

Vorlesung 10:

Roter Faden:

Der harmonische Oszillator
Der Drehimpuls

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: <http://www.wmi.badw-muenchen.de/E23/lehre/skript/>

Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in einem rechteckigen Potentialtopf

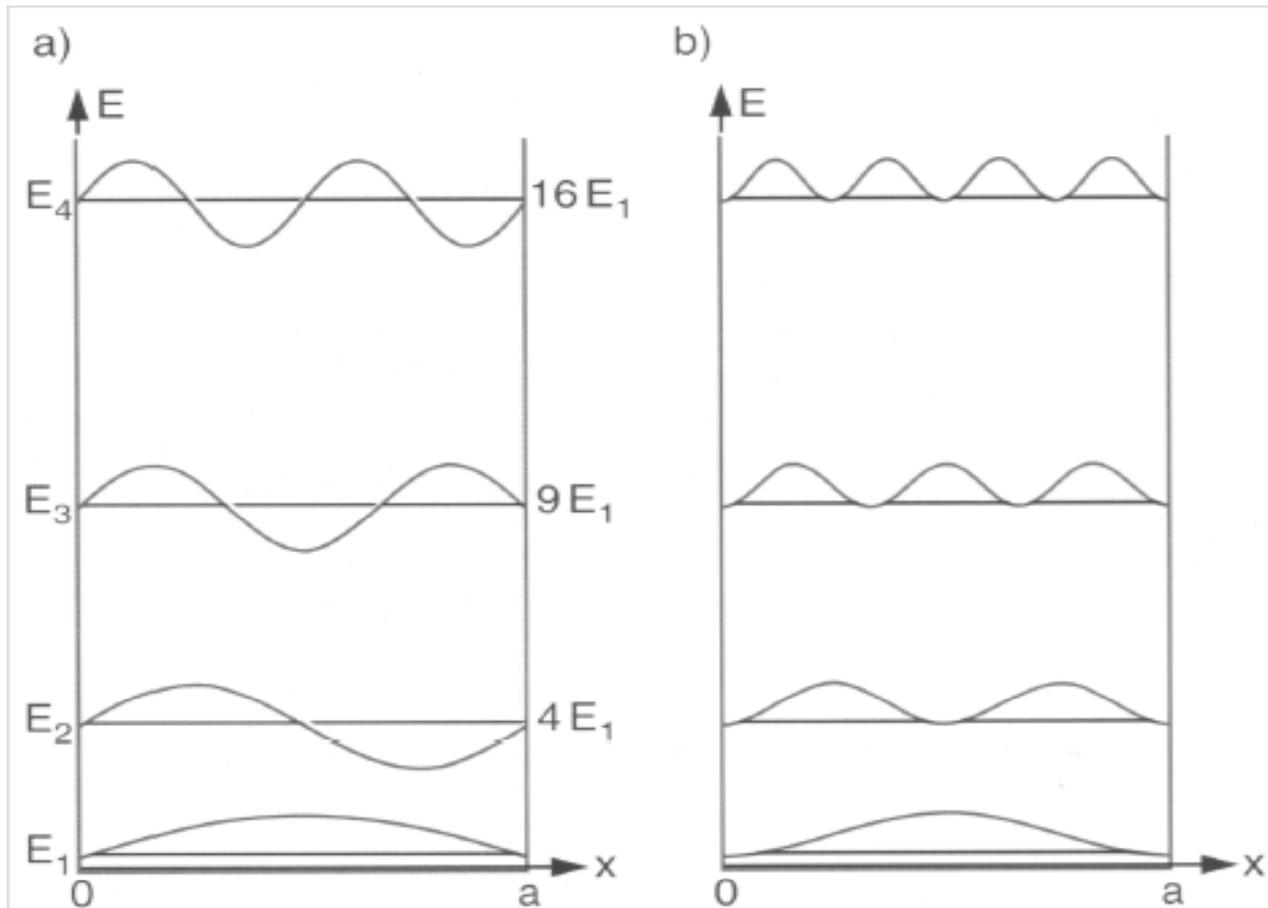


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ des Teilchens

Lösung der SG mit beliebigen Potentialen (bisher eindimensionales Rechteckpotential)

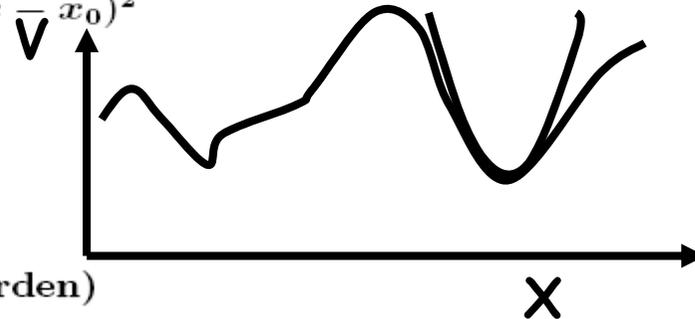
Das Potential um das Minimum x_0 kann wie jedes Polynom als Taylorsche Reihe entwickelt werden:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

$$V' = \frac{dV}{dx} \quad V'' = \frac{d^2V}{dx^2}$$

Im Minimum:

- $V' \equiv 0$
- $V(x_0) = \text{konstant}$ (darf subtrahiert werden)
- $V_{eff}(x) = \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$



Dies ist das Potential eines harmonischen Oszillators ($V \propto x^2!$)

$$V = \int_0^x F dx = -\frac{1}{2}kx^2(1) ; V < 0 \rightarrow \text{anziehend}$$

$$\text{DGL: } m\ddot{x} = -kx \quad (2)$$

$$\text{Lösungsansatz: } x = A \cos \omega t \quad (3)$$

$$(3) \text{ in } (2) : -mA\omega \cos \omega t = -kA \cos \omega t \Rightarrow$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \rightarrow$$

$$V = -\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \rightarrow x = A_0 \cos \sqrt{\frac{k}{m}}t$$

KM

QM

QM : statt $F = ma$ jetzt: SG

$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0}{2} \omega^2 x^2(1), \text{ wobei } \hat{H} = \text{Hamiltonoperator}$$

Erwarte wieder diskrete Energieniveaus, wie beim Rechteckpotential!

Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators(Beweis folgt!)

Inklusive Normierung: $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ gilt:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

mit $H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n \exp(-\xi^2)}{d\xi^n}$ (Hermite'sche Polynome)

z.B.: $H_0 = 1$, $H_1 = 2x$, $H_2 = 4x^2 - 2$, $H_3 = 8x^3 - 12x$,

$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$,

$H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120x + \dots$,

$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$

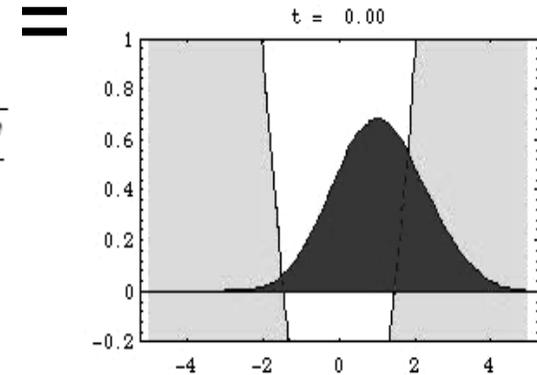
(Rodrigues-Gleichung)

