

8. Drehimpulsoperator und sphärisch symmetrische Potentiale

78

(Bahn) Drehimpuls: herm. Op.

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} \quad \begin{array}{c} \text{in Ortsdarstellung} \end{array} = \frac{\hbar}{i} \epsilon_{jkl} r_k \overset{\substack{\uparrow \\ \text{j. Komponente von } \hat{\vec{L}}}}{D_l} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \partial_z - z \partial_y \\ z \partial_x - x \partial_z \\ x \partial_y - y \partial_x \end{pmatrix}$$

Aus Vertauschungsrelationen $[x, p_x] = i\hbar$ etc.

folgen Vertauschungsrelationen für Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$ (ab jetzt ohne $\hbar$) ^{Operatoren}

$$[L_x, L_y] = i L_z, \quad [L_y, L_z] = i L_x, \quad [L_z, L_x] = i L_y$$

d.h. $[L_j, L_k] = i \epsilon_{jkl} L_l$ mit Summenkonvention: mehrfach vorkommende Indizes auf einer Seite der Glg. werden summiert

$$\Rightarrow \vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \text{ vertauscht mit allen } L_j$$

$$[\vec{L}^2, L_j] = 0$$

$\Rightarrow$ existieren simultane Eigenzustände von $\vec{L}^2$ und einer Komponente L_j , wähle $j=z$

Übung:

$$[L_j, r_k] = i \epsilon_{jkl} r_l$$

$$[L_j, p_k] = i \epsilon_{jkl} p_l$$

mit $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ folgt

$$[\vec{L}, \vec{r}^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\vec{L}, V(\vec{r}^2)] = 0 \quad \text{wenn Potential } V \text{ differenzierbare Fkt.}$$

$$[\vec{L}, \vec{p}^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\vec{L}, \overset{\substack{\uparrow \\ \text{kin. Energie}}}{T}] = 0$$

$\Rightarrow [\vec{L}, H] = 0 \Rightarrow$ Drehimpuls ist erhalten (gute Quantenzahl) für Zentralpotential

Für $\vec{L}$ im Ortsraum kann man zeigen,

daß $\vec{L}$ Drehungen erzeugt $\rightarrow$ Generator der Drehgruppe

Bei Drehung um Achse $\vec{n}$ mit Winkel α ($\vec{n}^2=1$)
gilt mit $\vec{\alpha} = \alpha \vec{n}$

$$\underbrace{\Psi'(\vec{r})}_{\text{nach Dreh}} = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \vec{L}\right)}_{\text{unitäre Trafo für Drehungen}} \Psi(\vec{r})$$

d.h. $[\vec{L}, H] = 0$ folgt für sphärisch sym. Potentiale
(Zentralkotentiale)
aus Symmetrie unter Drehungen

Für sphärisch sym. V bzw. H

existieren simultane Eigenzustände von $H, \vec{L}^2, L_z$

$\rightarrow$ Quantenzahlen zu diesen 3 Oper charakterisieren
QM Zustand in 3d.

Algebraischer Zugang zu Eigenzuständen von $\vec{L}^2$ und L_z

Ansatz: $\vec{L}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda, \mu\rangle$

$$L_z |\lambda, \mu\rangle = \mu \hbar |\lambda, \mu\rangle$$

$$\vec{L}^2 = \text{Summe von Quadraten von herm. Op.'s} \Rightarrow \lambda \geq 0$$

Definiere $L_{\pm} = L_x \pm i L_y \Rightarrow L_+^\dagger = L_-$

$$\Rightarrow 1) [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \quad \text{vgl. } [\underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N} \text{ (Besetzungszahl)}}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

$\rightarrow L_{\pm}$ sind Leitoperatoren bzgl. L_z

$$2) [L_{\pm}, \vec{L}^2] = 0$$

$$3) [L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \vec{L}^2 &= L_z^2 + L_+ L_- - \hbar L_z \\ &= L_z^2 + L_- L_+ + \hbar L_z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle \lambda, \mu | \underbrace{\vec{L}^2 - L_z^2}_{L_x^2 + L_y^2} | \lambda, \mu \rangle = \langle \lambda, \mu | \underbrace{\frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+)}_{L_+^\dagger L_+ + L_-^\dagger L_-} | \lambda, \mu \rangle \geq 0 \quad (*)$$

$$\text{Ans 1) } \Rightarrow L_z L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm 1) \hbar L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle$$

