

VL8. Das Wasserstoffatom in der Klass. Mechanik

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

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)

VL6. Elemente der Quantenmechanik I

6.1. Schrödingergleichung als Wellengleichung der Materie

6.2. Messungen in der Quantenmechanik

VL7. Elemente der Quantenmechanik II

7.1. Wellenpakete als Lösungen der Schrödingergleichung

7.2. Lösungen der Schrödingergleichung in einem Potentialfeld

Lösung der SG mit beliebigen Potentialen (bisher eindimensionales Rechteckpotential)

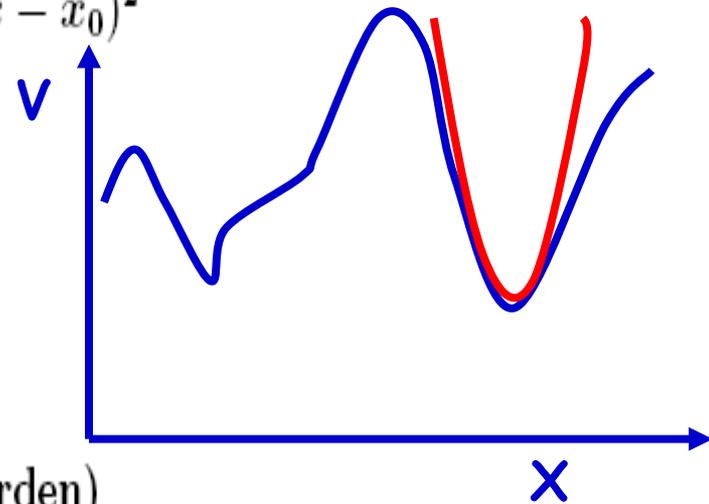
Das Potential um das Minimum x_0 kann wie jedes Polynom als Taylorsche Reihe entwickelt werden:

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

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

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 ($V \propto x^2!$)

Lösung der SG mit beliebigen Potentialen (bisher eindimensionales Rechteckpotential)

KM

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

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

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

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

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

$$V = -\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$\rightarrow x = A_0 \cos \sqrt{\frac{k}{m}} t$$

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 Energie-
niveaus, wie beim
Rechteckpotential!**

VL9. Elemente der Quantenmechanik III

9.2. Harmonischer Oszillator

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 $a_- a_+ f(x)$?

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

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

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

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

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

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

1. 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 : $\hat{H}\varphi = E\varphi, \hat{H} \equiv a_-a_+ \cdot -\frac{1}{2}\hbar\omega \} \rightarrow$ und $\hat{H} \equiv a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega \}$

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)

Energienstufen 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: $E > 0$ $\left[E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right]$, 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 : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \leftarrow \underline{\text{Nullpunktsenergie}}$

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

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

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

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

$$\rightarrow E_1 = E_0 + \hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\varphi_2 = a_+ \varphi_1$$

$$\rightarrow E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega_1 \text{ usw.}$$

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)

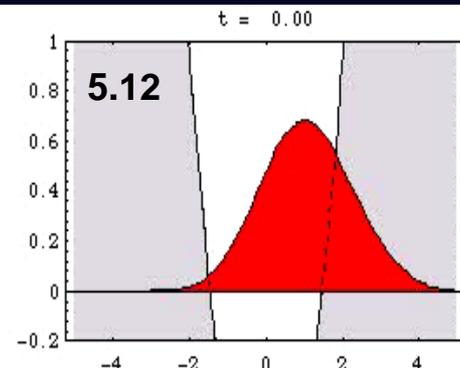
$\rightarrow \varphi_0 \rightarrow$ Gausskurve

