

# VL 10

---

## **VL8. Das Wasserstoffatom in der Klass. Mechanik**

- 8.1. Emissions- und Absorptionsspektren der Atome**
- 8.2. Quantelung der Energie (Frank-Hertz Versuch)**
- 8.3. Spektren des Wasserstoffatoms**
- 8.4. Bohrsches Atommodell**

## **VL9. Elemente der Quantenmechanik III**

- 9.1. Schrödingergleichung mit beliebigem Potential**
- 9.2. Harmonischer Oszillator**
- 9.3. Drehimpulsoperator**

## **VL10. Das Wasserstoffatom in der QM (I)**

- 10.1. SG in einem kugelsymmetrischen Potential**
- 10.2. Quantenzahlen des Wasserstoffatoms**
- 10.3. Winkelabhängigkeit (Kugelflächenfunktionen)**

# Operatoren

klassisch	Operator
$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$	$\mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$
$E = \frac{p^2}{2m} + V$	$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$ <b>Laplace Operator</b> $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
$L_x = yp_z - zp_y$	$\mathbf{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$
$L_y = zp_x - xp_z$	$\mathbf{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$
$L_z = xp_y - yp_x$	$\mathbf{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

# Zusammenfassung

---

Eigenfunktionsgleichungen:

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

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

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

**VL 6**

**Heute**

**Heute**

Da  $L_z$  immer kleiner als  $L_{\text{tot}}$  ist, muss gelten:

$$|m| \leq l \quad \text{und} \quad l \geq 0, \quad l = 0, 1, 2, 3$$

z.B.  $l=0 \Rightarrow m=0$

$$l=1 \Rightarrow m = -1, 0, 1$$

$$l=2 \Rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2 \text{ usw.}$$

**Heute**

# Räumliche Einstellung eines Drehimpulses

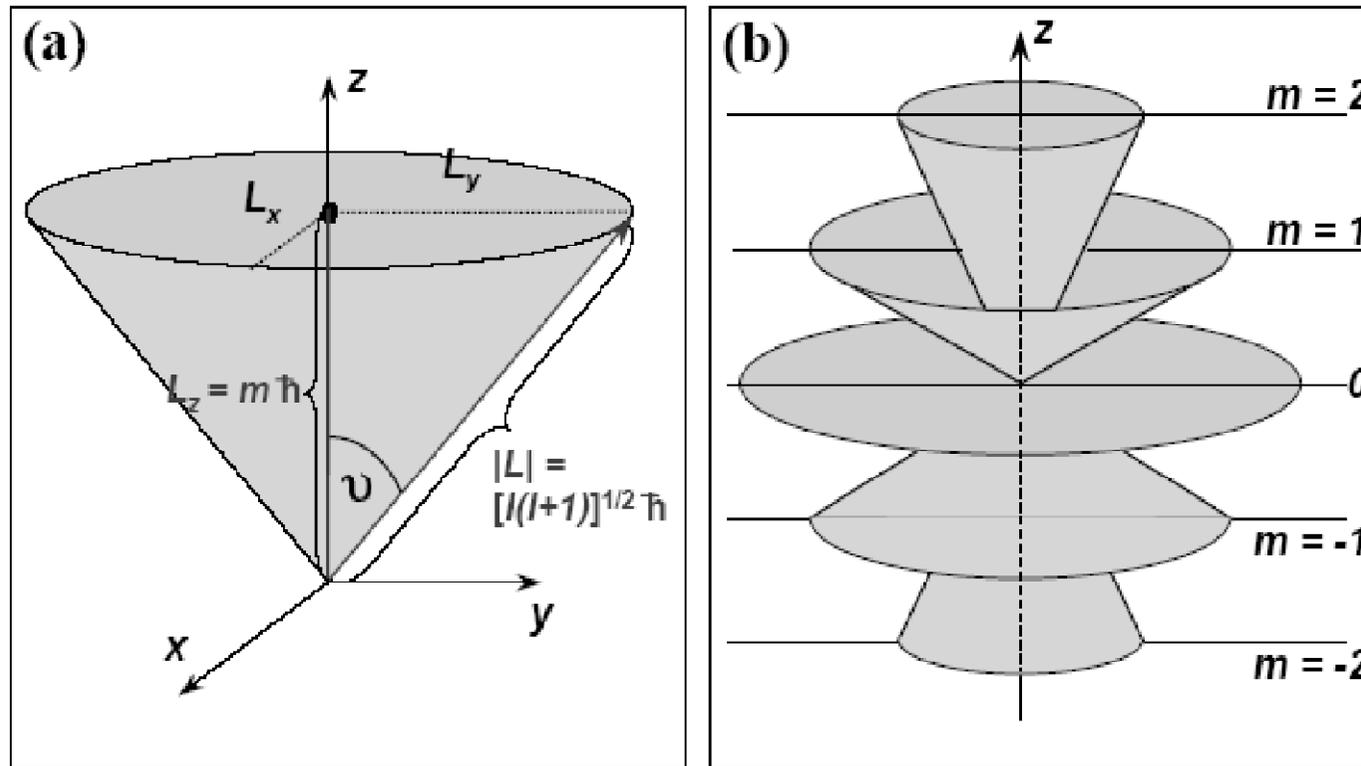


Abbildung 3.11: (a) Räumliche Einstellung eines Drehimpulses. (b) Einstellmöglichkeiten des Drehimpulses  $\mathbf{L}$  mit der Quantenzahl  $l = 2$ .  $L_x$  und  $L_y$  sind unbestimmbar, nachdem  $|L|$  und  $L_z$  festgelegt wurden und liegen auf Kegelmänteln.