λ verändert sich nicht wegen 2)

$$\Rightarrow L_{\pm} |\lambda, \mu\rangle = C_{\pm}(\lambda, \mu) |\lambda, \mu \pm 1\rangle$$

Bestimme $C_{\pm}(\lambda, \mu)$ aus Normierung

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle \lambda, \mu | L_- L_+ | \lambda, \mu \rangle}_{(C_+(\lambda, \mu))^2} &= \underbrace{\langle \lambda, \mu | \vec{L}^2 - L_z^2 - \hbar L_z | \lambda, \mu \rangle}_{(\lambda - \mu^2 - \mu) \hbar^2} \geq 0 \end{aligned}$$

Ebenso

$$\langle \lambda, \mu | L_+ L_- | \lambda, \mu \rangle = \langle \lambda, \mu | L^2 - L_z^2 + \hbar L_z | \lambda, \mu \rangle$$

$$|C_-(\lambda, \mu)|^2 = (\lambda - \mu^2 + \mu) \hbar^2 \geq 0$$

Aus $\lambda - \mu^2 - \mu \geq 0$ und $\lambda - \mu^2 + \mu \geq 0$ folgt $\lambda \geq \mu^2$
 siehe auch (*)

Zusammen mit $|\lambda, \mu\rangle \xrightarrow{(L_{\pm})^k} |\lambda, \mu \pm k\rangle$
 $\uparrow$
 k ganzzahlig

folgt für festes λ , existiert maximales $\mu_{\max}$ und minimales $\mu_{\min}$
 mit $\lambda \geq \mu_{\max}^2$ und $\lambda \geq \mu_{\min}^2$ und

$$L_+ |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0 \quad \text{und} \quad L_- |\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \lambda - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max} = 0 \quad \text{und} \quad \lambda - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min} = 0$$

(**)

$$\Rightarrow \mu_{\max}^2 + \mu_{\max} = \mu_{\min}^2 - \mu_{\min}$$

$$\mu_{\max}(\mu_{\max} + 1) = \mu_{\min}(\mu_{\min} - 1)$$

quadratische Gleichung mit Lösungen $\mu_{\min} = -\mu_{\max}$

oder $\mu_{\min} = \mu_{\max} + 1 \rightarrow$ widerspricht $\mu_{\max} \geq \mu_{\min}$

Zusammen mit $\mu_{\max} = \mu_{\min} + n$, n ganzzahlig

$$\Rightarrow \boxed{\mu_{\max} = \frac{n}{2} = -\mu_{\min}} \quad \mu \text{ ist ganz- oder halbzahlig}$$

$$\text{Definiere } \mu_{\max} = l \stackrel{(**)}{\Rightarrow} \lambda = l(l+1)$$

d.h. Eigenzustände von L^2 und L_z :

$$|\lambda, \mu\rangle = |l(l+1), \mu\rangle \equiv |l, m\rangle$$

$$\mu = -l, \dots, l$$

(2l+1) Eigenzustände zu l

→ Drehimpulsquantenzahl

→ magnetische Quantenzahl
 $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

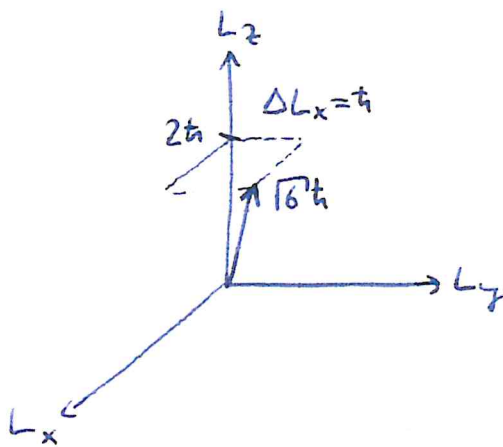
$$\Rightarrow \boxed{\vec{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) \hbar^2 |l, m\rangle}$$

$$L_z |l, m\rangle = m \hbar |l, m\rangle \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

$$\text{und } L_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \hbar |l, m \pm 1\rangle$$

