Zentralpotential (in Relativkoordinaten)

$V = V(r)$, $r = |\vec r|$ V invariant unter Drehung (ϑ, φ) (Kugelsymmetrisch)

→ Kugelkoordinaten: $\Delta_{Kugel} = \left(\frac{1}{r}\partial_r r\right)^2 + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin\vartheta}\left(\partial_\vartheta \sin\vartheta\, \partial_\vartheta + \frac{1}{\sin\vartheta}\partial_\varphi^2\right)}_{= -\frac{\vec L^2}{\hbar^2 r^2}}$

→ Drehimpuls(-erhaltung): $\vec L^2 \neq \vec L^2(r) \Rightarrow [\vec L^2, r] = [\vec L^2, \partial_r] = 0$

Da auch $[\vec L^2, \vec L^2] = 0$ folgt $[\vec L^2, H] = 0$, $\vec L^2$ und H teilen Eigenfunktionen

Kugelflächenfunktionen Y_{lm}: $\vec L^2 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$
$L_3 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \hbar m\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$

Separationsansatz: $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$, einsetzen, $\vec L^2$ auf Y anwenden und Y kürzen

$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{Kugel} + V(r)$, $\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac1r \partial_r r\right)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] + V(r) - E\right) R(r) = 0$

Betrachte kinetischen Term (mit Ableitung):

$\left(\frac1r\partial_r r\right)^2 R(r) = \frac1r \partial_r^2\, r R(r)$ vereinfacht sich durch Subst. $u(r) = rR(r)$

$$0 = \partial_r^2 u(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}u(r) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))u(r)$$

Betrachte nun konkretes Potential $V(r) = -\frac{A}{r}$ (Wasserstoff: $A = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$)

→ Dimensionslose Größen: $E_{kin} \sim \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a_0^2}$, $E_{pot} \sim -\frac{A}{a_0}$ $\Leftrightarrow$ $a_0 = \frac{\hbar^2}{mA}$ (Längenskala)

Subst. $r = \xi a_0$ → $\partial_r = \frac{1}{a_0}\partial_\xi$

$$0 = \left(\partial_\xi^2 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + \underbrace{\frac{2ma_0^2}{\hbar^2}}_{\text{Einheit } \frac{1}{\text{Energie}}}\left\{E + \frac{2ma_0}{\hbar^2}\frac{A}{\xi}\right)u(\xi)\right. \quad = \frac{2}{\xi}$$

$0 \overset{!}{=} \frac{dE}{da_0} = \frac{d}{da_0}\left(\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} - \frac{A}{a_0}\right) = -\frac{\hbar^2}{ma_0^3} + \frac{Aa_0}{a_0^3} = \frac{A}{a_0^3}\left(a_0 - \frac{\hbar^2}{Am}\right)$

Extremwert der Energie

Einheit $\frac{1}{\text{Energie}}$ → Def: $R_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$

Idee: · Vom System tatsächlich einstellbare Parameter der DGL sind

l – „gute Quantenzahl", die Drehimpuls charakterisiert

E – noch keine Quantenzahl, da es sich aber um DGL 2. Ordg. handelt und Term E/R_0 (dimensionslos) auftritt: wähle $E/R_0 = -1/n^2$ (dimensionslos)

· Um möglichst einfache DGL zu erhalten (linear in n, Koeff. gleich 1) subst. $\xi = n/2 \cdot x$ → $\partial_\xi = \frac{2}{n}\partial_x$

$$0 = \left[\partial_x^2 - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{n^2}{4}\left(-\frac{1}{n^2} + \frac{4}{nx}\right)\right]u(x)$$

$$= \left(\partial_x^2 - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{n}{x} - \frac14\right)u(x)$$

Siehe auch: ~~Für~~ Lösung finale DGL Zentralpotential