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

# Vertauschungsrelationen

---

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= i\hbar \hat{l}_z \\ [\hat{l}_y, \hat{l}_z] &= i\hbar \hat{l}_x \\ [\hat{l}_z, \hat{l}_x] &= i\hbar \hat{l}_y \\ [\hat{l}^2, \hat{l}_i] &= 0, \quad j=x,y,z \end{aligned}$$

**Nur Gesamtdrehimpuls und eine der Komponenten gleichzeitig zu bestimmen.**

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{l}^2] &= 0 \\ [\hat{H}, \hat{l}_z] &= 0 \end{aligned}$$

**Gesamtdrehimpuls und Energie gleichzeitig zu bestimmen.**

**Z-Komponente des Drehimpulses und Energie gleichzeitig zu bestimmen.**

# Vertauschungsrelationen

---

---

**Idee:** Heisenbergsche Unschärferelation bedeutet, dass man Impuls in x-Richtung und die x-Koordinate nicht gleichzeitig scharf bestimmen kann. Grund: Messung des Impulses beeinflusst Ort und umgekehrt.

Was ist, wenn man zuerst den Impuls bestimmt und dann den Ort??  
Dann kenne ich beide? Oder hängt es von der Reihenfolge ab?

Zuerst Ortsbestimmung und dann Impulsbestimmung  $\neq$  zuerst Impulsbestimmung und dann Ortsbestimmung?

Dies kann man testen durch die Operatoren zu vertauschen und die Differenz zu nehmen:

$$[A, B] = AB - BA$$

Dies nennt man den Kommutator (oder auch Vertauschungsrelation) zweier linearen Operatoren A und B .

# 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:**

$$\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

(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

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

# Das Wasserstoffatom

---

*Elektron in kugelsymmetrischen Coulombfeld des Kerns  
Schrödingerl. exakt lösbar.*

Sonst existiert nur numerische Lösung

Aber: Spektren d. H-Atoms zeigen **Feinstruktur** - diese kann mit Schrödingerl. vorerst nicht beschrieben werden.

*In relativistischer Theorie jedoch beschreibbar.*

Ziel: alle wesentlichen möglichen Phänomene an Hand  
Einelektronensystem behandeln.

# Hamilton-Operator in Kugelkoordinaten

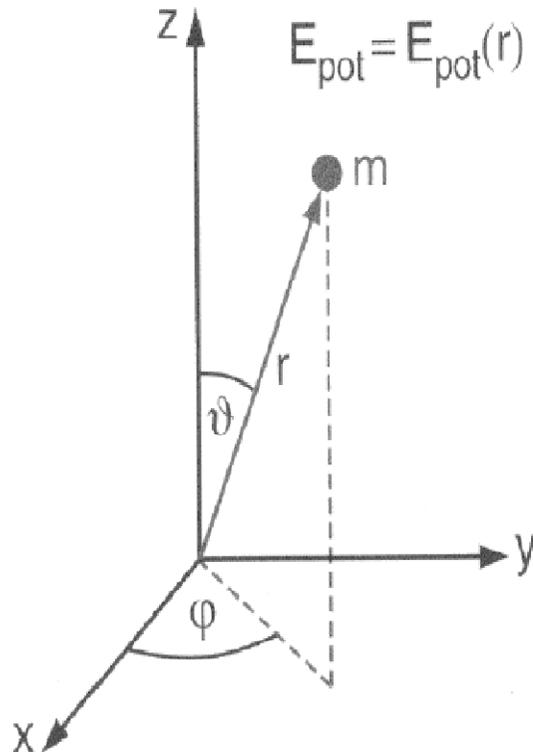
Kartesische  
Koordinaten:

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

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:

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

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

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

# 3-D Schrödingergleichung in Kugelkoor.

---

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + E_{pot} \Psi = E \Psi \quad \text{mit} \quad \Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

**Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten**

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) \Psi = 0$$

**Lösung mit Produktansatz:**  $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$

$$\hbar \equiv h/2 \pi$$

## Winkelabh. des Impulsoperators entspricht Drehimpulsoperator

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

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

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

**Eigenfkt. des Drehimpulsoperators sind**

$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) \cdot \Phi_m(\varphi)$  ....*Kugelflächenfunktionen* (später mehr)

mit Quantenzahlen  $l, m$ , die Quantisierung von  $\hat{l}$  und  $\hat{l}_z$  bestimmen.

