• Die Schrödinger-Gleichung in 3D

* Bisher haben wir nur Probleme in 1D studiert. Nun werden wir Probleme in 3D studieren

* Der Hamilton-Operator für die Bewegung eines Teilchens in 3D ist:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

wobei $\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \longrightarrow \vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ (in 1D: $p_x = -i\hbar\partial_x$)

$\vec{r} = (x, y, z)$

* Wir werden hier nur 2 Sorte von Potentialen studieren

① * $V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$

② * Zentralfelder: $V(\vec{r}) = V(r)$ wobei $r = |\vec{r}|$.

---

① $V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$

. Die t-unabhängige Schrödinger equation ist der Form:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(x,y,z)\right]u_E(x,y,z) = E\,u_E(x,y,z)$$

Da $\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

dann:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)\right]u_E(x,y,z) = E\,u_E(x,y,z)$$

Wir nehmen nun den folgenden Ansatz an:

$$u_E(x,y,z) = u_{E_1}(x)\,v_{E_2}(y)\,w_{E_3}(z)$$

Hier machen wir eine sogen. Separation der Variablen. Dies ist eine allgemeine Technique für die Lösung differentialer Gleichungen. Wir werden später ~~....~~ diese Idee auch für $V(r)$ anwenden.

* Dann:

$$\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right] u_{\varepsilon_1}(x)\right\} v_{\varepsilon_2}(y)\, w_{\varepsilon_3}(z)$$

$$+\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right] v_{\varepsilon_2}(y)\right\} u_{\varepsilon_1}(x)\, w_{\varepsilon_3}(z)$$

$$+\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right] w_{\varepsilon_3}(z)\right\} u_{\varepsilon_1}(x)\, v_{\varepsilon_2}(y) = E\, u_{\varepsilon_1}(x)\, v_{\varepsilon_2}(y)\, w_{\varepsilon_3}(z)$$

Die einzige Lösung ist also:

$$\left.\begin{aligned}
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right] u_{\varepsilon_1}(x) &= \varepsilon_1\, u_{\varepsilon_1}(x) \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right] v_{\varepsilon_2}(y) &= \varepsilon_2\, v_{\varepsilon_2}(y) \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right] w_{\varepsilon_3}(z) &= \varepsilon_3\, w_{\varepsilon_3}(z)
\end{aligned}\right\} \quad E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$$

Also wir lösen in jeder Richtung (das sind 3 verschiedene 1D Probleme).

z.B. Sei

$$\left.\begin{aligned}
V_1(x) &= \infty \quad & |x| \geq a \\
&= 0 & |x| < a \\
V_2(y) &= \infty & |y| \geq a \\
&= 0 & |y| < a \\
V_3(z) &= \infty & |z| \geq a \\
&= 0 & |z| < a
\end{aligned}\right\} \quad \text{3D Potential-Kasten}$$

Die Eigenfunktionen sind also der Form

$$u^{(\pm)}_{n_1}(x)\, u^{(\pm)}_{n_2}(y)\, u^{(\pm)}_{n_3}(z)$$

und die Eigenenergien $E \longrightarrow E^{(\pm)}_{n_1} + E^{(\pm)}_{n_2} + E^{(\pm)}_{n_3}$

• Die Separation der Variablen funktioniert hier ganz optimal, weil der Potential separabel ist. Das passiert relativ häufig, aber vielleicht wichtiger ist $V(\vec{r}) = V(r)$. Wir werden mit diesem Beispiel von nun an (und in der nächsten Vorlesungen) arbeiten.

② <u>Zentralfelder</u> $\Rightarrow V(\vec{r}) = V(r)$

* Für zentrale Felder können wir auch ganz einfach eine Separation der Variablen durchführen:

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\, Y(\theta,\phi)$$

(Bemerkung: Eigentlich wir können auch θ und ϕ spalten, aber das machen wir später).

