

## IV Drehimpuls: Vorbereitung 3d Probleme und Spin

### 1. Kugelkoordinaten, kinetische Energie und Bahndrehimpuls

bisher: eindimensionale Probleme, jetzt dreidimensional,

insbesondere Atome - einfachste Näherg. zentral-symm. Kumpotential

#### a) Verwendung von Kugelkoordinaten f. kinetische Energie:

$$\underline{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\Delta} \quad \downarrow \text{ gesucht Laplaceoperator in Kugelkoordinaten}$$

$$\underline{\Delta} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{kartesisch})$$

$$\text{darstellen in } r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \quad \text{tg } \varphi = \frac{y}{x}, \quad \text{tg } \vartheta = \frac{(x^2 + y^2)^{1/2}}{z}$$

$$\text{z.B. über } \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \quad (\text{Kette regel})$$

mathem. Methode VL:

$$\underline{\Delta} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\underline{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\Delta} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2mr^2} \underline{\underline{L}}^2$$

ist Definition f. Größe  $\underline{\underline{L}}^2$ :

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

Einführung v.  $\underline{\underline{L}}^2$  separiert den Winkel und Ortsanteil:  $\underline{\underline{L}}^2 = \underline{\underline{L}}^2(\vartheta, \varphi)$

es gilt:  $[\underline{I}_1, \underline{L}^2] = 0$  denn  $[\underline{L}^1, \underline{L}^2] = 0$  und  $\underline{L}^2 f(r) = f(r) \underline{L}^2$

b) Vergleich von  $\underline{L}^2$  mit Drehimpuls

in Mechanik:  $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \rightarrow$  in Quantenmechanik:  $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$

Wisse:  $\underline{p} = \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}$ , Kreuzprodukt einsetzen

$$L_z = x p_y - y p_x = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{nach Kettenregel}$$

(  $n$   $p_\varphi$  in Hamiltonformulierung  $p_\varphi \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$  )

$L_x, L_y$  analog, sehr aber komplizierter aus

Berechne:  $\underline{L}_x^2 + \underline{L}_y^2 + \underline{L}_z^2 =$  in Kugelkoordinaten berechnen, ergibt:  
das oben definierte  $\underline{L}^2$ .

Damit ist  $\underline{L}^2$  der Operator des Betrags  $\underline{L} \cdot \underline{L}$  des Drehimpulses

c) Vertauschungsregeln f. Drehimpuls

$$[L_x, L_y] = [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] \stackrel{\text{ÜA}}{=} \frac{\hbar}{i} (y p_x - x p_y) = i \hbar L_z$$

(i) insgesamt:  $[L_i, L_j] = i \hbar L_k \epsilon_{ijk}$  (zyklisch Vertauschung)

$$[L_x, \underline{L}^2] = (L_x (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) - (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) L_x) = 0$$

(ii) insgesamt:  $[L_i, \underline{L}^2] = 0 \quad \forall i$

gemeinam Eigenfunktion können wir zu  $\vec{L}^2$  und eine festes  $L_z = \hbar l$  gefunden werden, man wählt typischerweise die  $L_z$  Komponente

d) Eigenwertproblem

$$\vec{L}^2 = \vec{L}^2 (\mathcal{Y}_{lm}) \rightarrow \vec{L}^2 \mathcal{Y}_{lm} (\mathcal{Y}_{lm}) = \hbar^2 l(l+1) \mathcal{Y}_{lm} (\mathcal{Y}_{lm})$$

$$L_z \mathcal{Y}_{lm} (\mathcal{Y}_{lm}) = \hbar m \mathcal{Y}_{lm} (\mathcal{Y}_{lm})$$

Korrekturen, alg. Notation

e) kurzer Abriss algebraische Methode f.  $\vec{L}^2$ -Eigenwertproblem

Analogie zu harmonischen Oszillator:

harmonischer Oszillator

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n u_0(x)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x + \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \partial_x \right\}$$

$$a^+ u_n = \sqrt{n+1} u_{n+1}$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

Abbildung:

$$a u_0 = 0$$

Drehimpuls

$$\hbar \mathcal{Y}_{lm} (\mathcal{Y}_{lm}) = c_{lm} L_+^{l+m} e^{-il\varphi} \sin^l \vartheta$$

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} (\partial_\vartheta + i \cot \vartheta \partial_\varphi)$$

$$L_+ \mathcal{Y}_{lm} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \mathcal{Y}_{l, m+1}$$

$$m(l) = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \equiv m_l$$

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

$$L_+ \mathcal{Y}_{l, m_{\max}} = 0$$

$$u_0 = \text{fau} \beta \text{ fkt.}$$

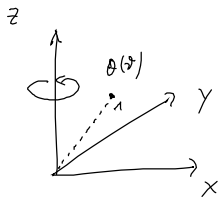
$$\text{max } m = +l / \text{min } m = -l$$

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

f) Darstellung v.  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  (Kugel/Kugelflächenfunktionen) in Polardiagramm

Richtungswinkel der Aufenthaltswahrscheinlichkeit über

$$\Theta_r(\vartheta) = |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (Y_{lm} \sim e^{im\varphi})$$

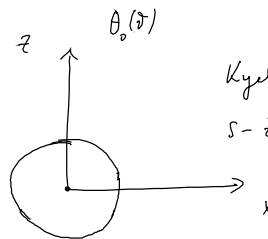


Rotationsinvariant

Schnitt bzgl. z-x Ebene reicht aus!