Beispiel: $l=2 \Rightarrow$ Eigenwert von $\vec{L}^2 = l(l+1) \hbar^2$

d.h. $|\vec{L}| \rightarrow \sqrt{l(l+1)} \hbar \rightarrow l \hbar$ für große l



→ Zustand $|2, 2\rangle$

$|2, 1\rangle$

$|2, 0\rangle$

$|2, -1\rangle$

$|2, -2\rangle$

$\uparrow L_+ \downarrow L_-$

Erwartungswerte und Schwankungen im Zustand $|2, 2\rangle$

$$\langle 2, 2 | L_x | 2, 2 \rangle = \frac{1}{2} \langle 2, 2 | L_+ + L_- | 2, 2 \rangle = 0$$

$$\langle 2, 2 | L_y | 2, 2 \rangle = 0$$

d.h. im Mittel ist $\langle L_x \rangle, \langle L_y \rangle = 0$

$$\langle 2, 2 | L_x^2 | 2, 2 \rangle = \frac{1}{4} \langle 2, 2 | L_+^2 + L_+ L_- + L_- L_+ + L_-^2 | 2, 2 \rangle$$

$$= \frac{1}{4} \langle 2, 2 | L_+ L_- | 2, 2 \rangle$$

$$= \frac{1}{4} \sqrt{6 - 2 \cdot 1} \hbar \sqrt{6 - 1 \cdot 2} \hbar \langle 2, 2 | 2, 2 \rangle$$

$$= \hbar^2$$

$$\langle 2, 2 | L_y^2 | 2, 2 \rangle = \hbar^2$$

d.h. $\Delta L_x, \Delta L_y = \hbar$

Explizite Eigenfunktionen im Ortsraum

definiert durch $L_{\pm} |l, \pm l\rangle = 0$ und Anwendung von $(L_{\pm})^k$

sphärische Symmetrie $\rightarrow$ Polarkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi & r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi & \varphi &= \arctan \frac{y}{x} \\ z &= r \cos \theta & \theta &= \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \end{aligned}$$

explizite Rechnung für $L_z = \frac{\hbar}{i} (x \partial_y - y \partial_x)$

Kettenregel

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{x}{x^2 + y^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{yz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{y}{x^2 + y^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{xz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{L_z = \frac{\hbar}{i} \partial_{\varphi}}$$

Auf gleiche Weise

$$L_x = \frac{\hbar}{i} (-\sin \varphi \partial_{\theta} - \cot \theta \cos \varphi \partial_{\varphi})$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} (\cos \varphi \partial_{\theta} - \cot \theta \sin \varphi \partial_{\varphi})$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} (\pm \partial_{\theta} + i \cot \theta \partial_{\varphi})$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_{\theta} (\sin \theta \partial_{\theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_{\varphi}^2 \right)$$

Drehimpulsoperator hängt nicht von r ab! vgl. $[\vec{L}, r] = 0$

$\Rightarrow$ Explizite Eigenfunktionen sind r unabhängig

$$\langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle \equiv Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

Separationsansatz, da L_z nur von φ abhängt

$$= \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Bestimmung der φ Abhängigkeit aus

$$L_z | \ell, m \rangle = m \hbar | \ell, m \rangle$$

$\langle \theta, \varphi |$

$$\Leftrightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_{\varphi} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = m \hbar Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_{\varphi} \Phi(\varphi) = m \hbar \Phi(\varphi) \Rightarrow \boxed{\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}}$$

Wellenfkt ist eindeutig $\Rightarrow \Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$

$\Rightarrow$ m ganzzahlig $\Rightarrow \ell$ ganzzahlig (halbzahlige ℓ -Werte nur für Spin)

Bestimmung der θ Abhängigkeit aus

$$\vec{L}^2 | \ell, m \rangle = \ell(\ell+1) \hbar^2 | \ell, m \rangle$$

$$\Leftrightarrow \vec{L}^2 \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = \ell(\ell+1) \hbar^2 \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\partial_{\theta}^2 - \cot \theta \partial_{\theta} + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = \ell(\ell+1) \Theta(\theta) \quad \text{d.h. } \Theta = \Theta_{\ell}^m$$

Stärke von $L_+ Y_{\ell}^{\ell} = 0$ mit $L_+ = \hbar e^{i\varphi} (\partial_{\theta} + i \cos \theta \partial_{\varphi})$
und $Y_{\ell}^{\ell} = \Theta_{\ell}^{\ell} e^{i\ell\varphi}$

$$\Rightarrow (\partial_{\theta} + i \cot \theta (i\ell)) \Theta_{\ell}^{\ell} = 0$$