**Eigenwerte:**  $\sqrt{l(l+1)} \hbar$  für  $\hat{l}$  und  $m\hbar$  für  $\hat{l}_z$  mit  $-l < m < l$  (Beweis folgt)

# 3-D Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten.

---

---

*Lösung mit Produktansatz:  $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$*

**Erwarte als Lösungen:**

- 1)  $\infty$  viele Energieniveaus, die nur von  $r$  abhängen, d.h.  $\infty$  viele Energieeigenfunktionen, erwarte Polynom in  $r$  mit  $\infty$  vielen Termen**
- 2) Die Winkelabh. wird durch die Eigenfkt. des Drehimpulsoperators gegeben. Da das Elektron eine stehende Welle bildet, erwarten wir für  $\Phi(\varphi) = C e^{im\varphi}$ .**

# VL 10

---

---

## VL10. Das Wasserstoffatom in der QM (I)

### 10.2. Quantenzahlen des Wasserstoffatoms

## Randbedingung in $\Phi \Rightarrow$ „magnetische“ Quantenzahl $m$ (Quantisierung macht sich nur bemerkbar im Magnetfeld)

Einsetzen in Schrödingergl. in Kugelkoordinaten

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) r^2 \sin \vartheta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}$$

*Linke Seite hängt nur von  $r$  und  $\vartheta$  ab, rechte nur von  $\varphi$   
Gleichung muß für ALLE Werte von  $r, \vartheta, \varphi$  gelten  $\Rightarrow$*

Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten  $C_1$  sein  $\Rightarrow$

Für rechte Seite:  $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -C_1 \cdot \Phi$

Lösungsfunktion:  $\Phi = A \cdot e^{\pm i \sqrt{C_1} \varphi}$

$\Phi$  muß im ganzen Raum eindeutig sein  $\Rightarrow$

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + n \cdot 2\pi) \Rightarrow e^{\pm i \sqrt{C_1} \cdot 2n\pi} = 1 \Rightarrow \sqrt{C_1} = m \text{ mit } m \in \mathbb{Z}$$

Damit ergibt sich für die Lösungsfunktionen  $\Phi_m(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi}$

Normierung:  $\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \cdot \Phi_m(\varphi) d\varphi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