$\rightarrow \varphi_0 \rightarrow$ Gausskurve

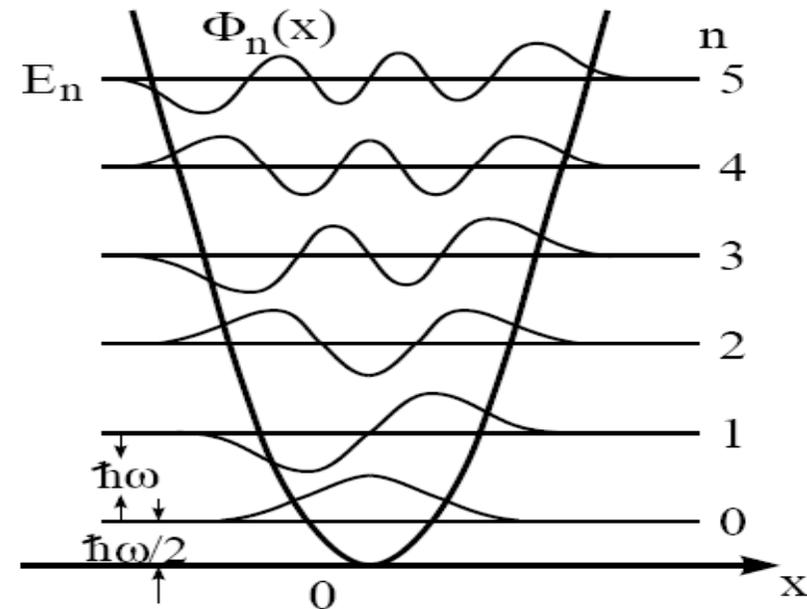
$\varphi_1 \rightarrow \varphi_0 2x$

$\varphi_2 \rightarrow \varphi_0(4x^2 - 2)$

Rechts: 2 Plots zusammengefügt:
 a) die Amplitudenfkt.
 des harm. Osz. für $n=0,1,2,\dots,5$
 aufgetragen gegen Auslenkung
 x bei der jeweiligen Energie E_n
 b) das Potential als Fkt. von x



$x=0$ mit $E=0$ verboten
 nach Unsicherheitsrel. \rightarrow
 Nullpunktsschwingungen



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

2 LÖSUNGSARTEN: für $V=cx^2$

1. algebraisch via Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (oder Auf- und Absteigeoperatoren)
2. analytisch (wie vorher beim Rechteckpotential)

Hier: nur 1. (Notation Griffiths)

$$\text{SG} : \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \Psi = E\Psi \quad (2)$$

$$\langle u^2 + v^2 = (u + iv)(u - iv) \rangle$$

Definition der Auf- und Absteigeoperatoren:

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \pm im\omega x \quad (3)$$

Was ist $a_- a_+ f(x)$?

$$\begin{aligned} a_- a_+ f &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} + im\omega x f \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar m \omega \frac{dx f}{dx} - \hbar m \omega x \frac{df}{dx} + (m\omega x)^2 f \right] \\ &\quad \text{Kettenregel auf } xf \text{ anwenden!} \\ &= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 + \hbar m \omega \right] f \quad (4) \end{aligned}$$

$$\text{d.h. } a_- a_+ = \hat{H} + \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (5)$$

$$\text{oder } (a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega) \varphi = E \varphi \quad (6)$$

$$\text{so auch : } a_+ a_- = \hat{H} - \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (7)$$

$$\text{Aus (5) + (7) : } a_- a_+ - a_+ a_- \equiv [a_- a_+]$$

Der Kommutator $[a_-, a_+] = \hbar \omega \neq 0$, d.h. Ψ nicht gleichzeitig Eigenfkt. von a_- und a_+ .

Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

I. springender Punkt:

Wenn φ eine Lösung der SG $\hat{H}\varphi = E\varphi$ ist (1), dann gilt (2) : $\hat{H}a_+\varphi = (E + \hbar\omega)a_+\varphi$.

Dies ist wieder eine SG mit Wellenfunktion $a_+\varphi$ und Energie $E = \hbar\omega$

D.h. statt die kontinuierlichen Lösungen der KM für den harmonischen Oszillator hat man jetzt diskrete Lösungen mit Energien $E = n\hbar\omega$ ($n = 1$

Beweis für (2): es gilt : $\hat{H}\varphi = E\varphi$, $\hat{H} \equiv a_-a_+ \left\{ -\frac{1}{2}\hbar\omega \right\} \rightarrow$ und $\hat{H} \equiv a_+a_- \left\{ +\hbar\omega \right\}$

Wir berechnen :

$$\begin{aligned} \hat{H} a_+\varphi &= (a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega)a_+\varphi = a_+a_-a_+\varphi + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\varphi = \\ &= a_+(E + \frac{1}{2}\hbar\omega)\varphi + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\varphi = (E + \hbar\omega)a_+\varphi \end{aligned} \quad a_-a_+ = \hat{H} + \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (5)$$

So auch:

$$\hat{H} a_-\varphi = (E - \hbar\omega)a_-\varphi$$

d.h. a_- erniedrigt die Energie um $\hbar\omega$ (Absteigeoperator)

und a_+ erhöht die Energie um $\hbar\omega$ (Aufsteigeoperator)

Energiestufen von $\hbar\omega$ ist gerade das, was man braucht um diskrete Energieniveaus eines harm. Osz. zu beschreiben.

Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

Daraus folgt: Durch Verschiebungsoperatoren kann ich ∞ viele Lösungen der SG finden.

Jede Eigenfunktion hat ihre eigene Energie.

2. Springender Punkt: $E > 0$ $[E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2]$, d.h. es muss eine niedrigste Stufe der Energie geben,

für die gilt: $a_- \varphi_0 = 0$ oder $\frac{1}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi_0}{dx} - im\omega x \varphi_0 \right] = 0 \rightarrow$

$$\rightarrow \int \frac{d\varphi_0}{\varphi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \rightarrow \ln \varphi_0 = -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} + c \rightarrow$$

$$\rightarrow \varphi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

Welche Energie E_0 gehört zu φ_0 ?

$$\text{SG} : \hat{H}\varphi_0 \equiv (a_+ a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega)\varphi_0 \equiv E_0 \varphi_0$$

Da $a_- \varphi_0 = 0$ muss gelten : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \leftarrow \text{Nullpunktsenergie}$

Da die Wellenfunktion der niedrigsten Energiestufe jetzt bekannt ist, können alle weitere Energiefunktionen durch Anwendung der Aufsteigeoperatoren berechnet werden:

$$\varphi_0 = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\varphi_1 = a_+ \varphi_0 = A_0 \frac{1}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) =$$

$$= \frac{A_0}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \left(-\frac{m\omega x}{\hbar}\right) + im\omega x \right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) = iA_1 \omega \sqrt{2m} x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\rightarrow E_1 = E_0 + \hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \varphi_2 = a_+ \varphi_1 \quad \rightarrow E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega_1 \text{ usw.}$$

Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

Inklusive Normierung: $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ gilt:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

mit $H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n \exp(-\xi^2)}{d\xi^n}$ (Hermite'sche Polynome)

z.B.: $H_0 = 1$, $H_1 = 2x$, $H_2 = 4x^2 - 2$, $H_3 = 8x^3 - 12x$,

$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$,

$H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120x + \dots$,

$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$

(Rodrigues-Gleichung)

$\rightarrow \varphi_0 \rightarrow$ Gausskurve

$\varphi_1 \rightarrow \varphi_0 2x$

$\varphi_2 \rightarrow \varphi_0(4x^2 - 2)$

Rechts: 2 Plots zusammengefügt:

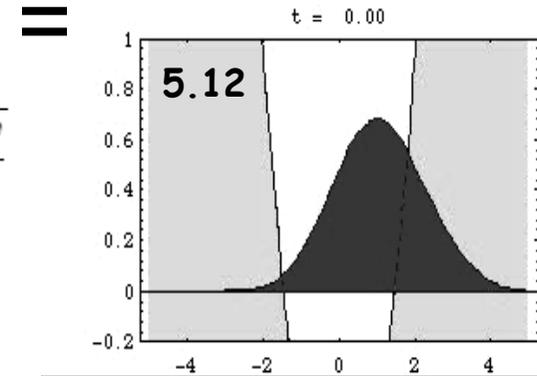
a) die Amplitudenfkt.

