

Zeitentwicklung:

(Ü:) Beweg.glg.en für $\hat{x}_H(t), \hat{p}_H(t)$ sehen aus wie klassisch, und haben die Lsg.

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin \omega t$$

(und $\hat{p}_H(t) = m \frac{d}{dt} \hat{x}_H(t)$)

Alternativ:
 \hat{a} -Operator:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_H(t) = [\hat{a}_H(t), \hat{H}_H(t)] = \hbar\omega ([\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}]_H(t))$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \dots = \hat{a}$$

\Rightarrow $\frac{d}{dt} \hat{a}_H(t) = -i\omega \hat{a}_H(t)$

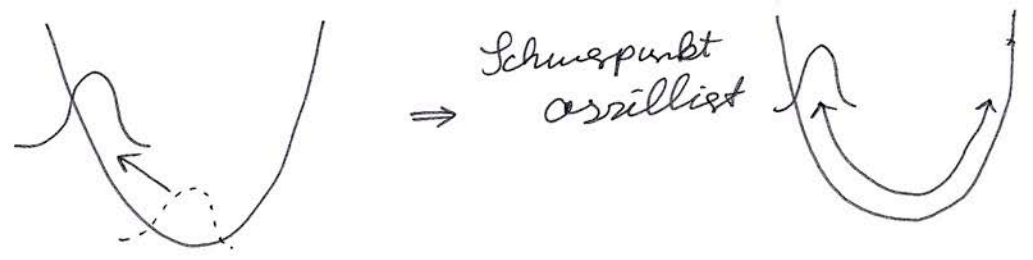
Lösung: $\hat{a}_H(t) = \hat{a} e^{-i\omega t}$

(analog zu klass. $\alpha(t)$)

Kohärenter Zustand: Eigenzustand zu \hat{a}

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

→ verschalerer Grundzustand! (Gaußpaket mit Breite x_{ZPF})



$$\begin{aligned} \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle &= \langle \alpha | x_{ZPF} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \alpha \rangle \\ &= x_{ZPF} \cdot (\alpha + \alpha^*) \end{aligned}$$

Zeitentwicklung: $\alpha(t) = \alpha \cdot e^{-i\omega t} \hat{=} \text{Oszillation!}$

Explizite Darstellung:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

(Ü: $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$)

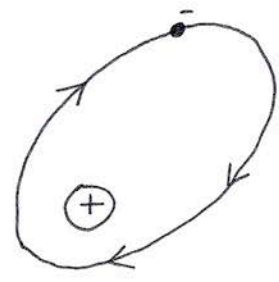
Wichtig, z.B. für Laserfeld oder optische Kavität!

Bem.:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x_{ZPF} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= i m \omega x_{ZPF} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{aligned}$$

(durch Auflösen der Def.en von \hat{a}, \hat{a}^\dagger nach \hat{x}, \hat{p})

4.3 Das Wasserstoff-Atom



Klassisches Bild:
 e^- auf Kepler-Ellipse
 im $\frac{1}{r}$ -Coulomb-Potential
 (analog $\frac{1}{r}$ -Gravitationspot.)

QM:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|}$$

$+q = p^+$ - Ladung
 $-q = e^-$ - Ladung
 $q \approx 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

3D-Problem

$$\hat{p} = \begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad \vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

isotrop: $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ hängt nur vom Abstand $|\vec{r}|$ ab!
 (alle Richtungen gleich gut) \Rightarrow Kugelsymmetrie, d.h. 3D-Rotationssymmetrie!

$$\epsilon_0 \approx 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^4 \text{ A}^2$$

$$m \approx 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

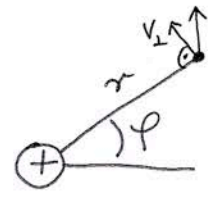
Erinnerung: Klass. Lsg.:

wegen Rotationsymm. ist der Drehimpuls erhalten!

