
Physik IV

Atome, Moleküle, Wärmestatistik

Vorlesungsskript zur Vorlesung im SS 2003

Prof. Dr. Rudolf Gross

Walther-Meissner-Institut
Bayerische Akademie der Wissenschaften
und
Lehrstuhl für Technische Physik (E23)
Technische Universität München

Walther-Meissner-Strasse 8
D-85748 Garching
Rudolf.Gross@wmi.badw.de

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	xiii
I Physik der Atome und Moleküle	1
1 Einführung in die Quantenphysik	3
1.1 Der Welle-Teilchen Dualismus	4
1.1.1 Dualismus des Lichtes	4
1.1.2 Dualismus der Materie	6
1.2 Materiewellen und Wellenfunktionen	10
1.2.1 Wellenpakete	11
1.2.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation	13
1.2.3 Messprozess und Observable	17
1.2.4 Dispersion von Materiewellen	17
1.2.5 Gegenüberstellung Quantenphysik – klassische Physik	19
1.3 Grundlagen der Quantenmechanik	22
1.3.1 Schrödinger-Gleichung und Materiewellen	22
1.3.2 Operatoren	29
1.3.3 Erwartungswerte	33
1.3.4 Eigenwerte und Eigenfunktionen	34
1.3.5 Zulässige Operatoren	36
1.3.6 Vertiefungsthema: Quantenmechanische Bewegungsgleichung	37
1.3.7 Vertiefungsthema: Vertauschungsrelationen und Heisenbergsche Unschärferelation	38
1.3.8 Anwendungen	40
1.4 Ununterscheidbarkeit	41
1.5 Fermionen und Bosonen	45

1.5.1	Der Spin von Quantenteilchen	45
1.5.2	Quantenteilchen mit ganz- und halbzahligem Spin	46
1.6	Austauschsymmetrie und Pauli-Verbot	48
1.6.1	Die Austauschsymmetrie	48
1.6.2	Das Pauli-Verbot	50
1.7	Vertiefungsthema: Zur Axiomatik der Quantenmechanik	52
2	Aufbau der Atome	57
2.1	Historisches	58
2.2	Experimenteller Nachweis der Existenz von Atomen	59
2.3	Größe, Masse und elektrischer Aufbau von Atomen	63
2.3.1	Größe von Atomen	63
2.3.2	Der elektrische Aufbau von Atomen	64
2.3.3	Bestimmung der Atommasse	65
2.4	Die Struktur von Atomen	69
2.4.1	Geschichtliche Entwicklung	69
2.4.2	Grundlagen zu Streuexperimenten	71
3	Das Einelektronenatom	81
3.1	Experimentelle Grundlagen	82
3.1.1	Spektralanalyse	82
3.1.2	Anregung von Atomen	83
3.1.3	Das Spektrum des Wasserstoffs	84
3.2	Das Bohrsche Atommodell	88
3.3	Die Schrödinger-Gleichung für Einelektronenatome	94
3.3.1	Schwerpunkt- und Relativbewegung	94
3.3.2	Teilchen im kugelsymmetrischen Potenzial	96
3.3.3	Winkelabhängigkeit	98
3.3.4	Der Drehimpuls	106
3.3.5	Die Radialabhängigkeit	113
3.3.6	Quantenzahlen	119
3.3.7	Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	122
3.4	Der Elektronenspin	125
3.4.1	Experimentelle Fakten	125
3.4.2	Vertiefungsthema: Theoretische Beschreibung des Spins	127

4	Das Wasserstoffatom	135
4.1	Experimentelle Befunde	136
4.2	Relativistische Korrektur der Energieniveaus	137
4.3	Die Spin-Bahn-Kopplung: Feinstruktur	139
4.3.1	Der Spin-Bahn-Kopplungsterm	139
4.3.2	Der Gesamtdrehimpuls	141
4.3.3	Energieniveaus des Wasserstoffatoms bei Spin-Bahn-Kopplung	143
4.3.4	Die Feinstruktur beim Wasserstoffatom	145
4.4	Die Lamb-Shift	148
4.5	Die Hyperfeinstruktur	154
4.6	Das Wasserstoffatom im Magnetfeld: Normaler Zeeman-Effekt	159
4.6.1	Klassisches Teilchen im Magnetfeld	159
4.6.2	Vertiefungsthema: Quantenmechanische Beschreibung	165
4.7	Anomaler Zeeman- und Paschen-Back-Effekt	168
4.7.1	Der anomale Zeeman-Effekt	168
4.7.2	Der Paschen-Back-Effekt	172
4.8	Der Stark-Effekt	175
4.9	Vollständiges Termschema des Wasserstoffatoms	176
4.10	Vertiefungsthemen	178
4.10.1	Das Modell des Elektrons	178
4.10.2	Vertiefungsthema: Das Korrespondenzprinzip	180
5	Wasserstoffähnliche Systeme	185
5.1	He^+ , Li^{++} und Be^{+++}	186
5.2	Die schweren Wasserstoffisotope	187
5.3	Rydbergatome	188
5.4	Exotische Atome	191
5.4.1	Myonische Atome	191
5.4.2	Anti-Wasserstoff	193
5.4.3	Positronium	194
5.5	Quarkonium	196
5.6	Exzitonen	196

6	Übergänge zwischen Energieniveaus	199
6.1	Übergangswahrscheinlichkeiten	200
6.1.1	Spontane und stimulierte Übergänge	200
6.2	Lebensdauer angeregter Zustände	205
6.3	Linienbreiten von Spektrallinien	208
6.3.1	Natürliche Linienbreite	209
6.3.2	Dopplerverbreiterung	211
6.3.3	Stoßverbreiterung	213
6.4	Übergangsmatrixelemente	217
6.4.1	Parität	219
6.4.2	Auswahlregeln	221
6.4.3	Auswahlregeln für die Bahndrehimpulsquantenzahl – Paritätsauswahlregeln	222
6.4.4	Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl	223
6.4.5	Auswahlregeln für die Spinquantenzahl	227
6.4.6	Stärke des Dipolübergangs	228
6.4.7	Vertiefungsthema: Multipol-Übergänge höherer Ordnung	232
6.4.8	Vertiefungsthema: Zwei-Photonen-Übergänge	232
6.4.9	Vertiefungsthema: Spektrales Lochbrennen	234
7	Mehrelektronenatome	237
7.1	Das Heliumatom	238
7.1.1	Die Zentralfeldnäherung	239
7.1.2	Symmetrie der Wellenfunktion	243
7.2	Numerische Methoden und Näherungsverfahren	249
7.2.1	Das Modell unabhängiger Elektronen	249
7.2.2	Das Hartree-Verfahren	250
7.3	Der Gesamtdrehimpuls	252
7.3.1	Die L-S - oder Russel-Saunders-Kopplung	252
7.3.2	Die j-j -Kopplung	253
7.3.3	Termschema bei L-S-Kopplung	255
7.3.4	Beispiele für Drehimpulskopplungen und Termschemata	256
7.4	Der Grundzustand des Vielelektronenatoms – Hundzsche Regeln	258

