

Übergang zur Quantenmechanik beim 2-Körperproblem:

$$H \rightarrow \underline{H} \left(\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_R, \vec{\Pi} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \right)$$

$$\underline{H} \psi_{\text{ges}}(\vec{r}, \vec{R}) = E_{\text{ges}} \psi_{\text{ges}}(\vec{r}, \vec{R})$$

$$\text{Ansatz: } \psi_{\text{ges}} = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}}{\sqrt{V}} \psi(\vec{r})$$

Schwerpunktbewegung

Relativbewegung

$$\underline{H} = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} + \frac{\vec{\Pi}^2}{2M} + V(r)$$

einsetzen in zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{\vec{P}^2}{2\mu} + \frac{\vec{\Pi}^2}{2M} + V(r) \right) \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r}) \right) = E_{\text{ges}} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r}) \right)$$

$$\left(\frac{\vec{P}^2}{2\mu} \psi(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \psi(r) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} + V(r) \psi(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

$$= E_{\text{ges}} \psi(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

k-Wellenzahl

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = \underbrace{\left(E_{\text{ges}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right)}_{E} \psi(\vec{r})$$

gleich. f. Relativbewegg.

E als Energie des Eigenwertproblems
f. die Relativbewegg.

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + E$$

↑
Energie der Schwerpunkts-
bewegg.

3.2. Separationsansatz f. Relativbewegung

Wage:

Idee: $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r)$

Sind Kugelkoordinaten günstig r, ϑ, φ

$$\frac{\vec{p}^2}{2\mu} = - \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2\mu} = - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

↑
Kugelkoordinaten

↑
Method der
theor. Physik

(Bilder)

dazu Drehimpuls benötigt

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \xrightarrow{QA} \quad \underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} = \underline{r} \times \frac{\hbar}{i} \underline{\partial}_r$$

$$\underline{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Drehimpuls geschrieben in Kugelkoordinaten

$$\underline{L} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} & -\cos \varphi \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} & \\ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} & -\sin \varphi \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} & \\ & & \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \begin{matrix} L_x \\ L_y \\ L_z \\ \uparrow \\ ij \end{matrix}$$

Zur Erinnerung: in Übung gezeigt

$$[L_i, L_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} L_k$$

$$[L^2, L_i] = 0 \quad \rightarrow \text{gemeinsame Messbarkeit}$$

Wählen: L_z und L^2 haben beide gemeinsame Satz von Eigenfkt.

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = i m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\left[\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \right] Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = -l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Siehe Koth

bzw QM:

$$L_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$

$$L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

Eigenfunktionen sind Kugelharmoniken Y

l, m nummerieren die Kugelharmoniken Y_{lm}

$$l: 0, 1, 2, 3, \dots; \quad m = m(l) = m_l = \underline{\underline{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, +l}}$$

Y_{lm} kann über assoziierte (zugeordnete)

Legendre polynome definiert werden

Ausatz: $\psi(\vec{r}) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) R(r)$

Dgl. f. $R(r)$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right\} Y_{lm} R = E Y_{lm} R$$

Y_{lm} kann dann gekürzt werden

$$\hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

$$\left\{ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)}_* + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right\} R(r) = E R(r)$$