des harm. Osz. für $n=0,1,2,\dots,5$

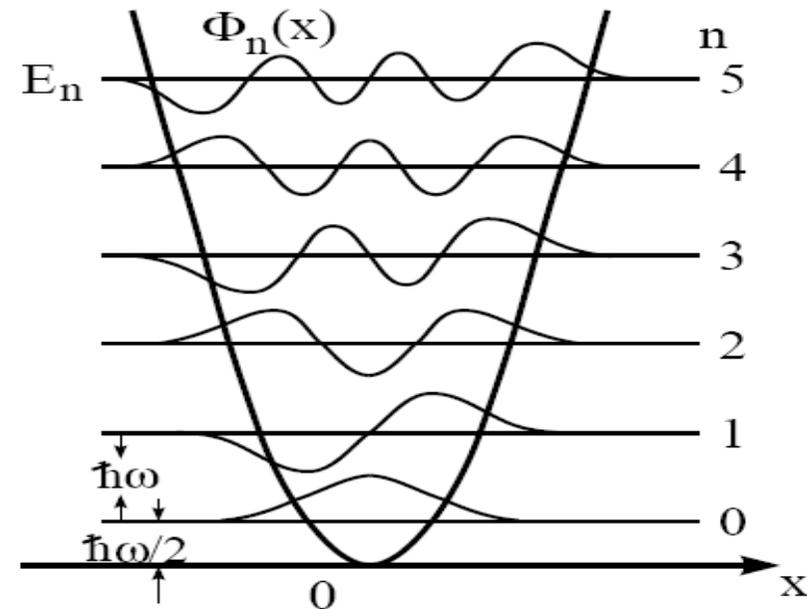
aufgetragen gegen Auslenkung

x bei der jeweiligen Energie E_n

b) das Potential als Fkt. von x



$x=0$ mit $E=0$ verboten
nach Unsicherheitsrel. \rightarrow
Nullpunktsschwingungen



Berechnung der AW beim klassischen Oszillator

Wahrscheinlichkeit, dass Kugel sich an Position x aufhält: $P(x) = k \frac{dt}{dx} = \frac{k}{v}$ (1).

Betrachte Energie und verlange gleiche Energie wie in der QM (Korrespondenzprinzip):

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \equiv (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\rightarrow v = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar\omega - m\omega^2 x^2}{m}} \equiv \sqrt{\frac{\mathcal{X}}{m}} \quad (2)$$

$$(2) \text{ in } (1) : P(x) = k \sqrt{\frac{m}{\mathcal{X}}} \quad (3)$$

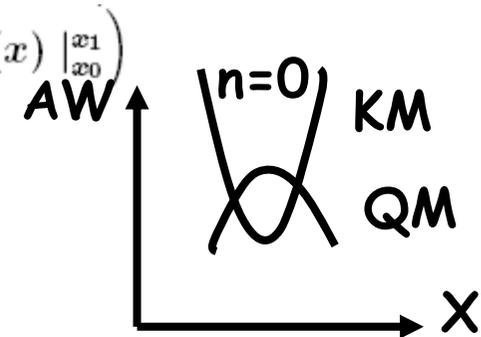
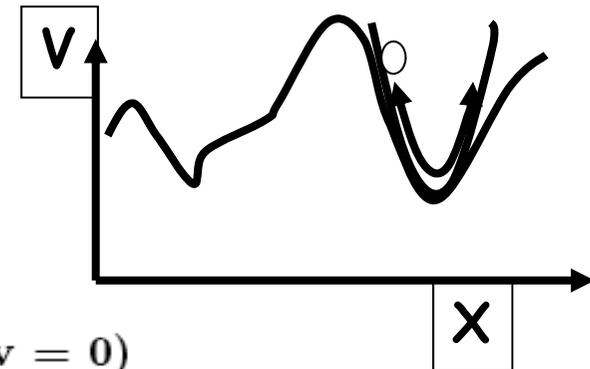
$$k \text{ aus Normierung : } \int_{x_{min}}^{x_{max}} P(x) dx = 1 \quad (4)$$

$$\text{mit } x_{min} = 0 ; x_{max} = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} \quad (\text{aus } (2) \text{ mit } v = 0)$$

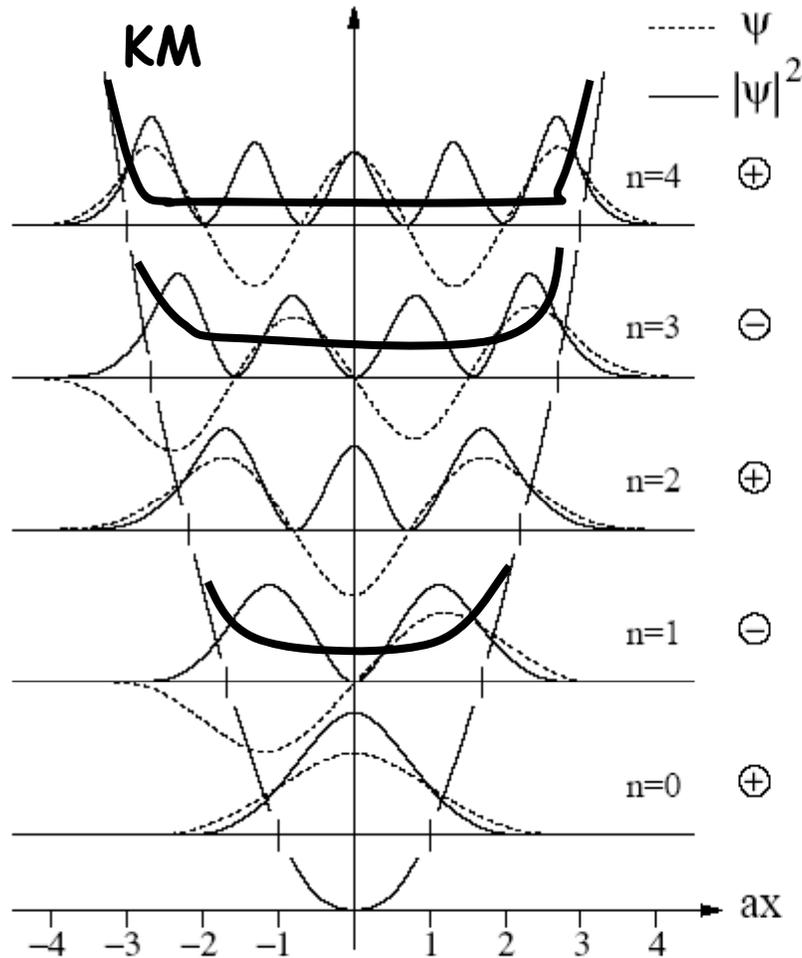
$$\text{Aus } (3) + (4) : k = \frac{\pi}{2} \quad \left(\text{benutze : } \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} = \arcsin(x) \Big|_{x_0}^{x_1} \right)$$

$$(5) \text{ in } (3) : P(x) = \frac{\omega\sqrt{m}}{\sqrt{(2n+1)\hbar\omega - m\omega^2 x^2}}$$

Dies entspricht klassische AW mit $E = (n+1/2)\hbar\omega$.



