Review: properties of spherical harmonics $Y_l^m(\theta,\varphi)$:

* eigenvalue relations:

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$
$$\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

* normalization:

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

* completeness:

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \left(Y_l^m(\theta,\varphi)\right)^* Y_l^m(\theta',\varphi') = \delta(\cos\theta-\cos\theta')\,\delta(\varphi-\varphi')$$

* complex conjugation:

$$\left(Y_l^m(\theta,\varphi)\right)^* = (-1)^m\, Y_l^{-m}(\theta,\varphi)$$

* parity transformation:

$$\vec{r} \to -\vec{r} \quad \Rightarrow \quad \varphi \to \varphi+\pi,\ \theta \to \pi-\theta$$

$$\Rightarrow Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-1)^l\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Schrödinger equation for spherical symmetric potentials

* Laplacian in spherical coordinates:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2 r^2}$$

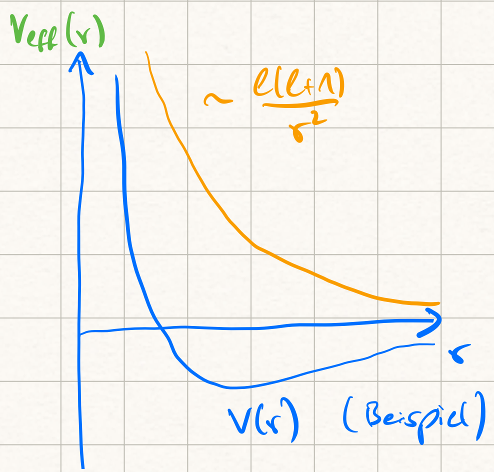
* Schrödinger equation :

Separation ansatz : $\psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{E,l}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right] R_{E,l}(r) = E\, R_{E,l}(r)$$

simplifying by defining $u_{E,l}(r) = r \cdot R_{E,l}(r)$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{\underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}}_{\text{centrifugal barrier}} + V(r)}_{V_{eff}(r)}\right] u_{E,l}(r) = E\, u_{E,l}(r)$$



Einfache Probleme:

1.) freies Teilchen (in Polarkoordinaten):

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

$$\Rightarrow \left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u(r) = k^2 u(r)$$

definiere: $\rho = k \cdot r$, $w(\rho) = u\left(\frac{\rho}{k}\right)$ $\Rightarrow \left[-\partial_\rho^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - 1 \right] w(\rho) = 0$

betrachte zunächst $\ell = 0$: $(-\partial_\rho^2 - 1) w(\rho) = 0$

Lösungen : $w_1(\rho) = A \sin \rho$, $w_2(\rho) = B \cos \rho$

allgemeine ℓ: $w_1(\rho) = \rho\, j_\ell(\rho)$, $w_2(\rho) = \rho\, n_\ell(\rho)$

j_ℓ: sphärische Bessel-Fkt. , n_ℓ: sphärische Neumann-Fkt

asymptotische Verhalten für $\rho \to 0$ und $\rho \to \infty$

	$j_\ell(\rho)$	$n_\ell(\rho)$
$\rho \to 0$	$\sim \rho^\ell$ (regulär)	$\sim \rho^{-(\ell+1)}$ (singulär)
$\rho \to \infty$	$\sim \frac{\sin(\rho - \frac{\ell\pi}{2})}{\rho}$	$\sim -\frac{\cos(\rho - \frac{\ell\pi}{2})}{\rho}$

ein-/auslaufende Kugelwellen ergeben sich aus Linearkombinationen von j_ℓ und n_ℓ (Hankelfunktionen):

$$h_\ell^\pm(\rho) = j_\ell(\rho) \pm i n_\ell(\rho) \sim \frac{\mp i}{\rho} e^{\pm i (\rho - \frac{\ell\pi}{2})} \quad \text{für } \rho \to 0$$

Wellenfunktion eines freien Teilchens:

ebene Wellen $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

In sphärischen Koordinaten benötigen wir Wellenfunktion die regulär im gesamten Bereich bleibt

$$\Rightarrow \quad \frac{u_{E,\ell}(r)}{r} \sim j_\ell(kr)$$

In der Tat kann man zeigen:

