



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung, Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

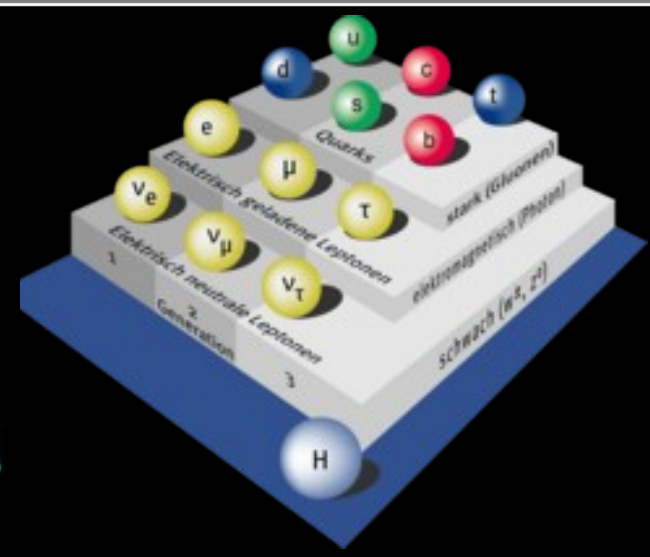
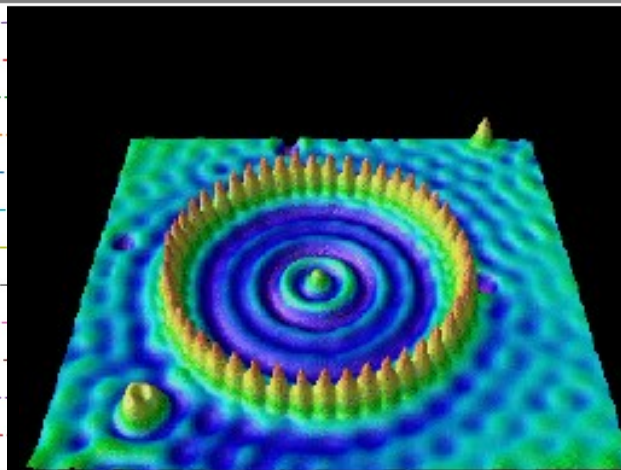
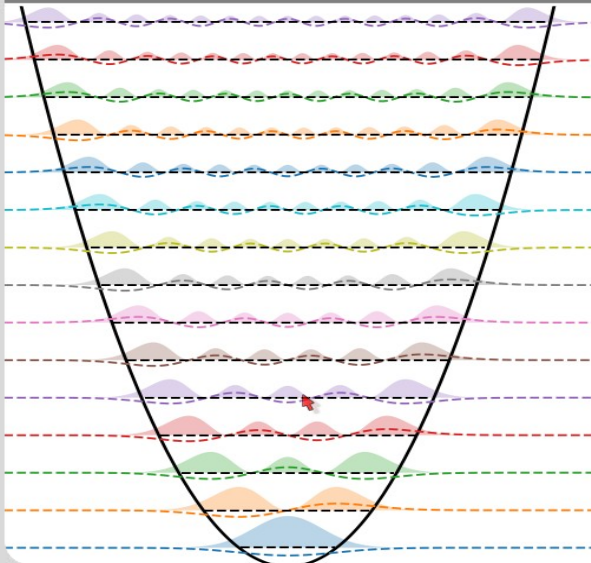
Vorlesung10 Moderne Physik (L)

Das Wasserstoffatom

Günter Quast

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



Die **Anmeldung zur Vorleistung** („Übungsschein“)

ist im Campus-System **freigeschaltet**

Prüfungsnummer 7800067

Bitte anmelden

(und Feedback geben, wenn es für Sie nicht funktioniert !)

Die **Anmeldung zur Vorleistung** („Übungsschein“)

ist im Campus-System **freigeschaltet**

Prüfungsnummer 7800067

Bitte anmelden

(und Feedback geben, wenn es für Sie nicht funktioniert !)

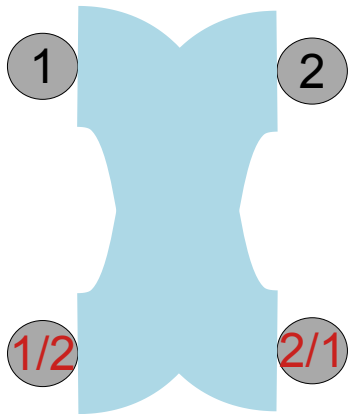
In der Anmeldung per E-Mail zur Kurseinteilung

gab es zum Studiengang zwei mal die Angabe „sonstige“.

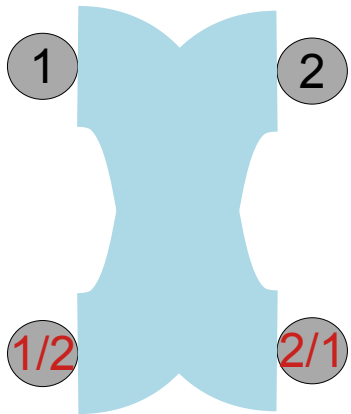
Bitte an die Betroffenen, per E-Mail

Frau Schäfer (daniela.schaefer@kit) und mir (guenter.quast@kit.edu)

Information zu Studiengang und Prüfungsmodalitäten zukommen lassen.



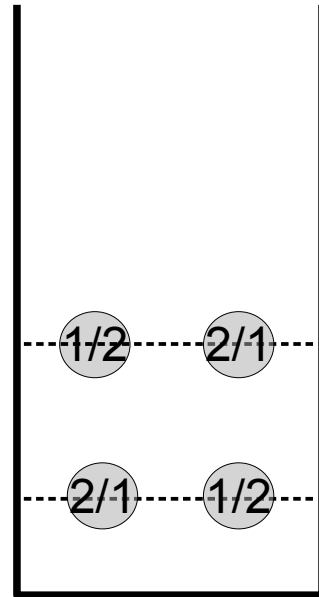
Zwei identische Quanten-Teilchen
sind ununterscheidbar

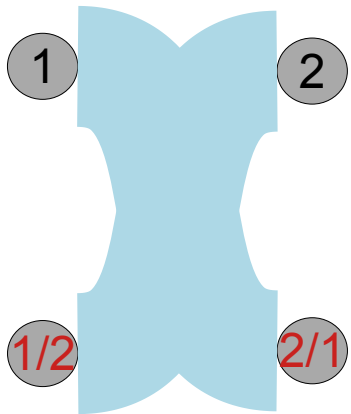


Zwei identische Quanten-Teilchen
sind ununterscheidbar

Beispiel: 2 Teilchen im Potentialkasten:

$$|\psi_{n,m}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{n,m}(x_2, x_1)|^2$$



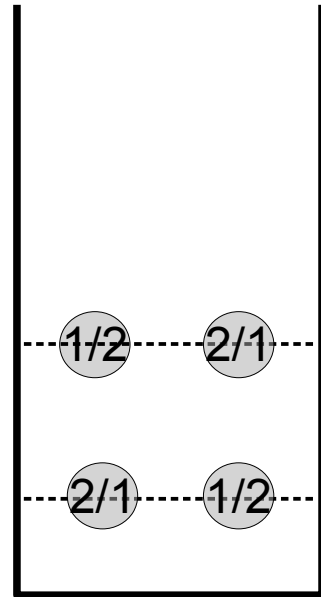


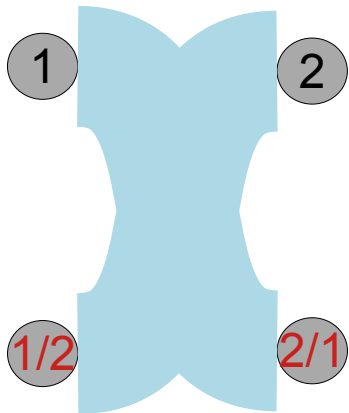
Zwei identische Quanten-Teilchen
sind ununterscheidbar

Beispiel: 2 Teilchen im Potentialkasten:

$$|\psi_{n,m}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{n,m}(x_2, x_1)|^2$$

– $\Psi_{n,m}(x_1, x_2) = \Psi_n(x_1) \cdot \Psi_m(x_2)$ löst Schrödinger-Gleichung



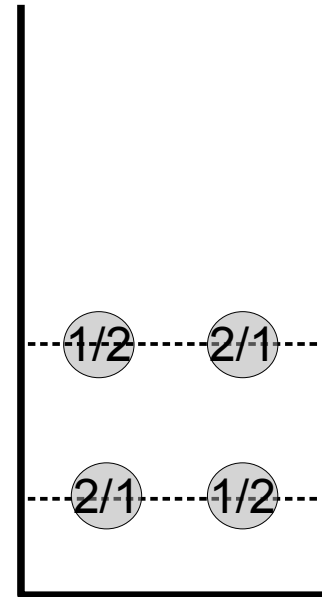


Zwei identische Quanten-Teilchen
sind ununterscheidbar

Beispiel: 2 Teilchen im Potentialkasten:

$$|\psi_{n,m}(x_1, x_2)|^2 = |\psi_{n,m}(x_2, x_1)|^2$$

– $\Psi_{n,m}(x_1, x_2) = \Psi_n(x_1) \cdot \Psi_m(x_2)$ löst Schrödinger-Gleichung



Ununterscheidbare Linearkombinationen:

$$\psi_{n,m}^S(x_1, x_2) = A (\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_n(x_2)\psi_m(x_1))$$

$$\psi_{n,m}^A(x_1, x_2) = A (\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1))$$

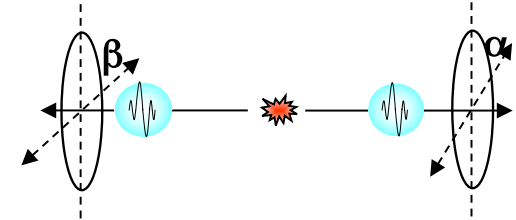
* +: Bosonen

* -: Fermionen

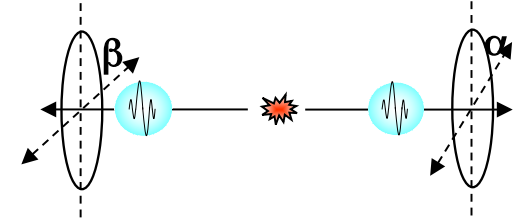
* $\Psi_{n,n} = 0$ für Fermionen: Pauli-Prinzip

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.



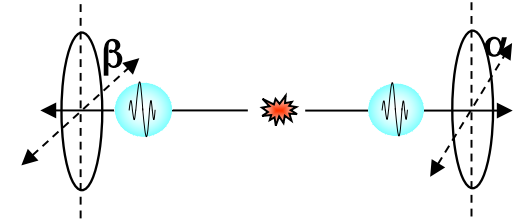
Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.



Beispiel: Teilchen (1) und (2) mit Zuständen a und b :

verschränkter Zustand:
$$\psi_{a,b}(0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 |b\rangle_2 + |b\rangle_1 |a\rangle_2 \right)$$

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.

