Einschub → als weiteres Beispiel für Lösung lin. Diff.gl. mit einer Variablen 93

5. Das Wasserstoffatom („orthodox“)

5.1 $$H = \frac{p^2}{2m} + \left(-\frac{e^2}{r}\right)$$

Coulombpotential

→ Mechanik
(2-Teilchen → Zentralpotential
(Übung: i.d. QM)
$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$...

Schrödinger-Gl.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \Big\{ \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)^2 \Big/ 2m}_{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta} - \frac{e^2}{r} \Big\} \psi(\vec{x}, t)$$

Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\right)^2 \ldots} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial \vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

(→ E-dynamik) (*)

wirkt nach rechts auf Funktion f(r)

Drehimpulsquadrat

erinnere Mechanik $$\vec{p}^2 = \frac{\vec{L}^2}{r^2} + \Big(\underbrace{\frac{\vec{x}}{r} \cdot \vec{p}}_{\text{„}p_r\text{“}}\Big)^2$$

da in QM $\vec{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$

sehen wir, daß $\hbar^2[\ldots]$ in (*) gerade $\vec{L}^2$ entspricht

– natürlich wollen wir das noch genauer sehen: der QM-Operator für d. Drehimpuls ist („Vektoroperator“)

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{P}$$

(wobei es hier nicht auf Oper. Reihenfolge ankommt)

Mechanik $\quad \vec{L}^2 = (\vec{x}\times\vec{p})^2 = \vec{x}^2\vec{p}^2 - (\vec{x}\cdot\vec{p})^2$

QM $\quad \vec{L}^2 = \vec{x}^2\,\vec{p}^2 - (\vec{x}\cdot\vec{p})^2 + i\hbar\,\vec{x}\cdot\vec{p}$

wegen Kommutator

$\vec{x}\cdot\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\,\vec{x}\cdot\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i}\, r\frac{\partial}{\partial r}$ in Kugelkoord.

$$\curvearrowright\ \vec{p}^2 = \underbrace{\frac{1}{r^2}\vec{L}^2}_{\checkmark} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{r^2}\left(\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + r\frac{\partial}{\partial r}\right)}$$

wie in klass. Mechanik

dies ist gerade der r-Ausdruck ($\times\hbar^2$) in (*)

Genauere Behandlung des Drehimpulses (Klassifizierung ...)

später: hier nur die Fertigkeiten aus E-Dyn. (natürlich dort können!)

$$\frac{\vec{L}^2}{\hbar^2} = [\ \ldots\ ]_{\text{aus } (*)}$$

5.2 Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$

$\ell = 0,1,2\ldots$

$m = -\ell,\ldots,+\ell$

sind (wie der Name sagt) Funktionen auf der Oberfläche der Einheitskugel

gilt
$$\boxed{\frac{\vec{L}^2}{\hbar^2}\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \ell(\ell+1)\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)}$$

$$\frac{L_3}{\hbar} = \left(x_2\,\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\,\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_2}\right) = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\frac{L_3}{\hbar} Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = m\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

Die $Y_{l,m}$ bilden ein vollständiges Orthogonalsystem auf Kugeloberfläche

! später: $[\vec{L}^2, L_3] = 0$ kann nach $\vec{L}^2, L_3$ klassifizieren → Math. der selbstadj. Operatoren

$$\underbrace{\int d\Omega}_{\int_{-1}^{+1} d\cos\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi} Y^*_{l,m}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l',m'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}$$

erinnere: $\vec{V} = \sum V_i \vec{e}_i$, $V_i = \vec{V}\cdot\vec{e}_i$

kann nach diesen Funktionen entwickeln

$$\boxed{f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l',m'} c_{l',m'}\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi)}$$

$$\boxed{\int d\Omega\, Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, f(\vartheta,\varphi)} = \sum_{l',m'} c_{l',m'} \underbrace{\int d\Omega\, Y^*_{lm} Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi)}_{\delta_{ll'}\delta_{mm'}}$$

$$= \boxed{c_{l,m}}$$

(bei verallgemeinerte → Fouriertransf.

5.3 Zurück zu Schrödinger-Gl.

stationäre Lösung $\psi(\vec{x},t) = e^{-iE/\hbar\, t}\,\varphi(\vec{x})$

(i)

$$E\,\varphi(\vec{x}) = H\,\varphi(\vec{x})$$

(ii) Kugelkoord.

$$E\,\psi(r,\vartheta,\varphi) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right] - \frac{e^2}{r}\right\}\psi(r,\vartheta,\varphi)$$

um auf Schwabl-Nomenklatur zu kommen.

(iii) Separationsansatz

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

erinnere $\quad \dfrac{\vec{L}^2}{\hbar^2} Y_{l,m} = l(l+1)\, Y_{lm}$

$$E\, R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - \frac{e^2}{r} \right\} R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

Diff.-gl. für $R(r)$!