Lösung: $\Theta_{\ell}^{\ell}(\theta) = \text{const.} (\sin \theta)^{\ell} \Rightarrow Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \varphi) = \text{const.} (\sin \theta)^{\ell} e^{i\ell\varphi}$

Y_l^m sind Kugelflächenfunktionen $\rightarrow$ Satz vollständiger Peter auf der Einheitskugel

restliche Y_l^m durch Anwendung von $(L_-)^k$ auf Y_l^l

$$\Rightarrow Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} (-1)^m e^{im\varphi} \underbrace{P_l^m(\cos\theta)}_{\text{assoziierte Legendre Polynome}}$$

$$= (-1)^l \frac{1}{2^l l!} (\sin\theta)^m \left(\frac{d}{d\cos\theta} \right)^{l+m} (\sin\theta)^{2l}$$

mit Normierung

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \int_{\substack{\theta, \varphi \\ l, m, m'}} d\Omega \langle l, m | \Omega \rangle \langle \Omega | l', m' \rangle$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\cos\theta (Y_l^m(\theta, \varphi))^* Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi)$$

Beispiele: $Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$\rightarrow Y_l^0 = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \underbrace{P_l(\cos\theta)}_{\text{Legendre Polynome}}$$

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin\theta$$

Legendre Polynome
unabhängig von φ

Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen

$$1) \boxed{Y_{\ell}^m}^* = (-1)^m Y_{\ell}^{-m} \quad (\text{Konjugation})$$

$$\text{Spezialfall: } (Y_{\ell}^{\ell})^* = (-1)^{\ell} Y_{\ell}^{-\ell}$$

$$\text{vgl. } (L_+ Y_{\ell}^{\ell})^{\dagger} = 0 = L_- Y_{\ell}^{-\ell}$$

$$\underbrace{\quad}_{\text{"}} L_- (Y_{\ell}^{\ell})^* \Rightarrow (Y_{\ell}^{\ell})^* \sim Y_{\ell}^{-\ell}$$

2) Verhalten von Y_{ℓ}^m unter Parität/Raumspiegelung $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$

$$\boxed{Y_{\ell}^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)}$$

$$\downarrow \quad \downarrow$$

$$(-1)^{\ell+m} \quad (-1)^m$$

$$\Downarrow$$

$$\varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

$$\theta \rightarrow \pi - \theta$$

Parität $(-1)^{\ell}$ gerade oder ungerade entsprechend von ℓ , unabhängig von m

3) Additionstheorem der Kugelflächenfunktionen

$$\boxed{\frac{4\pi}{(2\ell+1)} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (Y_{\ell}^m(\theta', \varphi'))^* Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = P_{\ell}(\cos \omega)}$$

mit $\cos \omega = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$, d.h. $\omega = \angle(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$

4) Vollständigkeit auf der Einheitskugel

$$\sum_{\ell, m} | \ell m \rangle \langle \ell m | = \mathbb{1} \Rightarrow \sum_{\ell, m} \langle \theta' \varphi' | \ell m \rangle \langle \ell m | \theta \varphi \rangle = \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}')$$

d.h.

$$\boxed{\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta', \varphi') (Y_{\ell}^m(\theta, \varphi))^* = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi')}$$

Sphärisch symmetrische Potentiale

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

aus $[\hat{H}, \hat{\vec{L}}] = 0$ folgt $\Psi_{E, l, m}(\vec{r}) = R_E(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$

↑
Wellenfkt zu Energie E $\hat{H} \Psi_E(\vec{r}) = E \Psi_E(\vec{r})$

Separationsansatz, da $V(r)$ unabh. von θ, φ

Laplaceoperator $\vec{\nabla}^2 = \Delta$ in Polarkoordinaten

$$\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 \quad (\text{siehe Kettenregel})$$

$$\Rightarrow \Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) - \frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\text{oder} \quad = \left(\frac{1}{r} \partial_r r \right)^2 - \frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\hat{\vec{p}}^2}{-\hbar^2 \Delta}} = \underbrace{\hat{p}_r^2}_{\left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \partial_r r \right)^2} + \underbrace{\frac{\hat{\vec{L}}^2}{r^2}}_{\hat{p}_\Omega^2}$$