7.5	Vertiefungsthema: Atomarer Magnetismus	261
7.6	Die Elektronenstruktur von Vielelektronenatomen	262
7.6.1	Schalen und Unterschalen	263
7.6.2	Aufbau der Atomhülle mit zunehmender Kernladungszahl	265
7.6.3	Das Periodensystem der Elemente	270
7.7	Spektren der Mehrelektronenatomen	273
7.7.1	Termschema des Heliumatoms	273
7.7.2	Alkalimetalle	275
7.7.3	Erdalkalimetalle	278
8	Angeregte Atomzustände	281
8.1	Einfachanregungen	283
8.1.1	Anregung und Rekombination durch Stoßprozesse	284
8.2	Komplexere Anregungsprozesse	286
8.2.1	Anregung mehrerer Elektronen – Autoionisation	286
8.2.2	Innerschalenanregungen	287
8.3	Röntgenstrahlung	289
8.3.1	Erzeugung von Röntgenstrahlung	290
8.3.2	Das Röntgenspektrum	292
8.3.3	Die Feinstruktur der Röntgenlinien	301
8.3.4	Vertiefungsthema: Streuung und Absorption von Röntgenstrahlung	303
8.3.5	Vertiefungsthema: Röntgenfluoreszenz	307
8.3.6	Vertiefungsthema: Monochromatisierung von Röntgenstrahlung	308
9	Moleküle	313
9.1	Das Einelektronen-Molekül — H_2^+ -Molekülion	316
9.1.1	Die Schrödinger-Gleichung des Einelektronenmoleküls	316
9.1.2	Die adiabatische Näherung	317
9.1.3	Lösung der elektronischen Wellengleichung	318
9.2	Das Vielelektronen-Molekül — H_2 -Molekül	328
9.2.1	Die Molekülorbitalnäherung	328
9.2.2	Die Heitler-London Näherung	330

9.2.3	Vergleich der Näherungen	332
9.2.4	Die Molekülbindung	334
9.3	Elektronische Zustände zweiatomiger Moleküle	336
9.4	Die Kernbewegung	340
9.4.1	Der starre Rotator	340
9.4.2	Molekülschwingungen	343
II	Wärmestatistik	349
10	Grundlagen der Wärmelehre	351
10.1	Systeme, Phasen und Gleichgewicht	352
10.1.1	Systeme	352
10.1.2	Phasen	352
10.1.3	Gleichgewicht	353
10.2	Zustandsgrößen	355
10.2.1	Definitionen	355
10.2.2	Die Temperatur	357
10.2.3	Der Druck	357
10.2.4	Teilchenzahl, Stoffmenge und Avogadrozahl	358
10.2.5	Die Entropie	359
10.3	Die thermodynamischen Potenziale	360
10.3.1	Prinzip der maximalen Entropie und minimalen Energie	360
10.3.2	Innere Energie als Potenzial	360
10.3.3	Entropie als thermodynamisches Potenzial	361
10.3.4	Die freie Energie oder das Helmholtz-Potenzial	361
10.3.5	Die Enthalpie	362
10.3.6	Die freie Enthalpie oder das Gibbsche Potenzial	363
10.3.7	Die Maxwell-Relationen	364
10.3.8	Thermodynamische Stabilität	365
10.4	Die kinetische Gastheorie	367
10.4.1	Druck und Temperatur	367
10.4.2	Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung	368
10.4.3	Freiheitsgrade	369
10.4.4	Der Gleichverteilungssatz	370

10.5	Energieformen, Zustandsänderungen und Hauptsätze	371
10.5.1	Energieformen	371
10.5.2	Energieumwandlung	373
10.5.3	Die Wärmekapazität	374
10.5.4	Zustandsänderungen	375
11	Statistische Beschreibung	377
11.1	Grundbegriffe der Statistik	379
11.1.1	Wahrscheinlichkeiten	379
11.1.2	Mittelwert, Mittelwert der Abweichung, Schwankung	380
11.2	Phasenraum und Verteilungen	382
11.2.1	Mikro- und Makrozustände	382
11.2.2	Der Phasenraum	382
11.2.3	Verteilungen	383
11.3	Das Spin-1/2 System	386
11.3.1	Die Magnetisierung	387
11.3.2	Entartung der Zustände	388
11.3.3	Statistische Eigenschaften der Magnetisierung	390
11.3.4	Die Gauß-Verteilung für große N	392
11.3.5	Die Energie des Spin-1/2-Systems	393
11.4	Grundlegende Annahmen der Wärmephysik	394
11.4.1	Zeitmittel und Scharmittel	396
11.5	Systeme in thermischem Kontakt	399
11.6	Entropie, Temperatur und chemisches Potenzial	406
11.6.1	Entropie	406
11.6.2	Statistische Definition der Temperatur	408
11.6.3	Statistische Definition des chemischen Potenzials	408
11.6.4	Der 3. Hauptsatz	409
11.6.5	Der 2. Hauptsatz	409
11.6.6	Wärmefluss	410
11.6.7	Teilchenfluss	411
11.6.8	Zusammenhang zwischen statistischen und thermodynamischen Größen	412
11.7	Der Zeitpfeil	415
11.8	Magnetische Kühlung	416

12 Verteilungsfunktionen	423
12.1 Repräsentative Ensemble	424
12.1.1 Abgeschlossenes System	424
12.1.2 System in Kontakt mit einem Wärmereservoir	424
12.1.3 System in Kontakt mit einem Wärme- und Teilchenreservoir	425
12.2 Gibbs- und Boltzmann-Faktoren	426
12.2.1 Der Gibbs-Faktor	428
12.2.2 Der Boltzmann-Faktor	428
12.3 Zustandssummen und Mittelwerte	431
12.3.1 Große Zustandssumme	431
12.3.2 Mittelwerte	431
12.3.3 Zustandssumme	433
12.3.4 Verteilungsfunktionen und ihre Eigenschaften	436
12.4 Anwendungen der Verteilungsfunktionen	438
12.4.1 Das ideale einatomige Gas	438
12.4.2 Gültigkeit der klassischen Näherung	441
12.4.3 Der Gleichverteilungssatz	442
12.5 Die Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung	446
12.5.1 Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages	448
12.5.2 Verteilung einer Geschwindigkeitskomponente	451
12.5.3 Die barometrische Höhenformel	453
12.5.4 Thermalisierung	454
13 Quantenstatistik	461
13.1 Identische Teilchen	462
13.1.1 Klassischer Fall: Maxwell-Boltzmann-Statistik	462
13.1.2 Quantenmechanischer Fall	462
13.2 Die quantenmechanischen Verteilungsfunktionen	465
13.2.1 Quantenstatistische Beschreibung	465
13.2.2 Photonen-Statistik	468
13.2.3 Die Fermi-Dirac-Statistik	469
13.2.4 Die Bose-Einstein-Statistik	472
13.2.5 Quantenstatistik im klassischen Grenzfall	473
13.3 Die Zustandsdichte	477