$\varphi_1 \rightarrow \varphi_0 2x$

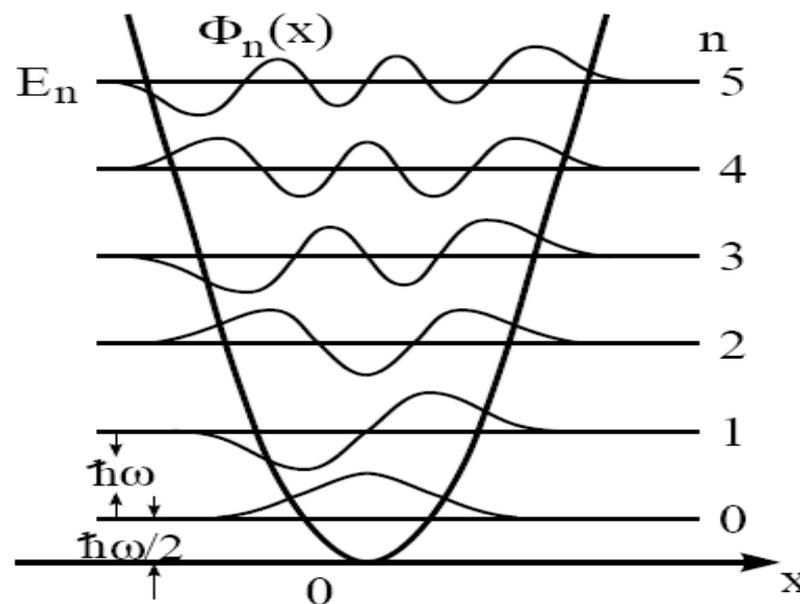
$\varphi_2 \rightarrow \varphi_0(4x^2 - 2)$

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



Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in einem rechteckigen Potentialtopf

