14.11.07

14.11.07

3.2 Drehimpuls

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

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

Im Polar Koordinaten

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

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

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

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 $\quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\Delta = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}}_{r\text{- Abhängigkeit}} - \underbrace{\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}}_{\varphi,\theta\text{ - Abhängigkeiten}}$$

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

$\hat{H}\psi = E\psi$ jetzt Separationsansatz

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \underbrace{Y_{lm}(\theta,\varphi)}_{\text{Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics)}}\ \underbrace{R(r)}_{\text{Radialfunktion}}$$

Quantenzahlen l und m

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

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

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

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

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

assoziierte Legendre-Polynome.

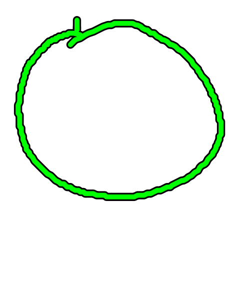
$l = 0,1,2,3,\dots \qquad m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l$

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

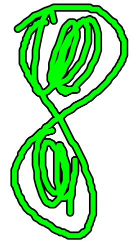
$$\langle l'm'|lm\rangle \leftrightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \cdot$$

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

$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$; $|Y_{00}|^2$



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



3.2.1 Radial-Lösungen

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

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$R_{nl}(r) \propto L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{n a_0}\right)$$

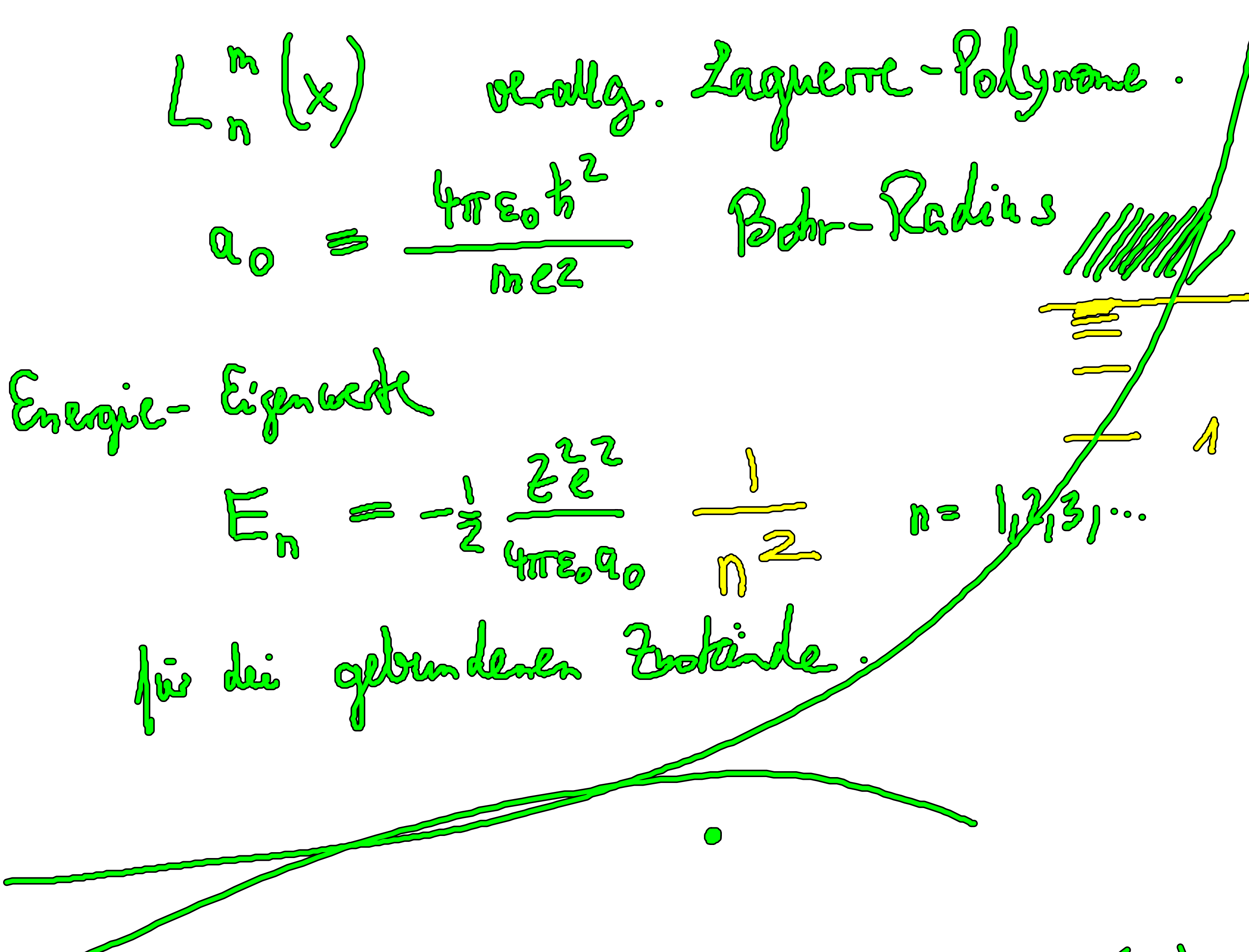
$L_n^m(x)$ verallg. Laguerre-Polynome.