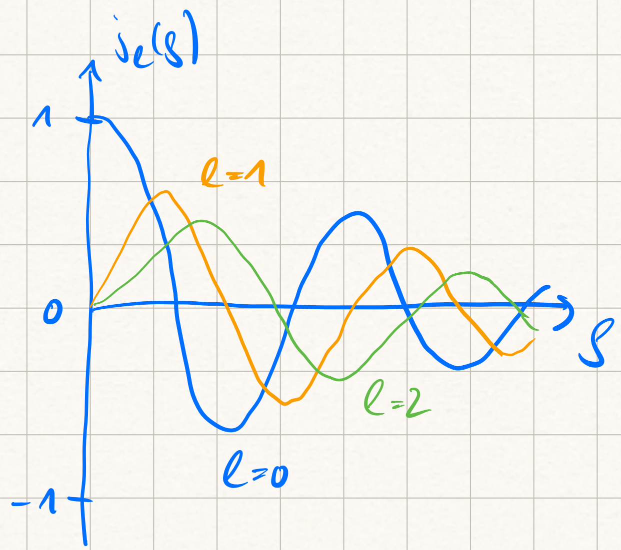
$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} 4\pi\, i^\ell \left(Y_\ell^m(\theta_k, \varphi_k)\right)^* j_\ell(kr)\, Y_\ell^m(\theta_r, \varphi_r)$$

2.) unendlicher sphärischer Potentialkasten:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r \leq a \\ \infty & \text{für } r > a \end{cases} \quad , \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Welche Randbedingungen gelten für $\psi(\vec{r})$ bzw. $R(r)$?

$\Rightarrow$ Lösung: $R_{E,l}(r) = j_l(kr)$



Randbedingung: $j_l(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad E_{n,l} = \frac{\hbar^2 z_{n,l}^2}{2ma^2}$

$\downarrow$

Energie ist quantisiert

$k \cdot a = z_{n,l}$ = n-te Nullstelle der Besselfunktion j_l

3.) Endlicher sphärischer attraktiver Potentialtopf

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r \leq a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases}$$

es existieren gebundene und Streuzustände

Wir betrachten nur gebundene Zustände: $E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} < 0$

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

$$R_{E,\ell}(r) = j_\ell(k\cdot r) \qquad \text{(wie oben)}$$

$r > a$: $R_{E\ell}(r) = A\, h_\ell^+(i\kappa r) \sim \frac{1}{r} e^{-\kappa r - i\frac{\ell\pi}{2}}$

$\downarrow$

für $r \to \infty$

korrektes asymptotisches Verhalten

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

$$\Rightarrow k\,\frac{j_\ell'(ka)}{j_\ell(k\cdot a)} = i\kappa\,\frac{(h_\ell^+)'(i\kappa a)}{h_\ell^+(i\kappa a)}$$

Lösungen ergeben Relation zwischen k und κ und damit die Quantisierungsbedingungen für $R_{n\ell}(r)$

Betrachte Fall $\ell = 0$: $j_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho}$, $h_0^+(\rho) = -\frac{i}{\rho}e^{i\rho}$

$$\Rightarrow k\left[\cot(ka) - \frac{1}{\cancel{k}a}\right] = -\kappa \cancel{-\frac{1}{a}} \Rightarrow k\cdot\cot(k\cdot a) = -\kappa$$

4) Sphärischer harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{\vec{r}}^2 \qquad \text{mit} \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

In kartesischen Koordinaten hatten wir die Schrödingergleichung schon mittels des Produktansatzes gelöst:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y)\,\psi_{n_z}(z)$$

$$\sim H_{n_x}\left(\frac{x}{b}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{b}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{b}\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2+y^2+z^2}{b^2}}$$

mit der Energie:

$$E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega\Big(\underbrace{n_x + n_y + n_z}_{}+\frac{3}{2}\Big)$$

$$= \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right) \qquad n_i = 0,1,2,\dots$$

Entartung der Energiezustände:

N	0	1	2	3	...	N
Entartung	1	3	6	10	...	$\frac{(N+1)(N+2)}{2}$
(n_x, n_y, n_z)	$(0,0,0)$	$(1,0,0)$ $(0,1,0)$ $(0,0,1)$	$(2,0,0)$ $(1,1,0)$ $\vdots$	$(3,0,0)$ $(2,1,0)$ $\vdots$		

Betrachte nun Schrödingergleichung in sphärischen Koordinaten:

$$\rho = \frac{r}{b} \quad (\text{dimensionslos})$$

$$E_{n,l} = \varepsilon_{n,l} \hbar\omega$$

$$R_{n,l}(\rho) = \frac{u_{n,l}(\rho)}{\rho} \frac{1}{b^{\frac{3}{2}}}$$

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

radiale Wellenfunktion (ohne Herleitung):

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

Normierung

bestimmt Verhalten für $r \ll b$

bestimmt Verhalten für $r \gg b$

assoziierte Laguerre Polynome

$$E_{n,l} = \varepsilon_{n,l}\hbar\omega = (\underbrace{2n+l}_{N} + \tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

N	0	1	2	3	…	N
Entartung	1	3	6	10	…	$\frac{(N+1)(N+2)}{2}$
(n,l)	$(0,0)$	$(0,1)$	$(1,0)$ $(0,2)$	$(1,1)$ $(0,3)$		