

# 4.5. Kugelsymmetrische Potentiale

$$V = V(r)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Beispiele für  $V(r)$

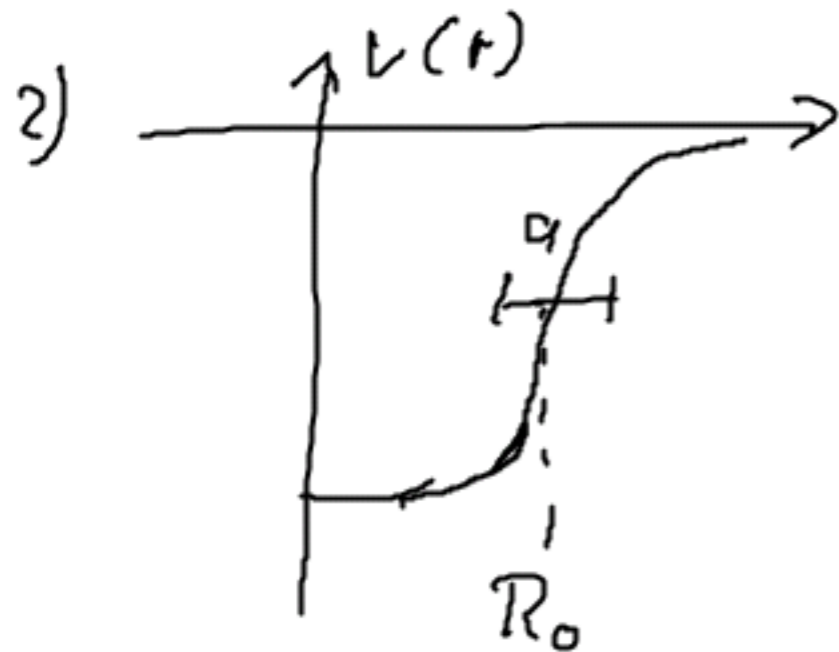


$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} \quad \text{Coulombpotential}$$

$\leadsto$  H-Atom

$$V(r) = -\frac{\alpha Z_{\text{eff}}(r)}{r}$$

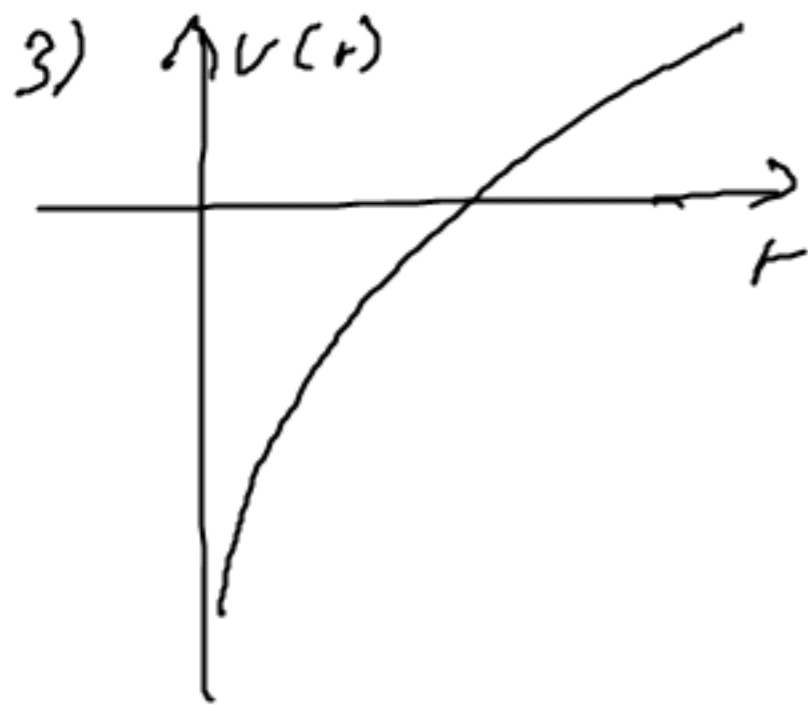
gute Näherung für größere Atome



$$V(r) = -V_0 \left[ 1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right) \right]^{-1}$$

