Kap. V   Zentral potential und Drehimpuls.

1) Drehimpuls, Eigenwertproblem.

2) Ortsraumdarstellung der Drehimpuls & Egenfunktionen

3) Zentralpotential, gebundene Zustände.

4) Wasserstoff Atom.

5) Magnetisches Moment.

Kapitel V

Drehimpuls

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad , \quad \left[\hat{p}_i, \hat{x}_j\right] = \frac{\hbar}{i}\delta_{i,j} \quad , \quad \hat{\mathbf{L}}^{+} = \hat{\mathbf{L}}$$

Kommutattionsregeln

$$(1)\ \left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon^{i,j,k} \hat{L}_k$$

$$(2)\ \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_j\right] = 0$$

Def:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

Eigenwertproblem. Sei: $|\psi\rangle$ mit $\hat{L}_z|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, $\hat{\mathbf{L}}^2|\psi\rangle = \beta|\psi\rangle$, und $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

Möglich wegen (2) und es gilt: $\lambda \in \mathbb{R}, \quad \beta \geq 0$

Aus Kommutationregeln folgt:

$$(3)\ \hat{L}_z \hat{L}_\pm|\psi\rangle = (\lambda \pm \hbar)\ \hat{L}_\pm|\psi\rangle$$

$$(4)\ \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{L}_\pm|\psi\rangle = \beta\ \hat{L}_\pm|\psi\rangle$$

$$(5)\ \text{Aus}\ \left\|\hat{L}_\pm|\psi\rangle\right\|^2 = \beta - \lambda^2 \mp \lambda > 0$$

$$\text{folgt:}\ \beta \geq \lambda(\lambda \pm \hbar)$$

Ansatz: $\beta = \hbar^2 l(l+1)$ mit $l \geq 0$

und $\lambda = \hbar m$

folgt aus (5) $|m| \leq l$

Note: we are free to choose $l \geq 0$ for the parametrization of β !

Notation:

Eigenzustände von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ werden wir durch $|l,m\rangle$ bezeichnen.

$|\psi\rangle \rightarrow |l,m\rangle$

$$\boxed{\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{L}}^2\,|l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,m\rangle, \qquad \hat{L}_z\,|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle \\
&\langle l,m|l',m'\rangle = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \quad , \qquad |m| \leq l \\
&\hat{L}_+\,|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,|l,m+1\rangle \\
&\hat{L}_-\,|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|l,m-1\rangle
\end{aligned}}$$

Normierungsfaktor folgt aus:

$$\hat{L}_\pm\,|l,m\rangle = \gamma\,|l,m\pm 1\rangle$$

$$\left\|\hat{L}_\pm\,|l,m\rangle\,\right\|^2 = \hbar^2\left[l(l+1)-m(m\pm 1)\right] = \gamma^2$$

Konsequenzen.

$$\hat{L}_+ \left| l,\ m = l \right\rangle = 0, \qquad \hat{L}_- \left| l,\ m = -l \right\rangle = 0$$

$$\hat{L}_- \left| l,\ m = l \right\rangle \sim \left| l, m = l-1 \right\rangle$$

$$\left(\hat{L}_-\right)^n \left| l,\ m = l \right\rangle \sim \left| l, m = l-n \right\rangle$$

Sei $-l+1 > l-n > -l \quad \Rightarrow \quad \hat{L}_- \left| l, m = l-n \right\rangle = 0$ da sonst wäre $|m| = |l-n-1| > l$

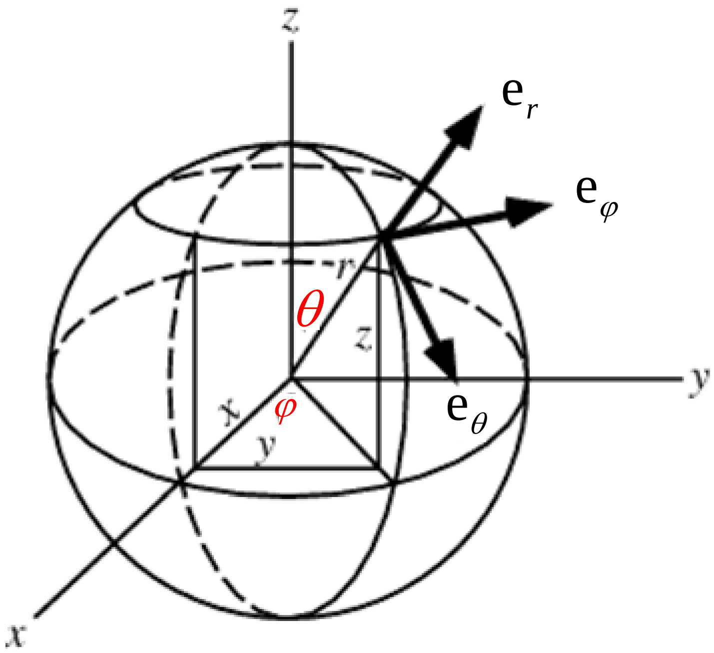
$$\left| l, m = l-n \right\rangle \propto \left| l, m = -l \right\rangle$$

