

14.11.07

14.11.07

3.2 Drehimpuls

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r), \quad r = |\underline{r}|$$

$$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$$

Im Polarkoordinaten

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Drehimpulsquadrat

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

Laplace-Operator $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

r -Abhängigkeit

φ, θ -Abhängigkeiten

Wiederholung H-Atom (Coulomb-Potential $V(r)$):

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \text{jetzt Separationsansatz}$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) R(r)$$

Radialfunktion

Kugelflächenfunktionen

(spherical harmonics)

Quantenzahlen
 l und m

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} i^{|m|} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2}$$

$$\cdot P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$P_l^{|m|}(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l$$

assoziierte Legendre-Polynome.

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l$$

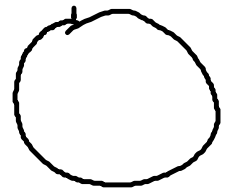
$$|lm\rangle \Leftrightarrow Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$\langle l'm' | lm \rangle \Leftrightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cdot$$

$$Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ;$$

$$|Y_{00}|^2$$



$$Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$



3.2.1 Radial-Lösungen

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) \underline{\underline{Y_{lm}(\theta, \varphi)}}$$

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$R_{nl}(r) \propto L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$$

$L_n^m(x)$ verallg. Laguerre-Polynome.

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

Bohr-Radius

Energie-Eigenwerte

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

für die gebundenen Zustände.



$$|nlm\rangle \iff \langle \underline{r} | nlm \rangle \equiv \Psi_{nlm}(\underline{r})$$

$|GS\rangle = |100\rangle$ hat Energie

$$E_0 = -13,6 \text{ eV für } H$$

(Wasserstoff)

Entartungsgrad zum Niveau E_n :

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2l+1 = n^2$$

3.3. Ergänzung

1. Erhaltungsgrößen

$$\dot{A} = i[H, A]$$

H : Hamiltonian

Def: Eine Erhaltungsgröße A ist eine Observable, die mit dem Hamiltonoperator vertauscht

(Heisenberg-Zeitentwicklung!)

Beispiele: Sei $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r)$, $r = |\underline{r}|$ in 3d

\Rightarrow
 \uparrow
(AUFGABE!) L_z, L_x, L_y, L^2
sind Erhaltungsgrößen.

3.3.2. Gemeinsame Eigenfunktion

Satz 1:

Zwei miteinander kommutierende Observablen A und B haben gemeinsame Eigenfunktionen.

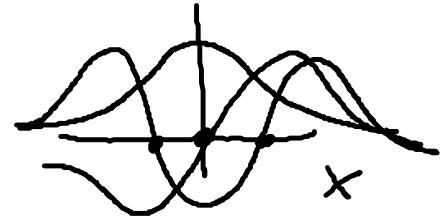
Beispiel:

$$[L^2, L_z] = 0$$

deshalb gemeinsames System

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

$$L_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$$



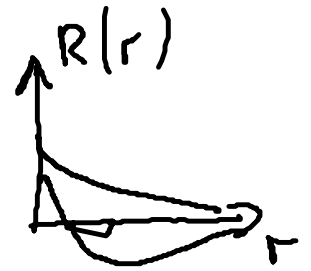
Satz 2: Knotensatz

Sturm-Liouville - Problem
für DGL mit RB

$$h(x) \psi''(x) + u(x) \psi'(x) + v(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$x \in [a, b]$$

RB für $\psi(a), \psi(b)$



- Beispiele:
- Teilchen im Kasten
 - harm. Oszill.
 - Radialteil von Wasserstoff

W. Walter: „gewöhnliche Differentialgleichungen“

Das Sturm-Liouville-Eigenwertproblem hat unendlich viele reelle Eigenwerte

$E_0 < E_1 < E_2 \dots < E_n \dots$ mit
Eigenfunktionen $\psi_n(x)$, die in (a, b) genau n Nullstellen haben.

Insbesondere hat der Grundzustand ψ_0 keine Knoten. Zwischen je zwei Nullstellen von $\psi_n(x)$ liegt eine Nullstelle von $\psi_{n+1}(x)$.



3.4 Symmetrie

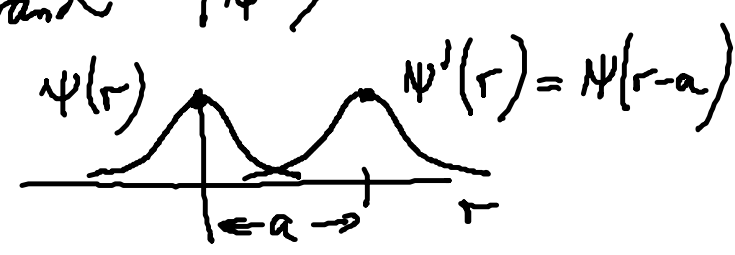
[
↔
Noether-Theorem
L
]

1) Translation

$|\psi\rangle$ Zustand mit WF $\psi(r)$

Setzt WF um Vektor \underline{a} räumlich verschieben
„aktive Transformation“

Wir erhalten den neuen Zustand $|\psi'\rangle$.



Setzt mehrere Zustände

verschoben

Solche Translationen sollen die Norm und das Skalarprodukt nicht ändern:

$$T : \psi(r) \rightarrow \psi'(r) \equiv \psi(r-a)$$

$$\phi(r) \rightarrow \phi'(r) \equiv \phi(r-a)$$

$$\text{es soll gelten } \langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi' | \psi' \rangle$$

$$|\psi'\rangle = U |\psi\rangle, \quad |\phi'\rangle = U |\phi\rangle$$

Satz (E. Wigner) : U : unitär, (anti) unitär

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \underbrace{U^\dagger U}_{1} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi' \rangle$$

Wie sieht U aus? $U_a \phi(r) = \phi(r-a)$

Bestimme U_a durch Taylor-Entwicklung

$$\phi(r-a) = \phi(r) - \underline{a} \underline{\nabla} \phi(r) + \dots$$

$$U_a = \underline{1} - \underline{a} \underline{\nabla} + \dots = \underline{1} - \frac{i\underline{a}}{\hbar} \underline{p} + \dots \quad \underline{p} = \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}$$

für kleine Translationen.

Der Impulsoperator „erzeugt“ infinitesimale Translationen.

Für endliche Translationen $\underline{a} = N \cdot \underline{\epsilon}$

$$\left(1 - \frac{i \underline{a} \nabla}{N}\right) \left(1 - \frac{i \underline{a} \nabla}{N}\right) \cdots \left(1 - \frac{i \underline{a} \nabla}{N}\right)$$

$$\xrightarrow{N \rightarrow \infty} e^{-i \underline{a} \nabla}$$

Damit hat man

$$U_{\underline{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{a} \cdot \underline{p}}$$

$$\Psi(\underline{r} - \underline{a}) \equiv \Psi'(\underline{r}) = U_{\underline{a}} \Psi(\underline{r})$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{a} \cdot \underline{p}} \Psi(\underline{r})$$

$$= \left[1 - \frac{i}{\hbar} \underline{a} \cdot \underline{p} - \frac{1}{2!} \frac{1}{\hbar^2} (\underline{a} \cdot \underline{p})^2 \dots \right] \Psi(\underline{r})$$