

- Eigenschaften

- $0 \leq \xi \leq \xi$ (4.73) bestätigt
- Für $\xi > 0$ gibt es mindestens einen gebundenen Zustand.
- Die Zahl der gebundenen Zustände ist:

$$n_g = \left\lfloor \frac{\xi}{\pi} \right\rfloor + 1 \quad \text{mit } \lfloor x \rfloor \text{ nächstkleinere natürliche Zahl zu } x.$$

- Energieeigenwert

$$E = -V_0 + (E + V_0) = -V_0 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \stackrel{(4.71c)}{=} -V_0 \left\{ 1 - \left(\frac{qa}{\xi} \right)^2 \right\} \quad (4.75)$$

4.4.3. Ungerade Wellenfunktionen

• Stetigkeitsbedingungen

$$\left. \begin{aligned} A \sin qa &= e^{-\kappa a} \\ Aq \cos qa &= -\kappa e^{-\kappa a} \end{aligned} \right\} (4.76a)$$

• Durchdividiert:

$$-\cot qa = \frac{\kappa}{q} \stackrel{(4.72)}{=} \frac{\{\xi^2 - (qa)^2\}^{1/2}}{qa} \quad (4.76b)$$

• Grafische Lösung in (4.74)

Eigenschaften

$$- n_u = \left\lfloor \frac{\xi}{\pi} - \frac{1}{2} \right\rfloor + 1$$

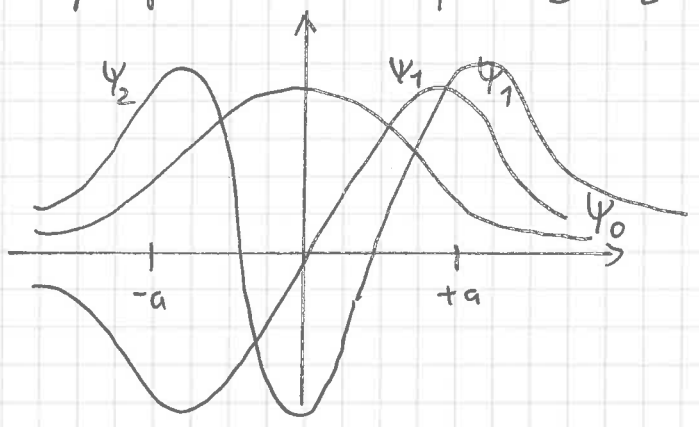
- Es gibt ungerade Lösungen nur, wenn $\xi \geq \frac{\pi}{2}$, d.h.

$$2mV_0 a^2 / \hbar^2 > \pi^2 / 4 \quad (4.77)$$

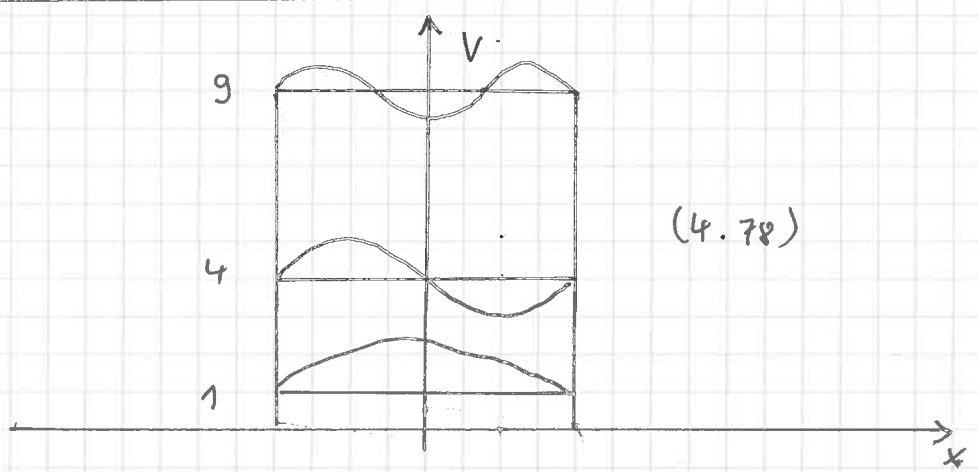
d.h. das Potential muss eine Minimalstärke überschreiten

