

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:

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

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

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

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

mathem. Methode VL:

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

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

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

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

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

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 erstudieren

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

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

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

gemeinsame 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

$$\vec{L}^2 = \vec{L}^2(\vartheta, \varphi) \rightarrow \vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Korrelations, alg. Notation

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

Analogie zu harmonischen Oszillator:

harmonischer Oszillator

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

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} x + \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/4} \partial_x \right\}$$

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

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

Abbildung:

$$a u_0 = 0$$

Drehimpuls

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

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

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

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

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

$$L_+ Y_{l, m_{\max}} = 0$$

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

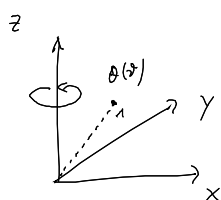
$$\& \max_{m=l} / \min_{m} = -l$$

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

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

Richtungsscharakter des Aufenthaltswahrscheinlichkeit über

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

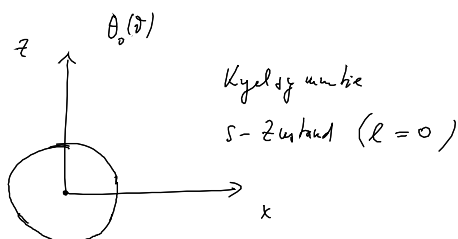


Rotationsinvariant

Schnitt bzgl. z-x Ebene reicht aus!

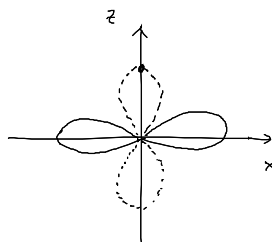
Beispiele:

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



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

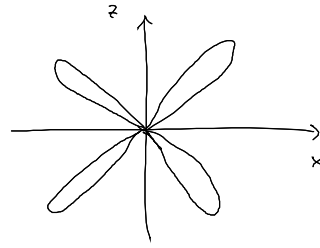
$$Y_{1\pm 1} = \pm \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \quad \dots$$



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 ($l=2$)

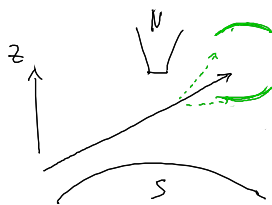
Rückup darüber f. Chemie möglich

2. Notwendigkeit eines weiteren Drehimpulsfreiheitsgrads

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

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

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



Befund: Aufspaltung d. Strahls in 2 Strahlen (Spinquantisierung)

räumlich inhomogen $\vec{B}(\vec{r})$

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. $\vec{r}_a = (x, y)$

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

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

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

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

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

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

f. die formale mit Exp. aus s-Zustände bzw. ab Willee dürfte kein
Abhängigkeit finden.

Streu-ferlach kann nicht mit Bahn Drehimpuls erklärt werden.