**$m$  ganzzahlig  
= „magnetische“  
Quantenzahl durch  
Randbedingung in  $\Phi$**

# 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)

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

# 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  $L_z$   
Z - Achse zuerst willkürlich, im Magnetfeld entlang B

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

# Mögliche Werte von $L_z$ für mehrere Werte von $L_{\text{tot}}$

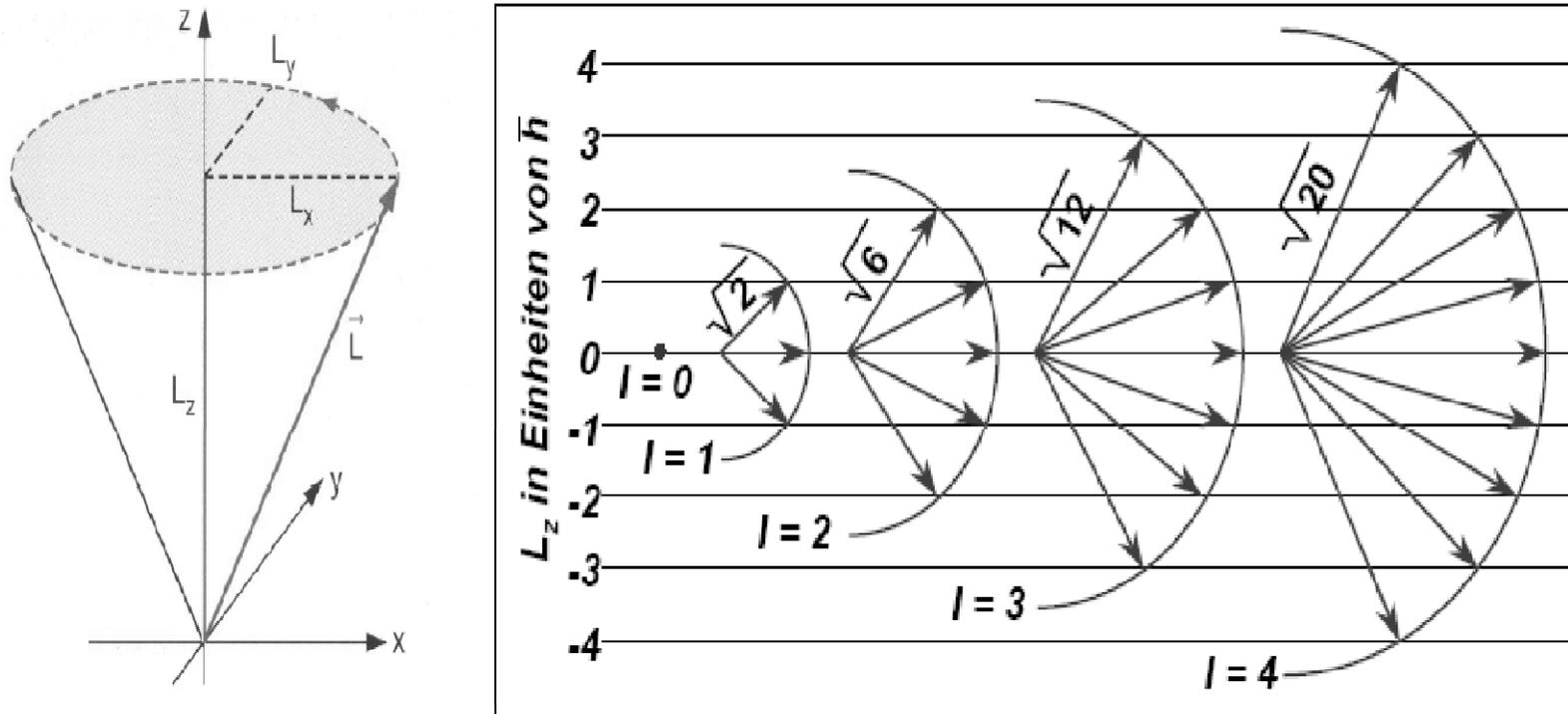


Abbildung 3.10: Mögliche Richtungen eines Drehimpulses mit definierter Komponente  $L_z$  und definiertem Betrag  $|L|$  für verschiedene Bahndrehimpulsquantenzahlen  $l$ .

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.

# Lösung der Polarwinkelabhängigkeit

**Normierte Funktionen:**  $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

Funktionen sind **orthogonal** - es gilt:  $\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \cdot \Phi_n d\varphi = \delta_{mn}$

$\delta_{mn} = 1$  für  $m = n$  sonst Null

**Bestimmung der Lösungsfunktion  $\Theta(\vartheta)$**

Vorgangsweise:

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) r^2 \sin \vartheta = C_1 = m^2 \quad \text{mal} \quad \frac{1}{\sin^2 \vartheta}$$

und umordnen  $\rightarrow$  rechts nur Terme in  $\vartheta$ , links nur solche in  $r$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) = \quad \mathbf{m= Masse!}$$

$$= - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = C_2 \quad \mathbf{m= magn.QZ!}$$

# Lösung der Polarwinkelabhängigkeit

---

*Vorsicht:*  $m$  hat hier zwei Bedeutungen

$m$ ...Masse und  $m = \sqrt{C_1}$  - *magnetische Quantenzahl*

*Wieder gilt: Linke Seite hängt nur von  $r$  ab, rechte nur von  $\vartheta$*

*Gleichung muß für ALLE Werte von  $r$  und  $\vartheta$  gelten  $\Rightarrow$*

Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten  $C_2$  sein  $\Rightarrow$

Erhalten für Funktion  $\Theta(\vartheta)$ :

$$\frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = -C_2 \quad m = \text{magn. QZ}$$

$m = 0$  und  $\cos \vartheta = \xi \Rightarrow$  *Legendresche Differentialgl.*

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (1 - \xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right] + C_2 \Theta = 0$$

# Lösung der Polarwinkelabhängigkeit

**Lösung in Form einer Potenzreihe:**

$\Theta = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots$  Reihe darf nur endlich sein, damit  $\Theta$  auch für  $\xi = \pm 1$ , d.h.  $\theta = 0$  oder  $180$ , endlich bleibt

Einsetzen - Koeffizientenvergleich (gleiche Pot  $\xi^k$ )

Rekursionsformel:  $a_{k+2} = a_k \cdot \frac{k \cdot (k+1) - C_2}{(k+2) \cdot (k+1)}$

Reihe hat endliche Zahl an Gliedern - Reihe bricht nach  $l$ -ten Glied ab, d.h.  $a_l \neq 0$  aber  $a_{l+2} = 0 \Rightarrow C_2 = l(l+1)$  mit  $l \in \mathbb{N}$

**$l$  = "Drehimpuls" QZ = ganze Zahl aus Randbedingung von  $\theta$**

Reelle Lösungsfunktionen - **Legendre Polynome**

$$\Theta_l(\xi) = \text{const.} P_l(\cos \vartheta)$$

Wegen Eindeutigkeit d. Aufenthaltswahrscheinlichkeit am gleichen Ort gilt  $\Theta(\vartheta) = \pm \Theta(\vartheta + \pi)$

# Lösung der Polarwinkelabhängigkeit

Für  $m \neq 0$  lässt sich  $\frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = -C_2$  m=magn. QZ

durch "assozierte Legendrefunktionen" lösen - enthalten m

Bestimmungsgl.:  $P_l^m(\cos \vartheta) = \text{const.} (1 - \xi^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} (P_l(\xi))$

Weil  $P_l(\xi)$  Potenzreihe bis  $\xi^l \Rightarrow$  es muß gelten  $|m| \leq l$

Da m positiv aber auch negativ sein kann gilt:

$$-l \leq m \leq +l$$

Normierungsbedingung:  $\int_0^\pi |P_l^m(\cos \vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = 1$