$\Rightarrow \quad l - n = -l \quad \Rightarrow \quad 2l = n,\ \ n \in \mathbb{N}$

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 \ldots\ldots$ Ganzzahlig Orbital Drehimpuls

$l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2} \ldots\ldots$ Halbzahlig. Spin

Ortsraum Darstellung von |l.m> und $\hat{\mathbf{L}}$



$$\mathbf{x} = r(\sin(\theta)\cos(\varphi), \sin(\theta)\sin(\varphi), \cos(\theta))$$

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\Theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \Theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{\sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\mathbf{e}_r = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \Big/ \left|\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r}\right| \quad , \quad \mathbf{e}_\Theta = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta} \Big/ \left|\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \Theta}\right| \quad , \quad \mathbf{e}_\varphi = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \varphi} \Big/ \left|\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \varphi}\right|$$

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{X}} \times \hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \times \nabla = \frac{\hbar}{i}\left[\mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \mathbf{e}_\Theta \frac{1}{\sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right]$$

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

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial \Theta}\left(\sin(\Theta)\frac{\partial}{\partial \Theta}\right) + \frac{1}{\sin(\Theta)^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]$$

Gesucht:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \langle \theta,\varphi | l,m \rangle \quad \text{mit:}$$

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

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

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \langle \theta,\varphi | l,m \rangle = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}(-1)^{(m+|m|)/2} e^{im\varphi} P_{l,|m|}(\cos(\theta))$$

Kugelflächenfunktionen

$$P_{l,|m|}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{l,0}(x)$$

Assoziiertem Legendre Polynome

$$P_{l,0}(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l$$

Legendre Polynome

$$l = 0,1,2,3.... \qquad m = -l, -l+1, ..., l$$

<u>Eigenschaften:.</u>

1) <u>**Orthonormal**</u>

$$\overbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\Theta \sin(\Theta)}^{=\int_S d\Omega} \; Y_{lm}^*(\Theta,\varphi)\; Y_{l'm'}(\Theta,\varphi) = \delta_{l,l'}\,\delta_{m,m'}$$

2) <u>**Vollständig**</u>

$$\forall\; f : S \to \mathbb{C} \quad f(\Theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{l,m} Y_{l,m}(\Theta,\varphi) \quad \text{mit } a_{l,m} = \int_S d\Omega\, Y_{lm}^*(\Theta,\varphi)\; f(\Theta,\varphi)$$

3) $$Y_{l,-m}(\Theta,\varphi) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\Theta,\varphi)$$

4) Eigenfunktion der Parität Operator

$$\overbrace{\mathrm{P}}^{\text{Parität}}\; Y_{l,m}(\Theta,\varphi) = Y_{l,m}(\pi-\Theta,\varphi+\pi) = (-1)^l\, Y_{l,m}(\Theta,\varphi)$$

Beispiele

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,0} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\cos(\theta), \quad Y_{1,1} = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\sin(\theta)\,e^{i\varphi}$$

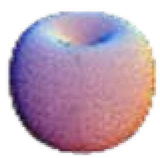
$$Y_{2,0} = \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{16\pi}}\left(3\cos^2(\theta)-1\right), \quad Y_{2,1} = -\frac{\sqrt{15}}{\sqrt{16\pi}}\sin(\theta)\cos(\theta)e^{i\varphi},$$

$$Y_{2,2} = \frac{\sqrt{15}}{\sqrt{32\pi}}\sin^2(\theta)\,e^{i2\varphi}$$

$|Y_0^0(\theta, \phi)|^2$

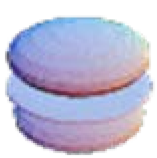
l=0: s-orbital (sharp)