Woods-Saxon Potential

$\leadsto$  Kernphysik



$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} + \beta r$$

Potential für Quarkonium  
 99

→ Elementarteilchenphysik

### Vorgehen

- 1.) 3-D Schrödinger-Gleichung
- 2.) Zerlegen in Radial- und Winkelanteil  
 ⇒ Winkelanteil für alle Probleme gleich  
 Radialanteil für alle Probleme unterschiedlich
- 3.) Skizzieren der Lösung für Winkelanteil  
 ⇒ allgemeinen Eigenschaften von Zentralpotentialen
- 4.) Lösung des Radialanteils für H-Atom skizzieren  
 ⇒ spezielle Eigenschaften des H-Atoms

# 7.) 3-D Schwingungsgleichung

bisher

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \Psi(x) = E \Psi(x)$$

$\mu$ : Masse

Potential

$E_{kin}$  in  $x$ -Richtung  $\frac{p^2}{2\mu}$

nun  $x, y, z$

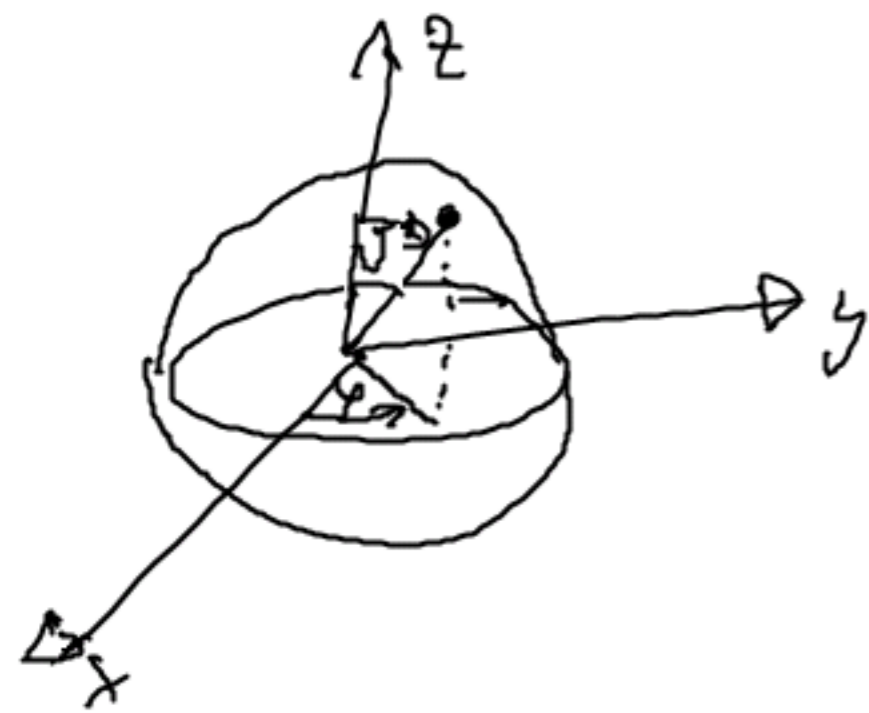
$$\Rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dy^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} + V(x, y, z) \right\} \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

kompakter

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(x, y, z) \right\} \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

$$\Delta = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}$$

Laplace-Operator



$r$  = Länge des Ortsvektors

$\vartheta$  = Winkel zwischen  $z$ -Achse und Vektor  $\vec{r}$

$\varphi$  = Winkel zwischen  $x$ -Achse und Projektion auf  $x$ - $y$ -Ebene

Laplaceoperator in Kugelkoordinaten

$$\Rightarrow \left\{ \underbrace{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)}_r + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right)}_{\vartheta} + \underbrace{\frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}_{\vartheta, \varphi} \right\} \Psi(r, \vartheta, \varphi) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \{ E - V(r) \} \Psi(r, \vartheta, \varphi) = 0$$