13.3.1	Das freie Elektronengas	480
13.3.2	Das Photonengas	484
13.4	Vertiefungsthema:	
	Die Bose-Einstein Kondensation	487
13.4.1	Historische Entwicklung	487
13.4.2	Temperatur der Bose-Einstein Kondensation	488
13.4.3	Realisierung eines Bose-Einstein Kondensats	494
13.4.4	Beobachtung der Bose-Einstein Kondensation	498
13.4.5	Atomlaser und Kohärenz	500
III	Anhang	505
A	Rutherfordsche Streuformel	507
B	Krummlinige Koordinaten	512
C	\hat{L}_i, \hat{L}^2 in Kugelkoordinaten	518
D	Vertauschungsrelationen \hat{L}_i, \hat{L}^2	520
E	Heliumatom	522
F	Literatur	525
G	SI-Einheiten	527
G.1	Geschichte des SI Systems	527
G.2	Die SI Basiseinheiten	529
G.3	Einige von den SI Einheiten abgeleitete Einheiten	530
G.4	Vorsätze	532
G.5	Abgeleitete Einheiten und Umrechnungsfaktoren	533
H	Physikalische Konstanten	537

Teil III

Anhang

A Rutherford'sche Streuformel

Zur Herleitung der Rutherford'schen Streuformel wird der Zusammenhang des Stoßparameters b mit dem Streuwinkel ϑ benötigt. Wir wollen deshalb in diesem Abschnitt den Ausdruck für den Stoßparameter beim Stoß eines α -Teilchens (Ladung $+2e$) mit dem Coulomb-Potenzial eines Atomkerns der Ladung $+Ze$ ableiten. Da die zwischen Kern und α -Teilchen wirkende Coulomb-Kraft stets parallel zu dem vom Kern zum α -Teilchen weisenden Ortsvektor ist, gilt der Flächensatz. In diesem Fall ist die Bahn des α -Teilchens eben und es ist zweckmäßig, den Bahnverlauf in Polarkoordinaten ρ, φ zu betrachten. Ferner können wir das Zweiteilchenproblem auf ein Einteilchenproblem zurückführen, indem wir die Kernmasse m_K als in Ruhe befindlich betrachten und für die Masse des α -Teilchens die reduzierte Masse

$$\mu = \frac{m_\alpha m_K}{m_\alpha + m_K} \quad (\text{A.1})$$

und für seine Geschwindigkeit die Relativgeschwindigkeit

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_K \quad (\text{A.2})$$

verwenden. Den Ursprung des Koordinatensystems legen wir in den ruhenden Atomkern (siehe Abb. A1).

Für $\rho \rightarrow \infty$, also sehr weit weg vom Atomkern, soll das α -Teilchen die Energie

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \mu v_0^2 \quad (\text{A.3})$$

besitzen. Seine Bahn verläuft dort geradlinig. Nähert sich das α -Teilchen dem Kern, so wird es von dieser geradlinigen Bahn abgelenkt. Wir wollen zuerst den Bahnverlauf $\rho(\varphi)$ berechnen. Nach dem Coulombschen Gesetz und $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$ bewegt sich das α -Teilchen im elektrischen Feld \mathbf{E} bzw. Potenzial V des Kerns ($q = +Ze$)

$$\mathbf{E} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0\rho^2} \hat{\rho} \quad V = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0\rho}, \quad (\text{A.4})$$

wobei $\hat{\rho}$ der Einheitsvektor in ρ -Richtung ist, also vom Kernort zum Ort des α -Teilchens.

Wegen $\text{rot}\mathbf{E} = \text{rot}\mathbf{F}/q = 0$, d.h. $\text{rot}\mathbf{F} = 0$, gilt für das betrachtete Problem der Energieerhaltungssatz der klassischen Mechanik. Da für die potentielle Energie $E_{\text{pot}} = qV = +2eV$ gilt, da die Ladung des α -Teilchens $+2e$ beträgt, so folgt aus dem Energieerhaltungssatz

$$E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \mu v_0^2 + \frac{2e \cdot Ze}{4\pi\epsilon_0\rho} = \text{const.} \quad (\text{A.5})$$

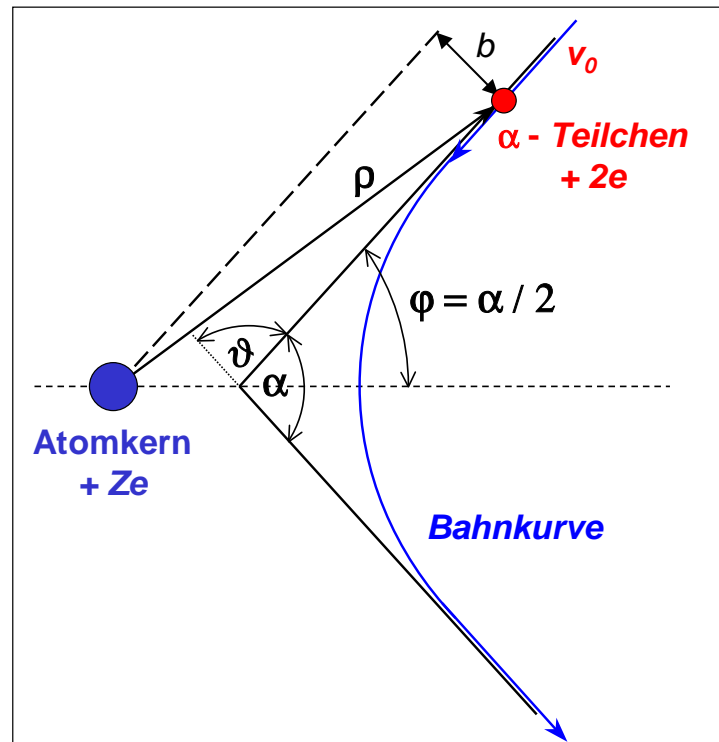


Abbildung A1: Zur Herleitung des Zusammenhangs zwischen Streuwinkel ϑ und Stoßparameter b .

Da für $\rho \rightarrow \infty$ die Geschwindigkeit des α -Teilchens gegen v_0 gehen muss, ergibt sich die Konstante zu $\frac{1}{2}mv_0^2$.

