11.4. Ortsdarstellung

$$\left(\begin{array}{l} J_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \\ \underline{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \end{array} \right. \qquad m = -j \cdots j$$

s.u.

· Ges.: $Y_{lm}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | lm \rangle$ mit $j = l$!

· Operatoren in Kugelkoordinaten:

$$\left. \begin{array}{l} x = r \sin\vartheta \cos\varphi \\ y = r \sin\vartheta \sin\varphi \\ z = r \cos\vartheta \end{array} \right\} \quad (11.41)$$

$$\left. \begin{array}{l} \underline{\nabla} = \underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \underline{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \underline{r} = r\, \underline{e}_r \end{array} \right\} \quad (11.42)$$

$\xrightarrow{\text{o.B.}}$ (11.1) (11.21)

$\underline{L} = \underline{r} \times \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}$!

$$\boxed{\begin{array}{l} L_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\varphi}{\tan\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ L_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\sin\varphi}{\tan\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \\ L_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\vartheta} + i \frac{1}{\tan\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ \underline{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \end{array}} \quad (11.42)$$

$\longrightarrow$ $Y_{lm}(\underline{r}) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$!

· Im Prinzip: Konstruktion von Y_{lm} über $L_\pm$, wie beim
harm. Oszillator
($\rightarrow$ s. Nolting, Cohen-Tannoudji, Haken-Wolf)

hier: löse EW-Problem direkt

· EW-Problem: $\underline{J} \rightarrow \underline{L}$

$$\boxed{\begin{array}{ll} \frac{1}{\hbar^2} \underline{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm} & (11.43) \\ \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{lm} = i m Y_{lm} & (11.44) \end{array}}$$

• der Bahndrehimpuls:

Separationsansatz: $Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \sim \phi_m(\varphi)\, P_l^m(\cos\vartheta)$

$$\text{(11.44)} \xrightarrow{} \frac{\partial}{\partial\varphi}\phi_m = im\,\phi_m \qquad \boxed{\phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}\ ,\ \underbrace{m \text{ ganzzahlig}}_{\text{wegen: } \phi_m(\varphi+2\pi) = \phi_m(\varphi)}} \quad (11.45)$$

$$\longrightarrow \boxed{\text{Bahndrehimpuls: } l = 0, 1, 2, \dots \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l} \quad (11.46)$$

· Bestimmung $P_l^m(\cos\vartheta)$:

$Y_{lm} \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\vartheta)$ in (11.43)

$$\longrightarrow \left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta} + l(l+1)\right] P_l^m(\cos\vartheta) = 0$$

mit $\frac{\partial}{\partial\vartheta} = \frac{\partial\cos\vartheta}{\partial\vartheta}\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta} = -\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}$ und $\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)$

$$= \frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\left[(1-\cos^2\vartheta)\frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\right]$$

$$\xrightarrow[x=\cos\vartheta]{} \boxed{\begin{aligned} &\left[(1-x^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x\frac{\partial}{\partial x} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right] P_l^m(x) = 0 \quad (11.47) \\ &\text{Lsg: } P_l^{|m|}(x) = \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^l\, l!}\frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}}(x^2-1)^l = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x) \end{aligned}}$$

(11.48)

... assoziierten Legendre Polynome

wobei eingeführt: $\boxed{P_l(x) = P_l^0(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l}$ (11.49)

... Legendre Polynome: VONS auf $x \in [-1,1]$

Bem.: (i) Orthonormierung: $\boxed{\int_{-1}^{1} dx\, P_l(x)\, P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}}$ (11.50)

(ii) Vollständigkeit: $$\boxed{\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,P_l(x)\,P_l(x') \underset{\text{o.B.}}{=} \delta(x-x')} \quad (11.51)$$

(iii) Rekursionsformeln: $$\boxed{\begin{aligned}(l+1)\,P_{l+1} &= (2l+1)\,x\,P_l - l\,P_{l-1}\\ (1-x^2)\frac{dP_l}{dx} &= l\,(P_{l-1} - x\,P_l)\end{aligned}} \quad (11.52)$$

(iv) Bsp: $$P_0 = 1\,,\quad P_1 = x\,,\quad P_2 = \frac{1}{2}(3x^2-1)\,,\quad P_3 = \frac{1}{2}(5x^3-3x)\,,\ \ldots \quad (11.53)$$

· Drehimpulseigenfktn:

$$\boxed{Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\left[\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}} \quad (11.54)$$

... Kugelflächenfktn

· Eigenschaften

(i) Orthonormierung:

$$\boxed{\langle Y_{lm}|Y_{l'm'}\rangle = \int \underbrace{d\Omega}_{d\cos\vartheta\, d\varphi}\; Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\,Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}} \quad (11.55)$$

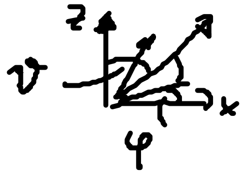
(ii) VONS auf der Einheitskugel:

$$f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} f_{lm}\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad (11.56)$$