1d. Dgl. ! nur noch r als Variable

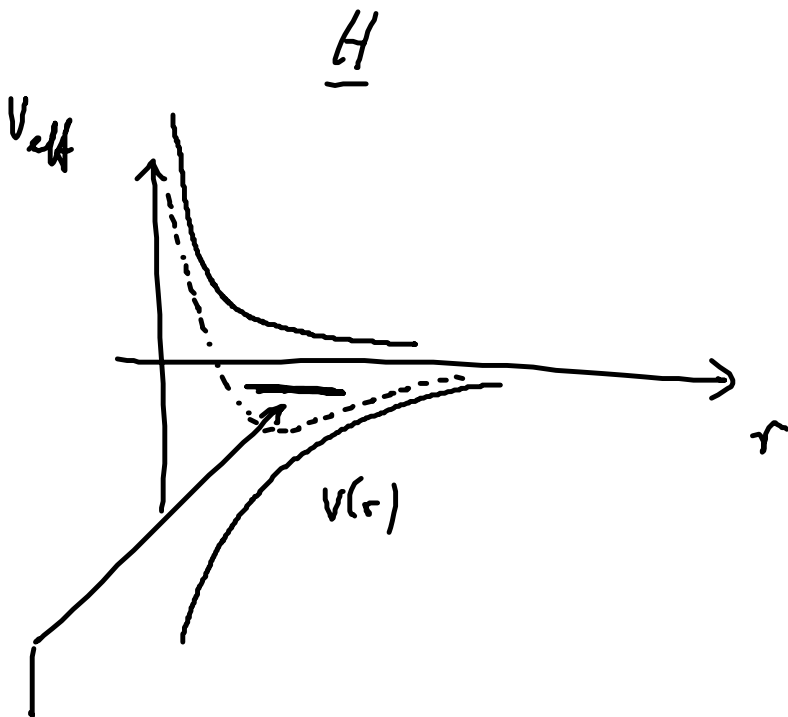
$R(r)$ ist getrennt

Ausatz: $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ um Analogie zu Helmholtz-Gleichung

in * einsetzen: $* R = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r)$

↓ Dgl. f. $u(r)$

$$\left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2}}_{\text{kinetische E.}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)}_{\text{effektives Potential (1d)}} \right) u(r) = E u(r)$$



$$V(r) \sim -\frac{1}{r}$$

$$V_{\text{Drehimpul}} \sim \frac{1}{r^2}$$

$$V_{\text{eff}} \sim \frac{1}{r^2} - \frac{1}{r}$$

gebund. Zustände?

$$E < 0$$

gebund. Zustände

$$E > 0$$

ungebund. Zustände

3.3. Das Wasserstoffatom

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \begin{array}{l} \text{Proton: } e \\ \text{Elektron: } -e \end{array}$$

3.3.1. Radialbewegung (r) und Abbruchbedingung

r Normie in der Dgl. für $u(r)$, suche $E < 0$ (gebunden)

$r \rightarrow \rho = kr = \text{dimensionlos}$

$$[k] = \frac{1}{m}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu(-E)}$$

> 0

in Dgl $u(r)$ überall $r \rightarrow \rho$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \quad \text{z.B.} \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial (kr)^2} \quad \underline{\underline{=}} \quad k^2$$

$$\downarrow$$

$$\underline{\underline{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\hbar^2} 2\mu(-E) \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} = E \frac{\partial^2}{\partial \rho^2}}}$$

für alle Terme:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) u(\rho) = 0$$

$$\rho_0 = \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{2\mu}}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{-E}} = \text{Kowhler}$$

asymptotisch Verhalten:

$u(\rho)$ für kleine ρ ($\rho \rightarrow 0$) und große ρ ($\rho \rightarrow \infty$)

untersuchen:

$$\underline{\rho \rightarrow 0} \quad \frac{1}{\rho^2} \gg \frac{1}{\rho} \quad \text{"'"} \equiv \rho$$

$$u'' - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} u = 0$$

Dgl. 2. Ordng, Lösung ist bekannt:

$$u = A \rho^{\ell+1} + B \rho^{-\ell} \quad (2 \text{ Lösungen, } A, B \text{ - Konstante})$$

$\rho \rightarrow 0$: divergente Wellenfunktion $\rho^{-\ell}$
nicht interpretierbar nach Born

$$\rightarrow B = 0$$

$$u \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^{\ell+1}$$

$$\underline{\rho \rightarrow \infty} \quad \frac{1}{\rho} \gg \frac{1}{\rho^2}$$

$$u'' - u = 0$$

$$u = A e^{+\rho} + B e^{-\rho}$$

$$e^{+\rho} \text{ ist nicht normierbar} \rightarrow A = 0$$

$$u \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} e^{-\rho}$$

Ausatz f. Dgl. von $u(\rho)$ ab:

$$u(\rho) = \underbrace{\rho^{l+1}}_{\text{Stellt das asymptotische Verhalten sicher}} \underbrace{e^{-\rho} w(\rho)}_{\text{gesucht}}$$