4.4.3. Zusammenfassung

- Grundzustand: $qa \in [0, \frac{\pi}{2})$, gerade, 0 Knoten
- 1. angeregter Zustand: $qa \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$, ungerade, 1 Knoten
- 2. angeregter Zustand: $qa \in [\pi, \frac{3\pi}{2})$, gerade, 2 Knoten



4.4.4. Potenzialtopf mit unendlich hohen Wänden



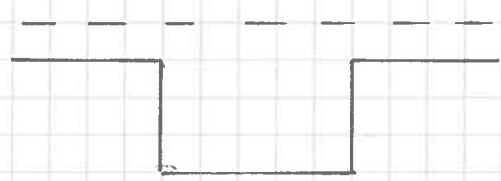
• $qa = n \frac{\pi}{2}$, $n \in \mathbb{N}$, $q = \sqrt{2mE}/\hbar$ (4.79)

• Wellenfunktion \cos bzw \sin mit Wellenzahl als ganzzahliges Vielfaches von $\frac{\pi}{2a}$

• $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$ (4.80)

4.5. Resonanzen am Potentialtopf

• Zustände mit $E > 0$



5. Der Drehimpuls

5.1. Vertauschungsrelationen

5.1.1. Definition und Vorbemerkungen

- Drehimpuls Klassisch: $\underline{l} = \underline{r} \times \underline{p}$
- Quantenmechanisch: Vektoroperator mit Komponenten l_x, l_y, l_z , wie auch \underline{r} und \underline{p} . Aber: Komponenten kommutieren nicht.
- In Ortsdarstellung:

$$\underline{l} = \frac{\hbar}{i} \underline{r} \times \nabla, \quad l_i = \epsilon_{ijk} x_j \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (5.1)$$

- Operator hermitisch, denn Orts- und Impulsanteil im Produkt kommutieren.

5.1.2. Kommutatoren

- Unter Nutzung der fundamentalen Kommutatoren

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (5.2)$$

erhält man folgende Vertauschungsrelationen:

$$[l_i, l_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} l_k \quad (5.3)$$

also beispielsweise (nachrechnen):

$$[l_x, l_y] = i\hbar l_z \quad (5.4a)$$

$$\text{bzw.} \quad \underline{l} \times \underline{l} = i\hbar \underline{l} \quad (5.4b)$$

! • Ferner: $[x_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k$, $\underline{l} \times \underline{x} = i\hbar \underline{x}$ (5.5)

! $[l_i, p_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} p_k$, $\underline{l} \times \underline{p} = i\hbar \underline{p}$ (5.6)

• Für den Operator

$$\underline{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \quad (5.7)$$

! gilt: $[\underline{l}^2, l_i] = 0$ bzw. $[\underline{l}^2, \underline{l}] = \underline{0}$ (5.8)

• Folge: Höchstens eine Drehimpuls-Komponente ist scharf messbar. $\{\underline{l}^2, l_z\}$ werden idR als vollständiges System kommutierender Operatoren gewählt.

• Ähnlich (5.8) gilt, ablesbar aus (5.5), (5.6):

! $[l_i, p^2] = 0$, $[l_i, p^2] = 0$ (5.9)

d.h. l_i vertauschen mit dem Hamiltonoperator eines Teilchens im Zentralpotential.

5.2. Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren

• Ziel: Bestimmung der Eigenwerte für die gemeinsamen Eigenzustände von \underline{l}^2 und l_z

• Weg: Rein algebraisch unter Nutzung der Kommutatorrelationen möglich, ähnlich harmonischem Oszillator

• Resultat: \underline{l}^2 : Eigenwerte $\hbar^2 l(l+1)$ $0 \leq l \in \mathbb{R}$

• Eigenvektoren: $|lm\rangle$, l_z Eigenwerte $\hbar m$

• Das Spektrum zu l_z ist

$$m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l$$

• Dies ist nur möglich, wenn $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

5.3. Bahndrehimpuls in Polarkoordinaten

5.3.1. Eigenwertgleichungen

• Es ist $\nabla = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \hat{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ (5.10)

(aus $\nabla = \hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$ und Umrechnung wie in der Mechanik).