Bem. werden später auch i.d. QM Beziehung: Symm. (Drehung) $\longleftrightarrow$ Erhaltungssatz (Drehimpulssatz) beleuchten! (hier alles konkret)

(iv) Umformung (um Singularität bei $r=0$ explizit zu haben, also wieder wie beim harmonischen Oszillator in Lösungs-
allgemein $\rightarrow$ verfahren für Diff. gl. 1. Ordnung ('Fuchs'sche Klasse'):
separiere Verhalten an singulären Stellen, dann Potenzreihenansatz) $\longleftarrow$ später durchzuführen

$R(r) = u(r)/r \quad$ (vgl. a. Mechanik)

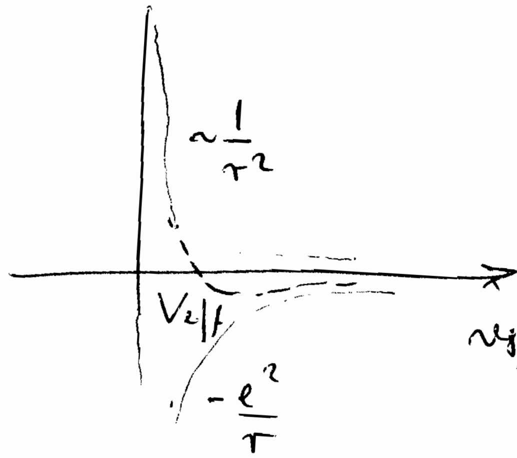
$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) R(r) \overset{\text{s.o.}}{=} \left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr} r\right)^2 \frac{u}{r} = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2} u(r)$$

$$\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u(r) = E\, u(r) \right\}$$

eindimensionales Problem!

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

$V(r) = -\frac{e^2}{r}$



vgl. Mechanik

---

wollen Normierbarkeit

$$\int d^3x\, |\varphi(x)|^2 = \int_0^\infty dr\, r^2 \int d\Omega\, \frac{|u(r)|^2}{r^2}\, Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{lm'}(\vartheta,\varphi)$$

$$= \int_0^\infty dr\, |u(r)|^2$$

soll endlich sein!

Bem. wollen hier zunächst lokalisierte Zustände (Bindungszustände) – könnten natürlich auch das entsprechende Streuproblem behandeln (~ Bildung von Wellenbergen ...) $E<0$

Diff. gl. $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - \frac{e^2}{r} \right\} u(r) = E\, u(r)$

reskaliere $(E<0)$ r

(V)

(hier benutze ich das erste Mal genaue Form von $V(r)$!)

$$r = \rho \Big/ \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

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

mit $\rho_0 = \frac{e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{|E|}}$

Verhalten bei $\rho \to \infty$

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - 1\right)\bar{u}(\rho) \approx 0 \qquad \bar{u}(\rho) \sim e^{-\rho}$$

$\rho \to 0$

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)\bar{u}(\rho) \sim 0$$

$$\bar{u}(\rho) \sim \rho^{\ell+1}$$ (weil singuläre Lsg. von $\alpha(\alpha+1) = \ell(\ell+1)$, $\alpha = -(\ell+1)$ weg!)

Ansatz

$$\bar{u}(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\rho}\, w(\rho)$$

gibt.

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2(\ell+1-\rho)\frac{dw}{d\rho} + (\rho_0 - 2(\ell+1))w = 0 \qquad 1\circledast$$

mit Potenzreihenansatz zu lösen (da keine singulären Punkte mehr)

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

$$\to \sum_{k=0}^{\infty} a_k \Big[k(k+1)\rho^{k-1} + 2(\ell+1)k\rho^{k-1} - 2k\rho^k + (\rho_0 - 2(\ell+1))\rho^k\Big] = 0$$

$$\Big[(k+1)k + 2(\ell+1)(k+1)\Big]a_{k+1} + \Big[-2k + (\rho_0 - 2(\ell+1))\Big]a_k = 0$$

$\leftarrow$ nach Verschiebung der Indices

Koeffizientenvergleich bei ρ^k

Rekursion für a_k!

$k \to \infty$

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \to \frac{2}{k} \; ; \; e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^k}{k!}$$ hat gleiche Rekursion! für $k \to \infty$

insgesamt hat dann $\bar{u}(\varrho) = \varrho^{l+1} e^{-\varrho} w(\varrho)$

für $\varrho \to \infty$ keine Normierbarkeit

$\Longrightarrow$ Reihe muß abbrechen!

wie beim harm. Oszillator

$$-2k + (\varrho_0 - 2(l+1)) = 0 \quad \text{für ein } k$$

$$\varrho_0 = 2(l+1) + 2N \qquad N = 0, 1, 2 \ldots$$

N : "radiale" Quantenzahl

$n = (N + l + 1)$ "Hauptquantenzahl"

$$\rightarrow \boxed{E_n = -\frac{m e^4}{2\hbar^2 n^2}}$$ nach Einsetzen von ϱ_0

$n = 0, 1, 2 \ldots$

$l = 0, \ldots n-1$

$m = -l, \ldots, +l$

starke "Entartung" von den Quantenzahlen n, l, m nur n in die Energie eingeht

---

1⊗
(S. 38)

gibt Laguerresche Diffgl., die Polynome (nach Abbruch) sind die sog. Laguerre-Polynome ...

$\rightsquigarrow$ Übungen ; Bilder z. B. in Schwabl

Algebraische Lsg.?! $\longrightarrow$ Übungen!