Blatt 9

Ausgabe: Freitag, 15.01.2021; Abgabe bis: Freitag, 22.01.2021, 14 Uhr (**20 Punkte**)

Aufgabe 1 Das Zentralpotential [20 Punkte]

In der Vorlesung haben Sie die stationäre Schrödingergleichung für ein Zentralpotential kennengelernt, wir wollen die Diskussion dieses Problems in der Folge noch etwas vertiefen. Bitte beachten Sie, dass die Punkte insbesondere für den Rechenweg vergeben werden. Gegeben sei also ein Hamiltonoperator in Ortsdarstellung:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \triangle + V(r) \, , \tag{1}$$

wobei das Potential $V(r)$ nur eine radiale Abhängigkeit besitze (und keine Winkelabhängigkeit). Der Nabla- $\underline{\nabla}$ und Laplace-Operator $\triangle = \underline{\nabla}^2$ in Kugelkoordinaten ist jeweils gegeben durch

$$\underline{\nabla} = \underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \underline{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \, , \tag{2}$$

$$\triangle = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \, , \tag{3}$$

mit den orthonormalen Einheitsvektoren $\underline{e}_r, \underline{e}_\vartheta$ und $\underline{e}_\varphi$ der Kugelkoordinaten.

(1.a) (**4 Punkte**) Verwenden Sie zunächst die Darstellung des Drehimpulsoperators $\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{x}} \times \hat{\underline{p}}$ in Kugelkoordinaten um zu zeigen, dass $\hat{H}$ wiefolgt geschrieben kann:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{\hat{\underline{L}}^2}{2m_e r^2} \, . \tag{4}$$

Zeigen sie damit, dass der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße von $\hat{H}$ ist.

Aus $[\hat{H}, \hat{\underline{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_\alpha] = 0$ für $\alpha = x, y, z$ folgt, dass alle drei Operatoren $\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{H}$ durch einen gemeinsamen Satz von Eigenzuständen diagonalisiert werden können. Die Eigenzustände $|l, m\rangle$ mit $|m| \leq l \in \mathbb{N}_0$ von $\hat{\underline{L}}^2$ sowie $\hat{L}_z$ kennen Sie bereits, sowie deren Ortsdarstellung $Y_l^m(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi | l, m\rangle$ in den Winkelkoordinaten ϑ, φ.

(1.b) (**4 Punkte**) Machen Sie für die stationäre Schrödingergleichung einen Produktansatz der Form $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ und zeigen Sie, dass die Radialwellenfunktion $R(r)$ der Gleichung

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left[V(r) - E\right] R = l(l+1)R \tag{5}$$

genügt. Verwenden Sie die Substitution $u(r) = rR(r)$ um schließlich das Eigenwertproblem für die radiale Abhängigkeit in die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}\right] u = Eu \tag{6}$$

zu überführen. Welche Normierungsbedingung muss $u(r)$ erfüllen?

Wir wollen nun für den Fall gebundener Zustände $E < 0$ des Wasserstoffpotentials $V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$ die explizite Form der Radialwellenfunktion(en) $R(r)$ bestimmen. Um die weiteren Rechnungen zu vereinfachen, definieren wir

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}}\ , \quad \rho = \kappa r \quad \text{und} \quad \rho_0 = \frac{m_e e^2}{2\pi\varepsilon_0\hbar^2\kappa}\ . \tag{7}$$

Damit geht eq. (6) über in die kompakte Form

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u\ . \tag{8}$$

(1.c) (**2 Punkte**) Betrachten Sie zunächst die Grenzfälle $\rho \to \infty$ sowie $\rho \to 0$ von eq. (8). Geben Sie für beide Grenzfälle die allgemeinen Lösungen an unter Berücksichtigung der Tatsache, dass diese auch in den Grenzfällen korrekt normierbar sein sollen. *Hinweis: Im Grenzfall $\rho \to 0$ dürfen Sie annehmen, dass $l \neq 0$. Warum ist das gerechtfertigt?*

(1.d) (**2 Punkte**) Betrachten Sie nun den allgemeinen Ansatz

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} K(\rho) \tag{9}$$

und zeigen Sie, dass dieser auf die Differentialgleichung

$$\rho\frac{d^2K}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{dK}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]\, K = 0 \tag{10}$$

führt.

(1.e) (**4 Punkte**) Verwenden Sie einen Potenzreihenansatz der Form

$$K(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu \tag{11}$$

und zeigen Sie, dass die Koeffizienten a_ν die Rekursion

$$a_{\nu+1} = \frac{2(\nu+l+1) - \rho_0}{(\nu+1)(\nu+2(l+1))} a_\nu \tag{12}$$

erfüllen.

(1.f) (**2 Punkte**) Begründen Sie unter Berücksichtigung der Normierbarkeit von $u(r)$ die Existenz eines $\nu_0 \in \mathbb{N}$ so, dass $a_{\nu>\nu_0} \equiv 0$.

(1.g) (**2 Punkte**) Verwenden Sie die Rekusion eq. (12) und die Abbruchbedingung aus Aufgabe (1.f), um zu zeigen, dass $\rho_0 = 2n$ für $n \in \mathbb{N}$ und $n > l$. Geben Sie damit die Eigenwerte (Energien) der gebundenen Zustände des Wasserstoffpotentials an.