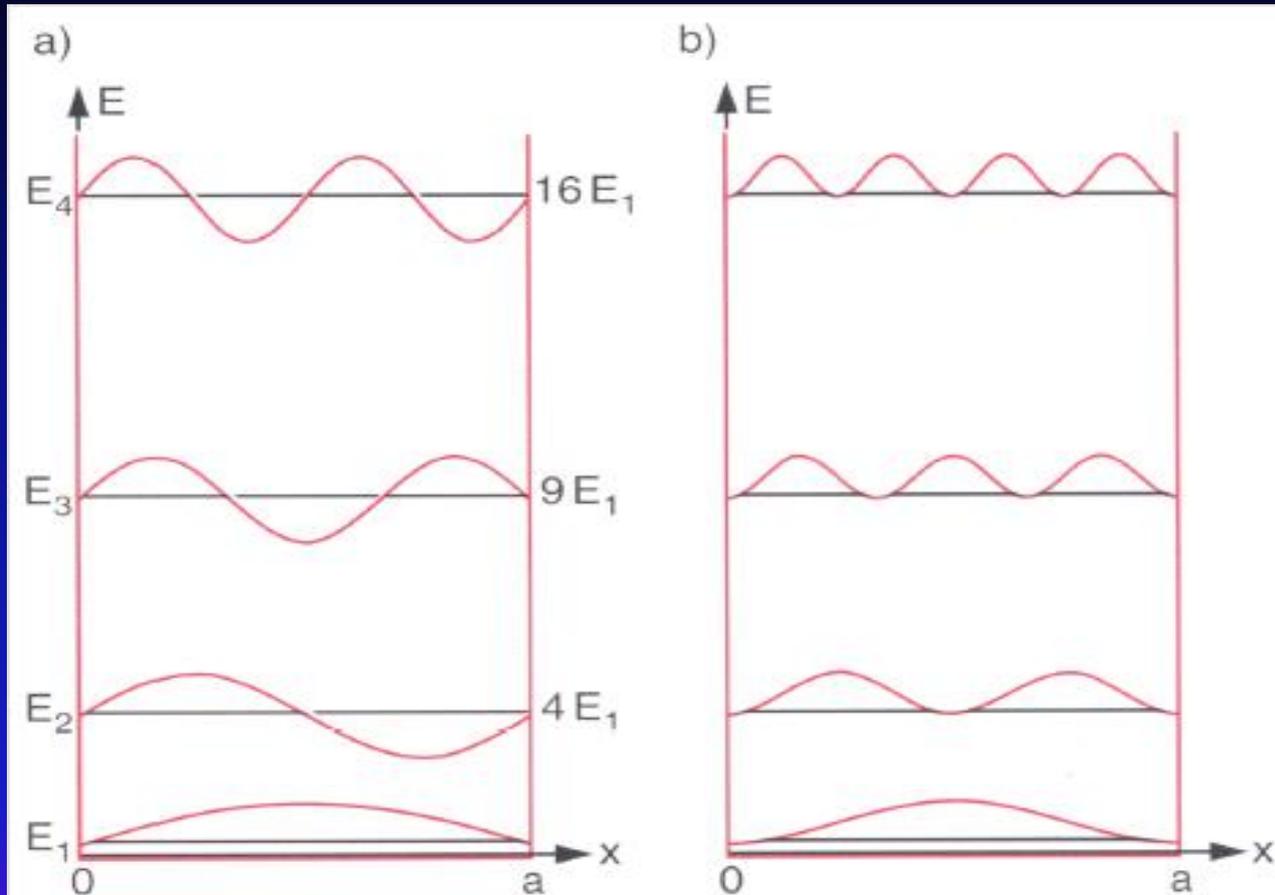


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ des Teilchens

Berechnung der AW beim klassischen Oszillator

Wahrscheinlichkeit, das Kugel sich am Position x aufhält:

$$P(x) = k \frac{dt}{dx} = \frac{k}{v} \quad (1).$$

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

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

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

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

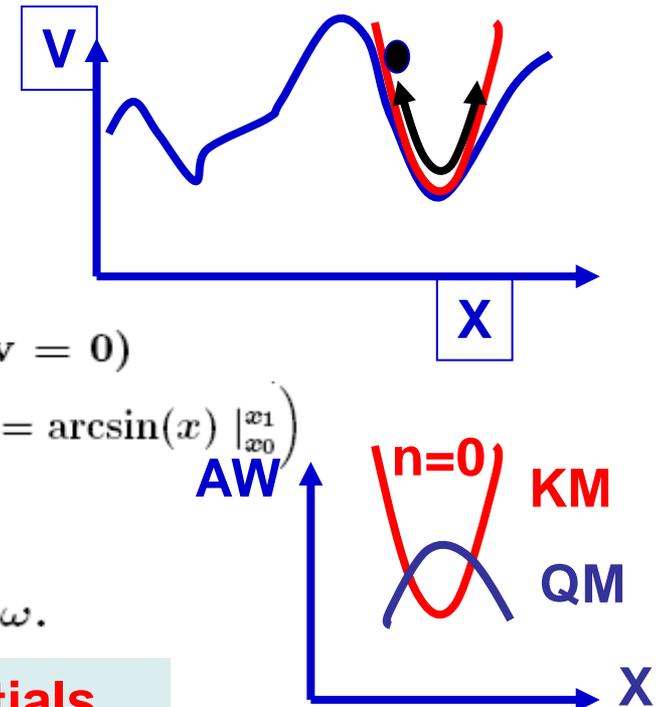
$$k \text{ aus Normierung : } \int_{x_{min}}^{x_{max}} P(x) dx = 1 \quad (4)$$