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators



$$n = 2$$

$$\psi_2(x) \propto (4a^2x^2 - 2)e^{-(1/2)a^2x^2}$$

$$n = 1$$

$$\psi_1(x) \propto (2ax)e^{-(1/2)a^2x^2}$$

$$n = 0$$

$$\psi_0(x) \propto e^{-(1/2)a^2x^2}$$

Nullpunkts-“Schwingung”

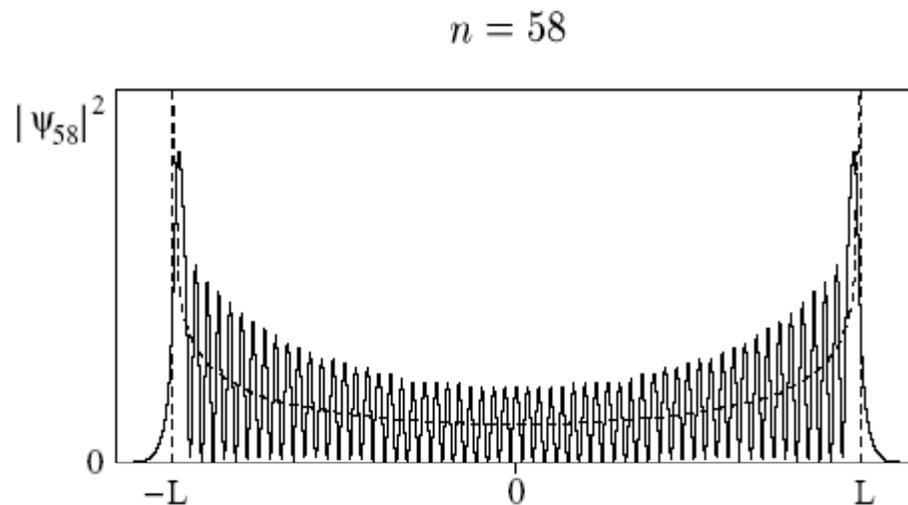
ψ_0 und $|\psi_0|^2$ Gauß-Funktionen
zentriert bei $x = 0$

Paritätsoperator = Spiegelung gegen Ursprung ($x \rightarrow -x$).
Eigenwert + oder -1, hier $(-1)^n$

Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

Beachte folgende Eigenschaften der $\psi_n(x)$:

- 1) Alle Wellenfunktionen sind $\neq 0$ *außerhalb* des klassisch erlaubten Bereichs ($V(x) > E_n$, im Bild auf der jeweiligen Achse markiert)
 \Rightarrow Exponentiell abklingendes Eindringen in den klassisch verbotenen Bereich (Tunneleffekt)
- 2) Wellenfunktionen haben definierte "*Parität*" (die beim H-Atom erwähnten $\Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$ ebenfalls, dort aber nicht diskutiert): bei Spiegelung am Ursprung ($x \rightarrow -x$) kein Vorzeichenwechsel für gerade n (+), Vorzeichenwechsel für ungerade n (-).
- 3) Asymptotisches Verhalten für $n \gg 1$



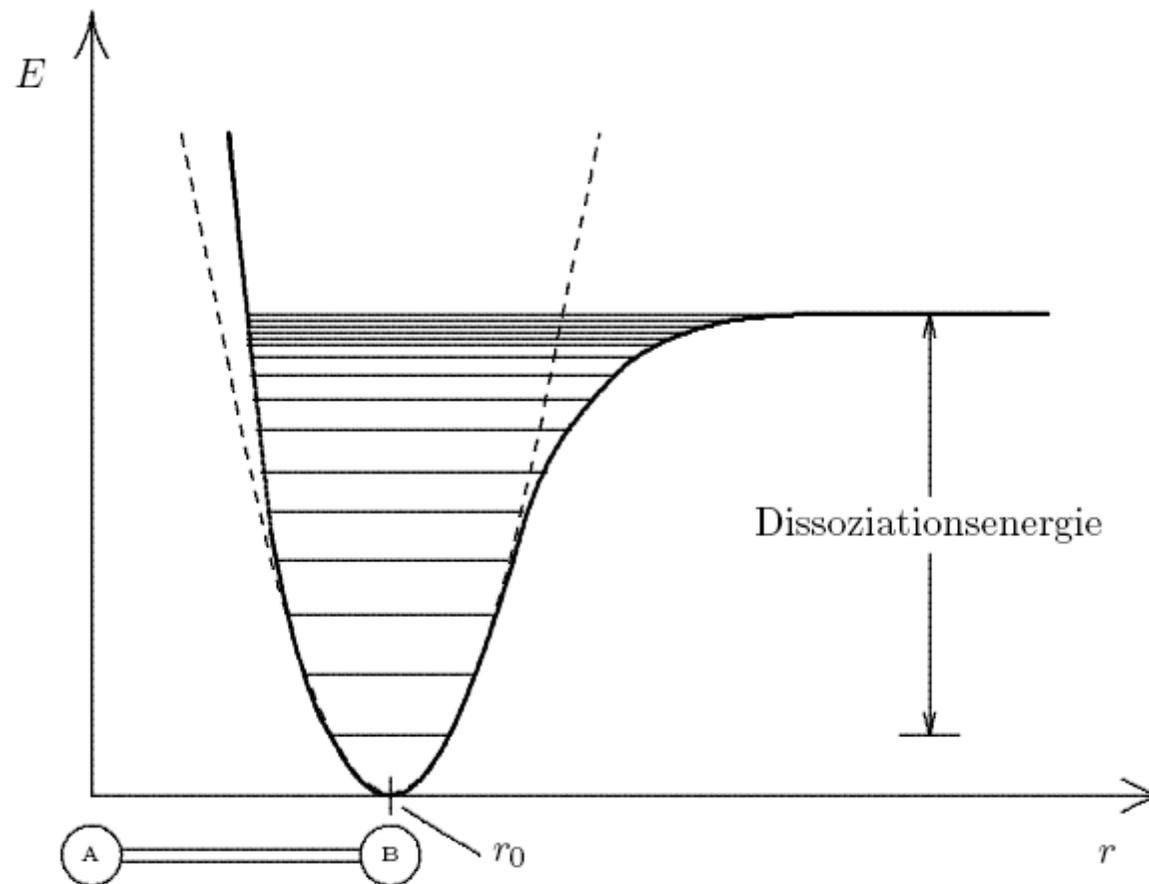
$(n + 1)$ Maxima für $|\psi_n|^2$

Hauptmaxima außen: Oszillation um die *klassisch* zu erwartende Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines schwingenden Systems (maximal an den Umkehrpunkten $x = \pm L$)

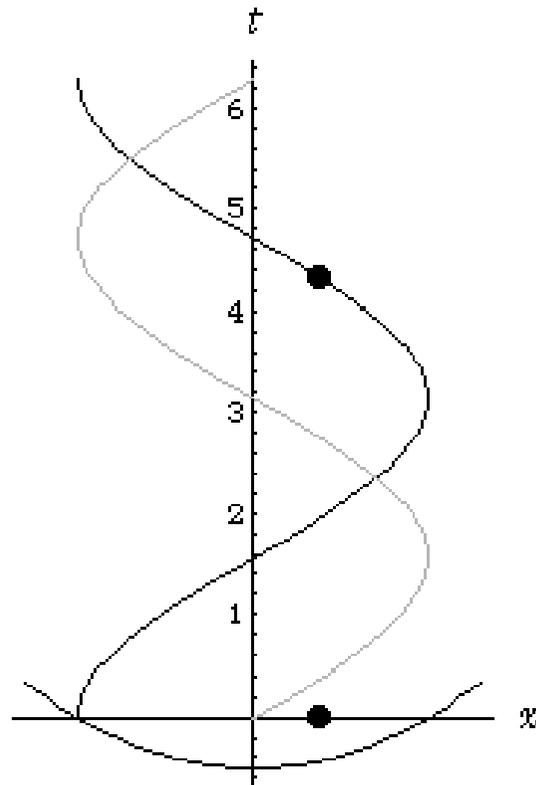
\Rightarrow *Bohrsches Korrespondenzprinzip*: Übergang zur klassischen Physik im Grenzfall sehr hoher Quantenzahlen