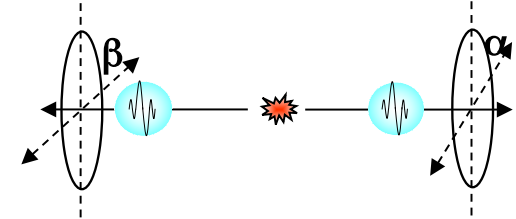


Beispiel: Teilchen (1) und (2) mit Zuständen a und b :

verschränkter Zustand:
$$\psi_{a,b}(0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 |b\rangle_2 + |b\rangle_1 |a\rangle_2 \right)$$

Beispiele: Photon-Spin $\rightarrow$ zirkulare oder transversale Photon-Polarisation,
Elektron-Spin, überlagerte gebundene Zustände

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.



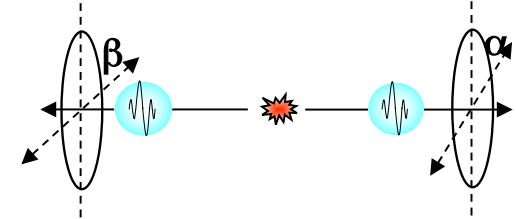
Beispiel: Teilchen (1) und (2) mit Zuständen a und b :

$$\text{verschränkter Zustand: } \psi_{a,b}(0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 |b\rangle_2 + |b\rangle_1 |a\rangle_2 \right)$$

Beispiele: Photon-Spin $\rightarrow$ zirkulare oder transversale Photon-Polarisation, Elektron-Spin, überlagerte gebundene Zustände

Eine Messung, d. h. Bestimmung des Zustands eines Teilchens, legt instantan auch den Zustand des verschränkten Partnerteilchens fest.

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.



Beispiel: Teilchen (1) und (2) mit Zuständen a und b :

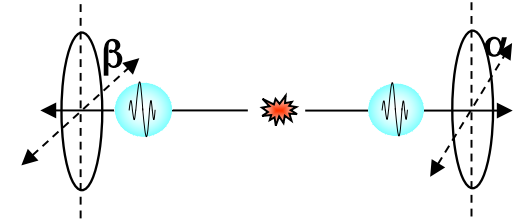
$$\text{verschränkter Zustand: } \psi_{a,b}(0,1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 |b\rangle_2 + |b\rangle_1 |a\rangle_2 \right)$$

Beispiele: Photon-Spin $\rightarrow$ zirkulare oder transversale Photon-Polarisation, Elektron-Spin, überlagerte gebundene Zustände

Eine Messung, d. h. Bestimmung des Zustands eines Teilchens, legt instantan auch den Zustand des verschränkten Partnerteilchens fest.

Verschränkung führt zu größeren Korrelationen zwischen Messungen an beiden Teilchen als es in alternativen Theorien (mit verborgenen Parametern) möglich wäre
 $\rightarrow$ **Bell'sche Ungleichung**.

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.



Beispiel: Teilchen (1) und (2) mit Zuständen a und b :

$$\text{verschränkter Zustand: } \psi_{a,b}(0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 |b\rangle_2 + |b\rangle_1 |a\rangle_2 \right)$$

Beispiele: Photon-Spin $\rightarrow$ zirkulare oder transversale Photon-Polarisation, Elektron-Spin, überlagerte gebundene Zustände

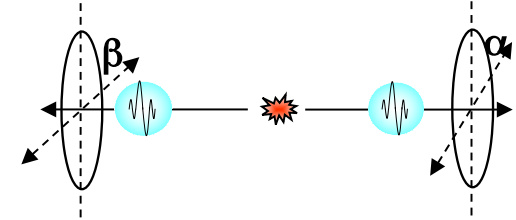
Eine Messung, d. h. Bestimmung des Zustands eines Teilchens, legt instantan auch den Zustand des verschränkten Partnerteilchens fest.

Verschränkung führt zu größeren Korrelationen zwischen Messungen an beiden Teilchen als es in alternativen Theorien (mit verborgenen Parametern) möglich wäre
 $\rightarrow$ **Bell'sche Ungleichung**.

Bell'sche Ungleichung für zwei polarisations-verschränkte Photonen, die mit zwei Polarisatoren unter dem Differenzwinkel φ gemessen werden:

$$-1 \leq 3 \cdot W(\varphi) - W(3\varphi) - 1 \leq 0$$

Teilchen, die sich einmal in Wechselwirkung befunden haben und danach ungestört (ohne Messung) bleiben, werden durch eine gemeinsame Wellenfunktion beschrieben - ihre Zustände sind **verschränkt**.



Beispiel: Teilchen (1) und (2) mit Zuständen a und b :

$$\text{verschränkter Zustand: } \psi_{a,b}(0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|a\rangle_1 |b\rangle_2 + |b\rangle_1 |a\rangle_2 \right)$$

Beispiele: Photon-Spin $\rightarrow$ zirkulare oder transversale Photon-Polarisation, Elektron-Spin, überlagerte gebundene Zustände

Eine Messung, d. h. Bestimmung des Zustands eines Teilchens, legt instantan auch den Zustand des verschränkten Partnerteilchens fest.

Verschränkung führt zu größeren Korrelationen zwischen Messungen an beiden Teilchen als es in alternativen Theorien (mit verborgenen Parametern) möglich wäre
 $\rightarrow$ **Bell'sche Ungleichung**.

Bell'sche Ungleichung für zwei polarisations-verschränkte Photonen, die mit zwei Polarisatoren unter dem Differenzwinkel φ gemessen werden:

$$-1 \leq 3 \cdot W(\varphi) - W(3\varphi) - 1 \leq 0$$

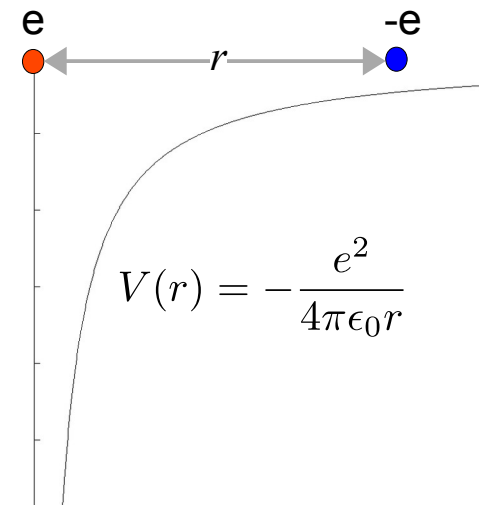
Quantenmechanik verletzt die Bell'sche Ungleichung; viele Bestätigungen seit 1982, immer noch aktuelles Forschungsthema.

Inhaltsübersicht VL Moderne Physik

- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) Die Schrödingergleichung
- 6) Anwendungen der Schrödingergleichung
- 7) **Das Wasserstoff-Atom**
- 8) Atome mit mehreren Elektronen
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) Grundlagen der Festkörperphysik
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

Wasserstoff (chem. Symb. **H**):

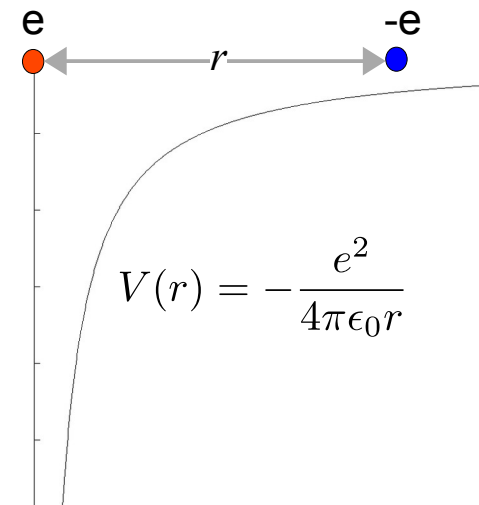
- das einfachste Atom
 - Kern bestehend aus einem **Proton** $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$
 - ein **Elektron** $m_e = 511 \text{ keV}/c^2$ $m_p / m_e = 1836 !$
- einzige Kraft: **Coulomb-Anziehung** → Elektron im Coulomb-Potential des Protons



Wasserstoff (chem. Symb. **H**):

- das einfachste Atom
 - Kern bestehend aus einem **Proton** $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$
 - ein **Elektron** $m_e = 511 \text{ keV}/c^2$ $m_p / m_e = 1836 !$
- einzige Kraft: **Coulomb-Anziehung** → Elektron im Coulomb-Potential des Protons

- bereits ein sehr kompliziertes Quantensystem
 - Berechnung mit Schrödinger-Gleichung als sehr gute Näherung
 - plus diverse Korrekturen



Bohr'sches Modell =

Rutherford-Modell (schwerer, kleiner Kern und leichtes Elektron außen) + Postulate, um experimentelle Ergebnisse zu reproduzieren:

Die Bohr'schen Postulate:

- 1) Es gibt **diskrete, stationäre Bahnen**, auf denen Elektronen strahlungslos umlaufen.
- 2) (**Frequenzbedingung**) Beim Übergang zwischen zwei stationären Zuständen (Bahnen) wird die Energiedifferenz in Form von Photonen aufgenommen / abgegeben: $E = h\nu = E_n - E_m$
- 3) (**Quantenbedingung**) der Bahndrehimpuls

nimmt nur Vielfache von $\hbar$ an:

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = n\hbar = \frac{nh}{2\pi}, \quad n = 1, 2, 3...$$

Postulat 3 „erklärt“ durch Materiewellen von de Broglie: „Elektron-Welle auf klassischer Kreisbahn !?“

Historisch zunächst behandelt als Anwendung des Bohr'schen Atommodells:

- Bohrs Postulate + klassische Rechnung
- liefert korrekte Werte der diskreten Energieniveaus

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{mit Grundzustandsenergie } E_1 = -13.6 \text{ eV}$$

- experimentell überprüfbar durch Lage der Spektrallinien des Wasserstoffs:

