Wh.:
Eigenwertproblem des Drehimpuls

gemeinsame Eigenzustände $\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z$ (denn $[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$)

Lösung mit Leiteroperatoren $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$

$\vdots$

$$\Rightarrow \hat{\underline{L}}^2 |l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l,m\rangle \quad ,$$

$$\hat{L}_z |l,m\rangle = \hbar m |l,m\rangle \quad \text{mit } m = -l, \dots, l$$

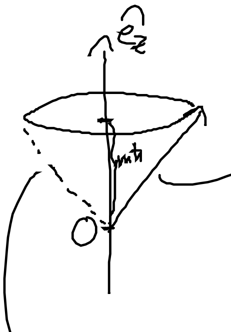
$2l+1$ Werte

$$\hat{L}_\pm |l,m\rangle = \hbar \underbrace{\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}}_{>0} |l, m\pm 1\rangle$$

$$\hat{L}_+ |l, \underbrace{l}_{m_{max}}\rangle = 0 \quad , \quad \hat{L}_- |l,-l\rangle = 0$$

Geometrische Veranschaulichung

„halb-klassisches Vektormodell"



„$\underline{L}$" präzediert um die z-Achse auf der Mantelfläche eines Kegels

Präzession symbolisiert, dass nicht alle Komponenten von $\underline{L}$ gleichzeitig scharf messbar sind

Höhe des Kegels: $m\hbar$

Mantellinie $\hbar\sqrt{l(l+1)}$

VI.3. Ortsdarstellung der Drehimpuls-Eigenfunktionen

Erinnerung: $\langle \underline{r} | \psi \rangle = \psi(\underline{r})$ Wellenfunktion

Basisvektor der Ortsdarstellung

Zustand im Hilbertraum

$\langle \underline{r} | l,m \rangle =: \psi_{lm}(\underline{r})$ Drehimpuls-Eigenfunktion in der Ortsdarstellung

es folgt: $\langle \underline{r} | \hat{\underline{r}} | l,m \rangle = \underline{r}\, \psi_{lm}(\underline{r})$

Ortsoperator — Ortsvektor

$\langle \underline{r} | \hat{\underline{p}} | lm \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{lm}(\underline{r})$ Impulsoperator wirkt wie Gradient

Um die explizite Form der $\psi_{lm}(\underline{r})$ zu finden, benutzen wir die Eigenwertgleichung für $\hat{L}_z$ und $\hat{\underline{L}}^2$ in der Ortsdarstellung

$\Longrightarrow$ benötige $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ in der Ortsdarstellung!

Erinnerung:

$$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}} \Rightarrow \hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Es muß gelten (Eigenwertgl. zu $\hat{L}_z$)

$$\hat{L}_z \, \varphi_{lm}(\underline{r}) \overset{!}{=} m\hbar \, \varphi_{lm}(\underline{r})$$

in der Ortsdarstellung

Um hieraus $\varphi_{lm}(\underline{r})$ zu bestimmen, ist es günstig, mit Kugelkoordinaten zu arbeiten

$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\vartheta \sin\varphi \qquad , \quad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$
$$z = r \cos\vartheta$$

Was ist $\hat{L}_z$ in Kugelkoordinaten?

benötigt ∇ in Kugelkoordinaten ....

$\Rightarrow$ Übungen!

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

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

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

$\Rightarrow$ Eigenwertgleichung für $\hat{L}_z$:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = \hbar m\,\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$$

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = im\,\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$$

$\Rightarrow$ Ansatz: $\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = e^{im\varphi}\underbrace{f_{lm}(r,\vartheta)}$

Funktion, die nur noch von r und ϑ abhängt, und $m=-l,\dots,l$

Forderung:

Wellenfunktion soll eindeutig sein

$$\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi+2\pi) \overset{!}{=} \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$$

Folgerung: m muß <u>ganzzahlig</u> sein!! wegen Abhängigkeit $\sim e^{im\varphi}$

Konsequenz: <u>auch l muß ganzzahlig sein</u>

(denn $m=-l,\dots,l$)

$\Rightarrow$ Mögliche l-Werte des Bahndrehimpulses

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

ganzzahlig!!