Mit der Abkürzung $V(\rho) = k/\rho$, d.h. $k = 2e \cdot Ze / 4\pi\epsilon_0\rho$, und der Bahngeschwindigkeit $v = ds/dt$ erhalten wir mit dem Quadrat des Linienelements ds in Polarkoordinaten

$$ds^2 = d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2$$

den Ausdruck für die Gesamtenergie zu

$$E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = E = \frac{\mu}{2} \left[\left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \rho^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] + \frac{k}{\rho} = \frac{1}{2} \mu v_0^2 . \quad (\text{A.6})$$

Der vom Kern zum α -Teilchen gerichtete Kraftvektor ist immer parallel zu $\hat{\rho}$, wodurch das Drehmoment $\mathbf{M} = \boldsymbol{\rho} \times \mathbf{F} = 0$ wird. Das heißt, neben dem Energieerhaltungssatz gilt auch der Drehimpulserhaltungssatz.

Zur Berechnung des Drehimpulses betrachten wir in großer Entfernung vom Kern die Parallele zur dort geradlinigen Bahn des α -Teilchens, die durch den Koordinatenursprung geht (siehe Abb. A1). Der Abstand der beiden Geraden definiert den *Stoßparameter* b . Mit der Definition $\mathbf{L} = m(\mathbf{r} \times \mathbf{v})$ bzw. $\mathbf{L} = \Theta_\omega \boldsymbol{\omega}$ des Drehimpulses, wobei $\Theta_\omega = m\rho^2$ und $\boldsymbol{\omega} = d\boldsymbol{\varphi}/dt$ ist, erhalten wir den Betrag des Drehimpulses zu

$$|\mathbf{L}| = \mu |\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{v}_0| = \mu v_0 \rho \sin(\hat{\boldsymbol{\rho}}, \hat{\mathbf{v}}_0) = \mu v_0 b = \text{const.} \quad (\text{A.7})$$

sowie zu

$$|\mathbf{L}| = \Theta_{\omega} \omega = \mu \rho^2 \frac{d\varphi}{dt} = \text{const.} \quad (\text{A.8})$$

Hieraus erhalten wir durch Gleichsetzen von (A.7) und (A.8) schließlich

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{v_0 b}{\rho^2}. \quad (\text{A.9})$$

Setzen wir diesen Ausdruck in (A.6) ein, so erhalten wir

$$\frac{\mu}{2} \left[\left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \frac{v_0^2 b^2}{\rho^2} \right] + \frac{k}{\rho} = \frac{1}{2} \mu v_0^2. \quad (\text{A.10})$$

Ersetzen wir schließlich die zeitliche Ableitung von ρ durch

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{d\rho}{d\varphi} \frac{v_0 b}{\rho} = - \frac{v_0 d\left(\frac{b}{\rho}\right)}{d\varphi},$$

so folgt

$$\frac{\mu}{2} v_0^2 \left[\left(\frac{d\left(\frac{b}{\rho}\right)}{d\varphi} \right)^2 + \frac{b^2}{\rho^2} \right] + \frac{k}{\rho} = \frac{1}{2} \mu v_0^2. \quad (\text{A.11})$$

Teilen wir durch $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \mu v_0^2$, so erhalten wir

$$\left[\left(\frac{d\left(\frac{b}{\rho}\right)}{d\varphi} \right)^2 + \frac{b^2}{\rho^2} \right] + \frac{k}{E_{\text{kin}} \rho} = 1. \quad (\text{A.12})$$

Addieren wir auf beiden Seiten $k^2/4E_{\text{kin}}^2 b^2$, so können wir weiter umformen zu

$$\left(\frac{d\left(\frac{b}{\rho}\right)}{d\varphi} \right)^2 + \frac{b^2}{\rho^2} + \frac{k}{E_{\text{kin}} \rho} + \frac{k^2}{4E_{\text{kin}}^2 b^2} = 1 + \frac{k^2}{4E_{\text{kin}}^2 b^2} \quad (\text{A.13})$$

bzw. zu

$$\left(\frac{d\left(\frac{b}{\rho}\right)}{d\varphi}\right)^2 + \left(\frac{b}{\rho} + \frac{k}{2E_{\text{kin}}b}\right)^2 = 1 + \frac{k^2}{4E_{\text{kin}}^2 b^2} . \quad (\text{A.14})$$

Mit der Substitution

$$u = \frac{b}{\rho} + \left(\frac{k}{2E_{\text{kin}}b}\right)^2 \quad du = d\left(\frac{b}{\rho}\right)$$

und unter Benutzung von

$$C^2 = 1 + \left(\frac{k}{2E_{\text{kin}}b}\right)^2$$

können wir zu

$$\left(\frac{du}{d\varphi}\right)^2 + u^2 = C^2 \quad (\text{A.15})$$

vereinfachen, woraus wir durch Trennung der Variablen

$$d\varphi = \pm \frac{du}{\sqrt{C^2 - u^2}} = \pm \frac{du}{C\sqrt{1 - \frac{u^2}{C^2}}} \quad (\text{A.16})$$

erhalten. Integration ergibt

$$\varphi = \arcsin \frac{u}{C} + \varphi_0 = -\arccos \frac{u}{C} + \varphi_0 \quad (\text{A.17})$$

oder

$$\cos(\varphi_0 - \varphi) = \frac{u}{C} . \quad (\text{A.18})$$

Wir legen nun die Winkelmessung so fest, dass durch $u = C$ der Winkelnullpunkt $\varphi = 0$ bestimmt ist. Dann geht (A.18) unter Benutzung der obigen Substitutionen in

$$\cos(\varphi) = \frac{\frac{b}{\rho} + \frac{k}{2E_{\text{kin}}b}}{\sqrt{1 + \left(\frac{k}{2E_{\text{kin}}b}\right)^2}} \quad (\text{A.19})$$

über. Durch Auflösen nach ρ erhalten wir schließlich die gewünschte Bahnkurve $\rho(\varphi)$ des α -Teilchens

$$\rho = \frac{-\frac{2E_{\text{kin}}b^2}{k}}{1 - \sqrt{1 + \left(\frac{2E_{\text{kin}}b}{k}\right)^2} \cos \varphi} . \quad (\text{A.20})$$

Die Teilchenbahn stellt einen Hyperbelast mit dem Brennpunkt im streuenden Kern und der numerischen Exzentrizität $\varepsilon = \sqrt{1 + \left(\frac{2E_{\text{kin}}b}{k}\right)^2}$ dar.