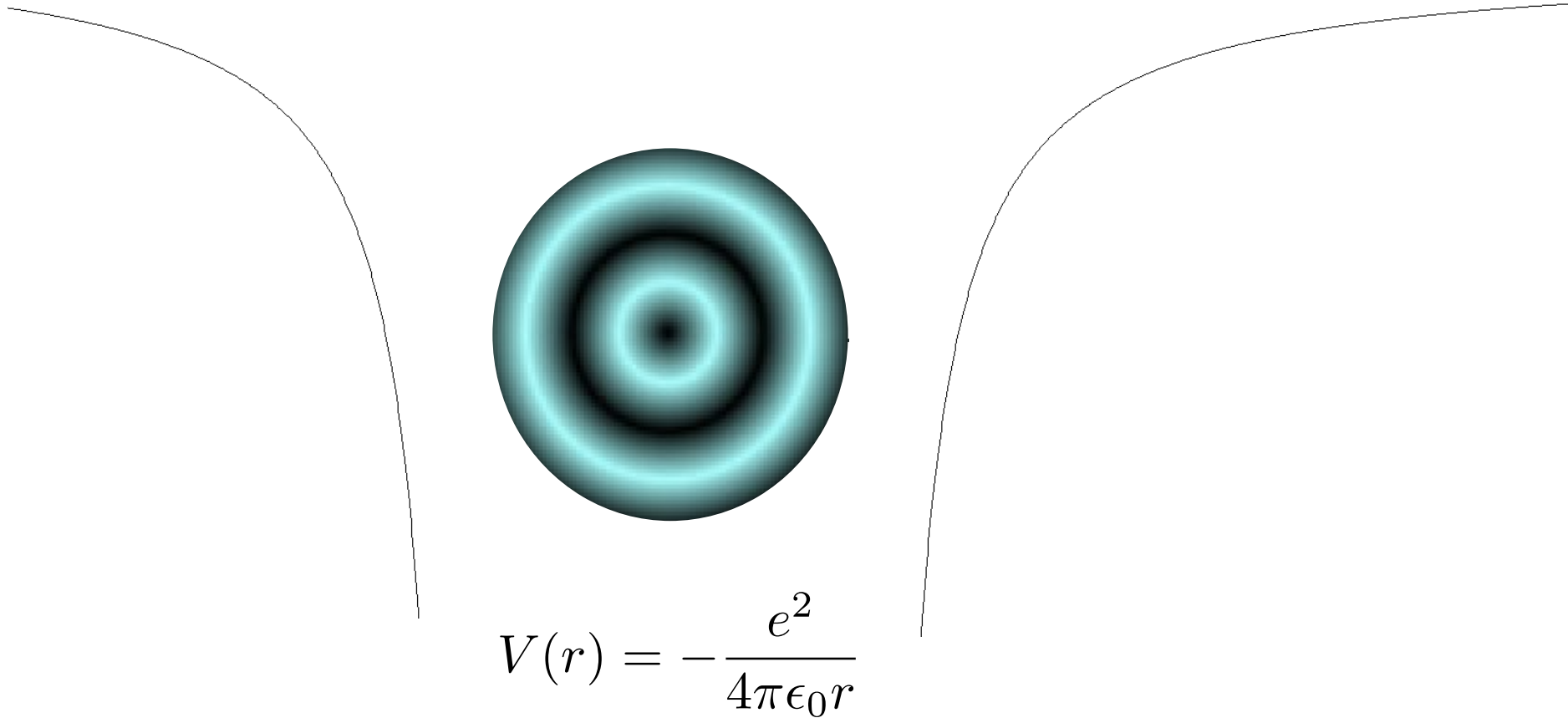
$$E_\gamma = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_1 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Der Radius der innersten Bohr'schen Bahn ist $\alpha_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$

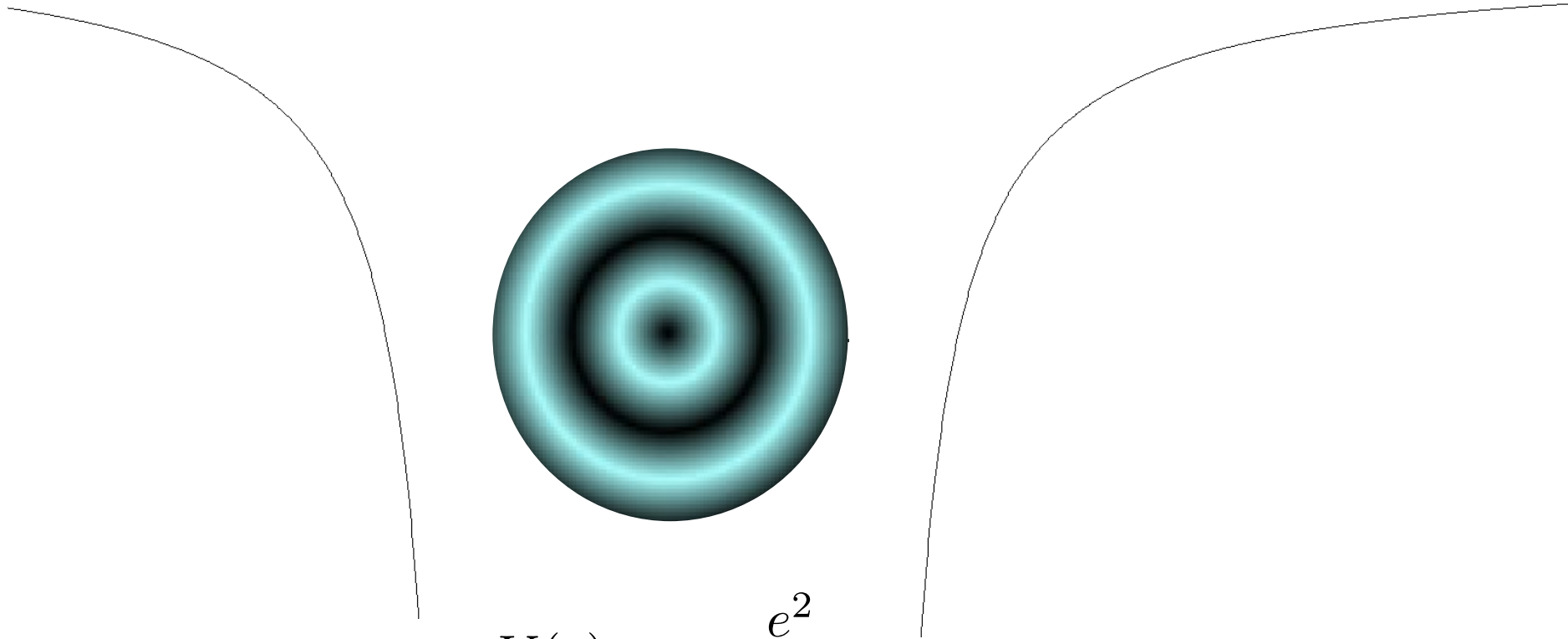
Bohr'scher Radius,
nur von fundamentalen
Naturkonstanten abhängig

Der Bahnbegriff im Bohr'schen Modell ist aber in der Quantenmechanik nicht haltbar. Zur stabilen Lokalisierung eines Elektrons in der Nähe des Protons ist z.B. kein Drehimpuls notwendig (→ später)

Kugelwelle eingeschränkt durch Coulomb-Potential



Kugelwelle eingeschränkt durch Coulomb-Potential



$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\vec{x}|) \right\} \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Elektron im Coulomb-Potential des Protons:

→ Zweiteilchenproblem (analog Kepler-Problem)

■ aus der klassischen Mechanik bekannt:

Behandlung im Schwerpunktsystem,

Einführung einer „reduzierten Masse“ μ : $m_e \rightarrow \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e$

Elektron im Coulomb-Potential des Protons:

→ Zweiteilchenproblem (analog Kepler-Problem)

- aus der klassischen Mechanik bekannt:

Behandlung im Schwerpunktsystem,

Einführung einer „reduzierten Masse“ μ : $m_e \rightarrow \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e$

- Hamilton-Operator: $\hat{\mathbf{H}} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$

- Stationäre Schrödingergleichung: $\hat{\mathbf{H}}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$

Elektron im Coulomb-Potential des Protons:

→ Zweiteilchenproblem (analog Kepler-Problem)

- aus der klassischen Mechanik bekannt:

Behandlung im Schwerpunktsystem,

Einführung einer „reduzierten Masse“ μ : $m_e \rightarrow \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e$

- Hamilton-Operator: $\hat{\mathbf{H}} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$

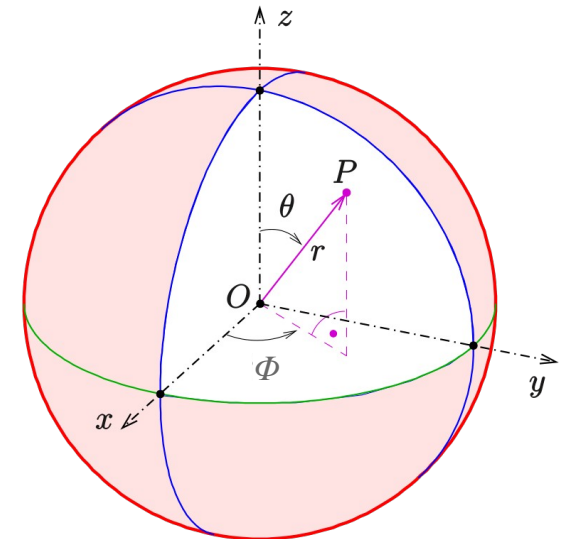
- Stationäre Schrödingergleichung: $\hat{\mathbf{H}}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$

- Kugelsymmetrie des Problems

→ Kugelkoordinaten

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \Theta \cos \Phi \\ r \sin \Theta \sin \Phi \\ r \cos \Theta \end{pmatrix}$$

mit $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$



Elektron im Coulomb-Potential des Protons:

→ Zweiteilchenproblem (analog Kepler-Problem)

- aus der klassischen Mechanik bekannt:

Behandlung im Schwerpunktsystem,

Einführung einer „reduzierten Masse“ μ : $m_e \rightarrow \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e$

- Hamilton-Operator: $\hat{\mathbf{H}} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)$

- Stationäre Schrödingergleichung: $\hat{\mathbf{H}}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$

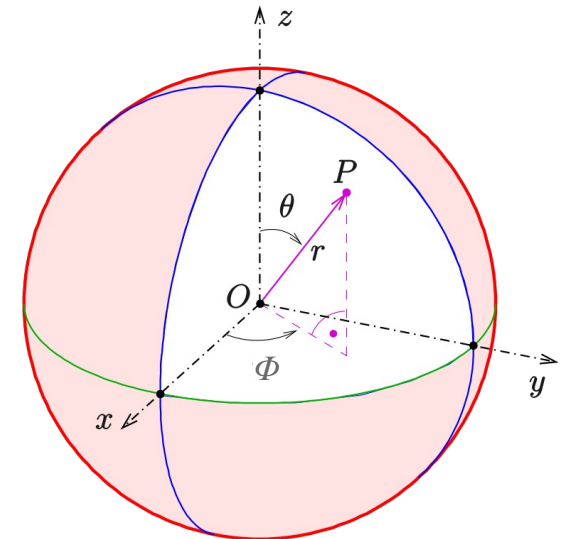
- Kugelsymmetrie des Problems

→ Kugelkoordinaten

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \Theta \cos \Phi \\ r \sin \Theta \sin \Phi \\ r \cos \Theta \end{pmatrix}$$

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

Volumenelement: $dV = r^2 \sin \Theta \, dr \, d\Theta \, d\Phi$



Benötigen partielle Ableitungen nach r , Θ , und Φ

→ Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

Benötigen partielle Ableitungen nach r , Θ , und Φ

→ Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\vec{\nabla}^2 = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\text{Radialteil}} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2}}_{\text{Winkelteil}}$$

Benötigen partielle Ableitungen nach r , Θ , und Φ

→ Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\vec{\nabla}^2 = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\text{Radialteil}} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2}}_{\text{Winkelteil}}$$

Separationsansatz: $\psi(r, \Theta, \Phi) = R(r) \cdot T(\Theta) \cdot P(\Phi)$

Benötigen partielle Ableitungen nach r , Θ , und Φ

→ Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\vec{\nabla}^2 = \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_{\text{Radialteil}} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2}}_{\text{Winkelteil}}$$

Separationsansatz: $\psi(r, \Theta, \Phi) = R(r) \cdot T(\Theta) \cdot P(\Phi)$

$$\begin{aligned} \rightarrow & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) \cdot T \cdot P + \frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial T}{\partial \Theta} \right) \cdot R \cdot P \\ & + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} \cdot R \cdot T + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) RTP = 0 \end{aligned}$$

