6. Teilchen im Zentralpotential

6.1. Der Hamiltonoperator in Polarkoordinaten

6.1.1. Umformungen

• Schreibe $H = \frac{\underline{p}^2}{2m} + V(r)$ (6.1)

um in Polarkoordinaten unter Verwendung des Drehimpuls-operators $\underline{\ell}$. Es gilt (nachrechnen):

$$\underline{\ell}^2 = \underline{r}^2 \underline{p}^2 - (\underline{r}\cdot\underline{p})^2 + i\hbar\, \underline{r}\cdot\underline{p} \qquad (6.2)$$

bei Beachtung der Vertauschungsregeln (letzter Term).

• Schreibe damit

$$\underline{p}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \right\} + \frac{1}{r^2}\underline{\ell}^2 =$$

$$= p_r^2 + \frac{1}{r^2}\underline{\ell}^2 \qquad (6.2)$$

6.1.2. Zeitunabhängige Schrödingergleichung

• (6.2) in (6.1):

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\underline{\ell}^2}{2mr^2} + V(r) \right\} \psi(r,\vartheta,\varphi) = E\,\psi(r,\vartheta,\varphi) \quad (6.3)$$

• NB! $[\ell_z, H] = 0$, $[\underline{\ell}^2, H] = 0$ aus (5.9)
d.h. $H, \underline{\ell}^2, \ell_z$ gemeinsam diagonalisierbar!

6.2. Separationsansatz und Radialgleichung

6.2.1. Ansatz

• Die Eigenfunktionen zu $\underline{\ell}^2$ sind bekannt, schreibe daher:

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) =: R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad (6.4)$$

- Folgt aus (6.3) eine Eigenwertgleichung für $R(r)$:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right\} R(r) = E\,R(r) \quad (6.5)$$

- (6.5) kann durch die Substitution

$$R(r) =: \frac{u(r)}{r} \quad (6.6)$$

in eine eindimensionale Schrödingergleichung umgewandelt werden.

- Mit $\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) R(r) = \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\right)^2 \frac{u}{r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} u \quad (6.7)$

folgt:

$$\boxed{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right\} u(r) = E\,u(r)} \quad (6.8)$$

- Effektives Potential:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (6.9)$$

- Rand- und Normierungsbedingungen:

i) Aus $\lim_{\substack{r\to\infty \\ r\to 0}} r\,\psi(\underline{r}) = 0$ (Hermitizität von p_r)

folgt $\lim_{\substack{r\to\infty \\ r\to 0}} u(\underline{r}) = 0 \quad (6.10)$

ii) $\int d^3\underline{r}\, |\varphi(\underline{r})|^2 = \int_0^\infty dr\, r^2 \frac{|u(r)|^2}{r^2} < \infty$

6.2.2. Bindungszustände in drei Dimensionen

a) Grenzübergang $r \to 0$

- Coulomb- und Kastenpotential, E, werden für $r \to 0$ vom Zentrifugalterm dominiert. (6.8) geht über in

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right\} u(r) = 0 \qquad (6.11)$$

- Allgemeine Lösung:

$$u(r) = A r^{\ell+1} + B r^{-\ell}, \quad \ell = 0, 1, \ldots \qquad (6.12)$$

wobei wegen (6.10) $B=0$ sein muss.

- Naheliegende Verbesserung: Potenzreihenansatz

$$u(r) = r^{l+1} (a_0 + a_1 r + \ldots) \qquad (6.13)$$

b) Grenzübergang $r \to \infty$

- Annahme: $V(r \to \infty) \to 0$, dann auch $V_{eff} \to 0$.
  (6.8) geht über in

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} u = E u$$

- $E<0$: $u(r) = C e^{-\varkappa r}$, $\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(-E)}$ (6.14)

- Einführung der dimensionslosen Variablen $\varrho := \varkappa r$ vereinfacht (6.8) zu

$$\left\{ \frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} - \frac{V(\varrho/\varkappa)}{|E|} - 1 \right\} \tilde{u}(\varrho) = 0 \qquad (6.15)$$

mit $\tilde{u}(\varrho) := u(r)$ (6.16)

6.3. Elektron im Coulombpotential von Z Protonen

6.3.1. Gleichung

$$V(r) = -\frac{e_0^2 Z}{r},$$

- Definiere $\frac{V}{|E|} =: \frac{\rho_0}{\rho}$ mit

$$\rho_0 = \frac{e_0^2 Z \varkappa}{|E|} = \sqrt{\frac{2m}{|E|}}\,\frac{Z e_0^2}{\hbar} \qquad (6.17)$$