$\Rightarrow$ Schrödingerglg. für sphärisch sym. Potentiale

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{2mr^2} + V(r) \right) \Psi_E(\vec{r}) = E \Psi_E(\vec{r})$$

$\Rightarrow$ für radiale Abhängigkeit mit $\Psi_E = R_E Y_l^m$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right) R_E(r) = E R_E(r)$$

Transformation $R_E(r) = \frac{u_E(r)}{r}$

$$\Rightarrow R' = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2}$$

$$\Rightarrow r^2 R' = u' r - u$$

$$\Rightarrow (r^2 R')' = u'' r$$

$\Rightarrow$ radiale Schrödingerglg. für $u_E(r)$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right) u_E(r) = E u_E(r)$$

Normierung:

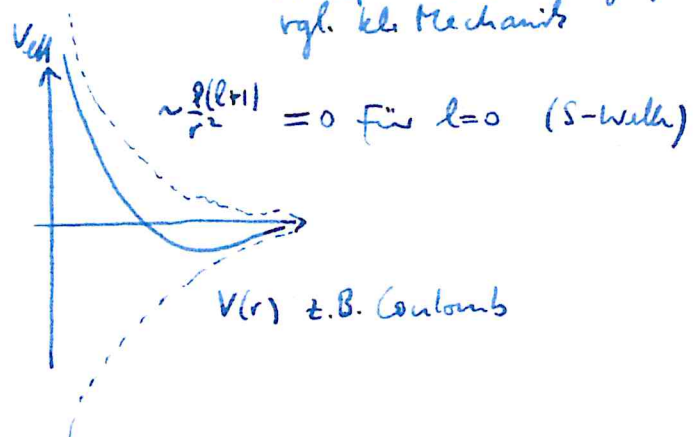
$$\int |\Psi_{E,l,m}(\vec{r})|^2 d^3r = 1 = \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\cos\theta}_{1} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \int_0^\infty r^2 dr \frac{|u_E(r)|^2}{r^2}$$

$\frac{1}{r^2} \rightarrow$ Abfall der Ws.-dichte

$$\Rightarrow \int_0^\infty dr |u_E(r)|^2 = 1$$

$\rightarrow$ Radiale Schrödingerglg. ist äquivalent zu 1-dim. Schrödingerglg. in effektivem Potential $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$

abstoßendes Zentrifugalpot.
vgl. klass. Mechanik



Randbedingung: da $R_E = \frac{u_E}{r} \Rightarrow u_E(r \rightarrow 0) \rightarrow 0$ (außer für $V \sim \delta(\vec{r})$)

Einfache Probleme

(89)

- 1) freies Teilchen oder stückweise konstantes Potential
- 2) unendlicher sphärischer Potentialkasten
- 3) endlicher sphärischer Potentialtopf
- 4) sphärischer harmonischer Oszillator

1) $V(r) = 0$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\Rightarrow \left(-\partial_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u(r) = k^2 u(r)$$

mit $\rho = kr$ und $w(\rho) = u\left(\frac{\rho}{k}\right)$

$$\Rightarrow \left(-\partial_\rho^2 + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - 1 \right) w(\rho) = 0$$

Lösungen: $l=0$ $(-\partial_\rho^2 - 1) w(\rho) = 0 \Rightarrow w(\rho) = \sin \rho$ oder $-\cos \rho$

allg. l : $w(\rho) = \rho j_l(\rho)$ sphärische Bessel-Fkt.

$$j_l(\rho) \sim \rho^l \quad \rho \rightarrow 0 \text{ regulär}$$

oder $w(\rho) = \rho n_l(\rho)$ sphärische Neumann-Fkt.

$$n_l(\rho) \sim \rho^{-(l+1)} \quad \rho \rightarrow 0 \text{ singulär}$$

und für große $\rho \gg l$

$$j_l(\rho) \sim \frac{\sin(\rho - \frac{l\pi}{2})}{\rho}, \quad \rho \gg l$$

$$n_l(\rho) \sim -\frac{\cos(\rho - \frac{l\pi}{2})}{\rho}, \quad \rho \gg l$$

$\Rightarrow$ Kugelwellen aus/einlaufend (+/-): Hankel-Fkten

$$h_l^\pm(\rho) = j_l(\rho) \pm i n_l(\rho) \sim \frac{\mp i}{\rho} e^{\pm i(\rho - \frac{l\pi}{2})}, \quad \rho \gg l$$