# VL 10

---

---

## VL10. Das Wasserstoffatom in der QM (I)

### 10.3. Winkelabhängigkeit (Kugelflächenfunktionen)

# Kugelflächenfunktionen

---

Produktfunktion:

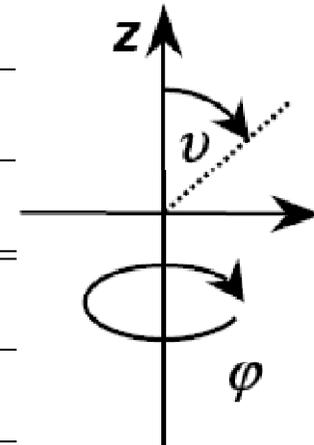
$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) \cdot \Phi_m(\varphi) \dots \textit{Kugelflächenfunktionen}$$

$$\text{Normierung: } \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1$$

$|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 \dots \textit{Aufenthaltswahrscheinlichkeit im kugelsymmetrischen Potential - Abhängigkeit in } \vartheta, \varphi$

# Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2,3$

$l$	$m$	$Y_l^m(\vartheta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	$\pm 1$	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta$
2	$\pm 2$	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	$\pm 1$	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2 \cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta)$
3	$\pm 3$	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$
	$\pm 2$	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	$\pm 1$	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$



Das Absolutquadrat der Kugelflächenfunktionen  $|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2$  gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im kugelsymmetrischen Potenzial als Funktion der Winkel  $\vartheta$  und  $\varphi$  an.

# Kugelflächenfunktionen in realen Linearkomb.

$l$	$m$	Bezeichnung	Entartungsgrad	$ m $	Winkelfunktion
0	0	$s$	1	0	$s = 1/\sqrt{4\pi}$
1	-1, 0, 1	$p$	3	0	$p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
				1	$p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi$
					$p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \sin \varphi$
2	-2 bis +2	$d$	5	0	$d_{3z^2-r^2} = \sqrt{5/16\pi} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
				1	$d_{xz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi$
					$d_{yz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi$
				2	$d_{x^2-y^2} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi$
					$d_{xy} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \vartheta \sin 2\varphi$
3	-3 bis +3	$f$	7		
4	-4 bis +4	$g$	9		
5	-5 bis +5	$h$	11		

Tabelle 3.3: Funktionennamen und Entartungsgrad für Zustände mit verschiedener Drehimpulsquantenzahl  $l$ . Ebenso gezeigt ist die mathematische Form der Winkelfunktionen für die  $s$ -,  $p$ - und  $d$ -Zustände in kartesischen Koordinaten.

# Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2,3$

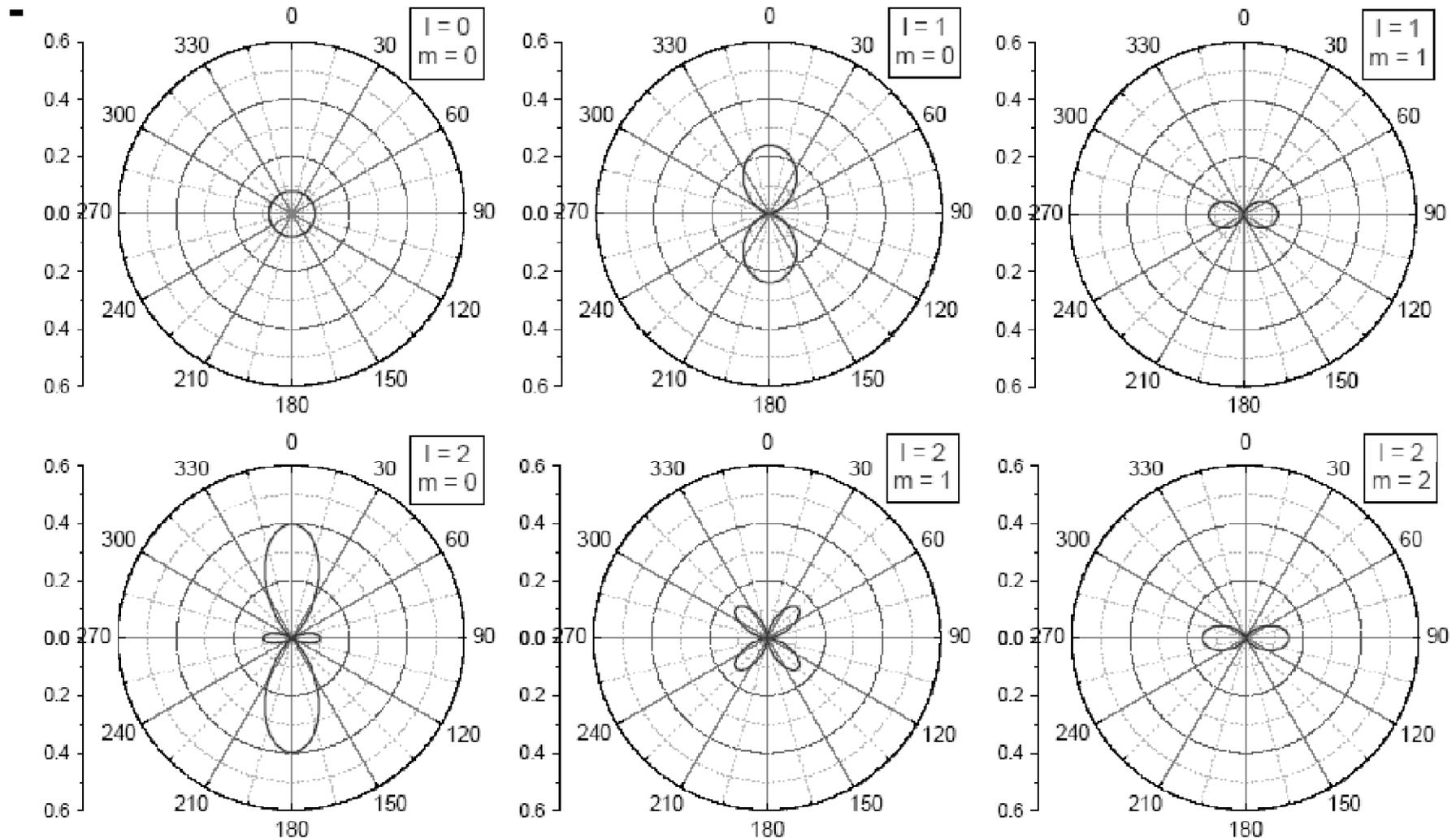


Abbildung 3.7: Polardarstellung des Absolutquadrats der normierten Kugelflächenfunktionen. Die Länge des Vektors vom Ursprung zu den Kurven gibt  $|Y_l^m(\cos \vartheta)|^2$  für die verschiedenen Winkel  $\vartheta$  an. Alle Diagramme sind rotationssymmetrisch um die  $z$ -Achse, die hier als vertikale Achse gewählt wurde.