* Um die Rechnungen einfach zu machen, müssen wir hier Kugelkoordinaten anwenden: $\vec{r} \equiv (r,\theta,\phi)$. Der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten ist der Form:

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right] + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\psi\right] + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

Also die Schrödinger equation:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi$$

wird:

$$E R(r) Y(\theta,\phi) = \left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR}{dr}\right] + V(r)R(r)\right]$$
$$+\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y\right] + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}\right\} R(r)$$

Also:

$$\frac{1}{R(r)}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left(E - V(r)\right)r^2 R(r)\right] =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2mY}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right]$$

* Aber die linke Seite der Gleichung ist nur r-Abhängig und die rechte Seite nur (θ, ϕ)-Abhängig. Das ist nur möglich wenn beide Seiten Konstanten sind.

· Die rechte Seite definiert ein Operator $\hat{L}^2$

$$\hat{L}^2 Y = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y \right] + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y \right]$$

Wir werden sofort $\hat{L}^2$ mit dem Drehimpuls verbinden.

· Also

Rechte Seite $\Rightarrow$ $\frac{\hat{L}^2}{2m} Y = (\text{KONSTANT}) Y = \frac{l(l+1)}{2m} \hbar^2 Y$ wir nennen so diese Konstant. Später werden wir sehen warum.

Linke Seite $\Rightarrow$ $\frac{1}{R} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + (E - V(r)) r^2 R \right] = \frac{l(l+1)}{2m}$

Also: $$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + V(r) R + \frac{l(l+1)}{2mr^2} R = ER}$$

Das ist die radiale Gleichung. Wir werden mehr später über die radiale Gleichung lernen.

* Aber nun werden wir zuerst die Idee von Drehimpuls-Operator einführen.

• **DREHIMPULS**

• Wir kennen aus der klassischen Physik, daß

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

ist der Drehimpuls.

* Natürlich der Drehimpuls ist ein Vektor $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$

wobei
$$L_x = y\, p_z - z\, p_y$$
$$L_y = z\, p_x - x\, p_z$$
$$L_z = x\, p_y - y\, p_x$$

* Quantenmechanisch ist der Impulsoperator (in X-Darstellung)

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

also
$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

* Wie sind die Kommutatoren von $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$ wobei $i,j = x,y,z$?

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = y[\hat{p}_z, z]\hat{p}_x + x[z, \hat{p}_z]\hat{p}_y$$
$$= -i\hbar(y\hat{p}_x - x\hat{p}_y) = i\hbar \hat{L}_z$$

und ähnlicherweise:

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

> <u>Bemerkung</u>: Da $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ nicht kommutieren, das bedeutet, daß die erfüllen eine Unschärferelation.
> $$(\Delta \hat{L}_x)(\Delta \hat{L}_y) \geq \frac{\hbar}{2} \langle \hat{L}_z \rangle$$

* Wir führen nun den Operator $\hat{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$. Wir werden sofort sehen, daß $\hat{L}^2$ derselbe Operator ist, wie vorher definiert.

* Es ist ganz interessant, daß $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$ (auch $[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = 0$)

BEWEIS:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_z, \hat{L}_y^2]$$

$$= [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_x + \hat{L}_x[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_y[\hat{L}_z, \hat{L}_y]$$

$$= +i\hbar\cancel{\hat{L}_y\hat{L}_x} + i\hbar\cancel{\hat{L}_x\hat{L}_y} - i\hbar\cancel{\hat{L}_x\hat{L}_y} - i\hbar\cancel{\hat{L}_y\hat{L}_x} = 0$$

* Wir werden nun sehen, daß $\hat{L}^2$ die vorherige Definition entspricht:

Nehmen wir Kugelkoordinaten

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \end{aligned}$$

* Also:

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

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

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

Und damit (Übung):

$$\hat{L}^2\psi = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)\psi = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\psi\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]$$

also genau wie wir vorher $\hat{L}^2$ definiert haben.