- Winkelanteil ist universell für alle kugelsymmetrischen Potentiale $V(r)$
- analytisch exakt berechenbar,
aber mit sehr viel Schreibaufwand verbunden (s. z. B. Demtröder, Physik 3)

daher hier nur eine **Lösungsskizze:**

- Winkelanteil ist universell für alle kugelsymmetrischen Potentiale $V(r)$
- analytisch exakt berechenbar,
aber mit sehr viel Schreibaufwand verbunden (s. z. B. Demtröder, Physik 3)

daher hier nur eine **Lösungsskizze**:

- zunächst Φ -abhängigen Teil abseparieren:

$$\rightarrow -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} = C_1 \quad C_1: \text{Konstante bzgl. } \Phi$$

- Winkelanteil ist universell für alle kugelsymmetrischen Potentiale $V(r)$
- analytisch exakt berechenbar,
aber mit sehr viel Schreibaufwand verbunden (s. z. B. Demtröder, Physik 3)

daher hier nur eine **Lösungsskizze**:

- zunächst Φ -abhängigen Teil abseparieren:

$$\rightarrow -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} = C_1 \quad C_1: \text{Konstante bzgl. } \Phi$$

Ausnutzen der Periodizität von Φ :

$$P(\Phi) = A \exp(im\Phi) \text{ mit } m = \sqrt{C_1} \in \mathbb{Z}$$

$$\text{Normierung auf Intervall } [0, 2\pi] \rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

- Winkelanteil ist universell für alle kugelsymmetrischen Potentiale $V(r)$
- analytisch exakt berechenbar,
aber mit sehr viel Schreibaufwand verbunden (s. z. B. Demtröder, Physik 3)

daher hier nur eine **Lösungsskizze**:

- zunächst Φ -abhängigen Teil abseparieren:

$$\rightarrow -\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} = C_1 \quad C_1: \text{Konstante bzgl. } \Phi$$

Ausnutzen der Periodizität von Φ :

$$P(\Phi) = A \exp(im\Phi) \text{ mit } m = \sqrt{C_1} \in \mathbb{Z}$$

$$\text{Normierung auf Intervall } [0, 2\pi] \rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

- Einsetzen von C_1 für $P(\Phi)$ in S-Gl.

$$\rightarrow -\frac{1}{\sin \Theta} \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial T}{\partial \Theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \Theta} = C_2$$

Dgl. für $T(\Theta)$,
 C_2 : Konstante bzgl. Θ

mit der Ersetzung $t = \cos \Theta$ und damit $\frac{\partial t}{\partial \Theta} = -\sin(\Theta)$

mit der Ersetzung $t = \cos \Theta$ und damit $\frac{\partial t}{\partial \Theta} = -\sin(\Theta)$

$$\rightarrow -\frac{\partial}{\partial t} \left((1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right) T + \frac{m^2}{1 - t^2} = C_2 T$$

Legendre'sche Differentialgleichung,
lösbar durch Potenzreihenansatz

mit der Ersetzung $t = \cos \Theta$ und damit $\frac{\partial t}{\partial \Theta} = -\sin(\Theta)$

$$\rightarrow -\frac{\partial}{\partial t} \left((1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right) T + \frac{m^2}{1 - t^2} = C_2 T$$

Legendre'sche Differentialgleichung,
lösbar durch Potenzreihenansatz

→ **Legendre-Polynome:**

$$T_{l,m} = P_l^m(\cos \Theta) \text{ mit } C_2 = l(l+1) \text{ und } -l \leq m \leq l$$

mit der Ersetzung $t = \cos \Theta$ und damit $\frac{\partial t}{\partial \Theta} = -\sin(\Theta)$

$$\rightarrow -\frac{\partial}{\partial t} \left((1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right) T + \frac{m^2}{1 - t^2} = C_2 T$$

Legendre'sche Differentialgleichung,
lösbar durch Potenzreihenansatz

→ **Legendre-Polynome:**

$$T_{l,m} = P_l^m(\cos \Theta) \text{ mit } C_2 = l(l+1) \text{ und } -l \leq m \leq l$$

damit: **Lösung für den gesamten Winkelanteil:**

$$Y_l^m(\Theta, \Phi) = P_l^m(\cos \Theta) \cdot P_m(\Phi)$$

„Kugelflächenfunktionen“ (engl. „Spherical Harmonics“)

mit der Ersetzung $t = \cos \Theta$ und damit $\frac{\partial t}{\partial \Theta} = -\sin(\Theta)$

$$\rightarrow -\frac{\partial}{\partial t} \left((1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right) T + \frac{m^2}{1 - t^2} = C_2 T$$

Legendre'sche Differentialgleichung,
lösbar durch Potenzreihenansatz

→ **Legendre-Polynome:**

$$T_{l,m} = P_l^m(\cos \Theta) \text{ mit } C_2 = l(l+1) \text{ und } -l \leq m \leq l$$

damit: **Lösung für den gesamten Winkelanteil:**

$$Y_l^m(\Theta, \Phi) = P_l^m(\cos \Theta) \cdot P_m(\Phi)$$

„Kugelflächenfunktionen“ (engl. „Spherical Harmonics“)

Normierung, so dass $\int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \int_0^{2\pi} d\Phi Y_{l'}^{n'} Y_l^n = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$ also 1 für $m=m'$ und $l=l'$, sonst 0

mit der Ersetzung $t = \cos \Theta$ und damit $\frac{\partial t}{\partial \Theta} = -\sin(\Theta)$

$$\rightarrow -\frac{\partial}{\partial t} \left((1 - t^2) \frac{\partial}{\partial t} \right) T + \frac{m^2}{1 - t^2} = C_2 T$$

Legendre'sche Differentialgleichung,
lösbar durch Potenzreihenansatz

→ **Legendre-Polynome:**

$$T_{l,m} = P_l^m(\cos \Theta) \text{ mit } C_2 = l(l+1) \text{ und } -l \leq m \leq l$$

damit: **Lösung für den gesamten Winkelanteil:**

$$Y_l^m(\Theta, \Phi) = P_l^m(\cos \Theta) \cdot P_m(\Phi)$$

„Kugelflächenfunktionen“ (engl. „Spherical Harmonics“)

Normierung, so dass $\int_0^\pi d\Theta \sin \Theta \int_0^{2\pi} d\Phi Y_{l'}^{n'} Y_l^n = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$ also 1 für $m=m'$ und $l=l'$, sonst 0

aktueller Zwischenstand: $\psi(r, \Theta, \Phi) = R(r) \cdot Y_l^m(\Theta, \Phi)$

Die ersten Kugelflächenfunktionen

Y_{lm}	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$m = -3$				$\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{-3i\varphi}$
$m = -2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{-2i\varphi}$
$m = -1$		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{-i\varphi}$
$m = 0$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$
$m = 1$		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{i\varphi}$
$m = 2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{2i\varphi}$
$m = 3$				$-\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{3i\varphi}$

Die ersten Kugelflächenfunktionen

Y_{lm}	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$m = -3$				$\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{-3i\varphi}$
$m = -2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{-2i\varphi}$
$m = -1$		$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{-i\varphi}$
$m = 0$	$\sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$
$m = 1$		$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi}$	$-\sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{i\varphi}$
$m = 2$			$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{2i\varphi}$
$m = 3$				$-\sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{3i\varphi}$

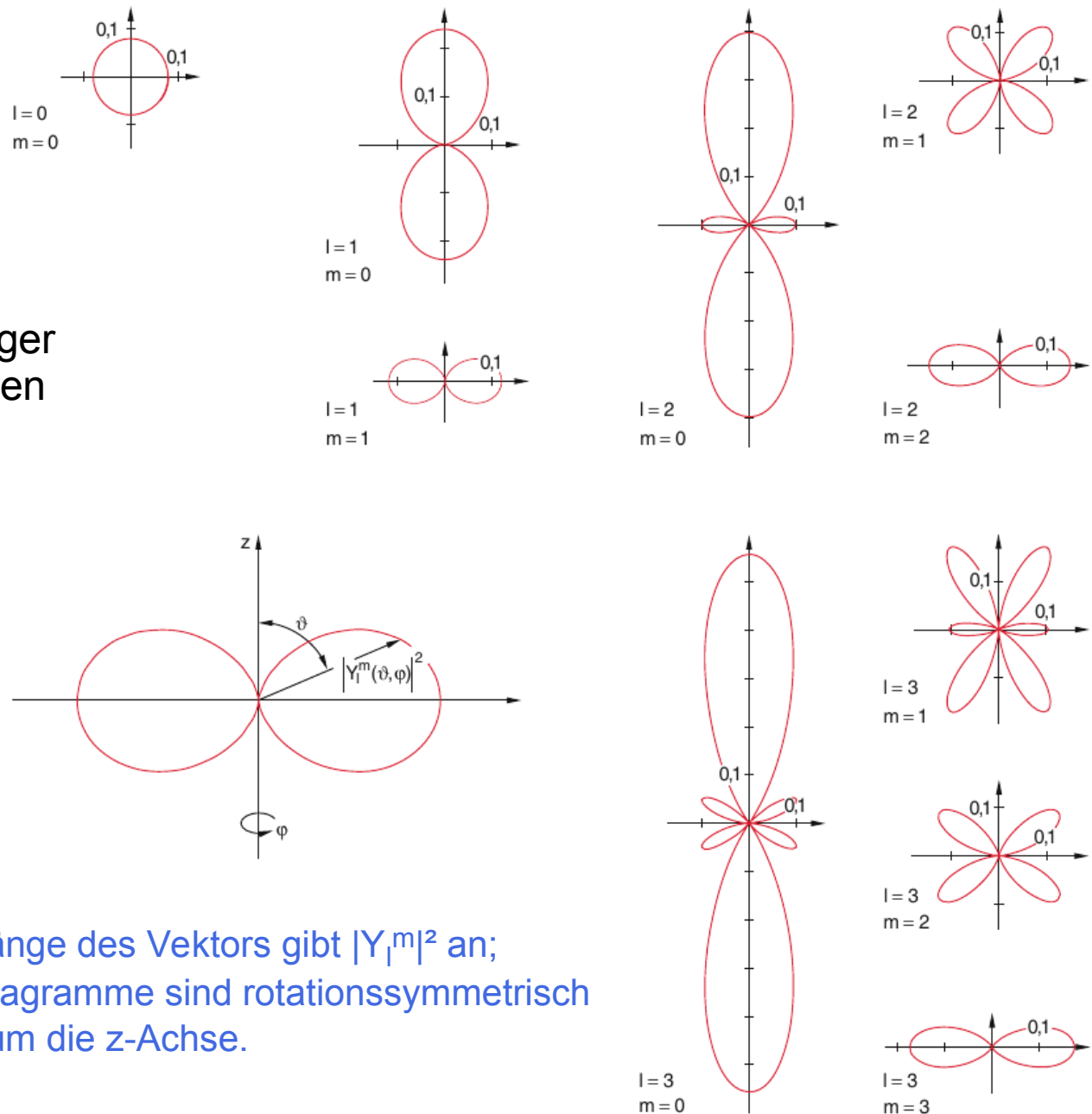
Allgemein für $l \geq 0$ und $-l \leq m \leq l$:

$$Y_l^m(\Theta, \Phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \Theta) \exp(im\Phi)$$