# Quadrat der Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2$

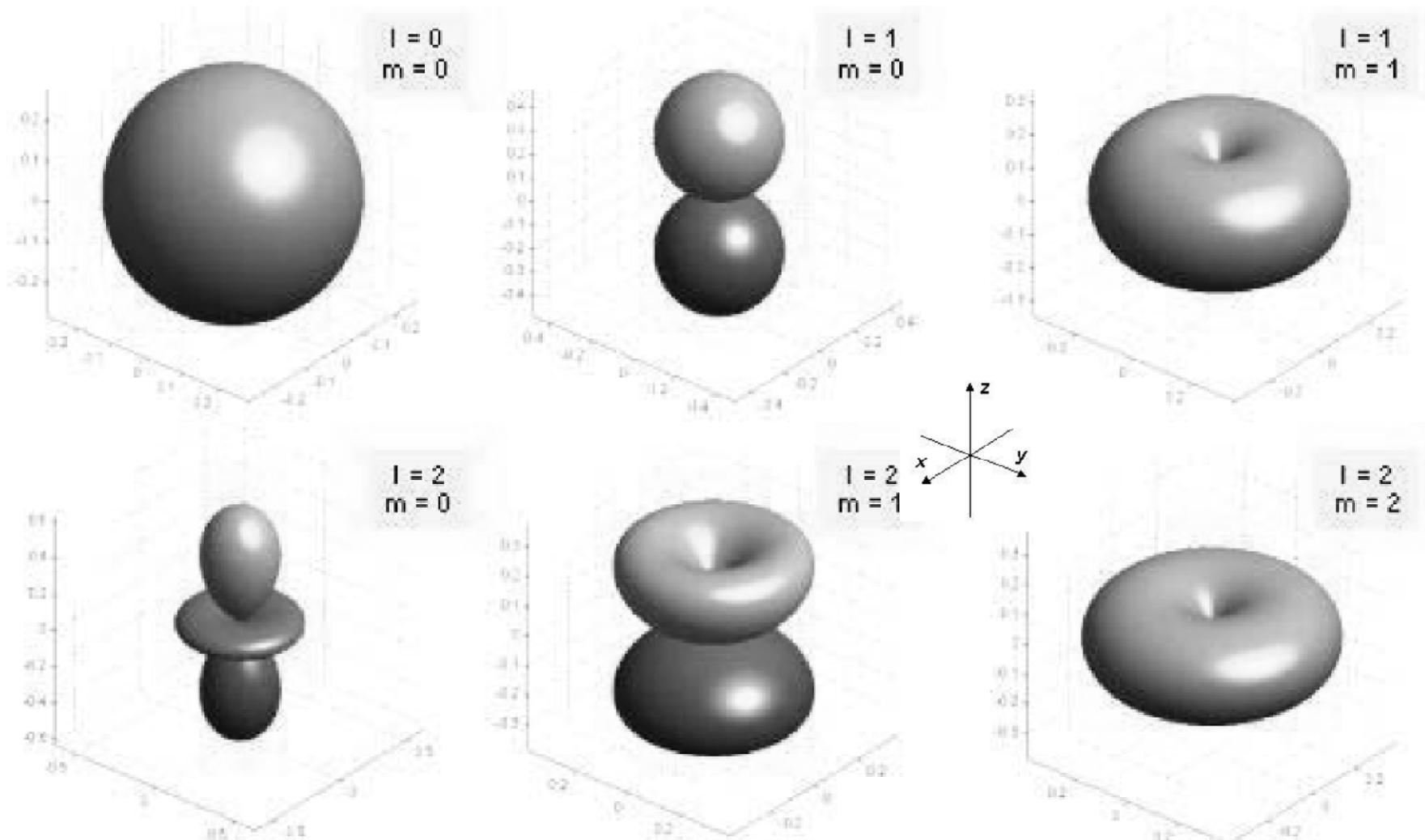


Abbildung 3.8: Dreidimensionale Darstellung der Quadrate der normierten Kugelflächenfunktionen  $|Y_l^m|^2$  für  $l = 0, 1, 2$  und 3. Zeichnet man einen Vektor vom Zentrum der betreffenden Figur in eine bestimmte Richtung, so gibt die Länge eines Vektors vom Ursprung zum Schnittpunkt mit der Oberfläche der Figur den Wert von  $|Y_l^m|^2$  an.