- Folgt (6.15):

$$\left\{\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right\} \tilde{u}(\rho) = 0 \qquad (6.18)$$

- Substitution gemäß dem asymptotischen Verhalten (6.13) und (6.14):

$$\tilde{u}(\rho) =: \rho^{l+1} e^{-\rho}\, \tilde{w}(\rho) \qquad (6.19)$$

führt zu (nachrechnen):

$$\rho \frac{d^2 \tilde{w}}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{d\tilde{w}}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]\,\tilde{w} = 0 \qquad (6.20)$$

- Potenzreihenansatz

$$\tilde{w}(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \qquad (6.21)$$

- Abbruch der Reihe notwendig, sonst $\tilde{u}(\rho) \overset{(6.19)}{\propto} e^{\rho}$

6.3.2 Abbruchbedingung und Spektrum

- (6.21) in (6.20): letzter Potenz N

$$a_{N+1} = a_{N+2} = \cdots = 0 \iff$$

$$\rho_0 = 2(N+l+1), \quad N = 0, 1, 2, \ldots \qquad (6.22)$$

N: „Radiale Quantenzahl"

- Folgen mit (6.17) als Energieeigenwerte

$$E = -\frac{2mZ^2e_0^4}{\hbar^2 \beta_0^2} = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2(N+l+1)} \qquad (6.23)$$

- Definiere die „Hauptquantenzahl"

$$n := N+l+1 \qquad (6.24)$$

- Folgt:

$$E_n = -\frac{mZ^2e_0^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1,2,\ldots \qquad (6.25)$$

$$\overset{(1.62)}{=} -\frac{Z^2(h)R_H}{n^2}, \quad (h)R_H \approx 13{,}6\,eV = \frac{me_0^4}{2\hbar^2}$$

- Entartung:
  - n gegeben, $l = n-N+1 = 0,1,2,\ldots\; n-1$ möglich
  - Zu jedem l sind $m = -l, -l+1, \ldots\; +l$, d.h. $(2l+1)$ Werte möglich.
  - Also Gesamtentartung:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\,\frac{n(n-1)}{2}+n = n^2, \quad \text{mit Spin } 2n^2 \qquad (6.26)$$

<u>Übersicht (6.27)</u>

$n=1$ $\quad l=0$ (s) $\quad m=0$ $\quad E_1$

$n=2$ $\quad l=0$ (s) $\quad m=0$
$\quad\quad\;\; l=1$ (p) $\quad m=-1,0,+1$ $\quad \Big\} E_2$

$n=3$ $\quad l=0$ (s) $\quad m=0$
$\quad\quad\;\; l=1$ (p) $\quad m=-1,0,+1$
$\quad\quad\;\; l=2$ (d) $\quad m=-2,-1,0,+1,+2$ $\quad \Big\} E_3$

6.3.3 Laguerrepolynome

• 2: (6.20) mit $\underset{(6.24)}{\overset{(6.17)}{\rho_0 = 2n}}$, $x = 2\rho$, $w(x) := \tilde{w}(\rho)$ (6.27)

$$x\, w''(x) + [(2l+1) + 1 - x]\, w'(x) + [(n+l) - (2l+1)]\, w = 0 \quad (6.28)$$

„Laguerre differenzialgleichung", gewöhnlich geschrieben als

$$x\, L_r^{s\,''} + (s+1-x)\, L_r^{s\,'} + (r-s)\, L_r^s = 0 \quad (6.29)$$

mit $s = 2l+1$, $r = n+l$

· Lösungen oB:

$$L_r^0(x) = e^x \frac{d^r}{dx^r} e^{-x} x^r \quad (6.30)$$

als „Laguerre polynome"

· Dann sind

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_r(x) \quad (6.31)$$

die „zugeordneten Laguerrepolynome" vom Grad $r-s$ mit $r-s$ verschiedenen positiven Nullstellen.

· Explizite Darstellung:

$$L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!\,(k+s)!\,(r-k-s)!}\, x^k \quad (6.32)$$

~~9.2.~~

6.3.4 Wellenfunktionen endgültig

· Mit (6.16), (6.18), (6.21) und Normierungsbedingungen folgt für die gebundenen stationären Zustände eines Teilchens im Coulombpotential