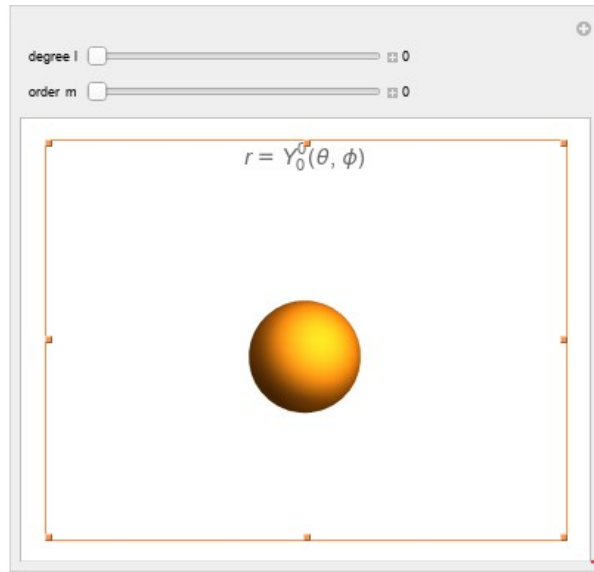
für negative m :

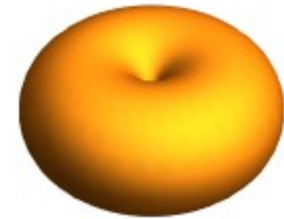
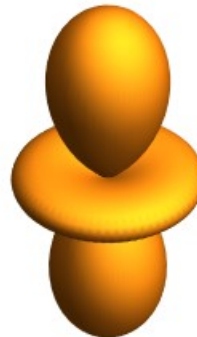
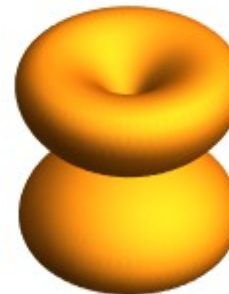
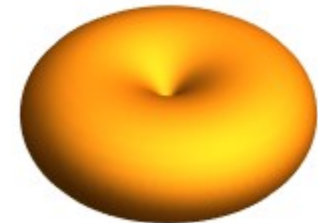
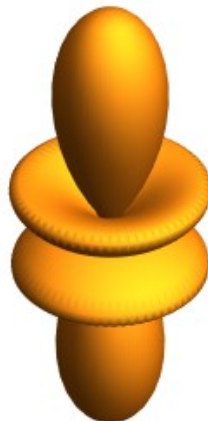
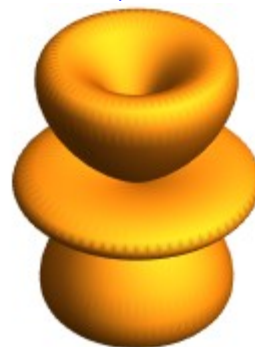
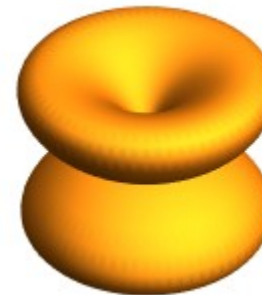
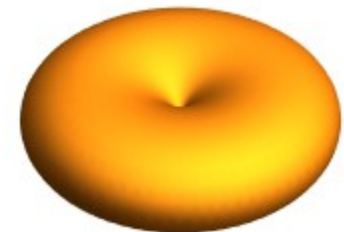
$$P_l^{-m}(\cos \Theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \Theta)$$

Polardarstellung des Betragsquadrats einiger Kugelflächenfunktionen



- Länge des Vektors gibt $|Y_l^m|^2$ an;
- Diagramme sind rotationssymmetrisch um die z -Achse.


 $l=1, m=0$

 $l=1, m=1$

 $l=2, m=0$

 $l=2, m=1$

 $l=2, m=2$

 $l=3, m=0$

 $l=3, m=1$

 $l=3, m=2$

 $l=3, m=3$


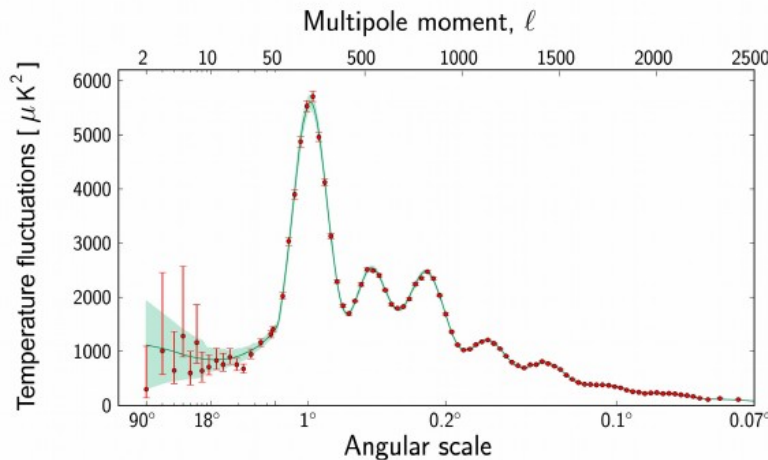
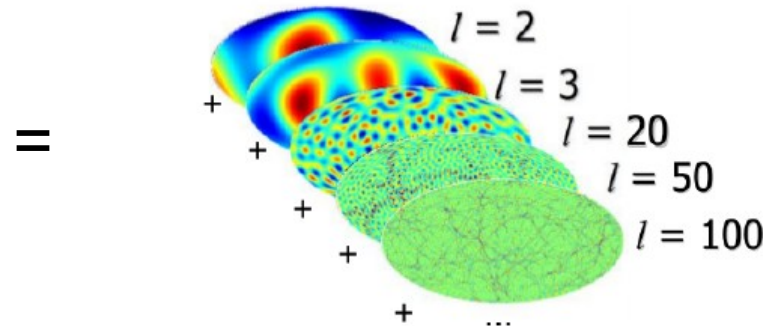
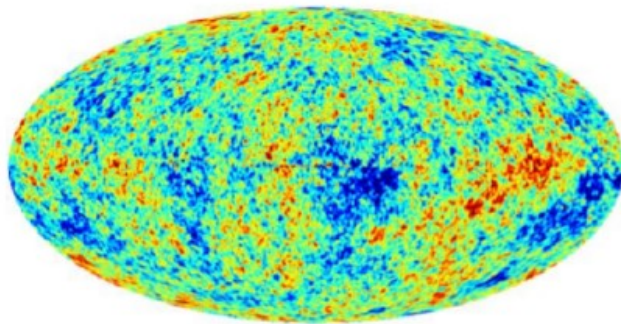
Einschub: Kugelflächenfunktionen

Vielfältige Anwendungen in der Physik:

- hier: **Form der Orbitale im H-Atom**
- allgemein: Entwicklung kugelsymmetrischer Verteilungen nach Multipolen
→ Monopol, Dipol, Quadrupol,...

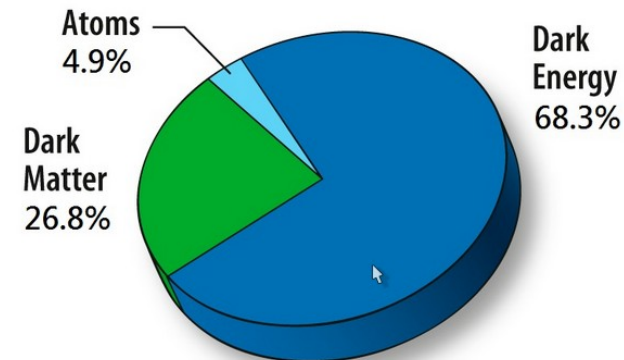
Aktuelles Beispiel:

Multipolentwicklung der kosmischen Hintergrundstrahlung



→ Zusammensetzung
der Materie- bzw.
Energiedichte
des Universums

(Planck - Weltraumteleskop)



Pause

und Zeit für Fragen ?

Was ist die physikalische Bedeutung der Quantenzahlen l und m ?

Angelehnt an die klassische Physik vermuten wir, dass bei Zentralpotentialen auch in der Quantenphysik der **Drehimpuls** eine Rolle spielt.

Was ist die physikalische Bedeutung der Quantenzahlen l und m ?

Angelehnt an die klassische Physik vermuten wir, dass bei Zentralpotentialen auch in der Quantenphysik der **Drehimpuls** eine Rolle spielt.

Wie sieht also der Drehimpulsoperator aus ?

Was ist die physikalische Bedeutung der Quantenzahlen l und m ?

Angelehnt an die klassische Physik vermuten wir, dass bei Zentralpotentialen auch in der Quantenphysik der **Drehimpuls** eine Rolle spielt.

Wie sieht also der Drehimpulsoperator aus ?

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$$

Was ist die physikalische Bedeutung der Quantenzahlen l und m ?

Angelehnt an die klassische Physik vermuten wir, dass bei Zentralpotentialen auch in der Quantenphysik der **Drehimpuls** eine Rolle spielt.

Wie sieht also der Drehimpulsoperator aus ?

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{L}}_x \\ \hat{\mathbf{L}}_y \\ \hat{\mathbf{L}}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

Was ist die physikalische Bedeutung der Quantenzahlen l und m ?

Angelehnt an die klassische Physik vermuten wir, dass bei Zentralpotentialen auch in der Quantenphysik der **Drehimpuls** eine Rolle spielt.

Wie sieht also der Drehimpulsoperator aus ?

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{\mathbf{L}}_x \\ \hat{\mathbf{L}}_y \\ \hat{\mathbf{L}}_z \end{pmatrix} = \frac{h}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

umschreiben in Kugelkoordinaten:

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{h}{i} \begin{pmatrix} -\sin \Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \frac{\cos \Theta \cos \Phi}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \\ -\cos \Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \frac{\cos \Theta \sin \Phi}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \\ \frac{\partial}{\partial \Phi} \end{pmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{y}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{z}}^2 = \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)}_{= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators !}}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{y}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{z}}^2 = \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)}_{= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators !}}$$

→ Winkelteil der Wellenfunktion, $Y_l^m(\Theta, \Phi)$ = **Eigenfunktion** von $\hat{\mathbf{L}}^2$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{y}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{z}}^2 = \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)}_{= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators !}}$$

→ **Winkelteil der Wellenfunktion**, $Y_l^m(\Theta, \Phi)$ = **Eigenfunktion** von $\hat{\mathbf{L}}^2$

Mit dieser Einsicht können wir leicht Erwartungswerte von $\hat{\mathbf{L}}^2$ ausrechnen:

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \int d\mathbf{x}^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}^2 \psi = \ell(\ell + 1) \cdot \hbar^2, \ell \in \mathbb{N}_0$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{y}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{z}}^2 = \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)}_{= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators !}}$$

→ **Winkelteil der Wellenfunktion**, $Y_l^m(\Theta, \Phi)$ = **Eigenfunktion** von $\hat{\mathbf{L}}^2$

Mit dieser Einsicht können wir leicht Erwartungswerte von $\hat{\mathbf{L}}^2$ ausrechnen:

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \int d\mathbf{x}^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}^2 \psi = \ell(\ell + 1) \cdot \hbar^2, \ell \in \mathbb{N}_0$$

→ **Der Drehimpuls ist quantisiert**, ℓ ist die Bahndrehimpuls-Quantenzahl

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{y}}^2 + \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{z}}^2 = \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)}_{= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators !}}$$