In Experimenten misst man allerdings nicht die Bahnkurve, sondern den Streuwinkel ϑ . Der Streuwinkel ist durch

$$\vartheta = 180^\circ - \alpha$$

gegeben, wobei α der Schnittwinkel der beiden Asymptoten an die Bahnkurve für $\rho \rightarrow \infty$ ist (siehe Abb. A1). Das heißt

$$\varphi \rightarrow \frac{\alpha}{2} = \frac{\pi - \vartheta}{2} \quad \text{für } \rho \rightarrow \infty . \quad (\text{A.21})$$

Mit der Polargleichung des Hyperbelastes

$$\rho = \frac{-p}{1 - \varepsilon \cos \varphi}$$

erhalten wir für $\rho \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{\rho} = 0 = \frac{1 - \varepsilon \cos(\alpha/2)}{-p} \quad (\text{A.22})$$

oder

$$\frac{1}{\varepsilon} = 0 = \cos \frac{\alpha}{2} = \cos \frac{\pi - \vartheta}{2} = \sin \frac{\vartheta}{2} \quad (\text{A.23})$$

und unter Benutzung der Bahngleichung weiter

$$\left(\frac{2E_{\text{kin}}b}{k}\right)^2 = \frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} - 1 = \frac{1 - \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} = \frac{\cos^2 \frac{\vartheta}{2}}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} = \cot^2 \frac{\vartheta}{2} \quad (\text{A.24})$$

Durch Auflösen nach dem Stoßparameter erhalten wir den Ausdruck

$$b = \frac{k}{2E_{\text{kin}}} \cot \frac{\vartheta}{2} = \frac{k}{\mu v_0^2} \cot \frac{\vartheta}{2} . \quad (\text{A.25})$$

B Differentialoperatoren in krummlinigen Koordinaten

Wir betrachten einen vom Ursprung eines kartesischen Koordinatensystems zum Punkt $P = (u, v, w)$ weisenden Ortsvektor \mathbf{r} , der eine Funktion der drei beliebigen unabhängigen Variablen u, v, w ist (siehe Abb. B2):

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(u, v, w) = x(u, v, w)\hat{\mathbf{i}} + y(u, v, w)\hat{\mathbf{j}} + z(u, v, w)\hat{\mathbf{k}} . \quad (\text{B.1})$$

Hierbei sind $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}$ und $\hat{\mathbf{k}}$ die Einheitsvektoren des kartesischen Koordinatensystems.

Das Linienelement $d\mathbf{r}$ besitzt die Darstellung

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} du + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} dv + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} dw . \quad (\text{B.2})$$

Ist $u = \text{const}$ und $v = \text{const}$, die Koordinate w dagegen variabel, dann beschreibt die Raumkurve $\mathbf{r}_{u,v}(w)$ eine bestimmte Raumkurve. Entsprechendes gilt für die anderen Koordinaten. Wir erhalten also insgesamt drei Raumkurven $\mathbf{r}_{u,v}(w)$, $\mathbf{r}_{u,w}(v)$ und $\mathbf{r}_{v,w}(u)$, die ein räumliches Koordinatennetz bilden.

Wir wollen im Folgenden orthogonale Systeme voraussetzen, für die

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} = 0 . \quad (\text{B.3})$$

Mit diesen Bedingungen können wir drei zueinander orthogonale Einheitsvektoren definieren (siehe Abb. B2):

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u}}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right|} \quad \hat{\mathbf{v}} = \frac{\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right|} \quad \hat{\mathbf{w}} = \frac{\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w}}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} . \quad (\text{B.4})$$

Mit Hilfe dieser Einheitsvektoren können wir das Linienelement $d\mathbf{r}$ schreiben als:

$$d\mathbf{r} = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \hat{\mathbf{u}} du + \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \hat{\mathbf{v}} dv + \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \hat{\mathbf{w}} dw . \quad (\text{B.5})$$

Die durch Gleichung (B.4) festgelegten Einheitsvektoren bilden die Achsen eines orthogonalen Koordinatensystems mit dem Punkt $P = P(u, v, w)$ als Ursprung. Wir können auch einen anderen Punkt $P' = P(u', v', w')$ betrachten. Auch an diesem Punkt bilden die durch (B.4) definierten Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{u}}', \hat{\mathbf{v}}'$ und $\hat{\mathbf{w}}'$ ein orthogonales System, dass aber im Allgemeinen eine andere Orientierung besitzt. Die

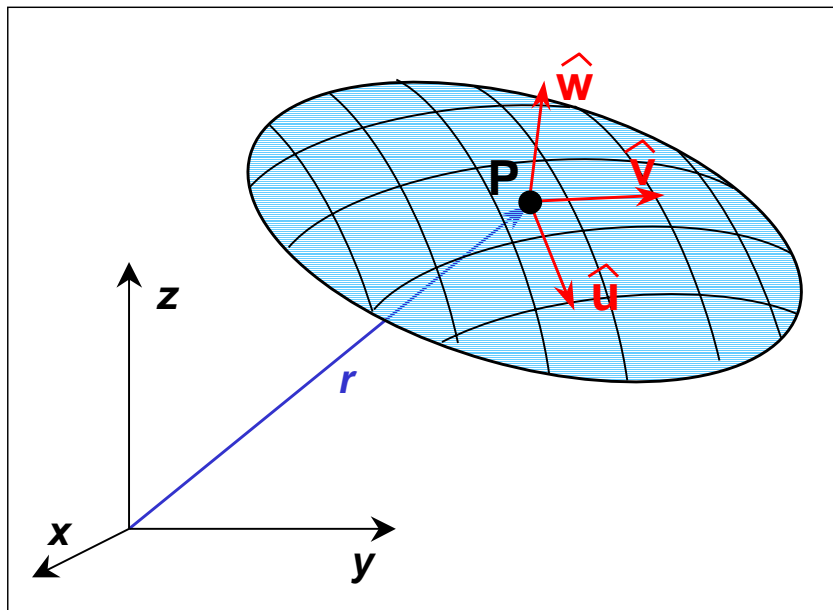


Abbildung B2: Zur Definition von krummlinigen Koordinaten.

orthogonalen Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{u}}$, $\hat{\mathbf{v}}$ und $\hat{\mathbf{w}}$ unterscheiden sich von den Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{i}}$, $\hat{\mathbf{j}}$ und $\hat{\mathbf{k}}$ des kartesischen Koordinatensystems dadurch, dass sie von Ort zu Ort ihre Richtung ändern. Wir nennen sie deshalb *krummlinigen Koordinaten*.