allgemeine Form der Schrödingergl für Zentralpotential

2.) zerlegen in Radial und einen Winkelanteil

Lösungsansatz  $\Psi(r, \nu, \varphi) = R(r) Y(\nu, \varphi)$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) Y + \frac{1}{r^2 \sin \nu} \frac{\partial}{\partial \nu} \left( \sin \nu \frac{\partial Y}{\partial \nu} \right) R + \frac{1}{r^2 \sin^2 \nu} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \cdot R \right.$$

$$\left. + \frac{2\mu}{\hbar^2} \{ E - V(r) \} R \cdot Y = 0 \quad \bigg/ \cdot r^2 / R Y$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu \nu^2}{\hbar^2} \{ E - V(r) \}}_{\text{nur } r} = - \underbrace{\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \nu} \frac{\partial}{\partial \nu} \left( \sin \nu \frac{\partial Y}{\partial \nu} \right) + \frac{1}{\sin^2 \nu} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right\}}_{\text{nur } \nu, \varphi}$$

$$= l(l+1)$$

↑ Drehimpuls

noch einmal:  $Y(\nu, \varphi) = \Theta(\nu) \Phi(\varphi)$

$$\Rightarrow \sin^2 \nu \left\{ \frac{1}{\Theta \sin \nu} \frac{\partial}{\partial \nu} \left( \sin \nu \frac{\partial \Theta}{\partial \nu} \right) + l(l+1) \right\} = - \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = m^2$$

↑  $L_z$

⇒ 3 Gleichungen

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + m^2 \psi = 0$$

Azimutalgleichung



$$\frac{1}{\Theta(\vartheta) \sin \vartheta} \left( \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \right) + l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = 0$$

Polargleichung

$$\frac{1}{r^2 \chi(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} [E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2M r^2}] = 0$$

Radialgleichung

### Forderungen an Lösungen

a) eindeutig auf Kugel

z.B.  $f(\varphi) = f(\varphi + 2\pi)$

b) quadratintegrierbar

$$\int dV |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 = \text{endlich} = 1$$

### 3.) Lösen des Winkelanteils

mögliche Lösung  $\alpha e^{im\varphi} + \beta e^{-im\varphi}$

aber: keine ausgezeichnete Achse  $\rightarrow$  keine Azimutalabhängigkeit für  $|\psi(\varphi)|^2$

$$\phi_m(\varphi) = \bar{A} e^{im\varphi}$$

mit  $\kappa$ )  $\phi_m(\varphi) = \phi_m(\varphi + 2\pi) \Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

(magnetische Quantenzahl,  $L_z$ )

Normierung:  $\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

### Polargleichung

Lösungen sind bekannt

$$\Theta_\ell^m(\nu) = N_\ell^m P_\ell^m(\cos \nu)$$

Normierungsfaktor

$P_\ell(\cos \nu)$  für  $m=0$

Legendrepolynome

$P_\ell^m(\cos \nu)$  für  $m \neq 0$

zugeordnete Legendrepolynome

physikalisch sinnvolle Lösungen nur für

$$|m| \leq l \quad \text{und} \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = -l, -(l-1), -(l-2), \dots, l-1, l$$

$$Y_l^m(\nu, \varphi) = \Theta_l^m(\nu) \Phi_m(\varphi)$$

$Y_l^m(\nu, \varphi)$  bilden vollständiges Orthonomalsystem

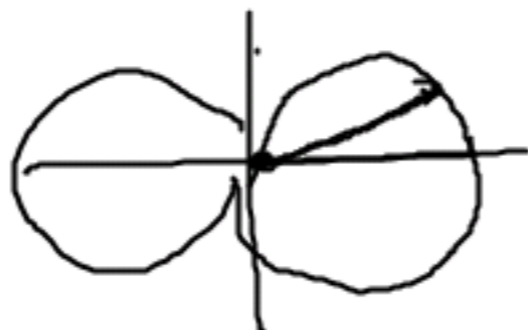
$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\nu \sin \nu \ Y_l^{*m}(\nu, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\nu, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Winkelverteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$|Y_l^m(\nu, \varphi)|^2 = \frac{1}{2\pi} |\Theta_l^m(\nu)|^2$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{+im\varphi}$$