→ **Winkelteil der Wellenfunktion**, $Y_l^m(\Theta, \Phi) = \text{Eigenfunktion}$ von $\hat{\mathbf{L}}^2$

Mit dieser Einsicht können wir leicht Erwartungswerte von $\hat{\mathbf{L}}^2$ ausrechnen:

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \int d\mathbf{x}^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}^2 \psi = \ell(\ell + 1) \cdot \hbar^2, \ell \in \mathbb{N}_0$$

→ **Der Drehimpuls ist quantisiert**, ℓ ist die Bahndrehimpuls-Quantenzahl

Der Betrag des Drehimpulses ist eine Observable: $\langle |\vec{L}| \rangle = \underbrace{\sqrt{\ell(\ell + 1)}}_{\neq \ell!} \cdot \hbar$

z-Komponente des Drehimpulses:

$$\langle \vec{L}_z \rangle = \int dx^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}_z \psi = \int dx^3 \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi} \psi = \text{im} \frac{\hbar}{i} = m \cdot \hbar, \quad -\ell \leq m \leq \ell$$

↓
wegen $Y_l^m \propto P_l^m(\cos \Theta) \cdot \exp(im\Phi)$

z-Komponente des Drehimpulses:

$$\langle \vec{L}_z \rangle = \int dx^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}_z \psi = \int dx^3 \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi} \psi = \text{im} \frac{\hbar}{i} = m \cdot \hbar, \quad -\ell \leq m \leq \ell$$

↓
wegen $Y_l^m \propto P_l^m(\cos \Theta) \cdot \exp(im\Phi)$

Die z-Komponente des Drehimpulses ist eine Observable: $\langle L_z \rangle = m \cdot \hbar$

z-Komponente des Drehimpulses:

$$\langle \vec{L}_z \rangle = \int dx^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}_z \psi = \int dx^3 \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi} \psi = \text{im} \frac{\hbar}{i} = m \cdot \hbar, \quad -\ell \leq m \leq \ell$$

↓
wegen $Y_l^m \propto P_l^m(\cos \Theta) \cdot \exp(im\Phi)$

Die z-Komponente des Drehimpulses ist eine Observable: $\langle L_z \rangle = m \cdot \hbar$

aber $\hat{\mathbf{L}}_x \psi \neq c \cdot \psi, \hat{\mathbf{L}}_y \psi \neq c \cdot \psi \quad \rightarrow$

**L_x und L_y sind keine Eigenwerte und damit keine Observablen,
die zusammen mit L und L_z gleichzeitig scharf bestimmbar sind !**

z-Komponente des Drehimpulses:

$$\langle \vec{L}_z \rangle = \int d\mathbf{x}^3 \psi^* \hat{\mathbf{L}}_z \psi = \int d\mathbf{x}^3 \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi} \psi = \text{im} \frac{\hbar}{i} = m \cdot \hbar, \quad -\ell \leq m \leq \ell$$

↓
wegen $Y_l^m \propto P_l^m(\cos \Theta) \cdot \exp(im\Phi)$

Die z-Komponente des Drehimpulses ist eine Observable: $\langle L_z \rangle = m \cdot \hbar$

aber $\hat{L}_x \psi \neq c \cdot \psi, \hat{L}_y \psi \neq c \cdot \psi \quad \rightarrow$

**L_x und L_y sind keine Eigenwerte und damit keine Observablen,
die zusammen mit L und L_z gleichzeitig scharf bestimmbar sind !**

Anmerkung: $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$ ist eine scharf bestimmte Observable:

$$\langle L_x^2 + L_y^2 \rangle = (\ell(\ell + 1) - m^2) \hbar$$

z-Komponente des Drehimpulses:

$$\langle \vec{L}_z \rangle = \int dx^3 \psi^* \hat{L}_z \psi = \int dx^3 \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi} \psi = \text{im} \frac{\hbar}{i} = m \cdot \hbar, \quad -\ell \leq m \leq \ell$$

↓
wegen $Y_l^m \propto P_l^m(\cos \Theta) \cdot \exp(im\Phi)$

Die z-Komponente des Drehimpulses ist eine Observable: $\langle L_z \rangle = m \cdot \hbar$

aber $\hat{L}_x \psi \neq c \cdot \psi, \hat{L}_y \psi \neq c \cdot \psi \quad \rightarrow$

**L_x und L_y sind keine Eigenwerte und damit keine Observablen,
die zusammen mit L und L_z gleichzeitig scharf bestimmbar sind !**

Anmerkung: $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$ ist eine scharf bestimmte Observable:

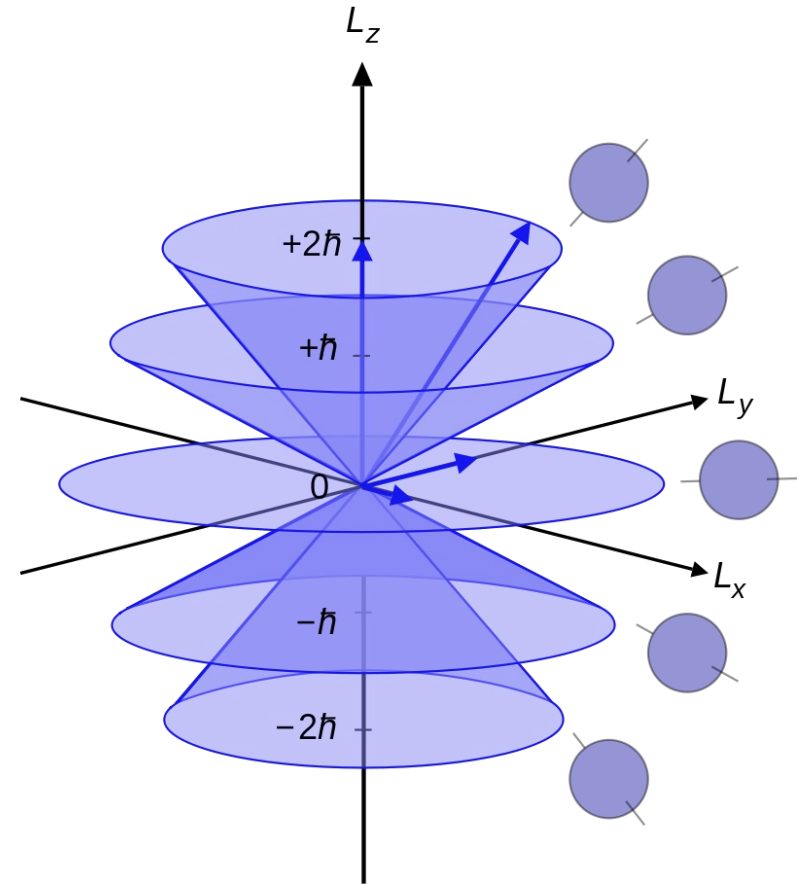
$$\langle L_x^2 + L_y^2 \rangle = (\ell(\ell + 1) - m^2) \hbar$$

Wenn der Hamilton-Operator zeitunabhängig ist, sind Betragsquadrat und z-Komponente des Drehimpulses gleichzeitig Eigenwerte und zeitlich konstant.

(anschauliches) Physikalisches Bild:

- z-Achse definiert eine Vorzugsrichtung (z.B. Richtung eines Magnetfelds)
„**Quantisierungsachse**“
- anschaulich kann man sich vorstellen, dass der Drehimpulsvektor um diese Richtung präzediert
→ L_x und L_y unbestimmt

Mögliche Richtungen des L -Vektors

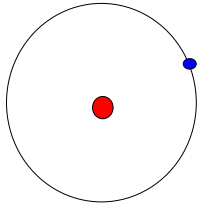


Länge: $\sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$

Projektion auf

z-Achse: $m\hbar, -\ell \leq m \leq \ell$

Der Drehimpuls ist mit einem magnetischen Moment verknüpft



klassisch: Elektron auf Kreisbahn mit Umlaufzeit T

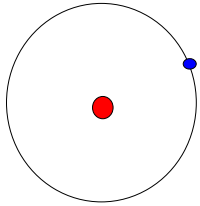
$$\text{Strom } I = -e/T, \quad T = 2\pi r / v$$

$$\text{Fläche: } A = \pi r^2$$

$$\text{Magnetisches Moment } \mu = I \cdot A = -e/(2m) \cdot L$$

analog in QM:

Der Drehimpuls ist mit einem magnetischen Moment verknüpft



klassisch: Elektron auf Kreisbahn mit Umlaufzeit T

$$\text{Strom } I = -e/T, \quad T = 2\pi r / v$$

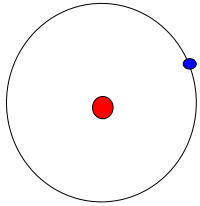
$$\text{Fläche: } A = \pi r^2$$

$$\text{Magnetisches Moment } \mu = I \cdot A = -e/(2m) \cdot L$$

analog in QM: **Magnetisches Moment durch Bahndrehimpuls**

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}, \quad \mu_z = -\frac{e}{2m_e} \cdot L_z$$

Der Drehimpuls ist mit einem magnetischen Moment verknüpft



klassisch: Elektron auf Kreisbahn mit Umlaufzeit T

$$\text{Strom } I = -e/T, \quad T = 2 \pi r / v$$

$$\text{Fläche: } A = \pi r^2$$

$$\text{Magnetisches Moment } \mu = I \cdot A = -e/(2m) \cdot L$$

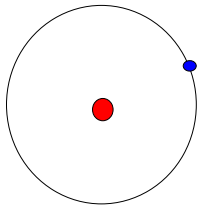
analog in QM: **Magnetisches Moment durch Bahndrehimpuls**

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}, \quad \mu_z = -\frac{e}{2m_e} \cdot L_z$$

Dieses Magnetische Moment ist messbar in externem B-Feld:

es führt zur **Aufspaltung von Energieniveaus** mit unterschiedlichem m

Der Drehimpuls ist mit einem magnetischen Moment verknüpft



klassisch: Elektron auf Kreisbahn mit Umlaufzeit T

$$\text{Strom } I = -e/T, \quad T = 2 \pi r / v$$

$$\text{Fläche: } A = \pi r^2$$

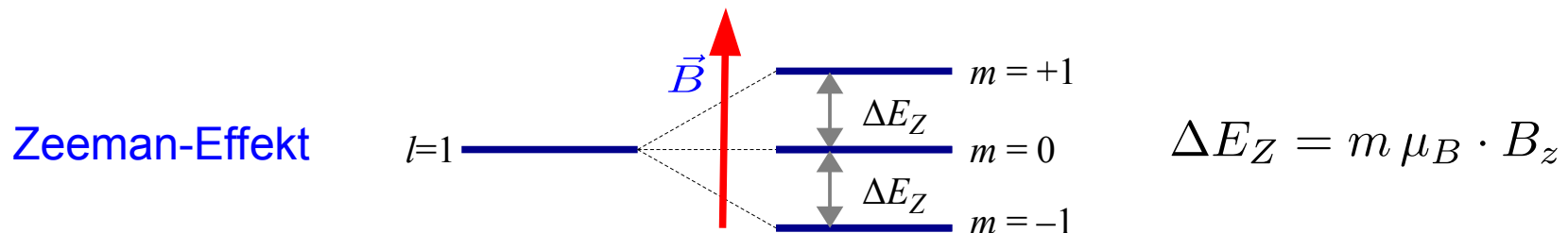
$$\text{Magnetisches Moment } \mu = I \cdot A = -e/(2m) \cdot L$$

analog in QM: **Magnetisches Moment durch Bahndrehimpuls**

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}, \quad \mu_z = -\frac{e}{2m_e} \cdot L_z$$

