6.5 Sphärische Koordinaten

Motivation: Zentralsymmetrische Felder spielen eine wichtige Rolle in der Physik:

■ Zwei-Körper-Problem: Bewegung zweier ausschließlich abstandsabhängig wechselwirkender Massen oder Ladungen bei $\underline{r}_1$ und $\underline{r}_2$ (kein äußeres Feld) ist auf eine eindimensionale Bewegung in einem $U_{eff}(r)$ zurückführbar; Lagrange-Formalismus (→ kommendes Semester)

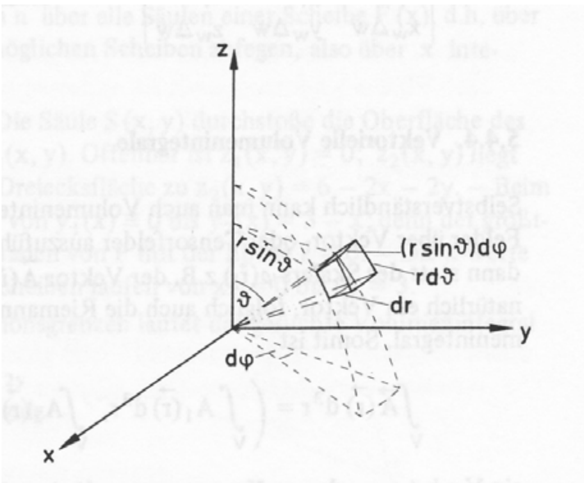
$$L(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dot{x}_1, \dot{y}_1, \dot{z}_1, \dot{x}_2, \dot{y}_2, \dot{z}_2) = T - U = ... = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 - U(r)\right) \underset{L=mr^2\dot{\varphi}}{=} \frac{m}{2}\dot{r}^2 + \underbrace{\frac{L^2}{2mr^2} - U(r)}_{U_{eff}}$$

■ Wasserstoffatom: Löse Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\psi = E\psi$, der Hamilton-Operator

$\hat{H} = \frac{(-i\hbar\underline{\nabla})^2}{2m} + U(r)$ wird in sphärischen Koordinaten benötigt.

Transformation:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\ y &= r\sin\vartheta\sin\varphi \\ z &= r\cos\vartheta \end{aligned}$$



Koordinatenlinien

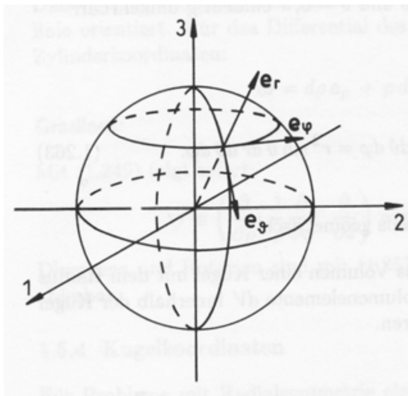
φ, ϑ = const → vom Ursprung ausgehende Strahlen: $0 \le r < \infty$,

r, ϑ = const → zur x-y-Ebene parallele Kreise mit Zentrum auf der z-Achse: $0 \le \varphi \le 2\pi$,

r, φ =const → Halbkreis mit Zentrum im Ursprung durch z-Achse berandet: $0 \le \vartheta \le \pi$.

Basis

$$\underline{e}_r = \frac{\frac{\partial \underline{r}}{\partial r}}{\left|\frac{\partial \underline{r}}{\partial r}\right|} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi \\ \cos\vartheta \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_\vartheta = \frac{\frac{\partial \underline{r}}{\partial \vartheta}}{\left|\frac{\partial \underline{r}}{\partial \vartheta}\right|} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta\sin\varphi \\ -\sin\vartheta \end{pmatrix}, \quad \underline{e}_\varphi = \frac{\frac{\partial \underline{r}}{\partial \varphi}}{\left|\frac{\partial \underline{r}}{\partial \varphi}\right|} = \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$



Die Einheitsvektoren sind von φ und ϑ-abhängig (also nicht ortsfest), aber orthogonal.