· Also der Hamilton Operator ist der Form:

$$\hat{H}\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right)\right] + V(r)\psi(\vec{r}) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\psi(\vec{r})$$

* Also die gesamte (θ,ϕ) - Abhängigkeit von $\hat{H}$ ist in $\hat{L}^2$.

$$\hat{H} = \begin{pmatrix}\text{RADIAL}\\ \text{TEIL}\end{pmatrix} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$$

Damit ist also ganz klar, daß $[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$

Ebenfalls $[\hat{H}, \hat{L}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$, da $[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0$ wobei $j = x, y, z$.

* Somit kommutieren die 3 Komponenten des Drehimpulsoperators mit dem Hamilton-Operator, d.h. der Drehimpuls ist eine Konstante der Bewegung (wenn $V(\vec{r}) = V(r)$)

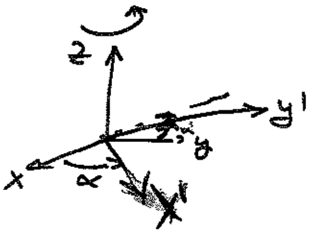
* Das kommt weil, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$ invariant gegen Rotation ist.

Sehen wir das.

- Erstmal sollte es klar sein, daß $\hat{H}$ invariant gegen Rotation ist.

$V(r)$ hängt nur von r ab, und nicht von $\vec{r}$.

$\vec{p}^2$ ist ebenfalls eine skalare Größe, unabhängig von der Richtung von $\vec{p}$.



(BEMERKUNG: z.B. machen wir eine Rotation um die z-Achse

$$\left.\begin{aligned} x' &= x\cos\alpha - y\sin\alpha \\ y' &= x\sin\alpha + y\cos\alpha \end{aligned}\right\} r' = \sqrt{x'^2+y'^2+z'^2} = \sqrt{x^2+y^2+z^2} = r$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^2 = \left[\cos\alpha\frac{\partial}{\partial x} - \sin\alpha\frac{\partial}{\partial y}\right]^2 + \left[\sin\alpha\frac{\partial}{\partial x} + \cos\alpha\frac{\partial}{\partial y}\right]^2$$

$$= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \longrightarrow \nabla_{\vec{r}'}^2 = \nabla_{\vec{r}}^2 \longrightarrow (\hat{p}')^2 = (\hat{p})^2$$)

---

* Wir werden nun sehen, daß diese Invarianz gegen Rotation zu die oben geschriebene Kommutationsregel führt.

* Machen wir nun eine infinitesimale Drehung um die z-Achse ($\alpha \ll 1$):

$$x' = x\cos\alpha - y\sin\alpha \simeq x - \alpha y$$
$$y' = x\sin\alpha + y\cos\alpha \simeq y + \alpha x$$

$\hat{H} u_E(x,y,z) = E u_E(x,y,z)$

* Sei $u_E(x)$ eine Eigenfunktion von $\hat{H}$ mit Eigenwert E.

Die Drehung läßt $\hat{H}$ Invariant, also wir haben auch daß

$$\hat{H} u_E(x', y', z) = E u_E(x', y', z)$$

Taylor-Entwicklung bis ~~zum~~ 1. Ordnung

$$u_E(x', y', z) = u_E[x - \alpha y, y + \alpha x, z] =$$

$$\cong u_E(x,y,z) + (-\alpha y)\frac{\partial u_E}{\partial x} + (\alpha x)\frac{\partial}{\partial y} u_E$$

$$= u_E(x,y,z) + \alpha\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right] u_E = u_E(x,y,z) + \frac{\alpha}{\hbar}\hat{L}_z u_E(x,y,z)$$