Der anharmonische Oszillator

Beispiel für Abweichung eines harm. Osz.: Energieniveaus eines zweiatomiges Molekül mit "Morse-potential" mit Dissoziation ab einem bestimmten Distanz und Energie



Der klassische harmonische Oszillator



The state of a classical harmonic oscillator is determined by Newton's equation of motion:

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) = -x(t)$$

(assuming that the mass of the particle is equal to 1). The solution is

$$x(t) = \alpha \sin(t - b), \quad (\text{position, blue curve})$$

$$\dot{x}(t) = \alpha \cos(t - b), \quad (\text{velocity, green curve})$$

The constants α and b have to be determined from the initial conditions

$$x(0) = x_0 \quad \text{and} \quad \dot{x}(0) = p_0.$$

Here they are given by

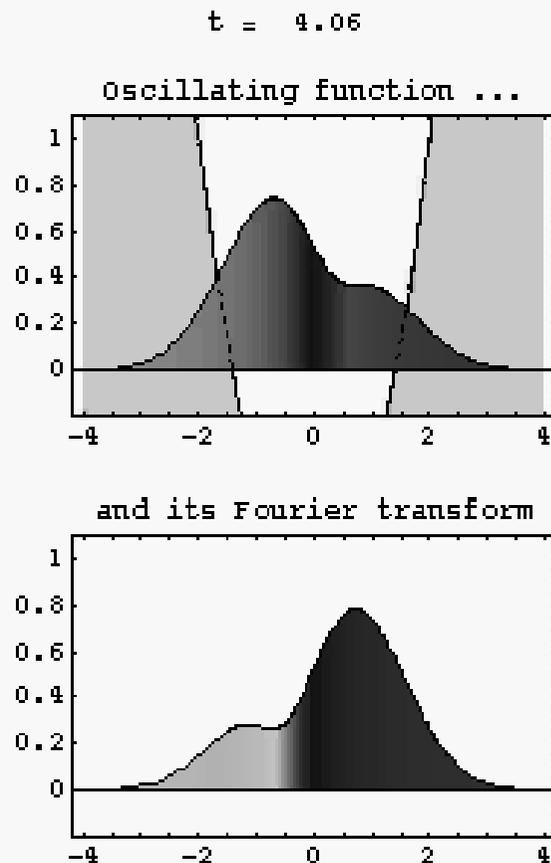
$$\alpha = 1, \quad b = -\pi/2.$$

5.1. Classical motion of the harmonic oscillator

Technical Note

Page 2 of 3

Bewegung im Impulsraum



A harmonic oscillator eigenfunction ϕ_n is related to its Fourier transform $\hat{\phi}_n$ by

$$\hat{\phi}_n(k) = (-i)^n \phi_n(k).$$

For the time evolution of an arbitrary state in the field of a harmonic oscillator we have

$$\psi(x, t + \pi/2) = e^{-i\pi/4} \hat{\psi}(k, t).$$

Up to a phase factor, the wave function in momentum space at time t looks like the wave function in position space at time $t + \pi/2$. An analogous relation holds between momentum and position of a classical harmonic oscillator.

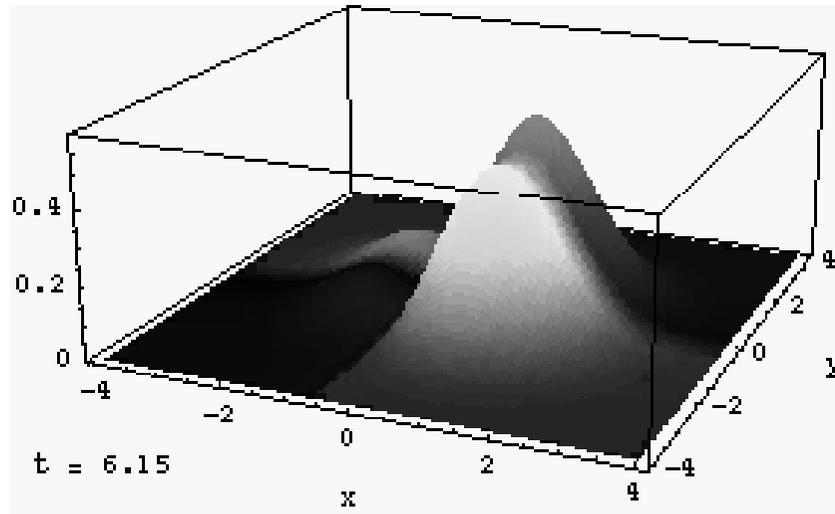
5.3. Oscillating state "0+1"

3: Momentum space

Technical Note

Page 1 of 1

Bewegung im Phasenraum



5.3. Oscillating state "0+1"

4: Wave function in phase space

For any solution $\psi(x, t)$ of the harmonic oscillator, the Fourier transform $\hat{\psi}(k, t)$ is a solution of the same equation:

$$i \frac{d}{dt} \hat{\psi}(k, t) = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dk^2} + k^2 \right) \hat{\psi}(k, t).$$

Hence the product

$$f(x, k, t) = \psi(x, t) \hat{\psi}(k, t)$$

is a solution of the two-dimensional oscillator equation which reads (after the variable substitution $k \rightarrow y$)

$$i \frac{d}{dt} f(x, y, t) =$$

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dy^2} + (x^2 + y^2) \right) f(x, y, t).$$

Der Drehimpuls

Im kugelsymmetrischen Coulombpotential gibt es nur radiale Kräfte, d.h. keine Drehmomente auf das Elektron im H-Atom! Daher erwarte ich Drehimpulserhaltung im Falle der Kugelsymmetrie und Wellenfkt. sollte Eigenfkt. des Drehimpulsoperators sein. Bei mehreren Elektronen wird Kugelsymmetrie aufgehoben -> kleine Störungen -> können nur numerisch berechnet werden.
Hier nur Einelektron-Atome.

Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen des Operators \hat{L}^2

Drehimpuls ist quantisiert: $|L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot h$

l...Drehimpulsquantenzahl

Mathematisches Intermezzo

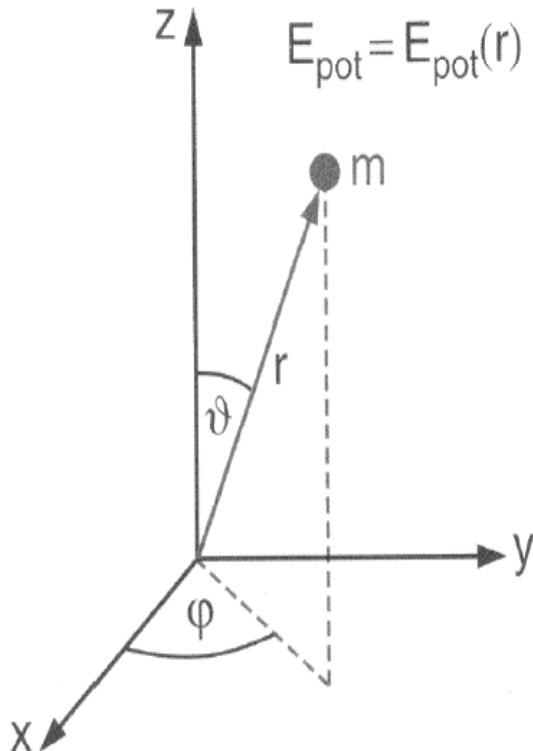
Kartesische Koordinaten:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \text{Laplace - Operator}$$