Stellt das asymptotische Verhalten sicher

einsetzen in Dgl. $u(\rho)$ und Dgl. $w(\rho)$ ableiten
mit Produktregel, Bin. Kettenr. und Durchstreichen

$\frac{1}{2}$ Seite:

$$\rho w'' + 2(l+1-\rho)w' + (-2(l+1) + \rho_0)w = 0$$

Dgl. f. $w(\rho)$. kann durch eine Potenzreihe gelöst werden

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad a_k \text{ ist gesucht}$$

Einsetzen in w'' :

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(k(k-1) \rho^{k-1} + 2(\ell+1)k \rho^{k-1} - 2k \rho^k + (\rho_0 - 2(\ell+1)) \rho^k \right) = 0$$

Rekursionsformel f. a_k ?

$$\sum_{k=0}^{\infty} (\quad) \rho^k$$

0

in den ersten Term Index verschieben. $k \rightarrow k+1$

$$a_{k+1} \left\{ (k+1)k + 2(\ell+1)(k+1) \right\} + a_k \left\{ -2k + \rho_0 - 2(\ell+1) \right\} = 0$$

$$a_{k+1} = a_k \frac{2(k+\ell+1) - \rho_0}{(k+1)(k+2\ell+2)}$$

alle a_k können bei einer vorgegebenen a_k bestimmt werden

bei Aufsummation um β sich gestellt werden, daß Reihe konvergiert

Kriterium f. Konvergenz:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \xrightarrow{k \rightarrow \text{groß}} \frac{2k}{k^2} \rightarrow \frac{2}{k}$$

Vergleich direkt Konvergenzkriterium mit:

$$e^{2\beta} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (2\beta)^k$$

$$\frac{b_{k+1}}{b_k} = \frac{2^{k+1} / (k+1)!}{2^k / k!} = \frac{2}{k+1} \rightarrow \frac{2}{k}$$

$$\text{weil } u \sim e^{-\beta} \beta^{k+1} \text{ und } \underline{\underline{e^{\beta}}}$$

u ist dann nicht normierbar!

es sieht so aus als finden wir keine normierbare Lösung.

Reihe künstlich Abbrechen der Reihe und den

$$N\text{-te Glied } \sum_0^{\infty} \rightarrow \sum_0^N \text{ weil } a_{N+1} = 0$$

alle Werte a_k mit $k > N$ sind Null.

die entstehend Polynome sind weiter Lösung f. w

aus der Rekursion folgt für $k = N$

$$a_{N+1} = a_N \frac{2(N+l+1) - \rho_0}{(N+1)(N+2l+2)}$$

//

0

$$\underbrace{2(N+l+1) - \rho_0 = 0}$$

wenn man das fordert, so ist auch $a_{N+1} = 0$

was bedeutet dies physikalisch?

$$\rho_0 = \left(\frac{2\mu}{|E|} \right)^{1/2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 2(N+l+1)$$

um β geht damit Wellenfunktion normierbar.

$$|E| = \frac{2\mu e^4}{\hbar^2 4(4\pi\epsilon_0)^2 \underbrace{(N+l+1)^2}_{n^2}}$$

Nat. Konstanten n^2

Bedingg. f Energie, $N = 0, 1, 2, 3 \dots$

N ist unabhangige QZ

$l = 0, 1, 2 \dots$

$$E_n = -E_{Ryd} \cdot \frac{1}{n^2}$$

↑
un QZ

↑

gebunde

$n = 1, 2, 3 \dots$

$$13,6 \text{ eV} \\ = E_{Ryd}$$

Energie eigenwert d. H-Atoms

n wird Haupt-QZ genannt