Also

$$\hat{H} u_E(x',y',z') \cong \hat{H} u_E(x,y,z) + \frac{\alpha}{\hbar}\hat{H}\hat{L}_z u_E(x,y,z)$$
$$\parallel$$
$$E u_E(x',y',z') \cong E u_E(x,y,z) + \frac{\alpha}{\hbar}\underbrace{E\hat{L}_z u_E(x,y,z)}_{\hat{L}_z \hat{H} u_E(x,y,z)}$$

Also $\quad \hat{H}\hat{L}_z = \hat{L}_z\hat{H} \longrightarrow [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$

Hätten wir die Rotation um die x-Achse bzw. y-Achse vorgenommen, so hätten wir gefunden $\quad [\hat{H}, \hat{L}_x] = 0$

$$[\hat{H}, \hat{L}_y] = 0$$

* Also die Invarianz gegen Rotation führt direkt zu die Erhaltung des Drehimpulses.

$$\boxed{\text{INVARIANZ GEGEN ROTATION}} \longrightarrow \boxed{\left.\begin{array}{l}\text{ERHALTUNG von}\\ \hat{L}_x, \hat{L}_y \text{ und } \hat{L}_z\end{array}\right\} [\hat{H}, \hat{L}_j] = 0 \quad j = x,y,z}$$

* Also jetzt wissen wir, daß für Zentralfelder

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

Also wir haben daß alle $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ kommutieren mit einander.

Das ist gut, weil d.h. daß die Eigenfunktionen von $\hat{H}$ auch Eigenfunktionen von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ sind.

* Nun sind wir interessiert, die Eigenwerte und Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ zu finden.

* Als wir die Separation der Variablen $\psi(\vec{r}) = R(r)\, Y(\theta, \phi)$ gemacht haben, haben wir gesehen daß: $\hat{L}^2 Y = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y$

Also:

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} Y\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} Y\right] = \ell(\ell+1) Y$$

Nun können wir noch eine Separation der Variablen machen:

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\, \Phi(\phi)$$

Dann:

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta \frac{d}{d\theta}\Theta(\theta)\right]\Phi(\phi) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{d^2}{d\phi^2}\left[\Phi(\phi)\right]\Theta(\theta) = \ell(\ell+1)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Also:

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi(\phi) = -\frac{\sin^2\theta}{\Theta(\theta)}\left[\ell(\ell+1)\Theta(\theta) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right]\right]$$

wie vorher, jetzt haben wir an der linken Seite eine Funktion von ϕ und an der rechten Seite eine Funktion von θ.

Also das kann nur sein, wenn beide Seiten gleich eine Konstant sind.

* Dann haben wir, daß:

$$\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi(\phi) = -m^2\Phi(\phi)$$

(wir werden sofort sehen warum nehmen wir die Konstant so)

Also $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$

und damit $Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\, e^{im\phi}$

(Bemerkung: $Y(\theta,\phi) = Y(\theta,\phi+2\pi)$ also m must eine ganze Zahl sein)

von nun an folgen wir die Schreibweise $Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\, e^{im\phi}$

* Dann:

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta,\phi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar m\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Also $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ erfüllt gleichzeitig:

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar m\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar^2 \ell(\ell+1)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

* Wir werden nun die Form von $\Theta(\theta)$ finden; wir haben oben gesehen, daß:

$$\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta) = \ell(\ell+1)\Theta(\theta) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left[\sin\theta\,\frac{d\Theta}{d\theta}\right]$$

Sei $y = \cos\theta$, dann die Gleichung wird:

$$(1-y^2)\frac{d^2}{dy^2}\Theta(y) - 2y\frac{d}{dy}\Theta(y) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-y^2}\right]\Theta(y) = 0$$