Wir betrachten jetzt ein Vektorfeld $\mathbf{A} = \mathbf{A}(u, v, w)$. Man bezeichnet nun auch in krummlinigen Koordinaten die Projektionen \mathbf{A}_u von \mathbf{A} auf $\hat{\mathbf{u}}$, \mathbf{A}_v von \mathbf{A} auf $\hat{\mathbf{v}}$ und \mathbf{A}_w von \mathbf{A} auf $\hat{\mathbf{w}}$ als die Komponenten von \mathbf{A} und wir können schreiben:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_u + \mathbf{A}_v + \mathbf{A}_w . \quad (\text{B.6})$$

Die Komponenten \mathbf{A}_u , \mathbf{A}_v und \mathbf{A}_w sind dann wie in einem kartesischen Koordinatensystem gegeben durch

$$\mathbf{A}_u = A_u \hat{\mathbf{u}} \quad \mathbf{A}_v = A_v \hat{\mathbf{v}} \quad \mathbf{A}_w = A_w \hat{\mathbf{w}} . \quad (\text{B.7})$$

Die Zahlen A_u , A_v und A_w heißen Koordinaten von \mathbf{A} in Bezug auf die Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{u}}$, $\hat{\mathbf{v}}$ und $\hat{\mathbf{w}}$.

Da (B.6) und (B.7) ganz analog zu den entsprechenden Darstellungen im rechtwinkligen kartesischen Koordinatensystem festgelegt sind, bleiben auch die für das kartesische Koordinatensystem gegebenen Ausdrücke für die skalare und vektorielle Produktbildung in krummlinigen orthogonalen Koordinaten erhalten. Einzige Voraussetzung ist hierbei, dass die Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{u}}$, $\hat{\mathbf{v}}$ und $\hat{\mathbf{w}}$ ein Rechtssystem

$$\hat{\mathbf{u}} \times \hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{w}} \quad \hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{w}} = \hat{\mathbf{u}} \quad \hat{\mathbf{w}} \times \hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{v}} \quad (\text{B.8})$$

bilden. Wir können also schreiben:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_u B_u + A_v B_v + A_w B_w \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = (A_v B_w - A_w B_v) \hat{\mathbf{u}} + (A_w B_u - A_u B_w) \hat{\mathbf{v}} + (A_u B_v - A_v B_u) \hat{\mathbf{w}} . \quad (\text{B.10})$$

Wir können damit das vollständige Differential der Funktion $f = f(u, v, w)$ schreiben als

$$df = \frac{\partial f}{\partial u} du + \frac{\partial f}{\partial v} dv + \frac{\partial f}{\partial w} dw = \nabla f \cdot d\mathbf{r} . \quad (\text{B.11})$$

Mit Hilfe von (B.7) können wir ∇f darstellen als

$$\nabla f = \nabla_u f \hat{\mathbf{u}} + \nabla_v f \hat{\mathbf{v}} + \nabla_w f \hat{\mathbf{w}} , \quad (\text{B.12})$$

woraus weiter mit (B.12), (B.5) und (B.9)

$$\frac{\partial f}{\partial u} du + \frac{\partial f}{\partial v} dv + \frac{\partial f}{\partial w} dw = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \nabla_u f du + \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \nabla_v f dv + \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \nabla_w f dw \quad (\text{B.13})$$

folgt. Diese Gleichung ist für beliebige du , dv und dw nur dann erfüllt, wenn der Gradient die Koordinaten

$$\nabla_u f = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right|} \frac{\partial f}{\partial u} \quad \nabla_v f = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right|} \frac{\partial f}{\partial v} \quad \nabla_w f = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} \frac{\partial f}{\partial w} \quad (\text{B.14})$$

hat.

Die Vektordifferentialoperation Divergenz

Zur Herleitung der Vektordifferentialoperation Divergenz in krummlinigen Koordinaten betrachten wir ein quaderförmiges Volumenelement ΔV mit den Kantenlängen Δu , Δv und Δw . Sein Volumen beträgt

$$\Delta V = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \Delta u \cdot \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \Delta v \cdot \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \Delta w . \quad (\text{B.15})$$

Seine Seitenflächen senkrecht zu den Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{u}}$, $\hat{\mathbf{v}}$ und $\hat{\mathbf{w}}$ sind gegeben durch

$$\Delta F_u = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \Delta v \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \Delta w \quad (\text{B.16})$$

$$\Delta F_v = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \Delta u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \Delta w \quad (\text{B.17})$$

$$\Delta F_w = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \Delta u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \Delta v \quad (\text{B.18})$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes \mathbf{A} ist nun definiert als die Volumenableitung

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\int_{S_{\Delta V}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{F}}{\Delta V} \quad (\text{B.19})$$

Hierbei ist $S_{\Delta V}$ die Oberfläche des Volumenelements ΔV und $d\mathbf{F}$ ein Vektor, der senkrecht auf dem Oberflächenelement steht und dessen Betrag gleich dem Flächeninhalt des Oberflächenelements ist. Wir können somit schreiben:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} & \left[\left(\left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)_{u+\Delta u} - \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)_u \right) dv dw \right. \\ & \left(\left(A_v \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)_{v+\Delta v} - \left(A_v \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)_v \right) du dw \\ & \left. \left(\left(A_w \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \right)_{w+\Delta w} - \left(A_w \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \right)_w \right) du dv \right] \quad (\text{B.20}) \end{aligned}$$

Benutzen wir

$$\begin{aligned} \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)_{u+\Delta u} &= \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)_u + \frac{\partial \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)}{\partial u} \Delta u + O(\Delta u)^n \\ &\text{mit } n = 2, 3, 4, \dots \quad (\text{B.21}) \end{aligned}$$

und den Ausdruck (B.15) für das Volumenelement ΔV , so erhalten wir

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} \\ &\cdot \left[\frac{\partial \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)}{\partial u} + \frac{\partial \left(A_v \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)}{\partial v} + \frac{\partial \left(A_w \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \right)}{\partial w} \right] \quad (\text{B.22}) \end{aligned}$$

Die Vektordifferentialoperation Rotation

Die Berechnung der Rotorkoordinaten auf krummlinigen Koordinaten lässt sich analog zum vorangegangenen Abschnitt durchführen. Die Rotation eines Vektorfeldes, $\nabla \times \mathbf{A}$, ist ein Vektor, der durch die mit dem umgekehrten Vorzeichen genommenen Volumenableitung dieses Feldes dargestellt wird:

$$\nabla \times \mathbf{A} = - \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\int_{S_{\Delta V}} \mathbf{A} \times d\mathbf{F}}{\Delta V} = + \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\int_{S_{\Delta V}} d\mathbf{F} \times \mathbf{A}}{\Delta V} . \quad (\text{B.23})$$

