English Summary:

3.1 Angular momentum eigenstates

$$L^2 |l\,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\,|l\,m\rangle$$
$$L_3 |l\,m\rangle = \hbar m\,|l\,m\rangle$$

$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$
$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

$(2l+1)$ fold degeneracy

3.2 Angular momentum in position representation

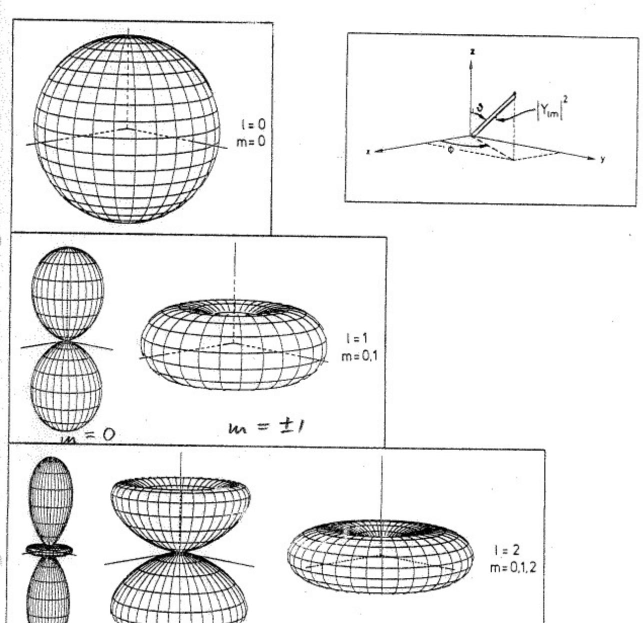
$$\underbrace{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}_{L_3} \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = \hbar m\, \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi), \quad \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{lm}(r)\, Y_l^m(\vartheta,\varphi)$$

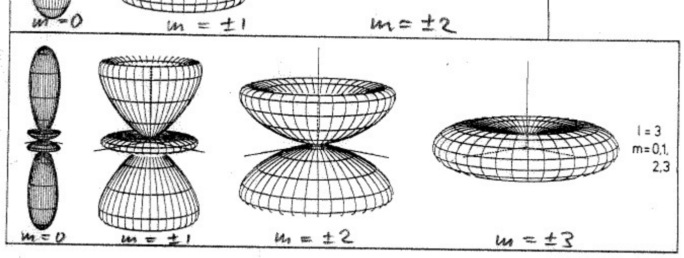
spherical harmonics $Y_l^m(\vartheta,\varphi) \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\vartheta)$ (basis on unit sphere)

associated Legendre polynomials $P_l^m(\xi) = (1-\xi^2)\frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi)$

Legendre polynomial of degree l: $P_l(\xi) = \frac{1}{2^l\, l!}\frac{d^l}{d\xi^l}(\xi^2-1)^l$

Hier ist $|Y_l^m|^2$ aufgetragen! 79a





aus:
S. Brandt, H. Dahmen: Picture Book of Quantum Mechanics on the PC (Springer 1989)

3.3 Kugelsymmetrische Potenziale

$$[L_3, x_1] = [x_1 p_2 - x_2 p_1, x_1] = -x_2 [p_1, x_1] = i\hbar x_2$$

$$[L_3, x_2] = [x_1 p_2 - x_2 p_1, x_2] = x_1 [p_2, x_2] = -i\hbar x_1$$

$$[L_3, x_3] = [x_1 p_2 - x_2 p_1, x_3] = 0$$

allgemein: $[L_j, x_k] = i\hbar x_\ell$ mit $(j k \ell)$ zykl.

analog: $[L_j, p_k] = i\hbar p_\ell$

$$[L_3, x_1^2] = \underbrace{[L_3, x_1]}_{i\hbar x_2} x_1 + x_1 \underbrace{[L_3, x_1]}_{i\hbar x_2} = 2i\hbar x_1 x_2$$

$$[L_3, x_2^2] = \underbrace{[L_3, x_2]}_{-i\hbar x_1} x_2 + x_2 \underbrace{[L_3, x_2]}_{-i\hbar x_1} = -2i\hbar x_1 x_2$$

$$[L_3, x_3^2] = \underbrace{[L_3, x_3]}_{0} x_3 + x_3 \underbrace{[L_3, x_3]}_{0} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{[L_j, \underline{r}^2] = [L_j, \underline{p}^2] = 0} \qquad j = 1,2,3$$

$$\Rightarrow [L_j, H] = 0 \quad \text{falls} \quad H = H(r^2, p^2)$$

d.h. $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$

(mit <u>Zentralpotenzial</u> $V(r)$)

<u>Theorem</u>:

Für rotationsinvariante Hamiltonoperatoren H gilt

$[L_j, H] = 0$, $[\underline{L}^2, H] = 0$ und der Drehimpuls ist eine Erhaltungsgröße, d.h. $\dot{\underline{L}} = 0$

Analogie in der klass. Mechanik:
Im Zentralpotenzial ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße.
Tieferer Grund: $\underline{L}$ ist die Erzeugende infinitesimaler Drehungen.

Sei $V(r)$ im Folgenden kugelsymmetrisch.
Dann gibt es gemeinsame Eigenzustände von H und L_j für jedes j, aber nicht zu H und $\underline{L}$.

Wegen
$$[L_3, H] = 0$$
$$[L^2, H] = 0$$
$$[L^2, L_3] = 0$$
können wir gemeinsame Eigenzustände zu H, L^2 und L_3 finden.