* Diese Differentialgleichung ist die sogenannte allgemeine Legendre-Gleichung. Die Lösungen dieser Gleichungen sind die sogen. <u>zugeordneten Legendre-Polynome</u> $P_\ell^m(y)$:

$$P_\ell^m(y) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell$$

z.B. $P_0^0(y) = 1$

$P_1^0(y) = y$

$P_1^1(y) = -(1-y^2)^{1/2}$

$P_2^0 = \frac{1}{2}(3y^2-1)$

$\vdots$

* Die zugeordneten Legendre-Polynomen erfüllen die Orthonormalitätsbedingung: $\int_{-1}^{1} P_\ell^{(m)}(y) P_{\ell'}^{(m)}(y) dy = \frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'}$ (für $|m| \leq \ell$)

· Diese Lösungen sind regulär (also die "explodieren" nicht) im Bereich $y \in (-1,1)$ (ich erinnere euch, daß $y = \cos\theta$) nur wenn ℓ und m sind ganze Zahlen und $|m| \leq \ell$.
Also für jeden Wert von $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ gibt es $m = -\ell, \ldots, 0, \ldots, \ell$
also $2\ell+1$ mögliche Werte von m.

[<u>Bemerkung</u>: da $\hat{L}^2$ ist positive, dann mußen die Eigenwerte $\ell(\ell+1) \geq 0$. Dann können wir ohne Verlust an Allgemeinheit auch $\ell \geq 0$ verwenden. In Prinzip könnten wir $\ell \leq -1$ verwenden, aber dann würden wir $\tilde{\ell} = -\ell-1$ definieren, und das alte ℓ durch das neue $\tilde{\ell}$ (positive) ersetzen. Hierbei würde sich nichts ändern $\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+1) = \ell(\ell+1)$]

· Also außer eine Normierungskonstante $C_{\ell m}$:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = C_{\ell m}\, P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}$$

Finden wir nun $C_{\ell m}$ aus der Orthonormalitätsbedingungen:

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi\; Y^*_{\ell' m'}(\theta,\phi)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) =$$

$$= C^*_{\ell' m'}\, C_{\ell m} \int_{-1}^{1} dy\; P_{\ell'}^{m'}(y)\, P_\ell^m(y)\; \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi\; e^{i(m-m')\phi}}_{2\pi\,\delta_{m,m'}}$$

$$= C^*_{\ell' m}\, C_{\ell m}\; 2\pi \int_{-1}^{1} dy\; P_{\ell'}^{m}(y)\, P_\ell^m(y) \quad \delta_{mm'}$$

$$= |C_{\ell m}|^2\; \frac{4\pi\,(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!}\; \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$$

Also $$|C_{\ell m}|^2 = \frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi\,(\ell+m)!}$$

und zum Schluß:

$$\boxed{Y_{\ell m}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi\,(\ell+m)!}}\; P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}}$$

Diese Funktionen sind die sogen. <u>Kugelflächenfunktionen</u>.

(<u>Bemerkung</u>: Der Faktor $(-1)^m$ ist eigentlich nicht notwendig für die Orthonormalisation. In manchen Bücher ist eigentlich nicht da, aber es ist gewöhnlich in der quantenmechanischen Literatur).

* Wichtige Beispiele sind:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\phi} \sin\theta$$

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

$$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, e^{2i\phi} \sin^2\theta$$

$$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, e^{i\phi} \sin\theta \cos\theta$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(3\cos^2\theta - 1\right)$$

$\vdots$

* und immer $Y_{\ell m}^{*} = (-1)^m Y_{\ell,-m}$

* Also, die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ sind die Eigenfunktionen von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$, und $\ell = 0, 1, 2, \dots$, und $m = -\ell, \dots, 0, \dots, \ell$.

---

* Genau wie für den harmonischen Oszillator können wir auch hier Leiteroperatoren einführen (wie schon gesagt die Idee von Leiteroperatoren wird in vielen Bereichen der Physik benutzt).

· sei $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi}\right)$ ← AUFSTEIGE-OPERATOR

$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi}\right)$ ← ABSTEIGE-OPERATOR

Wir werden sofort sehen warum diese Operatoren so genannt werden.