Wir können somit schreiben

$$\nabla_u \times \mathbf{A} = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} \left[\frac{\partial \left(A_w \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)}{\partial v} - \frac{\partial \left(A_v \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \right)}{\partial w} \right] \quad (\text{B.24})$$

$$\nabla_v \times \mathbf{A} = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} \left[\frac{\partial \left(A_w \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \right)}{\partial w} - \frac{\partial \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \right)}{\partial w} \right] \quad (\text{B.25})$$

$$\nabla_w \times \mathbf{A} = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right|} \left[\frac{\partial \left(A_v \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \right)}{\partial u} - \frac{\partial \left(A_u \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \right)}{\partial v} \right] . \quad (\text{B.26})$$

Der ∇^2 Operator

Mit $\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$ erhalten wir aus (B.14) und (B.22)

$$\nabla^2 f = \frac{1}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} \cdot \left[\frac{\partial \left(\frac{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \left| \frac{\partial f}{\partial u} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right|} \right)}{\partial u} + \frac{\partial \left(\frac{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right| \left| \frac{\partial f}{\partial v} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right|} \right)}{\partial v} + \frac{\partial \left(\frac{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v} \right| \left| \frac{\partial f}{\partial w} \right|}{\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial w} \right|} \right)}{\partial w} \right] . \quad (\text{B.27})$$

Anwendung auf Kugelkoordinaten

Der Ortsvektor nimmt für Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) die Form

$$\mathbf{r} = r \sin \vartheta \cos \varphi \hat{\mathbf{i}} + r \sin \vartheta \sin \varphi \hat{\mathbf{j}} + r \cos \vartheta \hat{\mathbf{k}} \quad (\text{B.28})$$

an. Damit erhalten wir

$$\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} \right| = 1 \quad (\text{B.29})$$

$$\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \vartheta} \right| = r \quad (\text{B.30})$$

$$\left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \varphi} \right| = r \sin \vartheta \quad (\text{B.31})$$

und demnach aus den oben abgeleiteten Beziehungen für die verschiedenen Differentialoperatoren die Ausdrücke

$$\nabla_r f = \frac{\partial f}{\partial r} \quad \nabla_{\vartheta} f = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \quad \nabla_{\varphi} = \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \quad (\text{B.32})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 A_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial(\sin \vartheta A_{\vartheta})}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial A_{\varphi}}{\partial \varphi} \quad (\text{B.33})$$

$$\nabla_r \times \mathbf{A} = \frac{1}{r \sin \vartheta} \left[\frac{\partial(\sin \vartheta A_{\varphi})}{\partial \vartheta} - \frac{\partial A_{\vartheta}}{\partial \varphi} \right] \quad (\text{B.34})$$

$$\nabla_{\vartheta} \times \mathbf{A} = \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial A_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial(r A_{\varphi})}{\partial r} \right] \quad (\text{B.35})$$

$$\nabla_{\varphi} \times \mathbf{A} = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial(r A_{\vartheta})}{\partial r} - \frac{\partial A_r}{\partial \vartheta} \right] \quad (\text{B.36})$$

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} . \quad (\text{B.37})$$

C Darstellung von \widehat{L}_i und \widehat{L}^2 in Kugelkoordinaten

In kartesischen Koordinaten gilt für die Komponenten des Drehimpulsoperators

$$\widehat{L}_x = i\hbar \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{C.1})$$

$$\widehat{L}_y = i\hbar \left(-\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{C.2})$$

$$\widehat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} . \quad (\text{C.3})$$

Damit ist auch der Operator $\widehat{L}^2 = \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2$ bekannt.

Zwischen den kartesischen Koordinaten (x, y, z) und den Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) besteht der Zusammenhang

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (\text{C.4})$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi \quad \vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (\text{C.5})$$

$$z = r \cos \vartheta \quad \varphi = \arctan \frac{y}{x} . \quad (\text{C.6})$$

Wir betrachten zunächst \widehat{J}_z . Mit

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{C.7})$$

können wir die Beziehungen

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \vartheta \cos \varphi \quad (\text{C.8})$$

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial x} = \frac{xz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \quad (\text{C.9})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \quad (\text{C.10})$$

gewinnen. Setzen wir diese Beziehungen in (C.7) ein, so erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} . \quad (\text{C.11})$$

Analog erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} . \quad (\text{C.12})$$

Setzen wir (C.11) und (C.12) sowie (C.4) bis (C.6) in (C.3) ein, so folgt

$$\widehat{L}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{C.13})$$

und analog

$$\widehat{L}_x = i\hbar \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{C.14})$$

$$\widehat{L}_y = i\hbar \left(-\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) . \quad (\text{C.15})$$

Für $\widehat{L}^2 = \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2$ erhalten wir nach einigen elementaren Umformungen

$$\widehat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] . \quad (\text{C.16})$$

D Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten

Wir wollen den Kommutator $[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y]$ der Drehimpulsoperatoren (3.3.37) bis (3.3.39) bestimmt werden. Nach Definition (1.3.59) gilt

$$[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = -[\widehat{L}_y, \widehat{L}_x] = \widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_x \quad (\text{D.1})$$

und damit unter Benutzung von (3.3.37) bis (3.3.39)

$$[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = \widehat{L}_x (\widehat{z}\widehat{p}_x - \widehat{x}\widehat{p}_z) - (\widehat{z}\widehat{p}_x - \widehat{x}\widehat{p}_z) \widehat{L}_x \quad (\text{D.2})$$

Für einen beliebigen Operator \widehat{A} , der eine Funktion der Impulsoperatoren \widehat{p}_i und der Ortsoperatoren \widehat{q}_i ist, können wir schreiben:

$$\widehat{p}_i \widehat{A}(\widehat{p}_i, \widehat{q}_i) \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \widehat{A}(\widehat{p}_i, \widehat{q}_i) \Psi = -i\hbar \frac{\partial \widehat{A}}{\partial q_i} \Psi + \widehat{A}(\widehat{p}_i, \widehat{q}_i) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial q_i} \Psi . \quad (\text{D.3})$$

Mit der Definition des Kommutator folgt daraus

$$\frac{\partial \widehat{A}}{\partial q_i} = \frac{\partial \widehat{A}}{\partial \widehat{q}_i} = \frac{i}{\hbar} (\widehat{p}_i \widehat{A} - \widehat{A} \widehat{p}_i) = \frac{i}{\hbar} [\widehat{p}_i, \widehat{A}] . \quad (\text{D.4})$$

Analog gilt

$$\frac{\partial \widehat{A}}{\partial \widehat{p}_i} = \frac{i}{\hbar} (\widehat{A} \widehat{q}_i - \widehat{q}_i \widehat{A}) = \frac{i}{\hbar} [\widehat{A}, \widehat{q}_i] . \quad (\text{D.5})$$