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

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

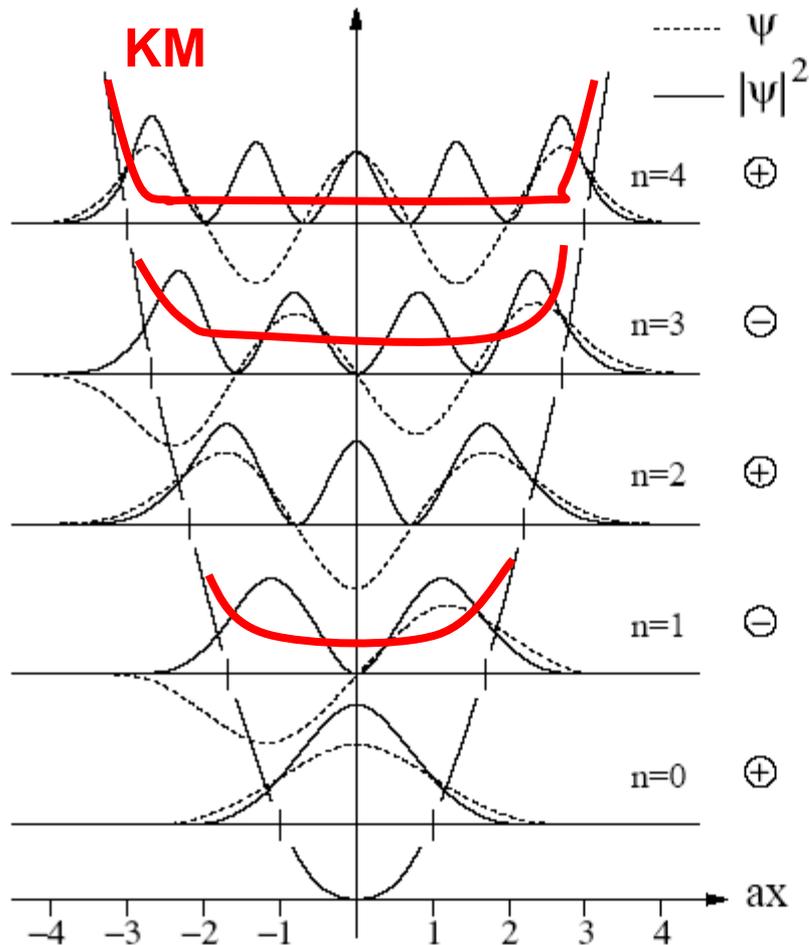
$$(5) \text{ in } (3): P(x) = \frac{\omega\sqrt{m}}{\sqrt{(2n+1)\hbar\omega - m\omega^2 x^2}} = k/v$$

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



KM: AW minimal im Minimum des Potentials
QM: AW maximal im Minimum des Potentials

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 $x = 0$

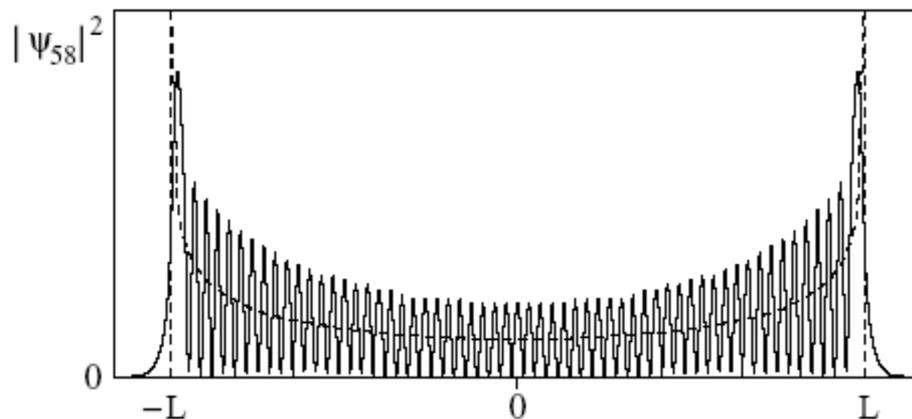
**Paritätsoperator = Spiegelung gegen Ursprung (x → -x).
Eigenwert + oder -1, hier $(-1)^n$**