· Es ist einfach zu sehen (Übung) daß

$$\boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z}$$

* Ebenfalls, $\hat{L}_\pm$ erfüllen die folgenden Kommutationsregeln (Übung)

$$[\hat{L}_+,\hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$$
$$[\hat{L}_+,\hat{L}_z] = -\hbar\hat{L}_+$$
$$[\hat{L}_-,\hat{L}_z] = \hbar L_-$$
$$[\hat{L}^2,\hat{L}_\pm] = 0$$

* Da $[\hat{L}^2,\hat{L}_\pm]=0 \longrightarrow \hat{L}^2\hat{L}_\pm Y_{\ell m} = \hat{L}_\pm \hat{L}^2 Y_{\ell m} = \hat{L}_\pm \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$
$= \hbar^2 \ell(\ell+1)\hat{L}_\pm Y_{\ell m}$

d.h. auch $\hat{L}_\pm Y_{\ell m}$ sind Eigenfunktionen von $\hat{L}^2$ mit Eigenwert ℓ.

Andererseits:

$$\hat{L}_z\hat{L}_+ Y_{\ell m} = (\hat{L}_+L_z + \hbar\hat{L}_+) Y_{\ell m} = m\hbar\hat{L}_+ Y_{\ell m} + \hbar\hat{L}_+ Y_{\ell m}$$
$$= (m+1)\hbar\,\hat{L}_+ Y_{\ell m}$$

d.h. $\hat{L}_+ Y_{\ell m}$ ist auch eine Funktion von $\hat{L}_z$, wobei aber der m-Wert um 1 erhöht wird.

Ebenso: $\hat{L}_z\hat{L}_- Y_{\ell m} = (m-1)\hbar\,\hat{L}_- Y_{\ell m}$

d.h. $\hat{L}_- Y_{\ell m}$ ist auch Eigenfunktion von $\hat{L}_z$, wobei aber m um 1 erniedrigt ist.

* Deswegen nennen wir $\hat{L}_\pm$ Aufsteige- bzw. Absteigeoperator.

* Also $\hat{L}_\pm Y_{\ell m} = C_\pm(\ell,m)\, Y_{\ell,m\pm 1}$ wobei $C_\pm(\ell,m)$ sind Normierungs-Konstanten.

Wir können die Konstanten $C_\pm(\ell,m)$ ganz einfach bestimmen:

$$|C_\pm(\ell,m)|^2 = |C_\pm(\ell,m)|^2 \langle Y_{\ell,m\pm1} | Y_{\ell,m\pm1}\rangle =$$

Diracsche Schreibweise $\Rightarrow \langle Y_{\ell m}|Y_{\ell' m'}\rangle = \iint Y^*_{\ell m} Y_{\ell' m'} \,d\cos\theta\, d\phi = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

$$= \langle \hat{L}_\pm Y_{\ell m} \,|\, \hat{L}_\pm Y_{\ell m} \rangle \overset{(\hat{L}_\pm)^\dagger = \hat{L}_\mp}{=}$$

$$= \langle Y_{\ell m} \,|\, \hat{L}_\mp \hat{L}_\pm \,|\, Y_{\ell m} \rangle =$$

$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$

also $\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z$

$$= \langle Y_{\ell m} \,|\, \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z \,|\, Y_{\ell m} \rangle$$

$$= \langle Y_{\ell m} \,|\, \hbar^2 \ell(\ell+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m \,|\, Y_{\ell m} \rangle$$

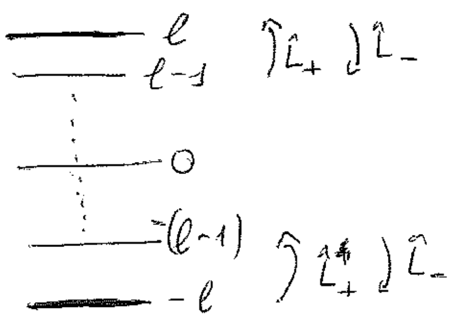
$$= \hbar^2 \left[\ell(\ell+1) - m(m \pm 1) \right]$$