• Folgt oB:

$$l_x = \frac{\hbar}{i} \left\{ -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cos \varphi \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \quad (5.11a)$$

$$l_y = \frac{\hbar}{i} \left\{ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \sin \varphi \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \quad (5.11b)$$

$$l_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (5.11c)$$

$$l_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} = l_x \pm i l_y \quad (5.11d)$$

Auf- und Absteigeoperatoren

$$l^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (5.11e)$$

• Eigenwertgleichungen:

$$\left\{ \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \right\} \Psi_{lm} = -l(l+1) \Psi_{lm} \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_{lm} = im \Psi_{lm} \quad (5.13)$$

5.3.2. Eigenfunktionen

• Separationsansatz: $\Psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = \phi(\varphi) \Theta(\vartheta)$ (5.14)

• Aus (5.13) folgt: $\phi(\varphi) = e^{im\varphi}$ (5.15)

• Eindeutigkeit $\phi(\varphi + 2\pi) = \phi(\varphi)$

$\Rightarrow m$ ganzzahlig und $l = 0, 1, 2, \dots$

• In (5.12):

$$\left\{ \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} + l(l+1) \right\} \Theta(\vartheta) = 0 \quad (5.15)$$

• Wird gelöst durch assoziierte Legendrefunktionen

• Gesamtergebnis:

$$\Psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) : \text{„Kugelflächenfunktionen“}$$

5.3.3. Zu den Kugelflächenfunktionen

a) Eigenschaften

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)^* \quad (5.17)$$

• Parität:

$$P Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (5.18)$$

• Orthogonalität:

$$\underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi}_{\int d\Omega} Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (5.19)$$

• Vollständigkeit

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi') = (\sin \vartheta)^{-1} \delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (5.20)$$

• d.h. jede Funktion $f(\vartheta, \varphi)$ über der Kugeloberfläche kann entwickelt werden als:

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

mit $c_{lm} = \int d\vartheta \sin\vartheta d\varphi Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) f(\vartheta, \varphi)$ (5.21)

~~g.z.~~

5.3.4. Einige Kugelflächenfunktionen

$l=0: Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ (5.22a)

$l=1: Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \rightarrow P_z$

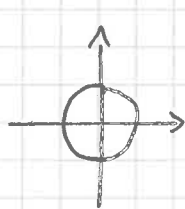
$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x+iy}{r}$ (5.22b) $\rightarrow P_{x,y}$

$l=2: Y_{20} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} (3\cos^2\vartheta - 1) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} (3\frac{z^2}{r^2} - 1) \rightarrow d_{zz} = z^2 - y^2$

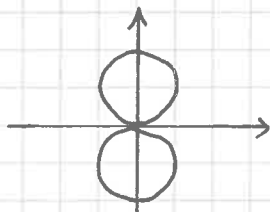
$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\vartheta \cos\vartheta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{z(x+iy)}{r^2}$ (5.22c) $\rightarrow d_{yz}, d_{xz}$

$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\vartheta e^{2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (x^2 - y^2 + 2ixy) \rightarrow d_{xy}, d_{x^2-y^2}$

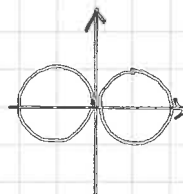
Polardiagramme



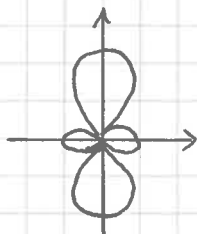
$|Y_{00}|$



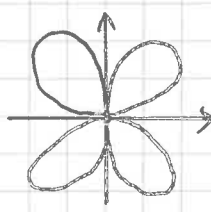
$|Y_{10}|$



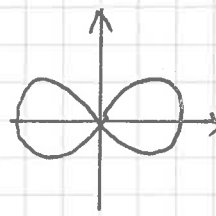
$|Y_{1±1}|$



$|Y_{20}|$



$|Y_{2±1}|$



$|Y_{2±2}|$