Springer-Lehrbuch

Grundkurs Theoretische Physik 5/2

Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen

von
Wolfgang Nolting

8. Auflage

Springer Spektrum Heidelberg 2015

Verlag C.H. Beck im Internet:
www.beck.de
ISBN 978 3 662 44229 6

Zu Inhaltsverzeichnis

schnell und portofrei erhältlich bei beck-shop.de DIE FACHBUCHHANDLUNG

Zentralpotential 6

6.1 Allgemeine Aussagen 101
6.1.1 Radialgleichung 101
6.1.2 Lösungsstruktur 105
6.1.3 Aufgaben 107
6.2 Coulomb-Potential (H-Atom) 109
6.2.1 Diskretes Energiespektrum 109
6.2.2 Eigenfunktionen der gebundenen Zustände 116
6.2.3 Laguerre-Polynome 119
6.2.4 Wahrscheinlichkeiten, Erwartungswerte 121
6.2.5 Kernmitbewegung; Zwei-Körper-Problem 126
6.2.6 Aufgaben 129
6.3 Kugelsymmetrischer Potentialtopf 133
6.3.1 Radialgleichung 133
6.3.2 Bessel-Funktionen 134
6.3.3 Gebundene Zustände 139
6.3.4 Kontinuumszustände 141
6.3.5 Aufgaben 143
6.4 Das freie Teilchen 146
Kontrollfragen 149

W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/2*, Springer-Lehrbuch,
DOI 10.1007/978-3-662-44230-2_6, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2015

Nach den eher abstrakten Überlegungen des vorigen Kapitels zur Observablen *Drehimpuls* soll nun wieder ein Abschnitt folgen, in dem wir anhand von konkreten und wichtigen Beispielen praktische Lösungsmethoden erarbeiten wollen. Das theoretisch-quantenmechanische Grundproblem liegt stets in der Lösung der Schrödinger-Gleichung, d. h. in dem Eigenwertproblem des Hamilton-Operators. Die Schrödinger-Gleichung ist im Allgemeinen eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung und damit *fast nie* streng lösbar. Für eindimensionale Problemstellungen geht sie dagegen in eine gewöhnliche Differentialgleichung über, die mathematisch wesentlich einfacher zu behandeln ist und in Kap. 4 in der Tat für einige einfache Modellsysteme exakt gelöst werden konnte. Eine bisweilen erfolgreiche Lösungsmethode zielt deshalb darauf ab, komplizierte mehrdimensionale Schrödinger-Gleichungen durch geschickte Wahl der Variablen in mehrere unabhängige, gewöhnliche Differentialgleichungen zu zerlegen. Man nennt dieses Verfahren *Separation der Variablen*, das wir im Übrigen schon an vielen Stellen dieses **Grundkurs: Theoretische Physik** angewendet haben. Natürlich lassen sich nicht alle Probleme *separieren*. Es gelingt allerdings insbesondere bei Teilchenbewegungen in einem **Zentralpotential**. Darunter versteht man ein sphärisch symmetrisches Potential,

$$V(\boldsymbol{r}) = V(r) \,, \tag{6.1}$$

in dem die potentielle Energie eines Teilchens nur von dessen Abstand $r = |\boldsymbol{r}|$ von einem fest vorgegebenen Kraftzentrum abhängt und nicht von der speziellen Richtung des Ortsvektors $\boldsymbol{r}$, falls der Koordinatenursprung mit dem Kraftzentrum zusammenfällt. Wir werden in Abschn. 6.1 demonstrieren, wie sich durch Verwendung von **Kugelkoordinaten** jedes Zentralfeldproblem letztlich auf die Lösung einer eindimensionalen *Radialgleichung* zurückführen lässt.

Für die Entwicklung und den Aufbau der Quantenmechanik hat die Theorie des **Wasserstoffatoms** eine ganz entscheidende Rolle gespielt. Wir sind darauf in unserer *induktiven Begründung* der Quantenmechanik in Kap. 1 sehr detailliert eingegangen. Die unwiderlegbaren experimentellen Aussagen z. B.über die diskreten, stationären Energieniveaus, die in dem spektroskopischen Kombinationsprinzip (1.102) ihren überprüfbaren Niederschlag fanden, standen zu Beginn dieses Jahrhunderts in eklatantem Widerspruch zum *klassischen Verständnis* der Physik. Das Hauptanliegen der Protagonisten der *vorquantenmechanischen Zeit* bestand deshalb in der Tat darin, eine *neue Theorie* zu entwickeln, mit der sich insbesondere die Eigenschaften des Wasserstoffatoms verstehen und begründen ließen. Das H-Atom besteht aus einem Elektron und einem einfach positiv geladenen Kern (Proton), deren Wechselwirkung dem Coulomb-Gesetz der Elektrostatik entspricht. Betrachtet man den etwa 2000-mal schwereren Kern als *ruhende Punktladung*, so bewegt sich das Elektron in einem **Zentralpotential** $(V(r) \sim 1/r)$, dem wir in Abschn. 6.2 wegen der erwähnten *historischen Bedeutung* einen relativ breiten Raum widmen werden. Im Abschn. 6.3 wird als Beispiel für ein kurzreichweitiges Zentralpotential der **sphärisch symmetrische Potentialtopf** besprochen, dessen Verständnis vor allem für die Streutheorie des Kap. 9 wichtig werden wird.