Kugelkoord.:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2m_0 r^2} \hat{l}^2 + V(r, \theta, \varphi)$$

später
mehr



$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$\vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$z = r \cos \vartheta$$

$$\varphi = \arctan \frac{y}{x}$$

Betrachte ein Längenelement ds :

$$\vec{ds} = x \hat{u}_x + y \hat{u}_y + z \hat{u}_z \quad \text{Einheitsvektoren: } \hat{u}_x, \hat{u}_y, \hat{u}_z$$

$$\vec{ds} = (r \sin \theta \cos \varphi) \hat{u}_x + (r \sin \theta \sin \varphi) \hat{u}_y + (r \cos \theta) \hat{u}_z$$

$$ds_r = dr \quad ds_\theta = r d\theta \quad ds_\varphi = r \sin \theta d\varphi$$

Hamiltonoperator für kugelsymmetrisches Potential

Wir betrachten nochmals den Hamilton-Operator wie er zum Beispiel bei der Diskussion des Wasserstoff-Problems auftrat. Es ist

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}, \hat{\vec{p}}) = \hat{\mathcal{T}}(\hat{\vec{p}}) + V(\vec{r}) \quad (573)$$

mit

$$\hat{\mathcal{T}} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \quad (574)$$

Wir stellen den Laplace-Operator $\Delta = \vec{\nabla}^2$ in Kugelkoordinaten dar. Es ist

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\nabla_{\vartheta, \varphi}^2}{r^2} \quad (575)$$

Mit

$$\hat{\mathcal{T}}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (576)$$

und dem Quadrat des Bahndrehimpulsoperators können wir den Operator der kinetischen Energie schreiben als

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}_r + \frac{\hat{\mathcal{L}}^2}{2m r^2} \quad (577)$$

Vertauschungsrelationen

Wir wollen nun die Vertauschungsrelation für die Komponenten des Drehimpulses ermitteln. Wir berechnen den Kommutator

$$\hat{G} = \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y \quad . \quad (542)$$

Hierzu betrachten wir zunächst den Operator $\hat{L}_y \hat{L}_z$,

$$\begin{aligned} \hat{L}_y \hat{L}_z &= (\hat{p}_z x - \hat{p}_x z) (\hat{p}_x y - \hat{p}_y x) \\ &= \hat{p}_z x \hat{p}_x y - \hat{p}_x z \hat{p}_x y - \hat{p}_z x \hat{p}_y x + \hat{p}_x z \hat{p}_y x \\ &= y \hat{p}_z x \hat{p}_x - z y \hat{p}_x^2 - x^2 \hat{p}_z \hat{p}_y + z \hat{p}_y \hat{p}_x x \quad . \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y &= i\hbar \hat{L}_x \quad , \\ \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z &= i\hbar \hat{L}_y \quad , \\ \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= i\hbar \hat{L}_z \quad . \end{aligned}$$

Kurzform:

$$\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L} \quad (543)$$

In ähnlicher Weise erhalten wir durch explizites Ausrechnen

$$\hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{p}_z \hat{p}_x x - z y \hat{p}_x^2 - x^2 \hat{p}_z \hat{p}_y + z \hat{p}_y x \hat{p}_x \quad . \quad (544)$$

Wir subtrahieren jetzt (544) von (543) und finden

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{p}_z (x \hat{p}_x - \hat{p}_x x) + z \hat{p}_y (\hat{p}_x x - x \hat{p}_x) \quad . \quad (545)$$

Unter Verwendung der obigen Vertauschungsrelationen zwischen Ort und Impuls bekommen wir

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar (y \hat{p}_z - \hat{p}_y z) = i\hbar \hat{L}_x \quad (546)$$

Vertauschungsrelationen

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{l} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$l_z = xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_j] = 0, \quad j=x,y,z$$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$$

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

Gesamtdrehimpuls und eine der Komponenten nur gleichzeitig zu bestimmen.

Gesamtdrehimpuls und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Z-Komponente des Drehimpulses und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Eigenfunktionsgleichungen:

$$\hat{H} \Psi = E(\Psi) \quad (1)$$

$$\hat{l}^2 F(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 F(\theta, \varphi) \quad (2)$$

$$\hat{l}_z F(\theta, \varphi) = m\hbar F(\theta, \varphi) \quad (3)$$

Drehimpuls in der QM

Während also in der klassischen Mechanik der Drehimpuls eines Teilchen, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential bewegt, nach Betrag und Richtung zeitlich konstant ist, sagt die QM, dass zwar der Betrag des Drehimpulses zeitlich konstant ist, dass aber von seinen drei Komponenten nur eine einen zeitlich konstanten Messwert besitzt! Dies kann man auffassen als eine Präzession des Drehimpulses um die Achse mit dem konstanten Messwert.

Weiter sind die konstante Komponenten quantisiert mit Eigenwerten $\sqrt{l(l+1)} \hbar$ für \hat{I} und $m\hbar$ für \hat{I}_z mit $-l < m < l$
Beweis folgt

Räumliche Einstellung eines Drehimpulses

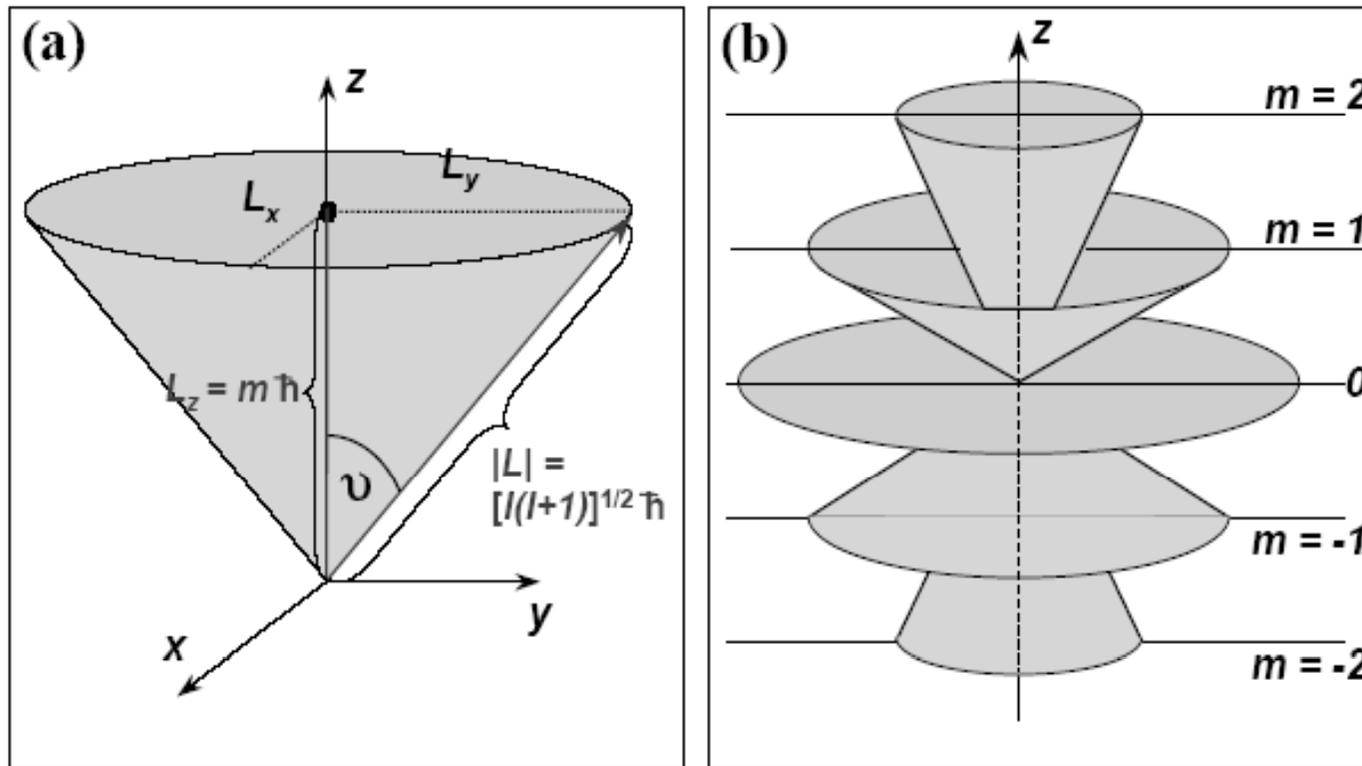


Abbildung 3.11: (a) Räumliche Einstellung eines Drehimpulses. (b) Einstellmöglichkeiten des Drehimpulses \mathbf{L} mit der Quantenzahl $l = 2$. L_x und L_y sind unbestimmbar, nachdem $|\mathbf{L}|$ und L_z festgelegt wurden und liegen auf Kegelmänteln.

Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators sind die Kugelflächenfunktionen. Für jedes Paar Quantenzahlen l, m gibt es eine eigene Funktion $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ (später mehr)

Mathematisches Intermezzo

Gradient einer Funktion f : $\nabla f \equiv \frac{1}{\left|\frac{\partial s_r}{\partial r}\right|} \frac{\partial f}{\partial r} u_r + \frac{1}{\left|\frac{\partial s_\theta}{\partial \theta}\right|} \frac{\partial f}{\partial \theta} u_\theta + \frac{1}{\left|\frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi}\right|} u_\varphi$

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{u}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{u}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \hat{u}_\varphi \quad (2)$$

Divergenz einer Funktion F :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} \equiv \frac{1}{\left|\frac{\partial s_r}{\partial r}\right| \left|\frac{\partial s_\theta}{\partial \theta}\right| \left|\frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi}\right|} \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{\partial F_r}{\partial r} \left|\frac{\partial s_\theta}{\partial \theta}\right| \left|\frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi}\right| + \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \left|\frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi}\right| \left|\frac{\partial s_r}{\partial r}\right| + \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} \left|\frac{\partial s_r}{\partial r}\right| \left|\frac{\partial s_\theta}{\partial \theta}\right| \right] \quad (3)$$

Mathematisches Intermezzo

(2) in (3) :

$$\begin{aligned}\nabla^2 f &= \nabla \cdot \nabla f = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin \theta \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{r \sin \theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{r}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}\end{aligned}$$

oder:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}$$

wobei $l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = \text{Drehimpuls}^2$ und der dazugehörige Operator \hat{l}^2 :

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad \text{Beweis folgt}$$

D.h. die Winkelabhängigkeit des Laplace-Operators wird durch den Drehimpuls bestimmt.

Drehimpulsoperator von kartesischen Koor. in Kugelkoordinaten umwandeln

Für Funktion $f = f(r, \theta, \varphi)$ gilt:

$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial f}{\partial \varphi} d\varphi \text{ und demzufolge :}$$

$$(\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}) : \begin{aligned} \hat{l}_x &= i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{l}_y &= i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ \hat{l}_z &= i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \text{ oder } \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

wobei:

- $\frac{\partial r}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi$ (aus : $r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 2r dr = 2x dx \rightarrow \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi$)
- $\left. \begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \text{ (aus : } \theta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \text{ und } \frac{d \arccos \alpha}{d\alpha} = -\frac{1}{\sqrt{1-\alpha^2}} \text{)} \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{xz}{r^2 \sqrt{x^2+y^2}} \end{aligned} \right\}$
- $\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{y}{x^2+y^2} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}$ (aus : $\varphi = \arctan \frac{y}{x}$)
- $\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Drehimpulsoperator von kartesischen Koor. in Kugelkoordinaten umwandeln

Analog folgt:

$$\bullet \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Einsetzen in \hat{l}_z :

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

so auch:

$$\hat{l}_x = i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$\hat{l}_y = i\hbar \left[\cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$

womit für

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

folgt:

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Stehende Wellen auf einem Kreis

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Betrachte stehende Wellen auf einem Kreis ($\cos\varphi$ oder $e^{im\varphi}$)
Randbedingung: $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$ oder $Ae^{im\varphi} = Ae^{im(\varphi + 2\pi)}$
 $\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (Quantisierung durch Randbedingung!)

Betrachte $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ $\Phi(\varphi) = \hbar m \Phi(\varphi)$ \Rightarrow z-Wert des Drehimpulses ist quantisiert!

Wie groß ist Gesamtdrehimpuls, d.h. Erwartung von \hat{l}^2 .

Eigenwert des Drehimpulses ist $\sqrt{l(l+1)} \hbar$

Warum ist der Eigenwert von $\hat{l}^2 = l(l+1)\hbar^2$ und nicht $l^2\hbar^2$?

Annahme: $\hat{l}^2 F(\theta, \varphi) = \omega^2 \hbar^2 F(\theta, \varphi)$

Zu beweisen: $\omega^2 = l(l+1)$

$$\begin{aligned} \hat{l}_- \hat{l}_+ F_{l,m} &\equiv (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) F_{l,m} \\ \text{Beweis:} &= [\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + i\hat{l}_x \hat{l}_y - i\hat{l}_y \hat{l}_x] F_{l,m} \\ &= (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z) F_{l,m} \\ &= (\omega^2 \hbar^2 - m^2 \hbar^2 - m \hbar^2) F_{l,m} \quad (1) \end{aligned}$$

Setze $F_{l,m} = F_{l,m_{max}} \equiv F_{l,l}$

Dann gilt : $\hat{l}_+ F_{l,m_{max}} = 0$ oder damit aus (1) $\omega^2 = m_{max}^2 + m_{max} = 0$ oder (2)

$$\omega^2 = m_{max}(m_{max} + 1) = l(l+1)$$

Da L_z immer kleiner als L_{tot} muss gelten: $|m| \leq l$ und $l \geq 0, l = 0, 1, 2, 3$