Beispiele:

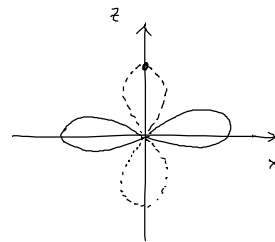
$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \text{konst.}$$



Kugelsymmetrie  
s-Zustand ( $l=0$ )

$$Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \vartheta \quad \dots$$

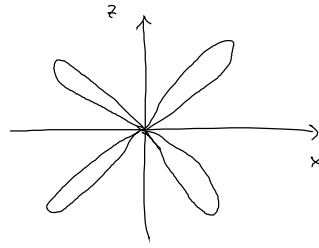
$$Y_{1\pm 1} = \pm \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \quad \dots$$



Ringsymmetrie

p-Zustand ( $l=1$ )

$$Y_{2, \pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$$



d-Zustand ( $l=2$ )

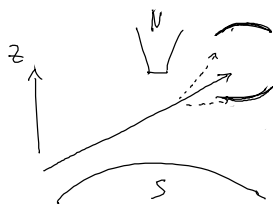
Richtig darstellbar f. Chemie möglich

### 2. Notwendigkeit eines weiteren Drehimpulsfreiheitsgrads

- nicht alle Experimente lassen sich mit dem Freiheitsgrad  $\vec{r}$  (Ort) erklären
- existiert weitere Freiheitsgrad „Spin“  $\rightarrow$  Spin  $\hat{=}$  sich drehen
- Zuordnung Observable Spin mittels Spinoperator  $\vec{S}$
- 1922, Frankfort Stern-Jerlach Experiment

Tüchtchen in räumlich inhomogenes Magnetfeld  $\vec{B}(\vec{r})$

(Silberatome  $S=1/2$  Außer Elektronen alle nach  $l(l+1) \rightarrow$  Drehimpuls 0;  
 - H - elektronisch neutral  $\rightarrow$  keine Komplexierung d. Lorentzkraft  
 auf das Gesamtsystem)



Befund: Auftreten d. Strahls in 2 Strahlen (Schirmdetektion)

räumlich inhomogenes  $\vec{B}(\vec{r})$

Zugehörige Schrödingergleichung:

$$i\hbar \dot{\psi}(\vec{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} - \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{\mu}(\vec{r}, \vec{p}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

Kopplg. im  $H$  über Magnetfeld Dipol d. Fällchen  $\vec{\mu} = \frac{q}{2m} \vec{L} = \frac{q}{2m} \vec{r} \times \vec{p}$

Strahl in  $x$ -Richtung:  $\psi(\vec{r}_{II}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(kx - \omega t)}$

Magnetfeld:  $\vec{B} = B(z) \vec{e}_z + \dots$

Energie:  $\langle f_z \rangle = \langle -\vec{\nabla} V \rangle_z$

↑  
Mittelwert Kraft in  $z$ -Richtung.  $\vec{r}_a = (x, y)$

$$= \int d^3 r \partial_z \psi^*(\vec{r}_{II}, t) \frac{q}{2m} B_z(z) L_z(\vec{r}_a, \vec{p}_{II}) \psi(\vec{r}_{II}, t)$$

$$= \int d^2 r_a \psi^*(\vec{r}_{II}, t) \frac{q}{2m} L_z \psi(\vec{r}_{II}, t) \underbrace{\int dz B_z(z)}_{\text{Fourier}}$$

$$\langle f_z \rangle = \frac{q}{2m} \langle L_z \rangle \quad b \quad \sim \langle L_z \rangle \cdot \text{Fourier}$$

in unser Bsp:  $\langle L_z \rangle \hat{=} \int d^3 r_a e^{ikx} L_z e^{-ikx}$  Zylinder:

$$= \int_0^\infty \rho \rho \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ik\rho \cos\varphi} \frac{1}{i} \partial_\varphi e^{-ik\rho \cos\varphi}$$

$$\sim \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\varphi \cos\varphi = 0$$

f. die Fourier mit Exp. aus  $s$ -Zustände bzw. ab Welle dürfte kein  
Abhängigkeit finden.

Streu-ferkel kann nicht mit Bahn Drehimpuls erklärt werden.