$Y_{l,m}$





$$\sum_m |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 = \text{const} \quad (\text{isotrope Verteilung})$$

#### 4. Radialgleichung

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ E - V(r) - \frac{L(L+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right\} = 0$$

= klassisch Zentrifugalbarriere

$$\frac{L^2}{2\mu r^2} = \frac{L(L+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

$$L^2 = \hbar^2 L(L+1)$$

$R(r)$ : radiale Wellenfunktion der 3D-Schrödingergl.

$$P(r) = r^2 |R(r)|^2$$

↑  
mit  $r^2$  wichten

Setze  $u(r) = r R(r)$

$$\Rightarrow \frac{1}{ru} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u}{r} \right) \right\} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right\} = 0$$

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

$$= \frac{1}{ru} (u' - u' + r u'') = \frac{u''}{u}$$

$$\leadsto \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right\} u(r) = 0$$

$u(r)$ : Lösung einer 1-dimensionalen Schrödinger-Gl.

$$P(r) = |u(r)|^2$$

Zum Lösen für H-Atom: • spezifizieren von  $V(r)$

• viele Lösungen  $u_n(r)$  sowie Energien  $E_n$

$$\Rightarrow \frac{d^2 u_n}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\{ E_n + \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right\} u_n(r) = 0$$

gleichung dimensionslos

$$\rho = \frac{r}{na_0}$$

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2}$$

$a_0$ : Bohrscher Radius

$$\Rightarrow \frac{d^2 u_n(\rho)}{d\rho^2} - \left\{ 1 - \frac{2n}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} u_n(\rho) = 0$$

Energie  $\swarrow$   $\swarrow$   $\swarrow$   
Coulombenergie  $\swarrow$  Zentrifugalenergie

$\rho$  groß:  $\frac{d^2 u}{d\rho^2} - u(\rho) = 0$

$$u(\rho) \propto e^{\pm \rho}$$

nur  $u(\rho) \propto e^{-\rho}$  physikalisch sinnvoll

$\rho$  klein:  $\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) \Rightarrow u(\rho) \propto \rho^{l+1}$

Ansatz für Gesamtlösung

$$u(\rho) \propto \rho^{l+1} e^{-\rho} G_n^l(\rho)$$

$G_n^l$  Polynom

des Grades  $n-l-1$  (Zahl der radialen Knoten in Lösung)

Lösung:  $G_{nr}^l(r) \propto L_{n+l}^{2l+1}(r)$  zugeordnete Laguerre-Polynome  
(tabelliert)

mit  $n = 1, 2, 3, \dots$   
 $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  } nur dann physikalisch  
Sinnvolle Lösungen

$$\Rightarrow \bar{E}_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{n^2}$$

identisch mit Energien  
des Bohrschen Atommodells

$$m = -l, -(l-1), -(l-2), \dots, l-1, l$$

•  $E$  hängt nur von  $n$  ab

$$\bullet \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

gilt alles nur für  $l$ -Werten: außer

$l = 0$	$1$	$2$	$3$	$4$	$5$
s	p	d	f	g	h

Zahl der reellen Nullstellen in  $\mathbb{R}_{n \times l-1}$

Table 2.1 Orbital angular momentum eigenfunctions.

$$\begin{aligned}
 Y_{0,0} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
 Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
 Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\
 Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\
 Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\
 Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}
 \end{aligned}$$

Normalisation:  $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{l,m}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$

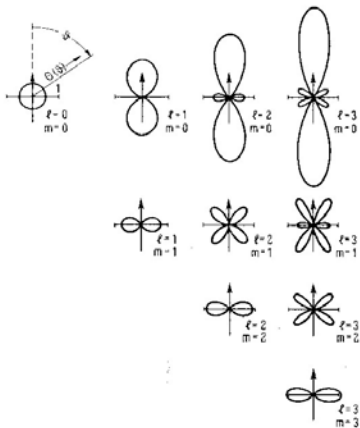


Fig. 33  
Quadrate der Winkelfunktionen  $|\Theta_l^m(\theta)|^2 = 2\pi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$  als Polardiagramm. Die Funktionen sind gemäß (3.20) normiert. Sie geben ein Bild von der Winkelabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Zentralpotential