Funktionaldeterminante:

$$\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\vartheta,\varphi)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \vartheta} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \vartheta} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \vartheta} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{vmatrix} =$$

$$= r^2\sin^2\vartheta\,\sin\vartheta\,\cos^2\varphi + r^2\sin^3\vartheta\,\sin^2\varphi + r^2\cos^2\vartheta\,\sin\vartheta\,\sin^2\varphi + r^2\sin^3\vartheta\,\cos^2\varphi = r^2\sin\vartheta\,.$$

Volumenelement: $d^3r = dx\,dy\,dz = r^2\sin\vartheta\;dr\,d\vartheta\,d\varphi$

geometrisch: $d^3r = dr\;r d\vartheta\;(r\sin\vartheta)\,d\varphi$ (vgl. Abbildung oben)

Def.: Raumwinkelelement $d\Omega = \sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi \quad d^3r = dr\;r^2\,d\Omega$

$d\Omega = \frac{\text{Flächenelement}}{\text{Radius}^2}$, als Verallgemeinerung von $d\varphi = \frac{\text{Bogenelement}}{\text{Radius}}$

Die Addition aller Raumwinkelelemente ergibt

$$\int d\Omega = \int_0^\pi \sin\vartheta\,d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi = (-\cos\vartheta)\Big|_0^\pi \cdot 2\pi = 4\pi = \frac{4\pi R^2}{R^2} = \frac{\text{Kugeloberfläche}}{\text{Radius}^2}\,.$$

■ Kugelvolumen (Radius R)

$$V = \int_V d^3r = \int_0^R dr\,r^2 \int d\Omega = \int_0^R \underbrace{4\pi r^2\,dr}_{\substack{\text{infin. dünne Kugel-}\\ \text{schicht der Dicke } dr}} = 4\pi\,\frac{r^3}{3}\Big|_0^R = \frac{4\pi}{3}R^3 \quad \left(\text{statt } V = \int_V d^3r = \int\limits^{x^2+y^2+z^2 = R^2} dx \int dy \int dz\right)$$

metrische Koeffizienten: $g_r = 1,\; g_\vartheta = r,\; g_\varphi = r\sin\vartheta \quad \to$

Nabla-Operator: $\underline{\nabla} = \underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \underline{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

Beachte: Da die EHV von φ und ϑ abhängen, müssen sie links von den Ableitungen stehen!

■ Gradient eines kugelsymmetrischen Skalarfelds: $\operatorname{grad}\phi(r) = \underline{\nabla}\,\phi(r) = \frac{\partial\phi(r)}{\partial r}\,\underline{e}_r = \phi'(r)\frac{\underline{r}}{r}$.

"Umständlicher":

$$\operatorname{grad}\phi(r) = \frac{\partial\phi}{\partial x}\underline{e}_x + \frac{\partial\phi}{\partial y}\underline{e}_y + \frac{\partial\phi}{\partial z}\underline{e}_z = \frac{d\phi}{dr}\frac{\partial r}{\partial x}\underline{e}_x + \ldots = \frac{d\phi}{dr}\frac{x}{r}\underline{e}_x + \ldots = \frac{d\phi}{dr}\left(\frac{x}{r}\underline{e}_x + \frac{y}{r}\underline{e}_y + \frac{z}{r}\underline{e}_z\right) = \phi'(r)\frac{\underline{r}}{r}$$

Laplace-Operator:

$$\Delta = \underline{\nabla}\cdot\underline{\nabla} = (\ldots)\cdot(\ldots) = \ldots \text{ Produktregel ! } \ldots = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}}_{\text{Radialanteil}} + \underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \frac{\cos\vartheta}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}}_{\text{Winkelanteil}}$$

Oft verwendete kompakte Schreibweise: $\Delta\phi(\underline{r}) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\phi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\phi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\phi}{\partial^2\varphi}$

(beweisen).

■ Für ein kugelsymmetrisches Skalarfeld finden wir die drei identischen Ausdrücke

$$\Delta\phi(r) = \begin{cases} \frac{\partial^2\phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\phi)}{\partial r^2} \\ \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\phi}{\partial r}\right) \end{cases}$$

(überprüfen) .