2) Unendlicher sphärischer Potentialkasten

90

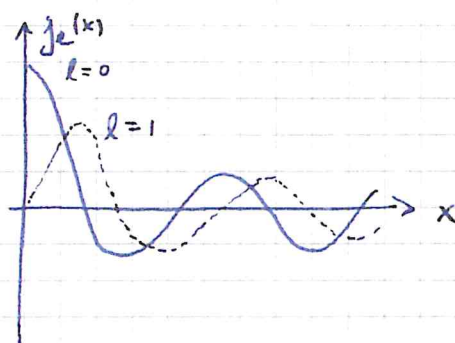
$$V(r) = \begin{cases} 0 & , r < a \\ \infty & , r > a \end{cases}$$

Lösung: $R_{E,l}(r) = j_l(kr)$ mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$j_l(ka) = 0$ Randbedingung $\Rightarrow E$ ist quantisiert

$\hookrightarrow k_{n,l} a = n\text{-te Nullstelle der Besselfkt } j_l$

$$E = \frac{\hbar^2 k_{n,l}^2}{2m}$$



3) Endlicher sphärischer Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & , r < a \\ 0 & , r > a \end{cases}$$

Ansatz für gebundene Zustände $E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m} < 0$

$r < a$: $K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2$

$R_{E,l}(r) = j_l(kr)$

$r > a$: $R_{E,l}(r) = A h_l^{(+)}(iKr) \sim \frac{1}{r} e^{-Kr - i\frac{l\pi}{2}}$ für große r

Matching bei $r=a$: $\frac{R'(a^-)}{R(a^-)} = \frac{R'(a^+)}{R(a^+)}$

91

$$\Rightarrow k \frac{j_e(ka)}{j_e(ka)} = iR \frac{(h_e^+)'(ika)}{h_e^+(ika)} \quad \text{Lösungen ergeben erlaubte Werte für } R_{\text{ref}}$$

Spezialfall $l=0$: $j_0(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}$ $h_0^+(\xi) = \frac{-i}{\xi} e^{i\xi}$

$$\Rightarrow k \left(\cot ka - \frac{1}{ka} \right) = -R - \frac{1}{a} \Leftrightarrow k \cot ka = -R$$

4) Sphärischer harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{r}^2$$

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \text{Oszillatorlänge}$$

Kartesische Koordinaten

$$\begin{aligned} \psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) &= \langle x, y, z | n_x, n_y, n_z \rangle \approx \langle x | n_x \rangle \langle y | n_y \rangle \langle z | n_z \rangle \\ &\sim H_{n_x}\left(\frac{x}{b}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{b}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{b}\right) e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2 + y^2 + z^2}{b^2}} \end{aligned}$$

mit Energie $E = \hbar \omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right)$ $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$

$$= \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

N	0	1	2	3
Entartung	1	3	6	10

$\begin{matrix} 1,0,0 \\ 0,1,0 \\ 0,0,1 \end{matrix}$
 $\begin{matrix} 2,0,0 \\ \vdots \\ 1,1,0 \end{matrix}$

$$N$$

$$\frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

↑
so viele Zustände mit
unterschiedlichem (n_x, n_y, n_z)
aber gleicher Energie/N

Radiale Schrödingerfg. für sphärischen HO

(92)

mit $\rho \equiv \frac{r}{b}$ dim.los, $E_{n,l} \equiv \varepsilon_{n,l} \hbar \omega$, $R_{n,l}(\rho) \equiv \frac{u_{n,l}(\rho)}{\rho} \frac{1}{b^{3/2}}$
radiale Quantenzahl

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{2} \rho^2 + \frac{l(l+1)}{2\rho^2} \right) u_{n,l}(\rho) = \varepsilon_{n,l} u_{n,l}(\rho)$$

$\Rightarrow$ Radialwellenfkt

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{b^3 \Gamma(n+l+3/2)}} \left(\frac{r}{b} \right)^l e^{-\frac{1}{2} \frac{r^2}{b^2}} L_n^{l+1/2} \left(\frac{r^2}{b^2} \right)$$

Verhalten für $r \ll b$ $r \gg b$ assoziierte Laguerre Polynome

$$E_{n,l} = \varepsilon_{n,l} \hbar \omega = (2n + l + 3/2) \hbar \omega$$