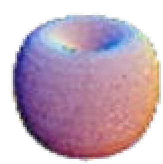
$|Y_1^0(\theta, \phi)|^2$ $|Y_1^1(\theta, \phi)|^2$



l=1:p-orbital (principle)

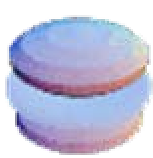
$|Y_2^0(\theta, \phi)|^2$ $|Y_2^1(\theta, \phi)|^2$ $|Y_2^2(\theta, \phi)|^2$

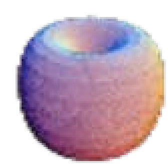




l=2:d-orbital (difuse)

$|Y_3^0(\theta, \phi)|^2$ $|Y_3^1(\theta, \phi)|^2$ $|Y_3^2(\theta, \phi)|^2$ $|Y_3^3(\theta, \phi)|^2$





l=3:f-orbital (fundamental)

Zentral Potential, Gebundene Zustände.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + V(\hat{\mathbf{X}}) \quad , \quad \text{mit} \quad V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|)$$

Symmetrien: $\hat{H}(R\hat{\mathbf{P}}, R\hat{\mathbf{X}}) = \hat{H}(\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}) \quad \text{mit} \quad R \in SO(3)$

Konsequenz: $\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}\right] = 0$ (Siehe Später.) $\Rightarrow$ $\hat{H}, \; \hat{\mathbf{L}}^2, \; \hat{L}_z$ kommutieren miteinander. Stationäre zustände können gleichzeitig Eigenzuständen von $\hat{\mathbf{L}}^2$und $\hat{L}_z$ sein.

Im Kugelkoordinaten ist:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2Mr^2} + V(r) \quad , \quad \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{P}}$$

Ansatz:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{u(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

so dass:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V(r) \right) u(r) = E\, u(r)$$

Radiale Schr. Gl.

Gebundene Zustände.

Wellenfunktion ist Normierbar: 1) $|u(r)| < C/\sqrt{r} \qquad r \to \infty \qquad$ 2) $|\psi(\mathbf{x}=0)| < \infty \Rightarrow u(0)=0$

Für, $\lim_{r\to\infty} V(r) = 0$ und $\lim_{r\to 0}\left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}\right) = \lim_{r\to 0}\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}$ ist

$$\lim_{r\to 0} u(r) \propto \lim_{r\to 0} r^{l+1} \quad \text{und} \quad \lim_{r\to\infty} u(r) \propto \lim_{r\to\infty} e^{-\kappa r}, \qquad \kappa = \sqrt{2M|E|}/\hbar$$

$$E < 0$$

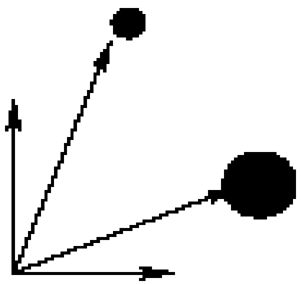
κ : Inverse Länge Skala: $\rho = \kappa r$ ist dimensions- los und radiale Wellenfunktion lautet:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{V(\rho/\kappa)}{|E|} - 1\right) u(\rho/\kappa) = 0$$

This is OK!

Wasserstoff Atom

$\mathbf{x}_e$, Ladung $-|e|$, Masse m_e



$\mathbf{x}_K$, Ladung $Z|e|$, Masse M_K

Im CM System ist

Relativer Impuls   Relativer Ort   Reduziert Masse.

$$H_{CM} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|}, \quad \mathbf{P} = \frac{M_k \mathbf{P}_e - m_e \mathbf{P}_K}{M_K + m_e}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_K, \quad M = \frac{M_k m_e}{M_K + m_e}$$

QM (Korrespondenzprinzip) :

$$\hat{H}_{CM} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|}$$

Ansatz: $\psi(\mathbf{x}) = \frac{u(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

Radiale Schrödinger Gleichung:

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) \tilde{u}(\rho) = 0}$$

Ansatz: $\boxed{\tilde{u}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho)}$

$$\kappa = \sqrt{2M|E|}/\hbar, \quad \rho_0 = \frac{\kappa Z e^2}{|E|}, \quad \rho = \kappa r, \quad \tilde{u}(\rho) = u(\rho/\kappa)$$

Einsetzen ergibt:

$$\left(\rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{\partial}{\partial \rho} + (\rho_0 - 2l - 2) \right) \omega(\rho) = 0$$

Ansatz: $\omega(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \qquad \Rightarrow \qquad a_{k+1} = a_k \frac{2(k+l+1)-\rho_0}{(k+1)(k+2l+2)}$

=> Für $k \to \infty$ ist $a_{k+1}/a_k \cong 2/k$ so dass $a_k \cong 2^{k-1}/(k-1)!$ und $\omega(\rho) \cong e^{2\rho}, \rho \to \infty$

Damit ist $\tilde{u}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho) \cong e^{\rho}, \; \rho \to \infty$ und die Wellenfunktion ist

nicht Normierbar !