(iii) Vollständigkeit:

$$\boxed{\begin{aligned}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\,Y_{lm}(\vartheta',\varphi') &= \delta(\cos\vartheta-\cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')\\ &= \frac{1}{\sin\vartheta}\,\delta(\vartheta-\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')\end{aligned}} \quad (11.57)$$

(iv) Parität: Verhalten unter $\underline{r} \to -\underline{r}$ (Spiegelung am Ursprung)



$$\hat{=}\ r \to r,\quad \vartheta \to \pi - \vartheta,\quad \varphi = \varphi + \pi$$

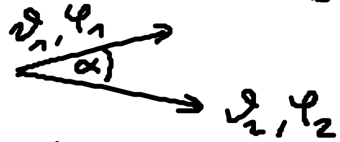
o.B.

$$\boxed{Y_{lm}(\pi-\vartheta, \varphi+\pi) = (-1)^l\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)} \qquad (11.58)$$

Parität: positiv = gerade: $l = 0, 2, \dots$

negativ = ungerade: $l = 1, 3, 5 \dots$

(v) Additionstheorem:



$$\cos\alpha = \cos\vartheta' \cos\vartheta + \sin\vartheta \sin\vartheta' \cos(\varphi - \varphi')$$

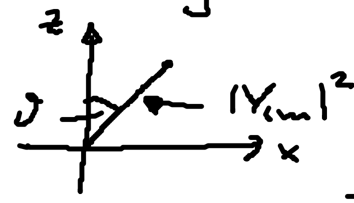
$$\boxed{\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\alpha) = \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\vartheta_1, \varphi_1)\, Y_{lm}(\vartheta_2, \varphi_2)} \qquad (11.59)$$

(vi) Bsp: $\longrightarrow$ Kopie

aus Atomphysik: $l = 0, 1, 2, 3, \dots \;\hat{=}\;$ s-, p-, d-, f- ... Orbitale

(vii) Veranschaulichung im Polardiagramm:

(1) $|Y_{lm}|^2 = f(\vartheta)$



$e^{im\varphi}$!

(2) Linearkombination $Y_{lm} \pm Y_{l-m} \longrightarrow$ Im $Y_{lm} \longrightarrow \sin m\varphi$

Re $Y_{lm} \longrightarrow \cos m\varphi$

$$\left.\begin{aligned} &p_x\text{-Orbitale}: -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta \cos\varphi \\ &p_y\text{-} \quad \text{"} \quad : -\frac{1}{\sqrt{2}\, i}(Y_{11} + Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta \sin\varphi \end{aligned}\right\} (11.60)$$

12. Das Wasserstoff-Problem

– Bewegung im Zentralpotential

- Problemstellung:

(i) Energieeigenzustände von e^- im H-Atom:

Coulombpotential:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \quad , \; |\underline{r}| = r$$

$e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,C$ ... Elementarladung

$\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12} \frac{C}{Vm}$ ... Dielektrizitätskonst. des Vakuums

(ii) allgemeiner: Bewegung im rotationssymmetr. Zentralpotential $U(r)$

(iii) klassisches Analogon: Keplerproblem

12.1 Zweikörperproblem

- vgl. klass. Mechanik Kap...

  Separation in Schwerpkts.- und Relativkoord.

- Variablen: Operatoren ohne ^

  $\underline{r}_\alpha$ ... Ortsoperator Teilchen $\alpha = 1, 2$

  $\underline{p}_\alpha$ ... Impuls " " "

  m_α ... Masse " "

  $U(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)$ ... Wechselwirkungspotential

$\longrightarrow$ Hamiltonoperator:

$$\boxed{H = \frac{\underline{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\underline{p}_2^2}{2m_2} + U(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)} \quad (12.1)$$

· Führe ein:

$$(12.2)\quad \begin{cases} \underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2 & \text{... Operator der Rel. Koord.} \\ \underline{R} = \dfrac{m_1 \underline{r}_1 + m_2 \underline{r}_2}{m_1 + m_2} & \text{... " " Schwerpkts. Koord.} \\ m = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} & \text{... reduzierte Masse} \\ M = m_1 + m_2 & \text{... Gesamtmasse} \\ \underline{p} = \dfrac{m_2 \underline{p}_1 - m_1 \underline{p}_2}{m_1 + m_2} & \text{... Operator des Relativimpulses} \\ \underline{P} = \underline{p}_1 + \underline{p}_2 & \text{... " " Gesamtimpulses} \end{cases}$$

$$(12.1) \xrightarrow{\text{o.B.}} \boxed{H = \underbrace{\frac{\underline{P}^2}{2M}}_{\substack{\text{freie Bew.} \\ \text{des Schwer-} \\ \text{pkts.}}} + \underbrace{\frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r})}_{\substack{\text{gebundene Bewegung} \\ \text{von "}\underline{r}\text{"}}}} \quad (12.3)$$