Dieses Magnetische Moment ist messbar in externem B-Feld:

es führt zur **Aufspaltung von Energieniveaus** mit unterschiedlichem m



$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \quad \text{nennt man das „Bohr'sche Magneton“}$$

Beobachtung einer Spektrallinie:



magnetic field
off



magnetic field
on

Beobachtung einer Spektrallinie:

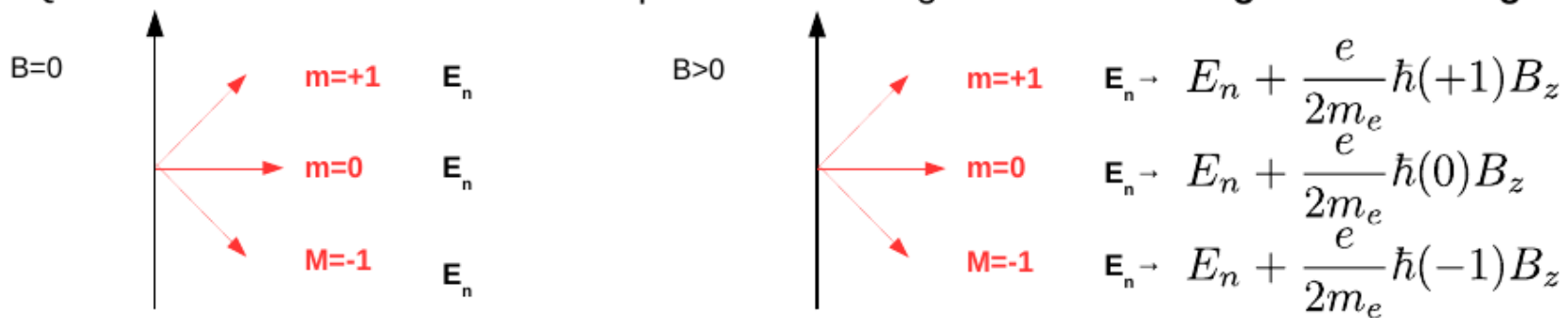


magnetic field
off



magnetic field
on

Erklärung: Im externen Magnetfeld erhalten Zustände mit unterschiedlichen Quantenzahlen m unterschiedliche potenzielle Energien → **Aufhebung der Entartung:**



Erinnerung Startpunkt:
$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = C_2 = \ell(\ell + 1)$$

Erinnerung Startpunkt: $\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = C_2 = \ell(\ell + 1)$

Lösungsskizze:

Ansatz $R(r) = u(r) \exp(-\kappa r)$ mit $\kappa^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

→ neue Dgl. für $u(r)$: Laguerre'sche Dgl → Laguerre-Polynome

Erinnerung Startpunkt:
$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = C_2 = \ell(\ell + 1)$$

Lösungsskizze:

Ansatz $R(r) = u(r) \exp(-\kappa r)$ mit $\kappa^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

→ neue Dgl. für $u(r)$: Laguerre'sche Dgl → Laguerre-Polynome

Ansatz:
$$u(r) = \sum_{j=0}^N a_j r^j$$

Erinnerung Startpunkt: $\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = C_2 = \ell(\ell + 1)$

Lösungsskizze:

Ansatz $R(r) = u(r) \exp(-\kappa r)$ mit $\kappa^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

→ neue Dgl. für $u(r)$: Laguerre'sche Dgl → Laguerre-Polynome

Ansatz: $u(r) = \sum_{j=0}^N a_j r^j$

→ Rekursionsformel für a_j mit Abbruchbedingung

Erinnerung Startpunkt: $\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = C_2 = \ell(\ell + 1)$

Lösungsskizze:

Ansatz $R(r) = u(r) \exp(-\kappa r)$ mit $\kappa^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

→ neue Dgl. für $u(r)$: Laguerre'sche Dgl → Laguerre-Polynome

Ansatz: $u(r) = \sum_{j=0}^N a_j r^j$

→ Rekursionsformel für a_j mit Abbruchbedingung

→ **Energiequantisierung**

$$E_N = - \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 \underbrace{(N + \ell + 1)^2}_{n^2}} = - \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

**n : Hauptquantenzahl
bestimmt Energie**

Erinnerung Startpunkt: $\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = C_2 = \ell(\ell + 1)$

Lösungsskizze:

Ansatz $R(r) = u(r) \exp(-\kappa r)$ mit $\kappa^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$

→ neue Dgl. für $u(r)$: Laguerre'sche Dgl → Laguerre-Polynome

Ansatz: $u(r) = \sum_{j=0}^N a_j r^j$

→ Rekursionsformel für a_j mit Abbruchbedingung

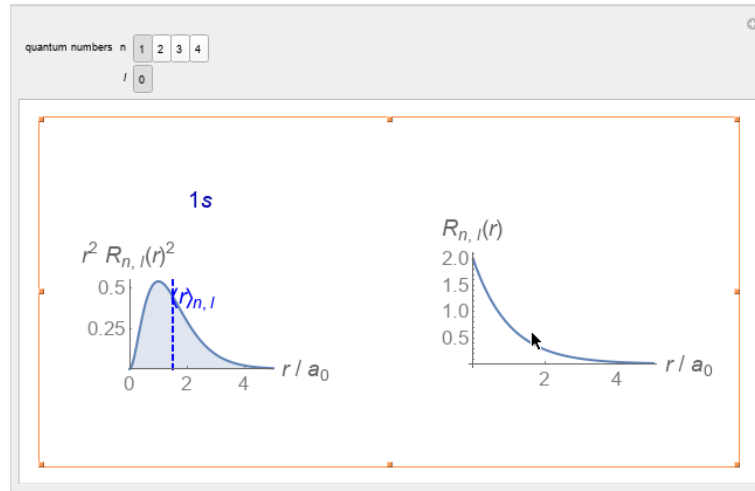
→ **Energiequantisierung**

$$E_N = - \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 \underbrace{(N + \ell + 1)^2}_{n^2}} = - \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

**n : Hauptquantenzahl
bestimmt Energie**

→ **Vollständige Wellenfunktion:** $\psi_{m,\ell,m}(r, \Theta, \Phi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_l^m(\Theta, \Phi)$

Hydrogen Atom Radial Functions



- Radialteil hat $n-l$ Maxima
- Faktor r^2 wegen $dV \propto r^2 dr$

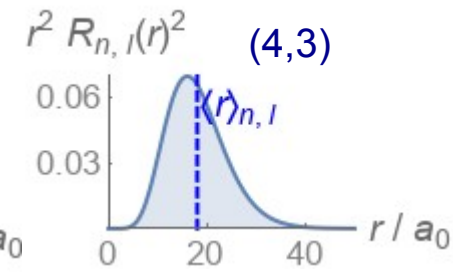
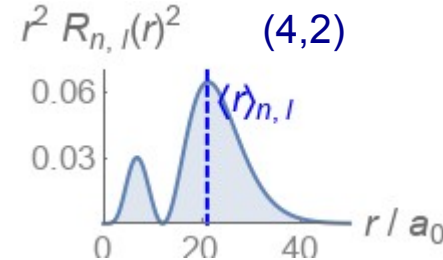
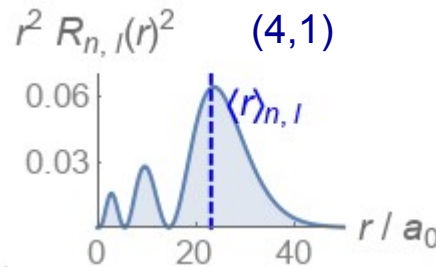
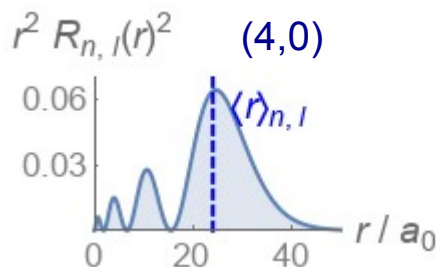
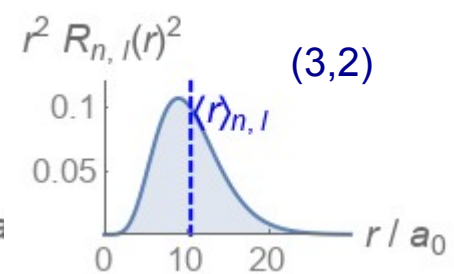
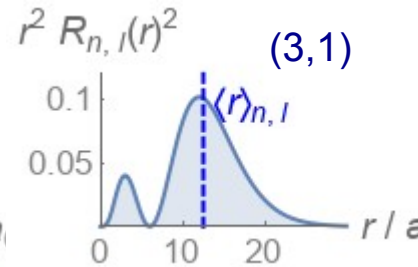
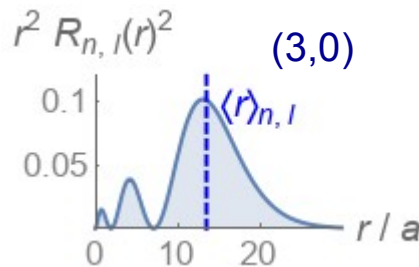
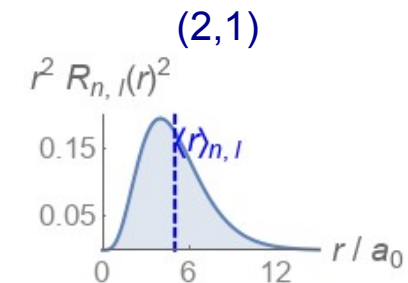
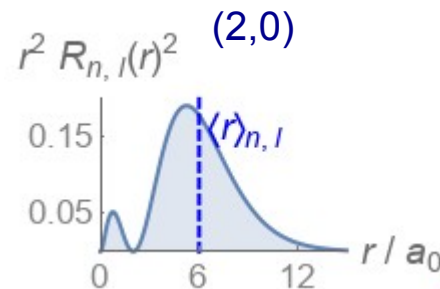
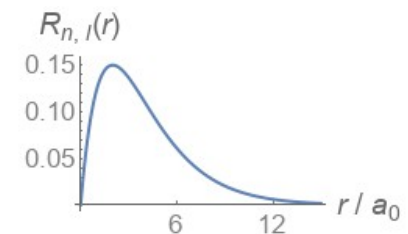
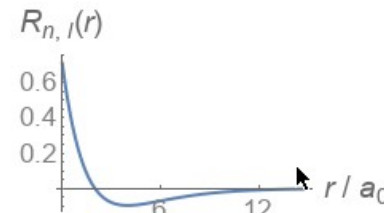