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m e^2}$$ Bohr-Radius

Energie-Eigenwerte

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\frac{1}{n^2} \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

für die gebundenen Zustände.



$$|nlm\rangle \Longleftrightarrow \langle \underline{r}|nlm\rangle = \psi_{nlm}(\underline{r})$$

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

$E_0 = -13{,}6\ eV$ für H (Wasserstoff)

Entartungsgrad zum Niveau E_n:

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

3.3. Ergänzung

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

H: Hamiltonian

1. Erhaltungsgrößen

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

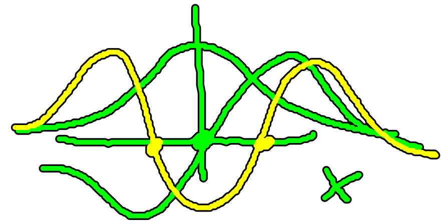
(Heisenberg-Zeitentwicklung!)

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

$\Rightarrow$ L_z, L_x, L_y; $\underline{L}^2$ sind Erhaltungsgrößen.

(AUFGABE!)

3.3.2. gemeinsame Eigenfunktion

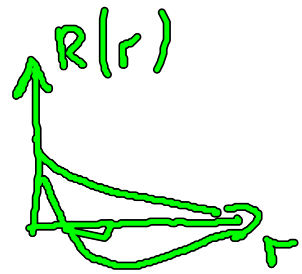


Satz 1: zwei miteinander kommutierende Observablen A und B haben gemeinsame Eigenfunktion.

Beispiel: $[\underline{L}^2, L_z] = 0$

deshalb gemeinsames System

$$\underline{L}^2 |l\,m\rangle = l(l+1)|l\,m\rangle$$
$$L_z |l\,m\rangle = m\,|l\,m\rangle$$



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 $\psi_{n+1}(x)$.

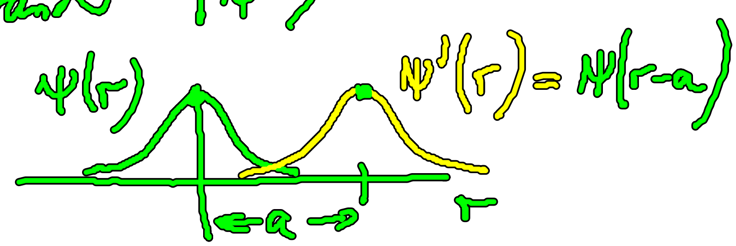
3.4 Symmetrie

[$\rightarrow$ Noether-Theorem]

1) Translation

$|\psi\rangle$ Zustand mit WF $\psi(\underline{r})$

Jetzt WF um Vektor $\underline{a}$ räumlich verschieben
„aktive Transformation".
Wir erhalten den neuen Zustand $|\psi'\rangle$.



Jetzt mehrere Zustände

verschieben

Solche Translationen sollen die Norm und das Skalarprodukt nicht ändern:

$$T: \quad \psi(r) \to \psi'(r) = \psi(r-a)$$

$$\phi(r) \to \phi'(r) = \phi(r-a)$$

so 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

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

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

für kleine Translationen.

Der Impulsoperator „erzeugt" infinitesimale Translationen.

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

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

$$\xrightarrow[N\to\infty]{} e^{-i\underline{a}\nabla}$$

Damit hat man

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

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

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

$$= \left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\underline{a}\,p - \frac{1}{2!}\frac{1}{\hbar^2}(\underline{a}\,p)^2 \ldots\right]\psi(r)$$