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

$$\dot{\vec{L}} = 0$$

⇒ Bewegung in Ebene, verwende Polarkoordinaten



$$L = r \cdot \underbrace{m r \dot{\varphi}}_{v_{\perp}} = m r^2 \dot{\varphi}$$

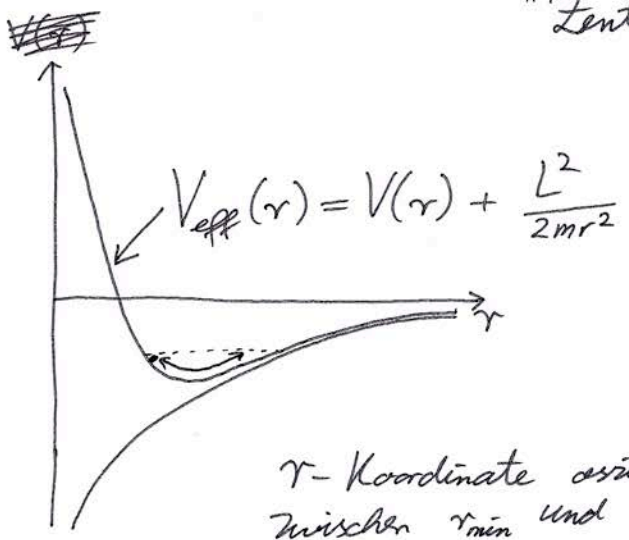
$$\Rightarrow \dot{\varphi} = \frac{L}{m r^2}$$

$$\Rightarrow E_{kin} = \frac{m}{2} \vec{v}^2 = \frac{m}{2} (\underbrace{\dot{r}^2}_{v_{\parallel}^2} + \underbrace{r^2 \dot{\varphi}^2}_{v_{\perp}^2})$$

$$= \frac{m}{2} \dot{r}^2 + \frac{L^2}{2 m r^2} \stackrel{!}{=} E - V(r)$$

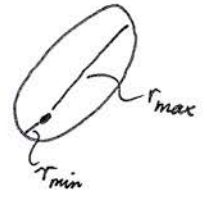
$$\Rightarrow E = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + V(r) + \underbrace{\frac{L^2}{2 m r^2}}$$

"Zentrifugalpotential"



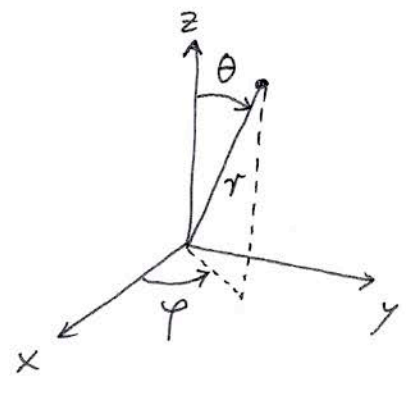
r-Koordinate oszilliert zwischen r_{min} und r_{max} ⇒

... ⇒ Ellipse



QM: ^{verwende} Kugelkoordinaten

$$\vec{r} = r \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$



Laplace-Operator:

$$\begin{aligned} \Delta \psi &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \\ &= \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)}_{\Rightarrow \text{Radialanteil der kinet. Energie}} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}}_{\text{Winkelanteil}} \end{aligned}$$

Drehimpuls-Operator:

$$\begin{aligned} \hat{L} &= \vec{r} \times \hat{p} = \vec{r} \times (-i\hbar \vec{\nabla}) \\ &= -i\hbar \begin{pmatrix} y\partial_z - z\partial_y \\ z\partial_x - x\partial_z \\ x\partial_y - y\partial_x \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Es zeigt sich:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \psi &= (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) \psi \\ &= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} \end{aligned}$$

⇒

$$\Delta \psi = \text{Radialteil} - \cancel{\frac{\hbar^2}{2m}} \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \psi$$

$$\Rightarrow \hat{H}\psi = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \partial_r(r^2 \partial_r \psi)}_{\text{"radiale kinetische Energie"} = \hat{H}_{\text{rad}}} + V(r)\psi + \underbrace{\frac{1}{2m r^2} \hat{L}^2 \psi}_{\text{"Zentrifugalpotential"}}$$

Suche $\hat{H}\psi = E\psi$

Ansatz:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \underbrace{\phi(r)}_{\text{radialer Anteil}} \cdot \underbrace{\chi(\theta, \varphi)}_{\text{Winkelanteil}}$$