<u>Beachte</u>:

Dies ist anders beim Spin: Dieser ist kein Bahndrehimpuls und genügt daher nicht der oben angegebenen Eigenwertgleichung

Ortsdarstellung der

Zur Konstruktion der gesamten Funktion $\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$ (incl. der Funktion $f_{lm}(r,\vartheta)$) benutzen wir nun die Leiteroperatoren $\hat{L}_\pm$ in der Ortsdarstellung:

$$\langle \underline{r} | \hat{L}_\pm | l,m\rangle = \frac{\hbar}{i} \langle \underline{r} | \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y | l,m\rangle$$

$$= \underbrace{\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x} \pm z\frac{\partial}{\partial x} \mp x\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi_{lm}(\underline{r})}_{\text{kartesisch}}$$

Übergang in Kugelkoordinaten

$$= \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi_{lm}(\underline{r})$$

(r,ϑ,φ)

Einsetzen von $\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = e^{im\varphi} f_{lm}(r,\vartheta)$

$$= \hbar e^{i(m\pm 1)\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} - m\cot\vartheta\right) f_{lm}(r,\vartheta) \quad (*)$$

Wende dies an auf die Relation: $\hat{L}_+ |l, \underbrace{l}_{m_{max}}\rangle = 0$

$(*)$ mit $m=l$

$$\Leftrightarrow \hbar e^{i(l+1)\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} - l\cot\vartheta\right) f_{ll}(r,\vartheta) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta} f_{ll}(r,\vartheta) = l\cot\vartheta\, f_{ll}(r,\vartheta)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{f_{ll}(r,\vartheta)}\frac{d f_{ll}(r,\vartheta)}{d\vartheta} = l\cot\vartheta$$

integrieren auf beide Seiten

$$\int \frac{df_{ll}}{f_{ll}} = l \int d\vartheta \cot\vartheta$$

Lösung:
Überprüfen durch Nachrechnen

$$f_{ll}(r,\vartheta) = a_l (\sin\vartheta)^l \underbrace{R_{ll}(r)}_{\text{rein abstandsabhängig}}$$

$$\text{mit } a_l = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!}$$

Normierungsfaktor

Erzeugung der anderen Funktion $f_{lm}(r,\vartheta)$ mit $m < l$ durch Anwenden des Absteigeoperators

z.B. $\psi_{l,l-1}(r,\vartheta,\varphi) \sim \langle \underline{r} | \underbrace{L_- | l, l\rangle}_{\sim | l, l-1\rangle}$

$$\sim e^{i(l-1)\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta} - m \cot\vartheta\right) f_{ll}(r,\vartheta)$$

⋮

Allgemein erhält man als normierte Drehimpuls-Eigenfunktion

$$\langle \underline{r} | l,m\rangle = \psi_{lm}(\underline{r}) = \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$$

$$= \underbrace{R_{lm}(r)}_{\text{Radialanteil}} \; \underbrace{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}_{\text{Kugelflächenfunktion}}$$

Definition der Kugelflächenfunktion:

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = e^{im\varphi}\, b_{lm}\, P_{lm}(\cos\vartheta)$$

$$\text{mit } b_{lm} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}$$

$$\text{und } P_{lm}(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

x: $\cos\vartheta$

P_{lm}: Zugeordnete Legendre-Polynome

P_l: Legendre-Polynom l-ten Grades

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

Eigenschaften der Kugelflächenfunktion

- Normierung:

$$\underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d(\cos\vartheta)}_{\text{Integral über Einheitskugel}} \; Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

$$\langle l,m \,|\, l',m' \rangle = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

• Die Kugelflächenfunktion bilden ein vollst. Orthogonalsystem, nach dem sich winkelabhängige Funktion $F(\vartheta, \varphi)$ entwickeln lassen

$$F(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{lm} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