Mögliche Werte von L_z für mehrere Werte von L_{tot}

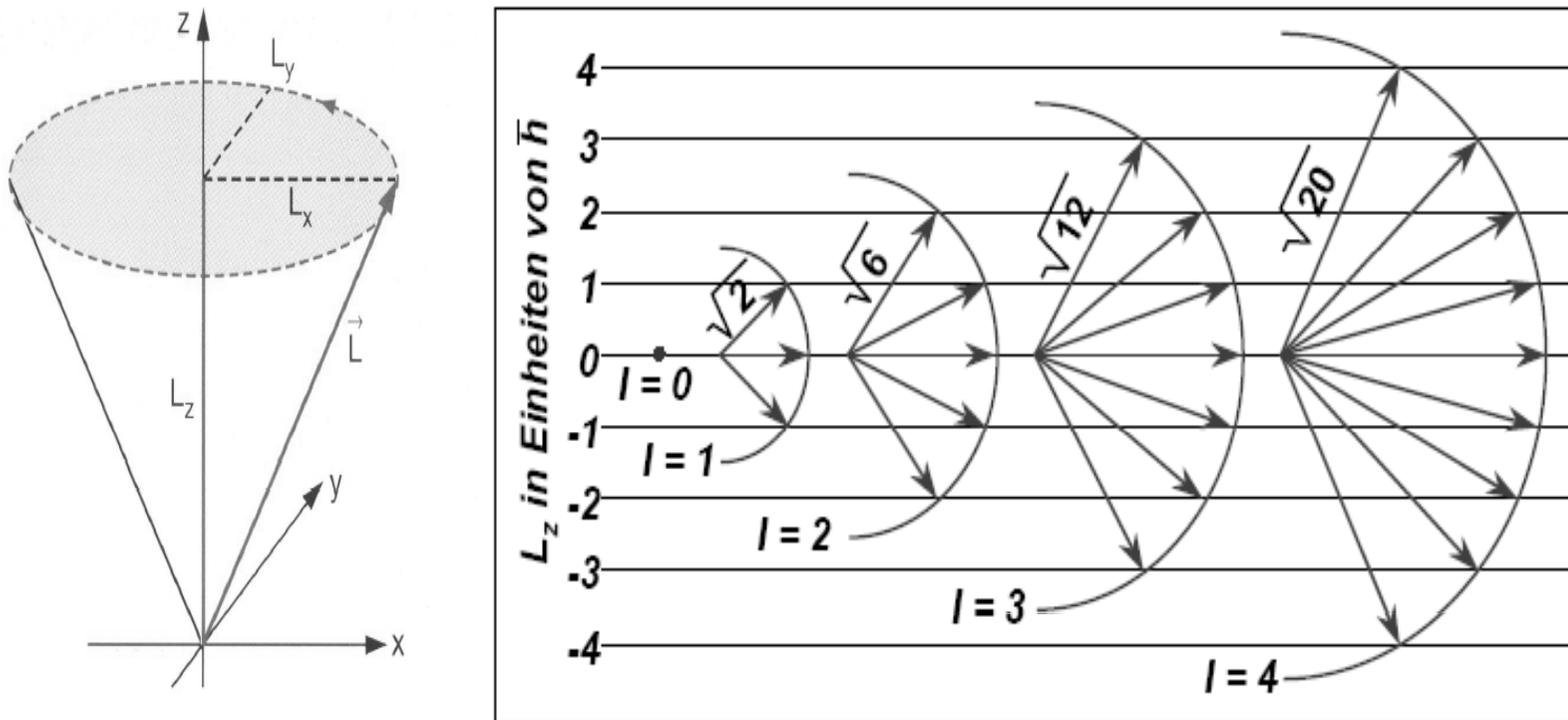


Abbildung 3.10: Mögliche Richtungen eines Drehimpulses mit definierter Komponente L_z und definiertem Betrag $|L|$ für verschiedene Bahndrehimpulsquantenzahlen l .

Da $|L| > L_z$ und L_x, L_y unbestimmt, liegt Vektor L auf Kegelmantel mit Öffnungswinkel $\cos\theta = |m|/\sqrt{l(l+1)}$

Zusammenfassung Drehimpuls

Klassische Mechanik: Drehimpuls in kugelsymmetrischen Potential nach Betrag und Richtung zeitlich konstant - alle drei Komponenten haben wohldefinierte Werte.

Quatenmechanische Beschreibung:

Betrag von L zeitlich konstant

$|L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot h$, aber von Komponenten hat nur L_z zeitlich konstanten Weßwert - anderen beiden Komponenten nicht gleichzeitig meßbar.

z-Richtung sei "Quantisierungsachse"

$\hat{L}^2 \cdot \Psi = l(l+1) \cdot \Psi$ und $\hat{L}_z \Psi = mh\Psi \Rightarrow$ Quantisierung der Richtungseinstellung.

Räumliche Einstellung eines Drehimpulses

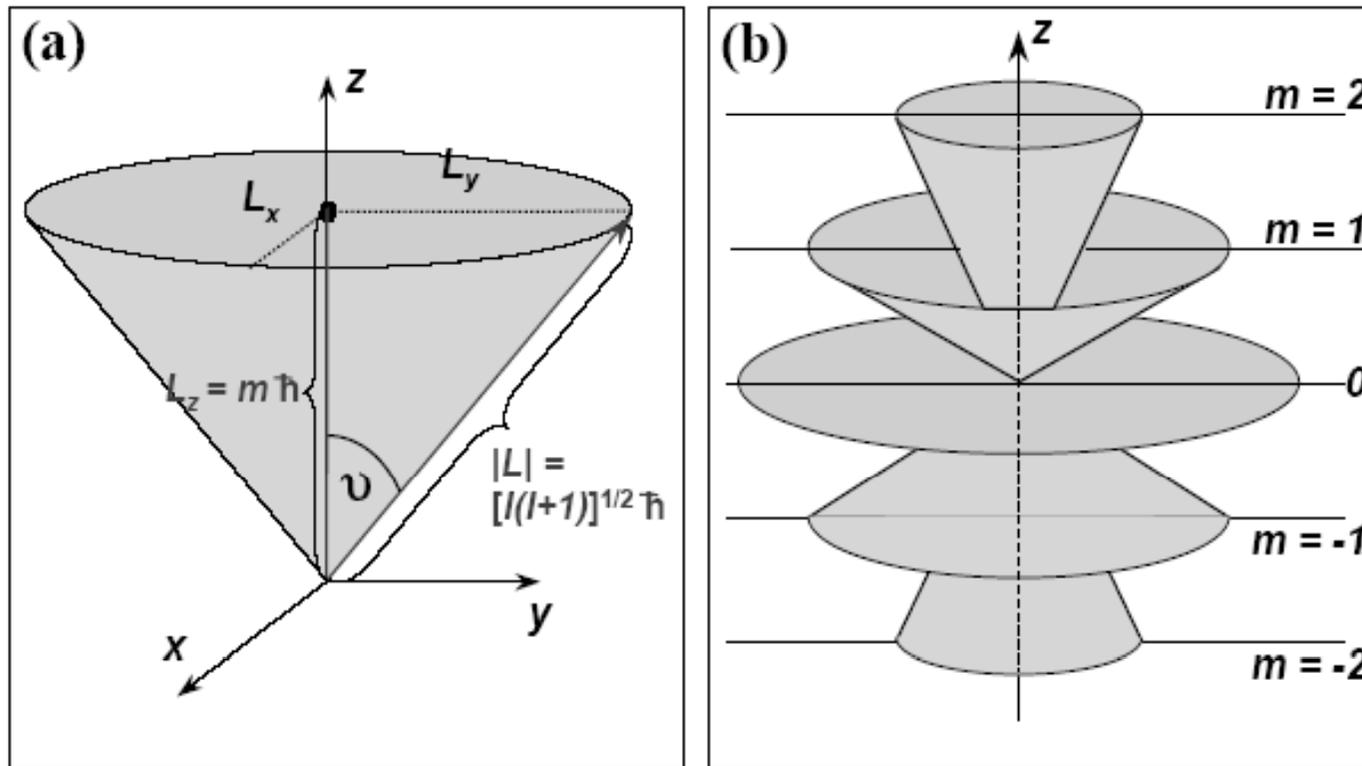


Abbildung 3.11: (a) Räumliche Einstellung eines Drehimpulses. (b) Einstellmöglichkeiten des Drehimpulses \mathbf{L} mit der Quantenzahl $l = 2$. L_x und L_y sind unbestimmbar, nachdem $|\mathbf{L}|$ und L_z festgelegt wurden und liegen auf Kegelmänteln.

Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators sind die Kugelflächenfunktionen. Für jedes Paar Quantenzahlen l, m gibt es eine eigene Funktion $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ (später mehr)

Zum Mitnehmen

Die Randbedingungen der SG führen zur Quantisierung der Energien

Ein beliebiges Potential kann im Minimum als quadratisches Potential angenähert werden (Taylor-Entwicklung). Dies entspricht das Potential eines harmonischen Oszillators, dessen Energien wieder quantisiert sind. Die Wellenfunktionen der einzelnen Energieniveaus können elegant mit Aufsteige- und Absteigeoperatoren bestimmt werden.

Drehimpulse sind quantisiert:

