

English Summary:

### 3.3 Spherically symmetric potentials

$[L_j, H] = 0$  for spherical potential  $V(r)$

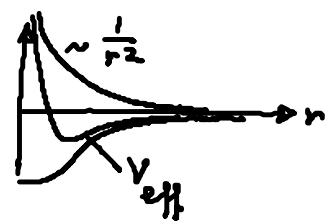
$\Rightarrow$  common eigenstates of  $H, L^2, L_3$ :  $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y(\vartheta, \varphi)$

radial Schrödinger eq.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + (V_{\text{eff}}(r) - E) u(r) = 0$$

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

$$u(r) = rR(r)$$



Aus der Normierbarkeit

$$\int d^3r |\psi_{nlm}|^2 = \underbrace{\int |Y_l^m|^2 d\Omega}_1 \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{r^2} |u_{nl}(r)|^2 < \infty$$

folgt

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |u_{nl}(r)| \leq \frac{a}{r^E} \quad \text{mit } E > \frac{1}{2}$$

Asymptotisches Verhalten für  $r \rightarrow \infty$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u = Eu \quad \Rightarrow \quad u(r) \sim e^{-Kr}$$

mit  $K := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)} \quad E < 0$

Verhalten für  $r \rightarrow 0$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u(r) = 0$$

Ausatz  $u(r) \sim r^s$ :

$$-s(s-1) + l(l+1) = 0 \quad \Rightarrow \quad s = \begin{cases} l+1 \\ -l \end{cases}$$

$s = -l$  ist nicht zulässig, da

$$R(r) \sim r^{-l-1}$$

Singulär bei  $r=0$  ( notwendig :  $u(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$  )

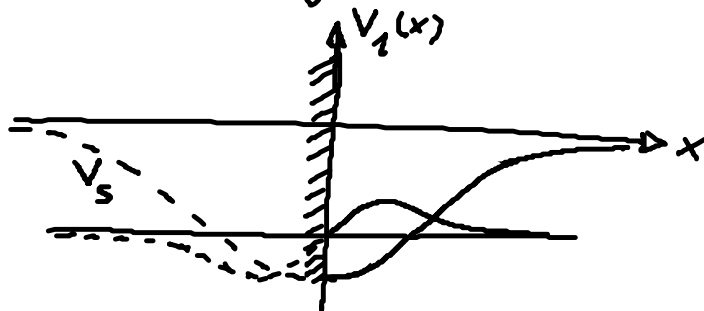
NB : Für  $l=0$  ist die radiale Schrödingergl.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u + (V(r) - E)u = 0, \quad u(0) = 0$$

äquivalent zur 1-dim. Schrödingergl. mit

$$V_1(x) = \begin{cases} V(x) & \text{für } x > 0 \\ \infty & \text{für } x \leq 0 \end{cases}$$

Symm. Fortsetzung des Pot.  $V_S$  :



Nur die antisymm. Eigenzustände von  $V_S$  sind auch Eigenzustände von  $V_1$  !

$\Rightarrow$  Grundzustand von  $V_1 \hat{=} 1.$  angeregter Zustand von  $V_S$

Es gilt : 1-dim. symm. Pot. besitzt mind. 1 Bindungszustand

$\Rightarrow$  3-dim. Pot. besitzt nicht immer Bindungszustände!

### 3.4 Wasserstoffatom

Elektron (Ladung  $e = -e_0$ , Masse  $m_1$ ;  $r_1$ ) und Proton

(Ladung  $e = e_0$ , Masse  $m_2 \gg m_1$ ;  $r_2$ ) wechselwirken ( $e_0 > 0$ ),

über Coulomb-Pot.

$$V(|r_1 - r_2|) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Reduktion des 2-Teilchen-Problems

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + V(|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|) - \tilde{E} \right\} \Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = 0$$

Schwingungsgl. für 2-Teilchen-Wellenfkt.  $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \langle \underline{r}_1, \underline{r}_2 | \Psi \rangle$

Schwerpunktkoord.  $\underline{R} := \frac{1}{M} (m_1 \underline{r}_1 + m_2 \underline{r}_2)$ ,  $M = m_1 + m_2$