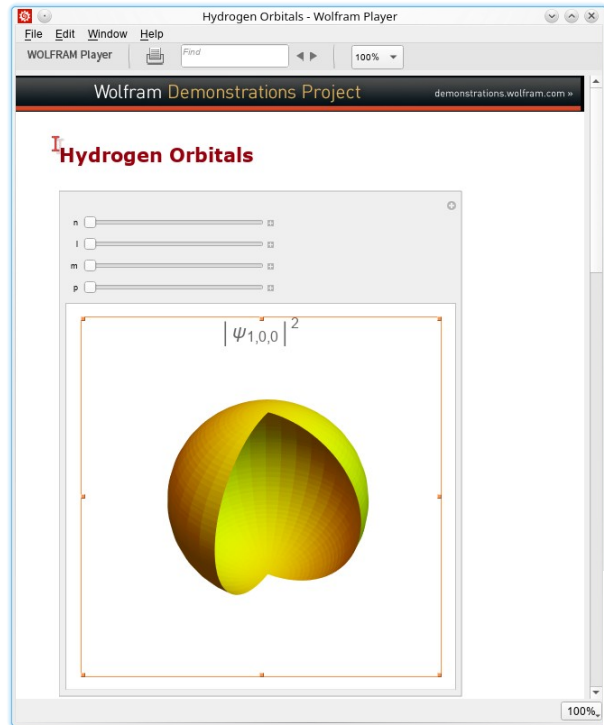
Tabelle 5.1 Die normierten radialen Eigenfunktionen $R(r)$ (**Laguerre-Polynome**) für ein Elektron im Coulomb-Potential ($N = (Z/na_0)^{3/2}$, $x = Zr/na_0$, $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/\mu e^2$)

n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2Ne^{-x}$
2	0	$2Ne^{-x}(1-x)$
2	1	$\frac{2}{\sqrt{3}}Ne^{-x}x$
3	0	$2Ne^{-x}\left(1-2x+\frac{2x^2}{3}\right)$
3	1	$\frac{2}{3}\sqrt{2}Ne^{-x}x(2-x)$
3	2	$\frac{4}{3\sqrt{10}}Ne^{-x}x^2$
4	0	$2Ne^{-x}\left(1-3x+2x^2-\frac{x^3}{3}\right)$
4	1	$2\sqrt{\frac{5}{3}}Ne^{-x}x\left(1-x+\frac{x^2}{5}\right)$
4	2	$2\sqrt{\frac{1}{3}}Ne^{-x}x^2\left(1-\frac{x}{3}\right)$
4	3	$\frac{2}{3\sqrt{35}}Ne^{-x}x^3$

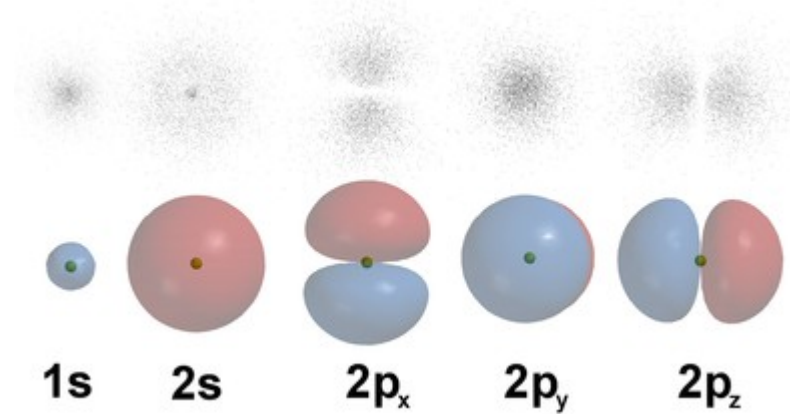
$$\psi_{n,\ell,m}(r, \vartheta, \varphi)$$

n	l	m	Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0}\cos\vartheta$
2	1	± 1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0}\sin\vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(27-18\frac{Zr}{a_0}+2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right)e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/3a_0}\cos\vartheta$
3	1	± 1	$\frac{1}{81}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/3a_0}\sin\vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2}e^{-Zr/3a_0}(3\cos^2\vartheta-1)$
3	2	± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2}e^{-Zr/3a_0}\sin\vartheta\cos\vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2}e^{-Zr/3a_0}\sin^2\vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

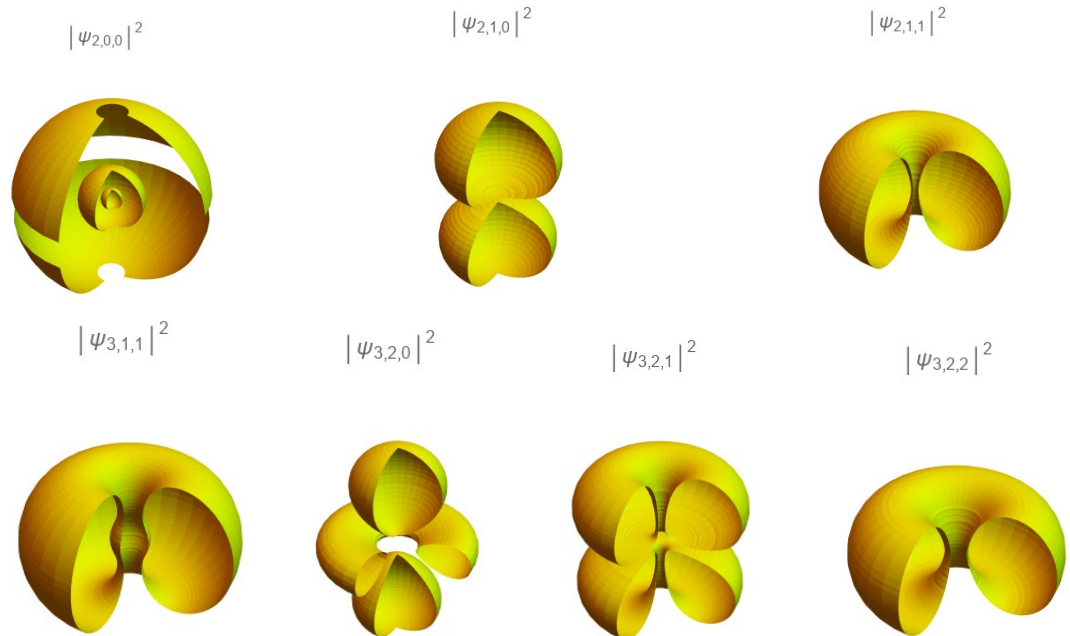
Interaktiv mit Wolfram cdf-Player

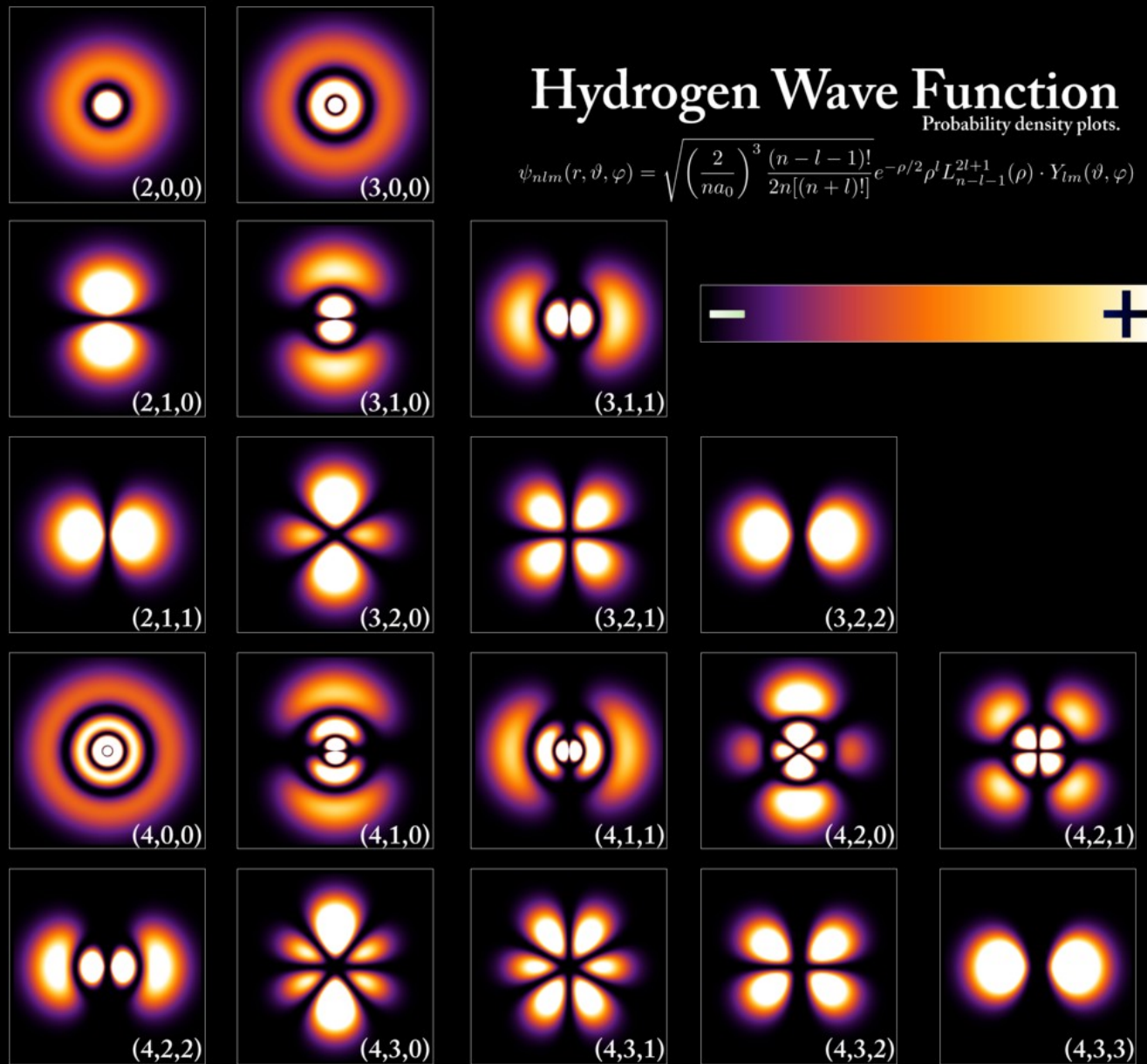


viele verschiedene Darstellungsformen
im Internet, hier **Wikipedia**



<https://de.wikipedia.org/wiki/Atomorbital>





Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons als Helligkeitswert

VL 12: Das Wasserstoffatom (2)

Kurze Zusammenfassung:

- Wellenfunktion des Wasserstoffatoms: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) T(\theta) P(\varphi)$
 - Winkelteil: gelöst durch Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \varphi)$
 - Radialteil: gelöst durch Laguerre-Polynome
- Quantenmechanischer Drehimpuls:
 - Wellenfunktionen, die stationäre Schrödingergleichung lösen, sind auch Eigenfunktionen von L^2 und $L_z \rightarrow$ zeitlich konstant
 - Mit z-Achse als Quantisierungsachse: L^2 und L_z messbar
- Quantenzahlen:
 - Hauptquantenzahl n (natürliche Zahlen)
 - Drehimpulsquantenzahl l (natürliche Zahlen und 0)
 - Magnetische Quantenzahl m mit $-l \leq m \leq l$
 - (Radialquantenzahl $N = n - l - 1$ (natürliche Zahlen und 0))

Ende VL10

und Zeit für Fragen ?