• $Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi) = Y_{l,-m}(\vartheta,\varphi)$

• Parität: $Y_{lm}(\pi-\vartheta, \varphi+\pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$

Inversion am Ursprung
$\underline{r} \to -\underline{r}$

Man sagt: Die Bahndrehimpuls-Eigenzustände $|l,m\rangle$ haben Parität $(-1)^l$

• Veranschaulichung durch Betrachtung der Aufenthaltswahrsch. dichte
$|Y_{lm}|^2 \longrightarrow$ „Orbitale"

VI.4. Teilchen im Zentralpotential

Betrachte konservatives quantenmechanisch System mit Potential der Form $V(\underline{r}) = V(r)$, mit $r = |\underline{r}|$

$\Rightarrow$ Hamilton-Operator (in Ortsdarstellung)

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

Da das Potential nur von r abhängt, ist es günstig, in Kugelkoordinaten zu arbeiten!

VI.4.1 Hamiltonoperator in Kugelkoordinaten

benutze Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \Delta_{\vartheta\varphi}$$

Separation in einen Anteil mit Ableitung nach r und einen Anteil mit Ableitung nach ϑ, φ

Man kann zeigen

$$\Delta_{\vartheta\varphi} = -\frac{\hat{\underline{L}}^2}{r^2\hbar^2}$$!!!

benutze dazu die Ortsdarstellung der Komponenten von $\underline{\hat{L}}$ in Kugelkoordinaten und quadriere

$$\Rightarrow \hat{\underline{L}}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\cdots\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\cdots\right)$$

Beachte: Das gilt nur für $r \neq 0$!!

⇒ Hamiltonoperator für Teilchen im Zentralpotential

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

Bemerkungen:

i) Analogie zur klass. Mechanik:

Erinnerung: dort führt man für ~~zentral~~symmetrische Probleme oft einen „Radialimpuls" ein

$$p_r = \frac{\underline{p}\cdot\underline{r}}{r}$$

Beim Übergang zur QM ist zu beachten, dass $\hat{\underline{p}}$ und $\hat{\underline{r}}$ nicht vertauschen!

⇒ symmetrisieren

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\underline{r}}\cdot\hat{\underline{p}}}{r} + \frac{\hat{\underline{p}}\cdot\hat{\underline{r}}}{r}\right)$$

Radialimpuls-Operator

Man kann zeigen, dass die Ortsdarstellung (Kugelkoordinaten) von $\hat{p}_r$ gegeben ist

$$\hat{p}_r \psi = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\psi$$

Quadrieren

$$\Rightarrow \hat{p}_r^2 \psi = \ldots = -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)\psi$$

$\Rightarrow$ Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\underline{L}}^2}{r^2}\right) + V(r)$$

Dies hat genau dieselbe Gestalt wie die entsprechende Hamiltonfunktion in der klassischen Mechanik !!

(ii) Vertauschungsrelationen

Beachte: • die Operatoren $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ wirken nur auf die Winkelvariablen

• $\hat{p}_r$ wirkt nur auf r

daher vertauschen $\hat{p}_r^2$ und $\hat{\underline{L}}^2$ sowie $\hat{p}_r^2$ und $\hat{L}_z$

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{\underline{L}}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$$

!!

$\Rightarrow$ die drei Operatoren $\hat{H}, \hat{L}_z, \hat{L}^2$ besitzen also ein gemeinsames System von Eigenzuständen!

Physikalisch:

Die Observablen, die zu $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ gehören, sind <u>Erhaltungsgrößen</u>

(Ehrenfest'sches Theorem!)

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle \sim \langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle + \underbrace{\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle}_{\text{hier nicht relevant}}$$

Das überrascht nicht, denn wir hatten bereits in der klass. Mechanik gesehen, dass Betrag und Richtung des Drehimpulses in Anwesenheit von Zentralkräften erhalten bleiben!