Lösung: $\exists \; N = k, \; N \in \mathbb{N}, \;$ so dass $\; 2(N+l+1) - \rho_0 = 0$

Damit ist die reihe abgebrochen
Und die Normierbarkeit vorhanden.

$$\Rightarrow E_n = -\frac{MZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \qquad n = N + l + 1$$

n: Hauptquantenzahl.

Bem.

1) Quantisierung der Energie kommt durch Normierungsbedingung der Wellenfunktion.

2) $N = n - l - 1 \geq 0$ Für gegebenes n ist $l = 0, 1, 2, \cdots, n-1$

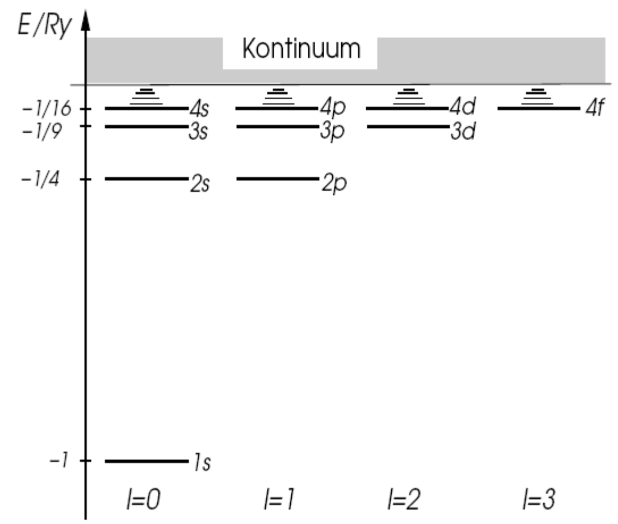
3) Entartung der Energieniveau. $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$

4) Länge Skala: $\kappa_n^{-1} = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2M|E_n|}} = \dfrac{na}{Z}, \quad a = \dfrac{\hbar^2}{Me^2} \cong 0.5 \text{ Angstrom} \ (M \cong m_e)$

a: Bohrsche Radius.

5) $$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}\frac{Me^4}{2\hbar^2}, \quad \frac{Me^4}{2\hbar^2} \approx Ry = 13.6eV$$

$$(M \cong m_e)$$



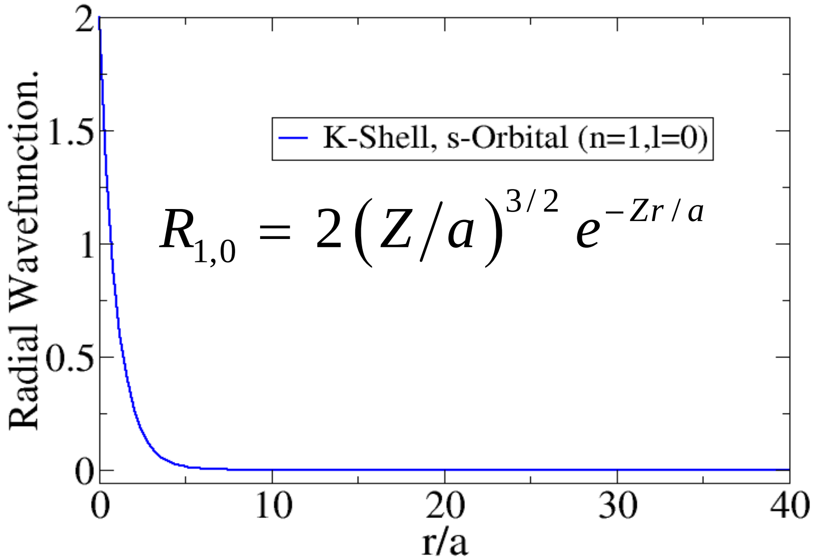
Optische Übergänge $\Delta l = \pm 1$

$\Delta m = 0, \pm 1$

6) Gesamte Wellenfunktion ist: $$\psi_{n,l,m}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