Zusammenhang zwischen L^2 und $H = \frac{p^2}{2m} + V$

$$L^2 = \underbrace{\epsilon_{jkl}\epsilon_{jmn}}_{\delta_{km}\delta_{ln} - \delta_{kn}\delta_{lm}} x_k p_l x_m p_n$$

(Summationskonvention: über gleiche Indizes summieren!)

$$\epsilon_{jkl} = \begin{cases} 1 & \text{gerade Permut.} \\ -1 & \text{ungerade "} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

total antisymm. Tensor 3. Stufe (Levi-Civita)

$$= x_m \underbrace{p_n x_m}_{x_m p_n - i\hbar\delta_{mn}} p_n - x_n \underbrace{p_m x_m}_{p_n x_n + i\hbar\delta_{mn}} p_n$$

$$= x_m x_m p_n p_n - \underbrace{p_m x_n x_m p_n}_{} - 2i\hbar x_m p_m$$

$$\underbrace{p_m x_m}_{x_m p_m - i\hbar \underbrace{\delta_{mm}}_{3}} x_n p_n$$

$$= x_n x_n p_m p_m - x_m p_m x_n p_n + 3i\hbar x_n p_n - 2i\hbar x_m p_m$$

$$= (x_n x_n)(p_m p_m) - (x_m p_m)(x_n p_n) + i\hbar (x_n p_n)$$

$$= r^2 p^2 - (\underline{r}\cdot\underline{p})^2 + i\hbar(\underline{r}\cdot\underline{p})$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2mr^2}\left[(\underline{r}\cdot\underline{p})^2 - i\hbar(\underline{r}\cdot\underline{p}) + L^2\right]}$$

$$\left(\text{klassisch: } \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2mr^2}\left[(\underbrace{\underline{r}\cdot\underline{p}}_{r p_r})^2 + L^2\right] \right)$$

Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten

$$x_1 = r \sin\vartheta \cos\varphi \qquad \underline{r}\cdot\underline{p} = \frac{\hbar}{i} x_j \partial_j = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}$$

$$x_2 = r \sin\vartheta \sin\varphi \qquad \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x_j}{\partial r}\partial_j = \frac{x_j}{r}\partial_j$$

$$x_3 = r\cos\vartheta$$

Operator der kinet. Energie in Ortsdarstellung:

$$(\underline{r}\cdot\underline{p})\left[(\underline{r}\cdot\underline{p}) + \frac{\hbar}{i}\right]\psi(r,\vartheta,\varphi) = -\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r} + 1\right)\psi$$

$$= -\hbar^2 r\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{\partial\psi}{\partial r}\right] = -\hbar^2 r\left[r\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + 2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right]$$

$$= -\hbar^2 r\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi)$$

(oder alternativ

$$= -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)$$)

Also $$\frac{p^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{L^2}{2mr^2}\psi$$

Schrödinger-Gl. für $\psi(r,\vartheta,\varphi)$:

$$\boxed{H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \left[\frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi = E\psi}$$

In Analogie zur klass. Hamiltonfkt. identifiziert man

$$p_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$ als Radialimpuls-Op.

mit der Vertauschungsrelation

$$[p_r, r] = \frac{\hbar}{i}$$

und

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}$$

(nachrechnen!)

Ortsdarstellung von L^2 (ohne Beweis):

$$L^2\psi = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right\}$$

NB: H erhält man auch direkt durch Transf. von

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi$$

auf Kugelkoordinaten.

Lösung der Schrödingergl. durch Separationsansatz

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\,Y(\vartheta,\varphi) \quad \text{mit} \quad L^2 Y = \hbar^2 l(l+1)\,Y \; :$$

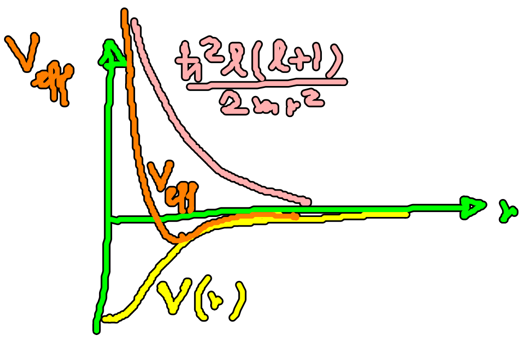
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{R}{2mr^2}\underbrace{(L^2Y)}_{\hbar^2 l(l+1)Y} + Y(V(r)-E)R = 0$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \Big(\underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalpot.}} + V(r) - E\Big)(rR) = 0}$$

<u>radiale Schrödingergl.</u> mit eff. Potenzial

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

<u>Bindungszustände</u> im anziehenden Zentralpot.:



Voraussetzung:

$$|V(r)| \le \frac{M}{r^\alpha} \qquad \alpha < 2 \quad \text{für } r \to 0$$

(d.h. Zentrifugalpot. dominiert gegenüber V für $r \to 0$)

Dann existieren für <u>anziehendes</u> Potenzial $V(r)$ wie im 1-dim. Fall endlich oder unendlich viele gebundene Zustände (eine <u>Serie</u> E_{nl}, $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ zu jedem l)

Jeder Zustand ist bzgl. m ($m = -l, \ldots, +l$) <u>$(2l+1)$fach</u> entartet.

Wellenfkt.

$$\boxed{\psi_{nlm}(\underline{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r}\, Y_l^m(\vartheta, \varphi)}$$

mit $R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}$.