Relativkoord.  $\underline{r} := \underline{r}_1 - \underline{r}_2$

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{M} \nabla_R + \nabla_r, \quad \nabla_2 = \frac{m_2}{M} \nabla_R - \nabla_r$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 &= -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{m_1}{M^2} \Delta_R + \cancel{\frac{2}{M} \nabla_R \cdot \nabla_r} + \frac{1}{m_1} \Delta_r \right. \\ &\quad \left. + \frac{m_2}{M^2} \Delta_R - \cancel{\frac{2}{M} \nabla_R \cdot \nabla_r} + \frac{1}{m_2} \Delta_r \right\} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \quad \text{mit redne. Masse } m \\ &\quad \left( \frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \end{aligned}$$

Separationsansatz:

$$\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = e^{i \underline{Q} \cdot \underline{R}} \psi(\underline{r}) \quad (\text{freie Schwerpunktbewegung})$$

$$\Rightarrow \boxed{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r) - E \right\} \psi(\underline{r}) = 0} \quad \text{mit } E := \tilde{E} - \frac{\hbar^2 Q^2}{2M}$$

reduziertes eff. 1-Teilchen-Problem mit kugelsymm. Pot.

Separation in Kugelkoord.:

$$\psi(\underline{r}) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Effektive radiale Schwingungsgl.:

$$u_{nl}''(r) - \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{2m}{\hbar^2} |E| \right\} u_{nl}(r) = 0$$

(Beschränkung auf gebundene Zustände  $E < 0$ )

Abspaltung des asymptotischen Verhaltens:

$$u_{nl} = r^{\ell+1} e^{-\kappa r} w(r)$$

$$\kappa := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}$$

Mit  $\rho := 2\kappa r$

$$\lambda := \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2\kappa} \sim \frac{1}{\sqrt{|E|}}$$

ergibt sich

$$u_{nl}''(\rho) - \left\{ \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{1}{4} \right\} u_{nl}(\rho) = 0$$

sowie

$$w''(\rho) + \left[ \frac{2(\ell+1)}{\rho} - 1 \right] w' + \frac{\lambda - \ell - 1}{\rho} w = 0$$

Potenzreihenansatz:

$$w(\rho) = \sum_{\mu=0}^{\infty} a_{\mu} \rho^{\mu}, \quad w' = \sum_{\mu=1}^{\infty} a_{\mu} \mu \rho^{\mu-1}$$

$$w'' = \sum_{\mu=2}^{\infty} a_{\mu} \mu(\mu-1) \rho^{\mu-2}$$

Koeff.vergleich:

$$a_{\mu+1} = a_{\mu} \frac{\mu + \ell + 1 - \lambda}{(\mu+1)(\mu + 2\ell + 2)} \quad \text{Rekursionsformel}$$

Wenn die Reihe nicht abbricht, wird für  $\mu \rightarrow \infty$ :

$$\frac{a_{\mu+1}}{a_{\mu}} \sim \frac{1}{\mu}, \quad \text{also } a_{\mu+1} \sim \frac{1}{\mu!} a_0$$

$$\text{Demnach für } \rho \rightarrow \infty: w \sim \sum_{\mu} \frac{1}{\mu!} \rho^{\mu+1} \sim \rho e^{\rho}$$

$$\Rightarrow u \sim w e^{-\frac{\rho}{2}} \sim e^{\frac{\rho}{2}} \quad \text{nicht normierbar!}$$

Daher Abbruch der Pot.reihe bei  $\mu = n' \in \mathbb{N}_0$ :

$$\lambda = n' + l + 1 \equiv n \in \mathbb{N}$$

Für  $E = -\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{\lambda^2}$  folgt daraus  
 $R_H$  (Rydberg-Energie) = 13.6 eV

Energie-Eigenwerte

$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$$

$n = 1, 2, 3, \dots$   
(Hauptquantenzahl)

Entartungsgrad:

Zu festem  $n$  ist  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  (Drehimpuls-quantenzahl)  
 und  $m = -l, \dots, +l$   
 $2l+1$  Werte

möglich:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 = \underline{\underline{n^2\text{-fache Entartung}}}$$

NB: Die Energie-Entartung bzgl.  $l$  ist eine Besonderheit des  $1/r$ -Potenzial (alle anderen kugelsymm. Pot. haben i.a. Energie-Eigenwerte  $E_{nl}$ )

found: Für das  $1/r$ -Potenzial ist der Lenz'sche Vektor  $\underline{N} = \frac{1}{2m} (\underline{p} \times \underline{L} - \underline{L} \times \underline{p}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \underline{r}$   
 eine Erhaltungsgröße:  $[\underline{N}, H] = 0$   
 (Klass.: keine Periheldrehung)