Potentiale mit sphärischer Symmetrie

Es sei

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{r}) \quad , \quad \hat{r} = |\hat{\vec{x}}| = \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}$$

und

$$\hat{R}(\vec{\alpha}) = e^{-i\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{L}}/\hbar}$$ eine Rotation

Dann ist $\hat{H}$ invariant unter Rotationen:

$$\hat{R}(\vec{\alpha})\,\hat{H}\,\hat{R}(\vec{\alpha})^{\dagger} = \hat{H} \quad , \forall \vec{\alpha}$$

$$\Rightarrow [\hat{R}(\vec{\alpha}), \hat{H}] = 0 \quad , \quad \forall \vec{\alpha}$$

Für $\vec{\alpha}$ infinitesimal: $\hat{R}(\vec{\alpha}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\hat{\vec{L}} + \ldots$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = 0}$$

Daraus folgt: $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{H}] = 0$

$\rightsquigarrow$ Es gibt somit eine simultane ONB für $\hat{L}_z$, $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{H}$!

In der Positions-Basis:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

$$= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r)}_{=:\,\hat{H}_{rad}} + \frac{1}{2mr^2}\hat{\vec{L}}^2$$

Zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\hat{H}\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

Separation der Variablen:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,f(\theta,\varphi)$$

$$\Rightarrow f(\theta,\varphi)\,\hat{H}_{rad}R(r) + \frac{1}{2mr^2}R(r)\,\hat{\vec{L}}^2 f(\theta,\varphi) = E\,R(r)\,f(\theta,\varphi)$$

Konstante

$$\Rightarrow \frac{2mr^2\left(\hat{H}_{rad} - E\right)R(r)}{R(r)} = \frac{-\hat{\vec{L}}^2 f(\theta,\varphi)}{f(\theta,\varphi)} = -K$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{\vec{L}}^2 f(\theta,\varphi) = \hbar^2 K\, f(\theta,\varphi) \\ \left(\hat{H}_{rad} + \frac{1}{2mr^2}K\right)R(r) = E\,R(r) \end{cases}$$

Winkelanteil

$$\hat{\vec{L}}^2 f(\theta,\varphi) = K\,f(\theta,\varphi)$$

$\rightsquigarrow$ Eigenwertgleichung für $\hat{\vec{L}}^2$.

$$\Rightarrow \begin{cases} K = \ell(\ell+1)\hbar^2 & , \ell = 0,1,2,\dots \\ f(\theta,\varphi) = Y_\ell^m(\theta,\varphi) & , m = -\ell,\dots,\ell \end{cases}$$

- Radialanteil

$$\hat{H}_{eff} R(r) = E R(r)$$

Eigenwertgleichung für $\hat{H}_{eff}$!

$$\hat{H}_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V_{eff}(r)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V_{eff}(r)$$

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2}$$

$\hat{H}_{eff}$ ist hermitisch $\Rightarrow$ Es gibt eine ONB aus Eigenfunktionen!

⇝ Welcher Hilbertraum?

$$d^3x = r^2 dr \, d\cos\theta \, d\varphi$$

⇝ $R(r) \in L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr)$

⇝ Da $\hat{H}_{eff}$ hermitisch, gibt es eine ONB aus Eigenfunktionen $R_{E\ell}(r)$

$$\int_0^\infty dr \, r^2 R_{E\ell}(r)^* R_{E'\ell'}(r) = \delta_{EE'}\delta_{\ell\ell'}$$

Alternativ: Sei $R_E(r) = \frac{u_E(r)}{r}$. Dann

$$\int_0^\infty dr \, r^2 R_{E\ell}(r)^* R_{E'\ell'}(r) = \int_0^\infty dr \, u_{E\ell}(r)^* u_{E'\ell'}(r)$$

⇝ $u_{E\ell} \in L^2(\mathbb{R}_+, dr)$

Es gilt:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{E\ell}(r)\right) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(-u_{E\ell}(r) + r\frac{\partial}{\partial r} u_{E\ell}(r)\right)$$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} u_{E\ell}(r)$$

$$\rightsquigarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} u_{E\ell}(r) + V_{eff}(r)\, u_{E\ell}(r) = E\, u_{E\ell}(r)$$

$\rightsquigarrow$ Schrödinger-Gleichung für 1-dim. System mit Potential $V_{eff}(r)$.