Also $\boxed{\hat{L}_\pm Y_{\ell m} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\; Y_{\ell, m\pm 1}}$

* Es ist ganz einfach zu sehen, daß

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_- Y_{\ell,-\ell} &= 0 \\ \hat{L}_+ Y_{\ell,\ell} &= 0 \end{aligned}\right\}$$

das ist klar weil $m = -\ell$ und $m = \ell$ sind die Endpunkte der Leiters



* Die Operatoren $\hat{L}_\pm$ sind sehr nützlich, wenn man mit Drehimpuls-operatoren arbeitet.

---

* Also, zusammengefaßt, wenn $V(\vec{r}) = V(r)$, sind die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators der Form: $\Psi_{E,\ell,m}(\vec{r}) = R_{E\ell m}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$

wobei $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ sind die Kugelflächenfunktionen, und $R_{E,\ell,m}(r)$ ist die Lösung der radialen Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{d}{dr} R_{E\ell m}(r) \right] + \left[V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] R_{E\ell m}(r) = E R_{E\ell m}(r)$$

Wir werden nun diese Gleichung näher ansehen.

• DIE RADIALE SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

* Also, die Differentialgleichung für den Radialteil der Wellenfunktion ist (etwa umgeschrieben):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{n\ell m}(r)-\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(r)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R_{n\ell m}(r)+\frac{2mE}{\hbar^2}R_{n\ell m}(r)=0$$

(Hierbei haben wir den Index E durch n ersetzt)

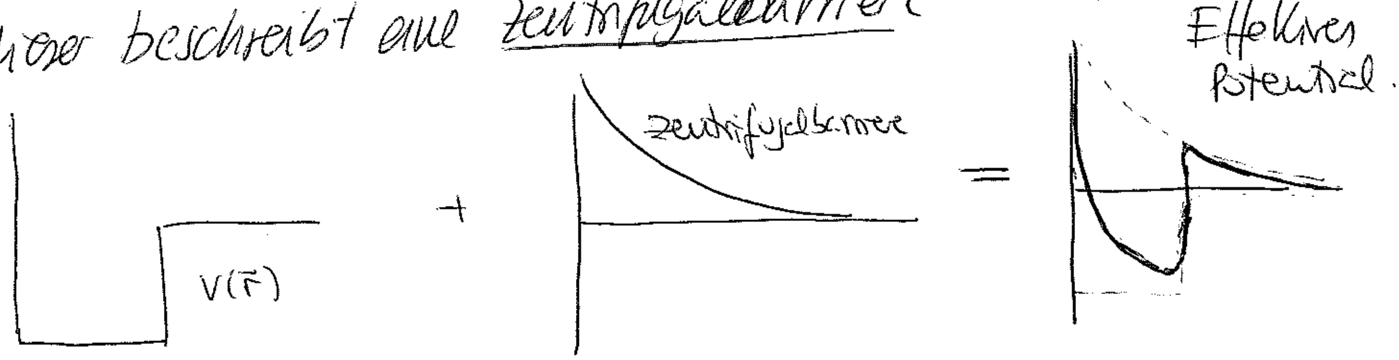
(Bemerkung: wir wollen voraussetzen, daß das Potential in keinem Fall beim Übergang zur Stelle $r=0$ rascher als $1/r^2$ divergiert).

Also $\lim\limits_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$

* Man hat nun ein effektives Potential

$$V_{eff}(r) \equiv \underbrace{V(r)}_{\text{Potential}} + \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}}$$

→ Zum Potential kommt ein weiterer Ausdruck hinzu; dieser beschreibt eine Zentrifugalbarriere



* Wir werden nun verschieden radiale Potentiale ansehen. Wir werden mit dem Fall $V(r)=0$ anfangen.