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 $n \gg 1$

$$n = 58$$



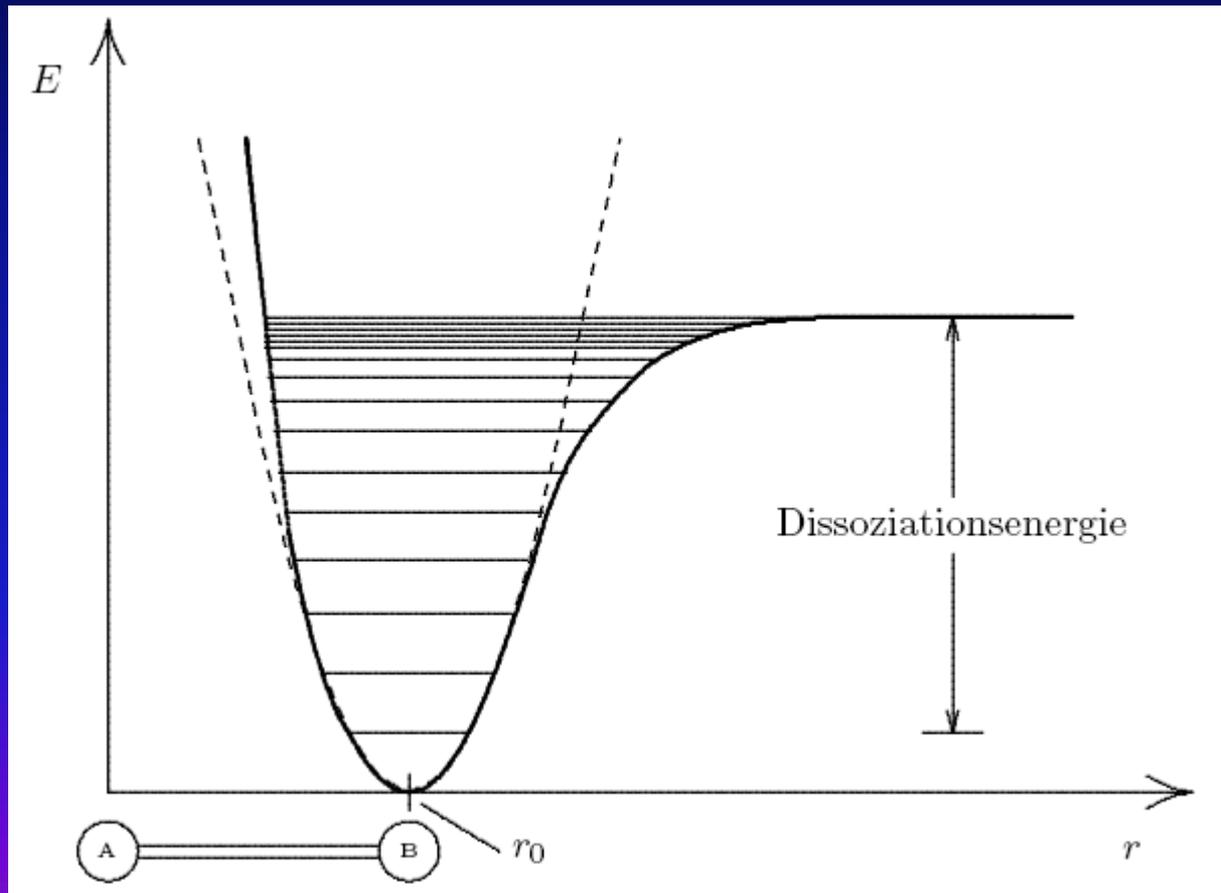
$(n + 1)$ Maxima für $|\psi_n|^2$

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 (= ab einer bestimmten Energie)



VL9. Elemente der Quantenmechanik III

9.3. Drehimpulsoperator

Wiederholung Drehimpuls

In der Atomphysik spielt der Drehimpuls eine zentrale, entscheidende Rolle.

Für Potentiale mit $V(r) = V(r)$, Zentralpotentiale ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße.

Der Drehimpuls hat die Dimension Länge***Masse*****Geschwindigkeit**

Die SI-Einheit ist: $\text{m}\cdot\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s} = \text{m}\cdot\text{s}\cdot\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s}^2 = \text{N}\cdot\text{m}\cdot\text{s} = \text{J}\cdot\text{s}$

Die Größe der Dimension Energie***Zeit** nennt man **Wirkung**.

Eine fundamentale Einheit der Wirkung ist $\hbar = h/(2\pi) = 1.0545726\cdot 10^{-34}\text{Js}$

Drehimpulse kommen in der Natur nur in Einheiten von $\frac{1}{2}\hbar$ vor!

Weil \hbar so klein ist, ist die Quantisierung des Drehimpulses bei makroskopischen Objekten praktisch nicht beobachtbar und der Drehimpuls erscheint klassisch als kontinuierliche Größe.