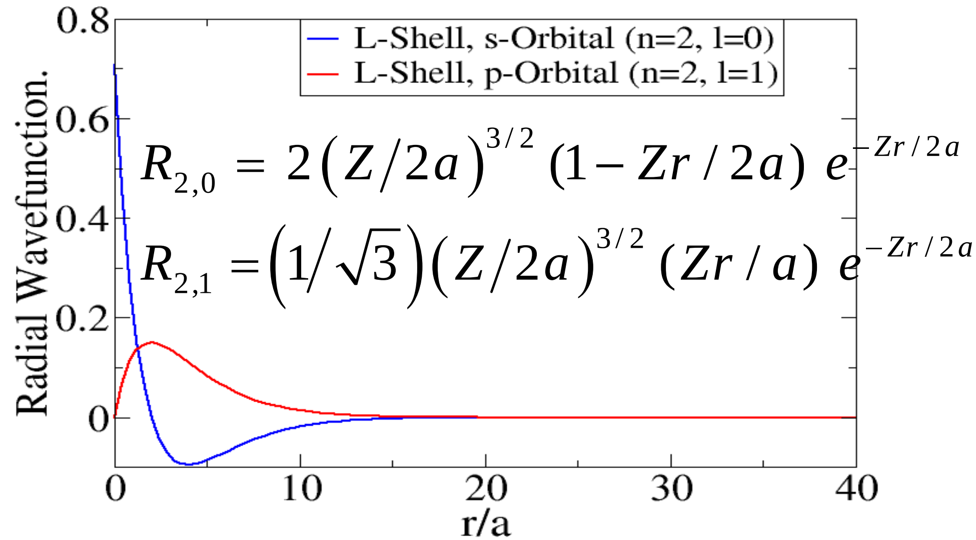
Radiale Wellenfunktionen. $R_{n,l}(r)$

n=1



$$R_{1,0} = 2\left(Z/a\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

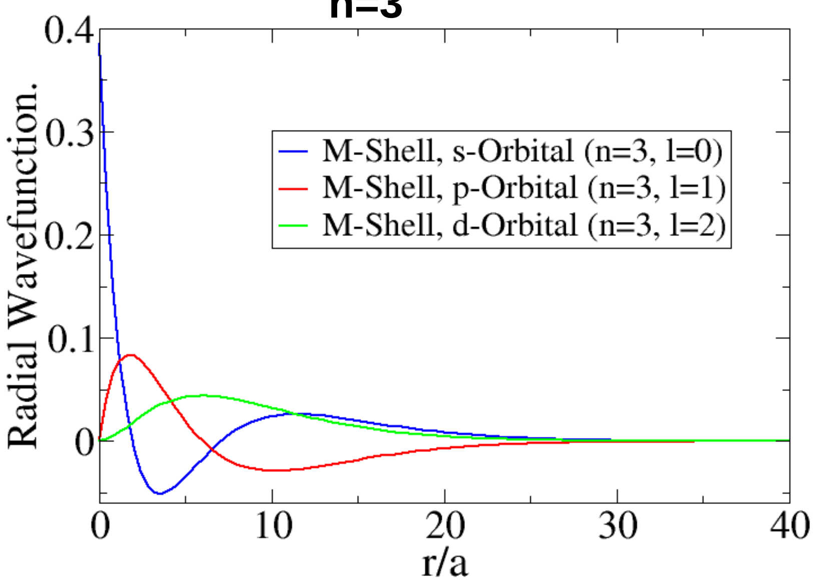
n=2



$$R_{2,0} = 2\left(Z/2a\right)^{3/2} \left(1 - Zr/2a\right) e^{-Zr/2a}$$

$$R_{2,1} = \left(1/\sqrt{3}\right)\left(Z/2a\right)^{3/2} \left(Zr/a\right) e^{-Zr/2a}$$

n=3

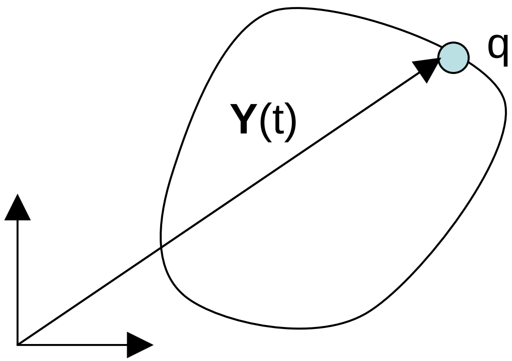


$$R_{3,0} = 2\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3a} + \frac{2Z^2r^2}{27a^2}\right) e^{-Zr/3a}$$

$$R_{3,1} = \frac{4\sqrt{2}}{9}\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a}\left(1 - \frac{Zr}{6a}\right) e^{-Zr/3a}$$

$$R_{3,2} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a}\right)^2 e^{-Zr/3a}$$

Magnetisches Moment (Klassisch).