⇒ nutzt Kugelsymm. aus

Wählen: $\hat{L}^2 \chi = \text{Zahl} \cdot \chi$

⇒ Verwende "Kugelflächenfunktionen",

$$\chi(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad \begin{matrix} l = 0, 1, 2, \dots \\ m = -l, \dots, +l \end{matrix}$$

denn es gilt:

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

↙
Drehimpuls-
Quantenzahl

Es gilt außerdem:

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Quantenzahl für \hat{L}_z
= "Drehimpulsprojektion"

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

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) := \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

mit $P_l^m(x) =$ "assoziierte Legendre-Polynome"

- ~~l=0, m=0~~ $l=m=0: 1$
- $l=1, m=0: x$
- $l=1, m=1: -\sqrt{1-x^2}$
- $l=1, m=-1: +\frac{1}{2}\sqrt{1-x^2}$
- usw. (siehe Formelsammlungen)

⇒

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta$$

usw.

Es gilt: Orthonormalität:

Flächenelement
in Polarkoord.

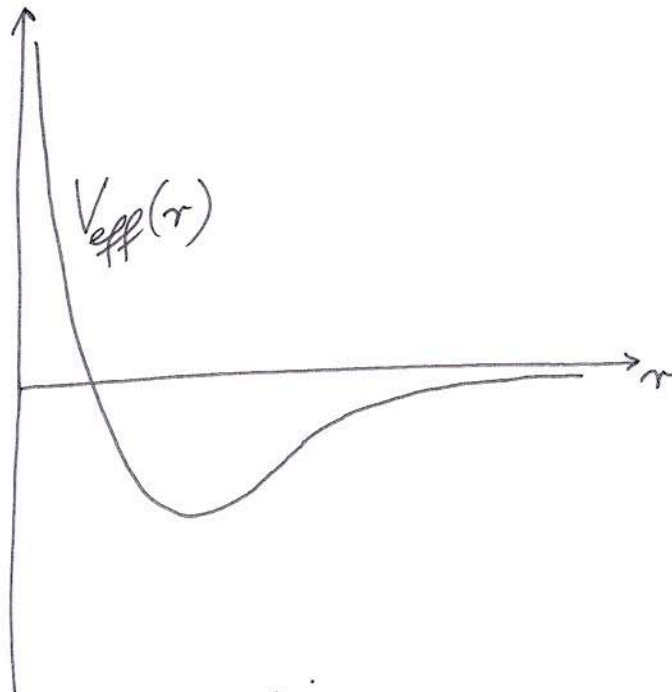
$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l',m'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

Radiale Glg.:

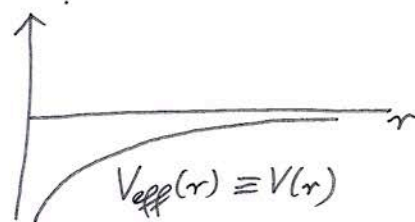
$$\left[\hat{H}_{\text{rad}} + \overbrace{V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}^{V_{\text{eff}}(r)} \right] \phi(r) \stackrel{!}{=} E \phi(r)$$

mit $V(r) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

⇒ Finde Energie-Eigenzustände in :



Einfachster Fall: $l=0 \Rightarrow$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \stackrel{!}{=} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \phi(r) \stackrel{!}{=} E \phi(r)$$

Ansatz:

$$\phi(r) \approx N e^{-cr}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r e^{-cr})$$

$$= -c \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 e^{-cr}) = -c \frac{1}{r^2} (2r + r^2(-c)) e^{-cr}$$

$$\Rightarrow \left[+ \frac{\hbar^2}{2m} c \left(\frac{2}{r} - c \right) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - E \right] e^{-cr} \stackrel{!}{=} 0$$

⇒ Vgl. Terme:

$$\text{"1/r"} : \frac{\hbar^2 c}{m} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow c = \frac{mq^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \quad (\text{Dimension: } \frac{1}{\text{Länge}})$$

$$\text{"konst."} : - \frac{\hbar^2}{2m} c^2 - E = 0$$

$$\Rightarrow E = - \frac{mq^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

Zahlenwerte einsetzen ⇒

$E \approx -13,6 \text{ eV}$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \frac{\text{C} \cdot \text{V}}{\text{J}}$$

Der experimentelle Wert!