# Quadrat der Kugelflächenfunktionen für $l=3$

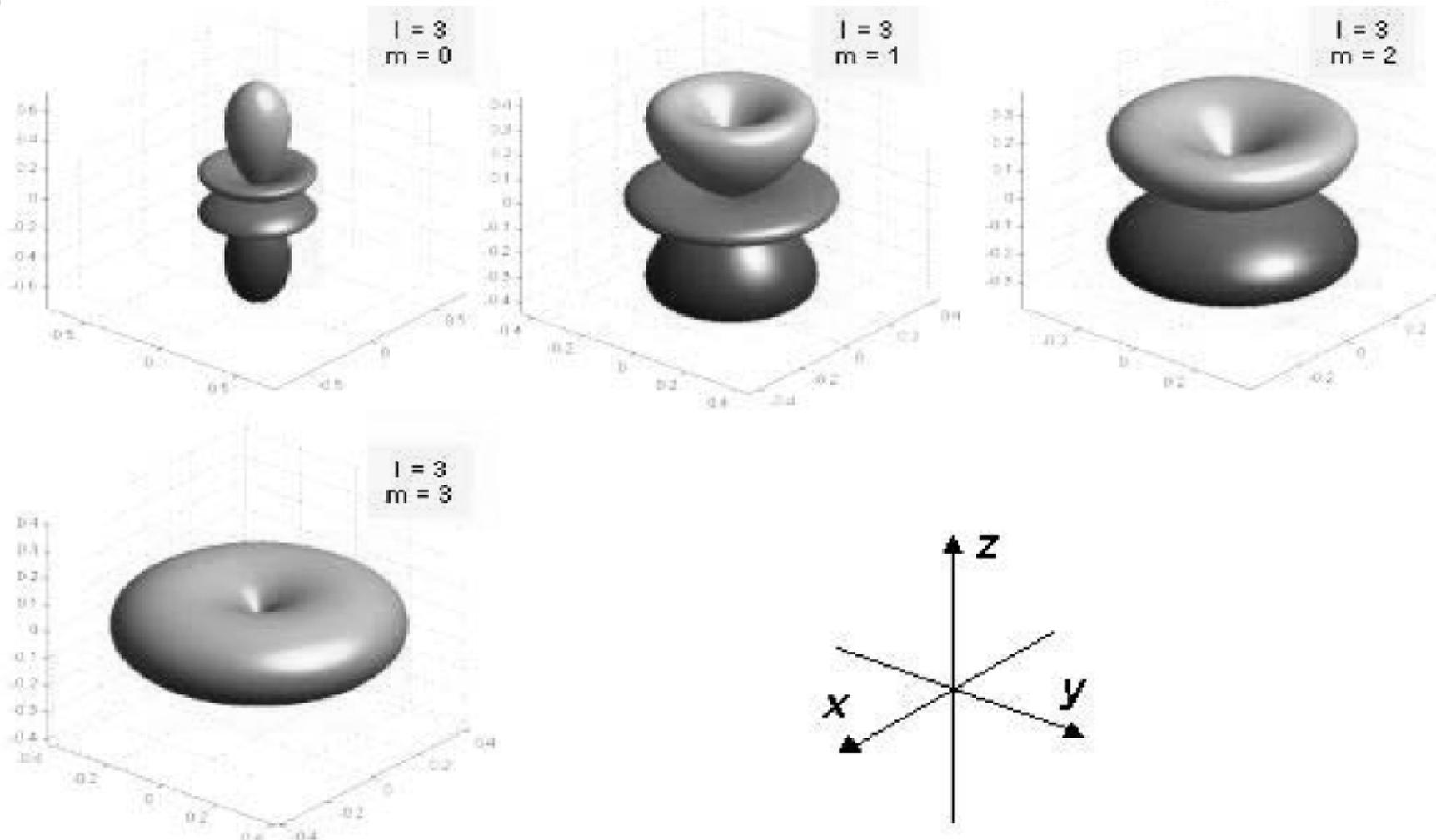
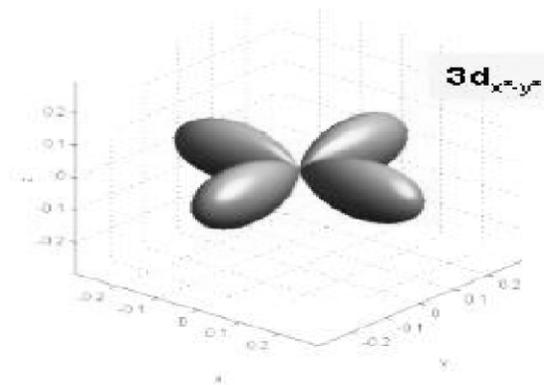
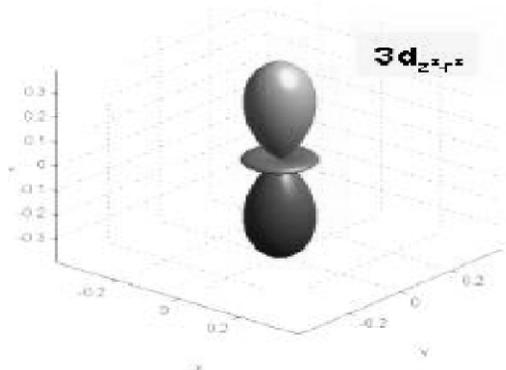
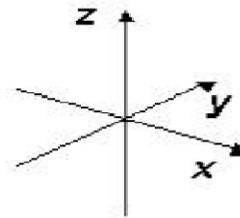
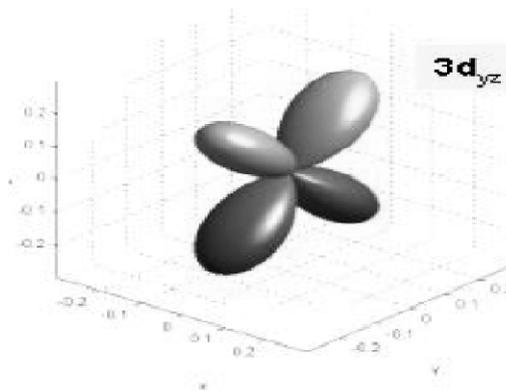
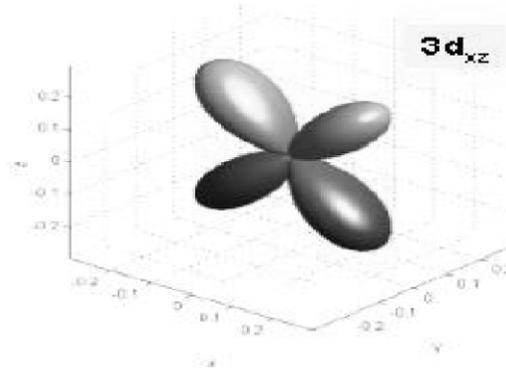
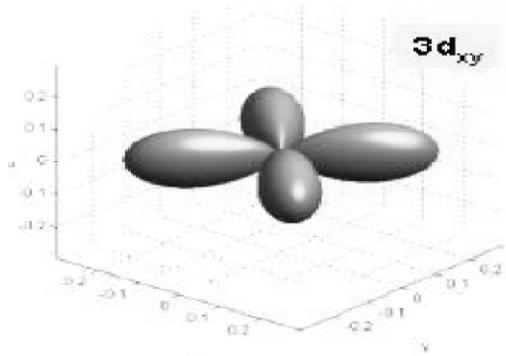


Abbildung 3.8: Dreidimensionale Darstellung der Quadrate der normierten Kugelflächenfunktionen  $|Y_l^m|^2$  für  $l = 0, 1, 2$  und  $3$ . Zeichnet man einen Vektor vom Zentrum der betreffenden Figur in eine bestimmte Richtung, so gibt die Länge eines Vektors vom Ursprung zum Schnittpunkt mit der Oberfläche der Figur den Wert von  $|Y_l^m|^2$  an.

# Die 5 Kugelflächenfunktionen für $l=2, n=3$



# Zum Mitnehmen

---

---

Die dreidimensionale SG für das H-Atom lässt sich wegen der Kugelsymmetrie des Potentials in drei eindimensionale Gleichungen der Kugelkoordinat.  $r$ ,  $\theta$  und  $\varphi$  umformen.

Die Wellenfkt. kann als Produkt  $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi)$  geschrieben werden, wobei  $\psi$  vom Potential abhängt und die Kugelflächenfkt.  $Y$  durch den Drehimpuls für alle kugelsymmetrischen Potentiale bestimmt wird.