$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = q\,\dot{\mathbf{Y}}(t)\,\delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{Y}(t)), \qquad \mathbf{m} = \frac{1}{2c}\int d^3\mathbf{x}\;\mathbf{x}\times\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \frac{q}{2mc}\,\mathbf{L}$$

m: magnetisches Moment

Im Magnetfeld, **B** $\quad \mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m}\bullet\mathbf{B}) = -\nabla U, \quad U = -\mathbf{m}\bullet\mathbf{B}$

QM: Teilchen im EM Feld.

(Coulomb Eichung)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{X}})\right)^2 + q\,\phi(\hat{\mathbf{X}}), \quad \mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0,0,B) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\mathbf{x}\times\mathbf{B}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + q\,\phi(\mathbf{x}) - \frac{q}{2mc}\mathbf{B}\bullet\hat{\mathbf{L}} + \frac{q^2}{8mc^2}B^2(x^2+y^2)$$

Für Wasserstoff Atom ist: $\langle \hat{L}_z \rangle \approx \hbar, \quad \langle x^2+y^2 \rangle \approx a^2, \quad q = -e, \quad e > 0$

$$\frac{\text{Diamagnetisch}}{\text{Paramagnetisch}} \approx \frac{eB}{4c}\frac{a^2}{\hbar} \approx 10^{-10}\;B \quad (\text{in Gauss})$$

Diamagnetisches Term
Ist vernachlässigbar.

Zeeman Effekt. (Atom im Magnetfeld)

Unter Vernachlässigung des diamagnetischen Term können wir der Hamilton Operator des Wasserstoffs Atom schreiben als:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + \frac{e}{2Mc} B \hat{L}_z$$

Eigenzustände: $$\psi_{n,l,m}(\mathbf{x}) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

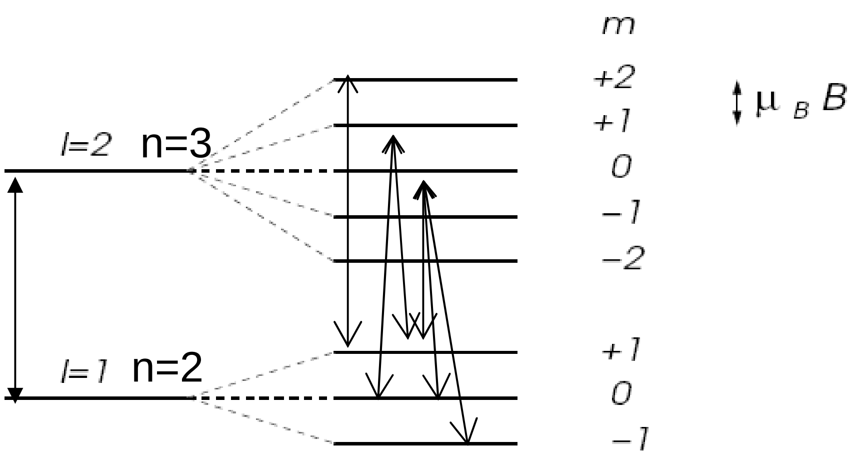
Energie: $$E_{n,m} = -Ry\frac{Z}{n^2} + \frac{eB}{2Mc}\hbar m = -Ry\frac{Z}{n^2} + \mu_B\frac{m_e}{M}Bm, \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

μ_B : **Bohrsche Magneton.**

$\mu_B = 9.274\,009\,49(80) \times 10^{-24}\ \mathrm{J \cdot T^{-1}}\quad (SI)$

$\mu_B = 9.274\,009\,49(80) \times 10^{-21}\ \mathrm{erg \cdot G^{-1}}\quad (\mathrm{cgs})$

=> Im Magnetfeld ist die Entartung teilweise aufgehoben.