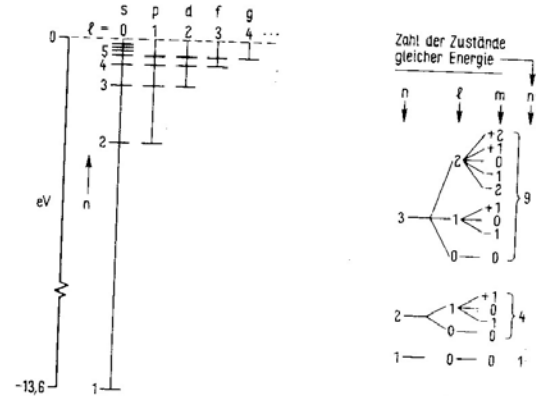


Fig. 28 Links: Termschema des Wasserstoffs. Die nach  $l$  entarteten Terme zum gleichen  $n$  sind getrennt gezeichnet. Rechts: schematische Darstellung der möglichen Quantenzahlen  $l$  und  $m$  zum gleichen  $n$ . Wenn keine äußeren Felder wirken, haben die Zustände mit gleichem  $n$  gleiche Energie

Table 2.2 Radial hydrogenic wavefunctions  $R_{n,l}$  in terms of the variable  $\rho = Zr/(na_0)$ , which gives a scaling that varies with  $n$ . The Bohr radius  $a_0$  is defined in eqn 1.40.

$$\begin{aligned}
 R_{1,0} &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\rho} \\
 R_{2,0} &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} 2(1-\rho)e^{-\rho} \\
 R_{2,1} &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \rho e^{-\rho} \\
 R_{3,0} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} 2\left(1-2\rho+\frac{2}{3}\rho^2\right)e^{-\rho} \\
 R_{3,1} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \rho\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)e^{-\rho} \\
 R_{3,2} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}} \rho^2 e^{-\rho}
 \end{aligned}$$

Normalisation:  $\int_0^\infty R_{n,l}^2 r^2 dr = 1$

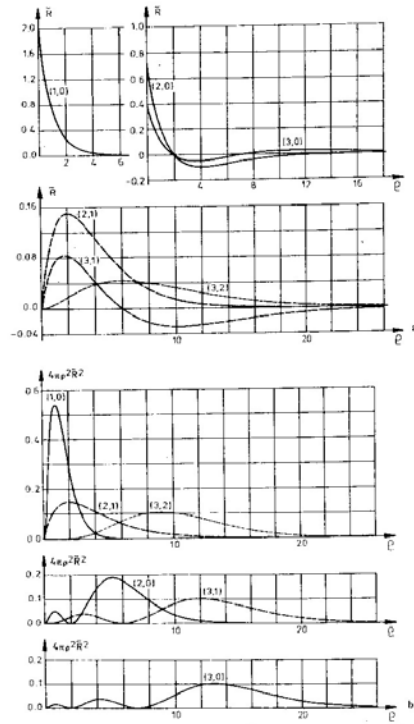


Abb. 10.3. a) Die Wellenfunktion des Radialteils  $R(r) = R(\rho)$  (10.77) des H-Atoms ist gegenüber der dimensionslosen Koordinate  $\rho$  aufgetragen. Die an den Kurven angegebenen Indizes (1, 0), (2, 1), ... usw. entsprechen ( $n, l$ ), wobei  $n$  die Hauptquantenzahl und  $l$  die Drehimpulsquantenzahl ist. b) Die entsprechenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in radialer Richtung, d.h.  $4\pi r^2 |R(\rho)|^2$ , sind gegenüber der dimensionslosen Koordinate  $\rho$  aufgetragen. (vgl. Text)