Eine Masse von 1kg auf einer Kreisbahn mit Radius 1m und $\omega = 2\pi\cdot 1\text{Hz}$ hat einen Drehimpuls von $\text{m}\cdot\text{r}^2\cdot\omega = 1.1916\cdot 10^{35}\cdot \hbar/2$

Die Winkelabhängigkeit der Wellenfkt. In einem Zentralpotential entspricht Drehimpulsoperator (Beweis folgt).

Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

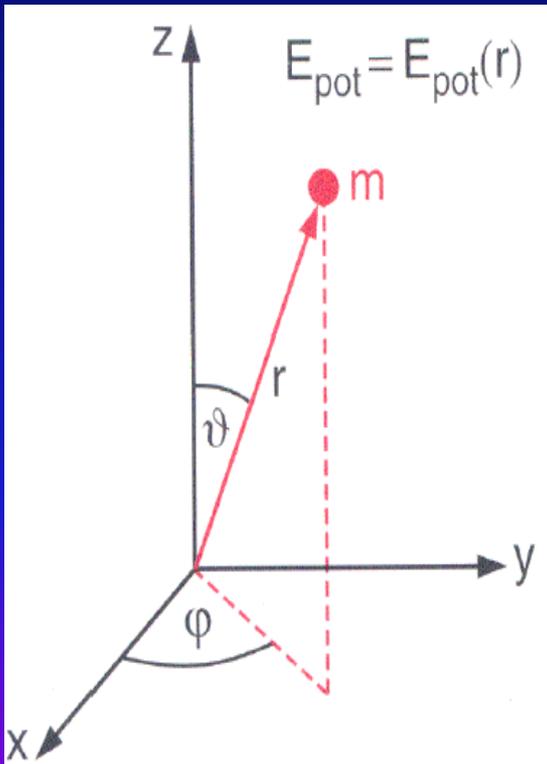
Kartesische
Koordinaten:

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

Kugelkoord.:

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

**Beweis
folgt.**



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

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

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

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

$$z = r \cos \vartheta$$

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

Betrachte ein Längenelement ds :

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

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

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

Mathematisches Intermezzo

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

(= Ableitung eines Vektors, also ein Vektor!)

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

Divergenz einer Funktion F : (= Skalarprodukt, also eine Zahl!)

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

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

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:

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

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:

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

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

Beispiel:

Setzen wir die Operatoren für Ort und Impuls einfach in obige Gleichung ein und lassen diese auf eine Wellenfunktion wirken, so folgt:

$$[x, p_x]\psi(x) = (x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}))\psi(x) - ((-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})x)\psi(x) = (-i\hbar x\frac{\partial}{\partial x} + (i\hbar(1+x\frac{\partial}{\partial x})))\psi(x) = i\hbar\psi(x)$$

D.h. x und p_x sind nicht kommutativ oder nicht gleichzeitig scharf messbar. Unsicherheit gegeben durch Kommutator $[]$. Wie ist es mit x und p_y ?

$$\begin{aligned}[x, p_y]\psi(x) &= (x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}))\psi(x) - ((-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})x)\psi(x) = (-i\hbar x\frac{\partial}{\partial y})\psi(x) + (i\hbar\frac{\partial}{\partial y})(x\psi(x)) \\ &= (-i\hbar x\frac{\partial}{\partial y} + i\hbar x\frac{\partial}{\partial y})\psi(x) = 0\end{aligned}$$

D.h. x und p_y sind kommutativ oder gleichzeitig scharf messbar.

PS. Normale Schreibweise der Operatoren: mit „Hütchen“, wie \hat{O} , \hat{x} , \hat{p}

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

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

Vertauschungsrelationen

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

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.

Zum Mitnehmen

Die Randbedingungen der SG führen zur Quantisierung.

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.

Winkelabhängigkeit der SG in einem kugelsymmetrischen Potential entspricht Drehimpuls-Operator. Gesamtdrehimpuls und eine Komponente gleichzeitig mit Energie zu bestimmen.