Aufspaltung der Energieniveaus ist klein im Vergleich zur Ursprungliche Abstand.

$$\mu_B B \approx 4\ Ry \times 10^{-10} B \quad (\text{In Gauss})$$

Optische Übergänge $\Delta l = \pm 1$

$\Delta m = 0, \pm 1$

Die Änderung der Energie der Atomniveaus im Magnetfeld bedeutet dass, die Zustände ein magnetisches Moment besitzen.

$$\hat{\mathbf{M}} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{B}} = -\frac{e}{2Mc}\hat{\mathbf{L}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\frac{m_e}{M}\hat{\mathbf{L}}$$

Note:

$$d\vec{x} = \left(\frac{d\vec{x}}{dz_i}\, dz_i\right)$$

$$\frac{d}{d\vec{z}} f(\vec{x}) = \frac{d f(\vec{x})}{dx_i}\cdot\frac{dx_i}{d\vec{z}} \Rightarrow \frac{d}{d\vec{z}} = \left(\frac{dx_i}{d\vec{z}}\right)\frac{d}{dx_i}$$

$$A_{i,j} = \frac{dx_i}{dz_j} \Rightarrow \frac{d}{d\vec{z}} = A^T \frac{d}{d\vec{x}} \quad \text{since} \quad \frac{d}{dz_j} = A^T_{j,i}\frac{d}{dx_i} = A_{i,j}\frac{d}{dx_i}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\vec{x}} = \left(A^T\right)^{-1}\frac{d}{d\vec{z}}$$

1,1, 1,2
2,1
3,1

$$A_{i,j} = \left(\frac{d\vec{x}}{dz_j}\right)_i = \alpha_i \left(\vec{e}_j\right)_i \Rightarrow A_{i,j} = \left(\alpha_1 \vec{e}_1,\ \alpha_2 \vec{e}_2,\ \alpha_3 \vec{e}_3\right)$$

$$\Rightarrow A^T = \begin{pmatrix}\alpha_1 \vec{e}_1^{\,T}\\ \alpha_2 \vec{e}_2^{\,T}\\ \alpha_3 \vec{e}_3^{\,T}\end{pmatrix} = \begin{bmatrix}\alpha_1 & & \\ & \alpha_2 & \\ & & \alpha_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\vec{e}_1^{\,T}\\ \vec{e}_2^{\,T}\\ \vec{e}_3^{\,T}\end{bmatrix}$$

$$A^{T^{-1}} = \left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \vec{e}_3\right)\begin{bmatrix}\frac{1}{\alpha_1} & & \\ & \frac{1}{\alpha_2} & \\ & & \frac{1}{\alpha_3}\end{bmatrix} \Rightarrow \frac{d}{d\vec{x}} = \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\right)\begin{pmatrix}\frac{1}{\alpha_1}\partial_1\\ \frac{\partial_2}{\alpha_2}\\ \frac{\partial_3}{\alpha_3}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\alpha_1}\vec{e}_1\frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{1}{\alpha_2}\vec{e}_2\frac{\partial}{\partial z_2} + \frac{1}{\alpha_3}\vec{e}_3\frac{\partial}{\partial z_3}$$

Kugel Koordinaten:

N2

$$\vec{X} = r\,(\sin(\theta)\cos(\varphi),\ \sin(\theta)\sin(\varphi),\ \cos(\theta))$$

$$\frac{d\vec{x}}{dr} = \vec{e}_r$$

$$\frac{d\vec{x}}{d\theta} = r\,(\cos(\theta)\cos(\varphi),\ \cos(\theta)\sin(\varphi),\ -\sin(\theta))$$

$$\left|\frac{dx}{d\theta}\right|^2 = r^2\left(c^2(\theta)\,(c^2(\varphi)+s^2(\varphi)) + s^2(\theta)\right) = r^2$$

$$\Rightarrow \frac{d\vec{x}}{d\theta} = r\,\vec{e}_\theta\ ,\quad (\vec{e}_\theta\cdot\vec{e}_r) = c(\theta)s(\theta)c^2(\varphi) + s(\theta)c(\theta)s^2(\varphi) - c(\theta)s \ldots$$

$$= 0\ ✓$$

$$\frac{d\vec{x}}{d\varphi} = r\,(-\sin(\theta)\sin(\varphi),\ \sin(\theta)\cos(\varphi),\ 0)$$

$$\left|\frac{d\vec{x}}{d\varphi}\right|^2 = r^2\left(\sin^2(\theta)\,(s^2(\varphi)+c^2(\varphi))\right) = r^2\sin^2(\theta)$$