Da \widehat{p}_x nicht von \widehat{z} und \widehat{L}_x weder von \widehat{x} noch von \widehat{p}_x abhängt, folgt mit (D.4) und (D.5)

$$\widehat{p}_x \widehat{z} - \widehat{z} \widehat{p}_x = 0 \quad \widehat{L}_x \widehat{p}_x - \widehat{p}_x \widehat{L}_x = 0 \quad \widehat{L}_x \widehat{x} - \widehat{x} \widehat{L}_x = 0 \quad (\text{D.6})$$

und damit für (D.2)

$$[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = \widehat{p}_x (\widehat{L}_x \widehat{z} - \widehat{z} \widehat{L}_x) - x (\widehat{L}_x \widehat{p}_z - \widehat{p}_z \widehat{L}_x) \widehat{L}_x \quad (\text{D.7})$$

Weiter gewinnen wir durch Einsetzen von \widehat{L}_x in (D.4) und (D.5) die Beziehungen

$$\widehat{p}_z \widehat{L}_x - \widehat{L}_x \widehat{p}_z = i\hbar \widehat{p}_y \quad \widehat{L}_x \widehat{z} - \widehat{z} \widehat{L}_x = i\hbar \widehat{y}, \quad (\text{D.8})$$

womit (D.7) unter Benutzung von (3.3.37) bis (3.3.39) in

$$[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = -i\hbar (\widehat{p}_x \widehat{y} - \widehat{x} \widehat{p}_y) = i\hbar \widehat{L}_z \quad (\text{D.9})$$

übergeht. Analog folgen die Beziehungen

$$[\widehat{L}_y, \widehat{L}_z] = i\hbar \widehat{L}_x \quad (\text{D.10})$$

$$[\widehat{L}_z, \widehat{L}_x] = i\hbar \widehat{L}_y. \quad (\text{D.11})$$

Wir wollen nun den Kommutator $[\widehat{L}_z, \widehat{L}^2]$ berechnen. Mit der Beziehung $\widehat{L}^2 = \widehat{L}_x^2 + \widehat{L}_y^2 + \widehat{L}_z^2$ gilt:

$$\begin{aligned} [\widehat{L}_z, \widehat{L}^2] &= [\widehat{L}_z, \widehat{L}_x^2] + [\widehat{L}_z, \widehat{L}_y^2] + [\widehat{L}_z, \widehat{L}_z^2] \\ &= [\widehat{L}_z, \widehat{L}_x] \widehat{L}_x + \widehat{L}_x [\widehat{L}_z, \widehat{L}_x] + [\widehat{L}_z, \widehat{L}_y] \widehat{L}_y + \widehat{L}_y [\widehat{L}_z, \widehat{L}_y] \\ &= i\hbar [\widehat{L}_y \widehat{L}_x + \widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_x \widehat{L}_y - \widehat{L}_y \widehat{L}_x] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Analog erhalten wir

$$[\widehat{L}_x, \widehat{L}^2] = 0 \quad (\text{D.13})$$

$$[\widehat{L}_y, \widehat{L}^2] = 0. \quad (\text{D.14})$$

E Effektives Potenzial beim Heliumatom

Das Potenzial $\Phi(r_1)$ für das erste Elektron eines Heliumatoms ist durch die Abschirmung des zweiten Elektrons gegeben durch

$$\Phi(r_1) = -\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int_{\vartheta} \int_{\varphi} \int_{r_2} \frac{\Psi_2^* \Psi_2}{r_{12}} dV_2 . \quad (\text{E.1})$$

Zur Lösung des Integrals benutzen wir (siehe Abb. E3)

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \vartheta , \quad (\text{E.2})$$

woraus

$$r_{12} dr_{12} = r_1 r_2 \sin \vartheta d\vartheta \quad (\text{E.3})$$

folgt. Weiterhin gilt

$$dV_2 = r_2^2 dr_2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi , \quad (\text{E.4})$$

womit wir

$$\frac{dV_2}{r_{12}} = \frac{r_2 dr_2 d\varphi dr_{12}}{r_1} \quad (\text{E.5})$$

erhalten. Wir sehen, dass wir bei der Integration das Integral über $\sin \vartheta d\vartheta$ in ein Integral über dr_{12} ersetzen können. Für die Wellenfunktion des 1s-Zustandes benutzen wir

$$\Psi_{1s} = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi} a_B^{3/2}} \exp(-Zr_2/a_B) \quad (\text{E.6})$$

mit $Z = 2$. Setzen wir Ψ_{1s} in (E.1) ein, so erhalten wir für das Integral

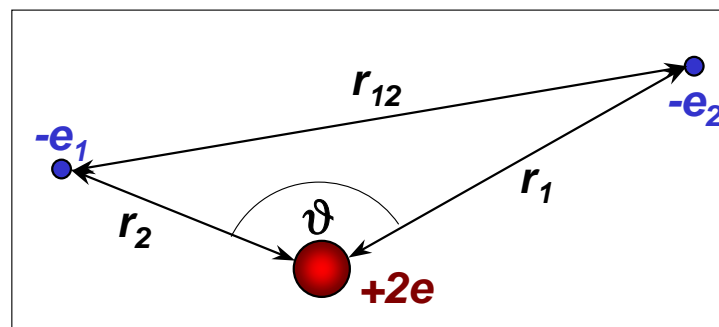


Abbildung E3: Zur Definition der Größen beim Heliumatom.

$$Int = \int \frac{|\Psi_{1s}|^2}{r_{12}} r_2^2 dr_2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \int \frac{|\Psi_{1s}|^2}{r_1} r_2 dr_2 dr_{12} d\varphi . \quad (E.7)$$

Mit $\int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi$ erhalten wir

$$Int = \frac{2Z^3}{a_B^3} \left[\int_{r_2=0}^{r_1} \frac{\exp(-Z \cdot 2r_2/a_B) r_2}{r_1} dr_2 \int_{r_{12}=r_1-r_2}^{r_1+r_2} dr_{12} + \int_{r_2=r_1}^{\infty} \frac{\exp(-Z \cdot 2r_2/a_B) r_2}{r_1} dr_2 \int_{r_{12}=r_2-r_1}^{r_2+r_1} dr_{12} \right] , \quad (E.8)$$

da für die Integrationsgrenze $\vartheta = 0$

$$r_{12} = \begin{cases} r_1 - r_2 & \text{für } r_2 < r_1 \\ r_2 - r_1 & \text{für } r_2 > r_1 \end{cases} \quad (E.9)$$

gilt und für $\vartheta = \pi$ die Beziehung $r_{12} = r_2 + r_1$ folgt. Ausführen der Integration und Addition der beiden Summanden in (E.8) ergibt

$$\Phi(r_1) = -\frac{(Z-1)e}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{a_B} + \frac{1}{r_1} \right) \exp\left(\frac{-2Zr_1}{a_B} \right) , \quad (E.10)$$

wobei wir für Helium $Z = 2$ setzen müssen.