Rotation in 3D

In karthesischen Koordinaten (x, y, z) (sehr) kompliziert, daher evtl. Polarkoordinaten sinnvoll!

Kugel-/Polarkoordinaten: r Radius

Θ Winkel von der z-Achse (gemessen von "Norden" aus)

ϕ Winkel in der x, y Ebene

→ Folie auflegen und zeigen!

Wie rechnet man die Systeme um?

→ Geometrie

$$x = r \cdot \sin\Theta \cos\phi$$
$$y = r \cdot \sin\Theta \sin\phi$$
$$z = r \cos\Theta$$

⇒ 3D Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \qquad (\text{mit } V = 0)$$

↑ Phönizischer Buchstabe "Nabla" (Form der Leier)

in kartesischen Koordinate:

$$\nabla^2\Psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi$$

in Kugelkoordinaten:

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r\Psi + \frac{1}{r^2}\Lambda^2\Psi$$

$$\Lambda^2\Psi = \frac{1}{\sin^2\Theta}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right) + \frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\Psi}{\partial\Theta}\right)$$

Lambda   Phi

Problem: Viele Variablen

Lösungsweg: Annahme r = konst. (nur auf Kugeloberfläche)

$$\rightarrow \nabla^2 \Psi = \frac{1}{r^2} \Lambda^2 \Psi$$

$$\rightarrow -\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r^2}}_{I} \Lambda^2 \Psi$$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2I} \Lambda^2 \Psi$$

Aber immer noch 2 Variablen $\rightarrow$ Variablentrennung

$\Psi = f(\Theta) \cdot f(\phi) \rightarrow$ 2 Schrödingergleichung

1) $$\frac{\partial^2 f(\phi)}{\partial \phi^2} = -m_l^2 f(\phi)$$ m_l: 1. Rotationsquantenzahl

2) $$\frac{\partial^2 f(\Theta)}{\partial \Theta^2} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\right) = E(\Theta) f(\Theta)$$

$E(\Theta)$

Lösung vom Differentialgleichung 2) ergibt eine neue Quantenzahl l mit $l = 0, 1, 2, 3, ..$ "Bahndrehimpulsquantenzahl"

$\Rightarrow$ Mehrere Wellenfkt. $\rightarrow$ Lösungen sind assoziierte Legendre Polynome (Kugelfunktionen)

$\Rightarrow \Psi_{l, m_l} = f(\Theta) \cdot f(\phi)$ mit $l = 0, 1, 2, 3, ..$

$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..$

$\Rightarrow m_l = -l, -l+1, ..., 0, ..., l-1$

$\Rightarrow$ $2l+1$ mögliche Werte für m_l

Mögliche Kugelfkt.

l	m_l	ψ_{l,m_l}
0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
1	0	$\left(3/4\pi\right)^{1/2}\cos\theta$
	± 1	$\mp\left(3/8\pi\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
2	0	$\left(5/16\pi\right)^{1/2}\left(3\cos^2\theta-1\right)$
	± 1	$\mp\left(15/16\pi\right)^{1/2}\cos\theta\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
	± 2	$\left(15/32\right)^{1/2}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$

$\Rightarrow$ ψ^2 gibt weiterhin die Wahrscheinlichkeitsdichte
hier: Teilchen auf Kugeloberfläche
Die Werte von $+m_l$ und $-m_l$ unterscheiden sich nicht!

Energie des Teilchens $E = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}$

mit $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$

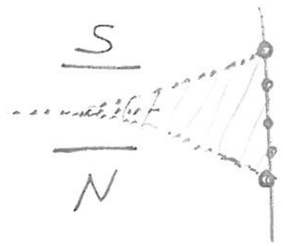
Achtung: Energie unabhängig von m_l!
Da es $2l+1$ Wellenfkt für jedes l gibt, ist das Energieniveaus zu l $(2l+1)$-fach entartet!

14.11.2014

Kann man diese Rotationsquantelung nachweisen?

$\Rightarrow$ Stern Gerlach Versuch (1921)

Aufbau: Strahl von Silbergas wird durch ein (inhomogenes) Magnetfeld geleitet



Idee: ein rotierendes, geladener Körper erzeugt ein elektromagnetisches Feld, welches mit dem angelegten Magnetfeld wechselwirkt

Die Richtung des Feldes des rotierenden Körpers bestimmt die Ablenkung des Teilchens

2 Ergebnisse möglich

i) klassische Mechanik:

- jede beliebige Orientierung ist erlaubt

$\rightarrow$ breites Band von abgelenkten Atomen

ii) Quantenmechanik:

Banden von Ag-Atomen, da Teilchen nur in bestimmten Richtungen rotieren dürfen

$\Rightarrow$ Resultat: 2 Banden, damit nur 2 Richtungen

Warum? Drehimpuls mit Quantenzahl l führt zu $2l+1$ Orientierungen ↯

2 Orientierungen bedeutet $l = 1/2$ $(2\cdot 1/2+1 = 2)$

l muss aber ganzzahlig sein!

$\Rightarrow$ Stern Gerlach Versuch beobachtet nicht den Bahndrehimpuls der Atome, sondern den Drehimpuls der durch die Rotation der Elektronen um die eigene Achse entsteht!

$\Rightarrow$ Dirac'sche Interpretation des Experiments

Elektronen haben nur einen Spin $s = 1/2$

"Spinquantenzahl" vergleichbar mit Bahndrehimpuls

$\rightarrow$ Spindrehimpuls

$$|\mathcal{J}^e| = \left(s(s+1)\right)^{1/2}\hbar = \sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}}\,\hbar$$
$$= \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$
$$= 0.866\,\hbar$$

Interpretierbar als Rotation um die z-Achse

$\mathcal{J}^e_z = m_s \hbar \qquad m_s = -s, -s+1, \dots, 0, \dots, s-1, s$

hier $m_s = +\frac{1}{2}$ und $m_s = -1$

$\mathcal{J}^e_z = \frac{1}{2}\hbar$

$m_s = 1/2$

$\mathcal{J}^e_z = -\frac{1}{2}\hbar$

$m_s = -\frac{1}{2}$

$\rightarrow$ Beide Banden im Stern Gerlach Versuch entsprechen den beiden e^- Spins

Die Spins und Drehimpulse aller anderen e^- heben sich auf (Pauli Prinzip), es bleibt nur der Spin des 5s-Elektrons über; es besitzt keinen Bahndrehimpuls ($l = 0$)

Achtung: Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen: e^-, Protonen, Neutronen

$\hookrightarrow$ Fermionen

Spin 1 Teilchen: manche Atomkerne

Photonen

$\hookrightarrow$ Bosonen