Zusammenfassung

* $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{r})$ rotationsinvariant.

* Es gibt eine ONB $|E\ell m\rangle$ aus Eigenzuständen von $\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z$.

$$\langle E\ell m | E'\ell' m'\rangle = \delta_{EE'}\,\delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$$

* In der Positions-Basis

$$\langle r,\theta,\varphi | E\ell m\rangle = \frac{u_{E\ell}(r)}{r}\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

und $u_{E\ell}(r)$ ist Lösung des 1-dim Systems mit Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{eff,\ell} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}$$

* $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ ist ein komplettes System von kommutierenden Observablen.

$\Rightarrow$ (E, ℓ, m) legen Zustand eindeutig fest.

Beweis: Benötigt Sturm-Liouville Theorie.

* Allgemein gilt: Energieeigenwerte können von ℓ abhängen, aber nicht von m.

* Parität: $(r, \theta, \varphi) \xrightarrow{\hat{P}} (r, \pi-\theta, \varphi+\theta)$

$$\rightsquigarrow \begin{cases} u_{E\ell}(r) \xrightarrow{\hat{P}} u_{E\ell}(r) \\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) \longmapsto (-1)^\ell \, Y_\ell^m(\theta,\varphi) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{P}\,|E\ell m\rangle = (-1)^\ell \, |E\ell m\rangle}$$

* Allgemeine Lösung:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \sum\!\!\!\!\!\!\int_E \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{E\ell m} \frac{u_{E\ell}(r)}{r} Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

mit $$\sum\!\!\!\!\!\!\int_E \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |c_{E\ell m}|^2 = 1$$

* Asymptotisches Verhalten der Lösungen für $r \to 0$:

Hypothese: $\lim_{r \to 0} r^2 V(r) = 0$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{E\ell}(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} u_{E\ell}(r) = 0 + \dots$$

$$\Rightarrow \quad u''_{E\ell}(r) = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_{E\ell}(r) + \dots$$

$$\Rightarrow \quad u_{E\ell}(r) \simeq A\, r^{\ell+1} + B\, r^{-\ell} \quad , \text{Für } r \to 0$$

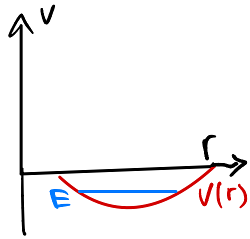
Falls $B \neq 0$, $\lim_{r \to 0} u_{E\ell}(r) = \infty$, was unmöglich ist

$$\Rightarrow u_{E\ell}(r) = A\, r^{\ell+1} + \dots \quad \text{für } r \to 0.$$

* Asymptotisches Verhalten der Lösungen für $r \to \infty$:

Hypothese: $\lim_{r\to\infty} V(r) = 0$ und $E < 0$

$\leadsto$ entspricht gebundenem Zustand in Potentialtopf:



Dann: $$-\frac{\hbar^2}{2m} u''_{E\ell}(r) = E\, u_{E\ell}(r) + \dots$$

$$\Rightarrow u''_{E\ell}(r) = \frac{2m(-E)}{\hbar^2} u_{E\ell}(r) + \dots = \kappa^2 u_{E\ell}(r) + \dots$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}$$

$$\Rightarrow u_{E\ell}(r) = A e^{\kappa r} + B e^{-\kappa r} + \dots$$

Da $\lim_{r\to\infty} u_{E\ell}(r) = 0$, $A = 0$.

$$\Rightarrow u_{E\ell}(r) = B e^{-\kappa r} + \dots$$

* Zusammenfassend:

Für einen gebundenen Zustand mit

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = \lim_{r\to\infty} V(r) = 0$$

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

mit $\lim_{r\to 0} w(r) = w_0 \neq 0$

Es sei $\rho = \kappa r = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, $v(\rho) = \kappa^{-l-1} w\left(\frac{\rho}{\kappa}\right)$

$$\Rightarrow u_{El}(r) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$$

wobei $v(\rho)$ die Differentialgleichung löst:

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{dv}{d\rho} + \left(\frac{V(r)}{E} - 2\frac{l+1}{\rho}\right)v = 0$$