$$\Rightarrow \frac{d\vec{x}}{d\varphi} = r\sin(\theta)\cdot\underbrace{(-\sin(\varphi),\ \cos(\varphi),\ 0)}_{=\vec{e}_\varphi}$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\quad ✓$$

$$\vec{e}_r = (s(\theta)c(\varphi),\ \sin(\theta)s(\varphi),\ \cos(\theta))$$

$$\vec{e}_\theta = (c(\theta)c(\varphi),\ c(\theta)s(\varphi),\ -\sin(\theta))$$

$$\vec{e}_\varphi = (-\sin(\varphi),\ \cos(\varphi),\ 0)$$

$$\ulcorner\ \hat{\vec{p}}^{\,2} = -\hbar^2 \left[\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \hat{\vec{I}} \right] \left[\vec{e}_r \partial_r + \frac{1}{r} \hat{\vec{I}} \right],$$

$$\hat{\vec{I}} = \left(\vec{e}_\theta \partial_\theta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin(\theta)} \partial_\varphi \right), \quad \vec{e}_r \cdot \vec{I} = 0,$$

$$\hat{\vec{p}}^{\,2} = -\hbar^2 \Big[\overbrace{\vec{e}_r \partial_r (\vec{e}_r \partial_r)}^{\mathrm{I}} + \overbrace{\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r} \hat{\vec{I}}\right)}^{\mathrm{II}} + \overbrace{\frac{1}{r} \hat{\vec{I}} \cdot \vec{e}_r \partial_r}^{\mathrm{III}}$$

$$+ \overbrace{\frac{1}{r^2} \hat{\vec{I}}^{\,2}}^{\mathrm{IV}} \Big]$$

$$\mathrm{I} := \partial_r^2 \quad da \quad \partial_r \vec{e}_r = 0, \quad \vec{e}_r \cdot \vec{e}_r = 1$$

$$\mathrm{II} := \vec{e}_r \left(-\frac{1}{r^2} \hat{\vec{I}} + \frac{1}{r} \underbrace{(\partial_r \hat{\vec{I}})}_{=0} + \frac{1}{r} \hat{\vec{I}} \partial_r \right) = 0 \quad da \quad \vec{e}_r \cdot \hat{\vec{I}} = 0$$

$$\mathrm{III}: \quad \hat{\vec{I}} \cdot \vec{e}_r = \left(\vec{e}_\theta \partial_\theta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin(\theta)} \partial_\varphi \right) \cdot \vec{e}_r \quad = \left[\begin{array}{l} \partial_\theta \vec{e}_r = \vec{e}_\theta \\ \partial_\varphi \vec{e}_r = s(\theta) \vec{e}_\varphi \end{array} \right]$$

$$= 2 + \overbrace{\vec{e}_r \cdot \hat{\vec{I}}}^{\equiv 0} = 2.$$

$$\mathrm{IV} = \hat{\vec{I}}^{\,2} = \left(\vec{e}_\theta \partial_\theta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin(\theta)} \partial_\varphi \right)^2 =$$

$$= \vec{e}_\theta \partial_\theta \cdot \vec{e}_\theta \partial_\theta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{s(\theta)} \partial_\varphi \cdot \vec{e}_\varphi \frac{1}{s(\theta)} \partial_\varphi + \overbrace{\vec{e}_\theta \partial_\theta \vec{e}_\varphi}^{\equiv 0} \frac{1}{\sin\theta} \partial_\varphi$$

$$+ \vec{e}_\varphi \frac{1}{\sin(\theta)} \partial_\varphi \vec{e}_\theta \partial_\theta = \ulcorner\ \partial_\theta \vec{e}_\theta = -\vec{e}_r, \quad \partial_\varphi \vec{e}_\theta = c(\theta) \vec{e}_\varphi \ \lrcorner$$

$$= \partial_\theta^2 + \frac{1}{s^2(\theta)} \partial_\varphi^2 + \frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)} \partial_\theta = \frac{1}{\sin(\theta)} \partial_\theta \left(\sin(\theta) \partial_\theta \right)$$

$$+ \frac{1}{s^2(\theta)} \partial_\varphi^2 = -\frac{1}{\hbar^2} \hat{\vec{L}}^{\,2} \quad \Rightarrow$$

$$\hat{\vec{p}}^{\,2} = -\hbar^2 \left[\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right] + \frac{\hat{\vec{L}}^{\,2}}{r^2} = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{\hat{\vec{L}}^{\,2}}{r^2} \ \lrcorner$$