6.1 Allgemeine Aussagen

6.1.1 Radialgleichung

Die besondere Symmetrie des Zentralpotentials $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$ legt natürlich die Verwendung von Kugelkoordinaten r, ϑ, φ (5.76) nahe, weil dadurch die potentielle Energie des Teilchens eine Funktion einer einzigen unabhängigen Variablen wird. Für den Hamilton-Operator eines Teilchens der Masse m in einem solchen Zentralpotential,

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(r)\,, \tag{6.2}$$

bleibt dann insbesondere der Laplace-Operator Δ in Kugelkoordinaten zu formulieren. Das haben wir bereits mit (5.83) durchgeführt,

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\,\frac{\partial}{\partial r}\right) + \Delta_{\vartheta\varphi}\,, \tag{6.3}$$

und dabei gefunden, dass der Winkelanteil $\Delta_{\vartheta\varphi}$ sich in einfacher Weise durch den Operator des Bahndrehimpulsquadrats $\boldsymbol{L}^2$ ausdrücken lässt:

$$\Delta_{\vartheta\varphi} = -\frac{1}{r^2\hbar^2}\,\boldsymbol{L}^2\,. \tag{6.4}$$

Damit lautet der Hamilton-Operator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{r^2}\,\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\,\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2m\,r^2}\,\boldsymbol{L}^2 + V(r)\,. \tag{6.5}$$

Die Operatoren (6.2) und (6.5) sind natürlich zunächst nur bis auf den *kritischen* Punkt $r = 0$ äquivalent. Da nach (5.80) und (5.82) die Drehimpulsoperatoren $\boldsymbol{L}^2$ und L_z nur auf die Winkel ϑ, φ wirken, erkennen wir unmittelbar die wichtige Aussage:

$$\left[H,\,L_z\right]_- = \left[H,\boldsymbol{L}^2\right]_- = 0\,. \tag{6.6}$$

Die drei Operatoren L_z, $\boldsymbol{L}^2$ und H werden also einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen (Eigenzuständen) besitzen. Dies bedeutet insbesondere, dass $\boldsymbol{L}^2$ und L_z Konstante der Bewegung sind (3.194), was allerdings auch nicht überraschen kann, da ja bereits in der Klassischen Mechanik der Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ unter dem Einfluss von Zentralkräften nach Richtung und Betrag konstant bleibt. Die Poisson-Klammern aller Komponenten von $\boldsymbol{L}$ mit der klassischen Hamilton-Funktion verschwinden deshalb, was sich wiederum nach dem Korrespondenzprinzip (Abschn. 3.5) auf die entsprechenden quantenmechanischen Kommutatoren überträgt und zu (6.6) führt. – Es sei aber auch noch einmal an die Überlegungen in Abschn. 5.1.3 erinnert. Da H im Falle eines Zentralpotentials ein gegenüber

Drehungen invarianter, skalarer Operator ist, muss er nach (5.47) mit jeder Komponente des Bahndrehimpulses vertauschbar sein.

Um die Analogie zur entsprechenden klassischen Problemstellung weiter zu verdeutlichen, versuchen wir, dem ersten Term in (6.5) ebenfalls eine anschauliche Bedeutung zuzuordnen. Dies gelingt mit Hilfe des **Radialimpulses** p_r. Dieser ist in der Klassischen Mechanik als die radiale Komponente des Teilchenimpulses $(m\dot{r} = (\boldsymbol{r}/r)\cdot\boldsymbol{p})$ definiert. Bei der Übertragung in die Quantenmechanik ist zu beachten, dass $\boldsymbol{p}$ und $\boldsymbol{r}$ nicht-kommutierende Operatoren sind. Der klassische Ausdruck ist deshalb nach den in Kap. 2 entwickelten Vorschriften zu *symmetrisieren*:

$$p_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) . \tag{6.7}$$

Wir beweisen in Aufgabe 6.1.1, dass p_r der zur Kugelkoordinate r kanonisch konjugierte Impuls ist,

$$[r, p_r]_- = \mathrm{i}\hbar , \tag{6.8}$$

der in der Ortsdarstellung die folgende Gestalt hat:

$$p_r = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r . \tag{6.9}$$

Es handelt sich um einen hermiteschen Operator, wenn man nur solche Wellenfunktionen zulässt, die die folgenden beiden Bedingungen erfüllen (Aufgabe 6.1.1):

$$\lim_{r\to 0} r\,\psi(\boldsymbol{r}) = 0 , \tag{6.10}$$

$$\lim_{r\to\infty} r\,\psi(\boldsymbol{r}) = 0 . \tag{6.11}$$

Die zweite Forderung ist für quadratintegrable Wellenfunktionen selbstverständlich. Schärfer ist deshalb (6.10). – Der Operator p_r ist aus diesem Grund im eigentlichen Sinne **keine** Observable, da das Eigenwertproblem zu p_r im Hilbert-Raum der Wellenfunktionen, die (6.10) und (6.11) erfüllen, keine Lösung hat (s. Aufgabe 6.1.3).

Bilden wir nach (6.9) das Quadrat des Radialimpulses,

$$\begin{aligned} p_r^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\right) \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) , \end{aligned} \tag{6.12}$$

so führt der Vergleich mit (6.3) und (6.4) zu der **Operatoridentität**,

$$\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \qquad (r \neq 0) , \tag{6.13}$$

die unabhängig vom speziellen Potential gültig ist und sich natürlich auch direkt aus den darstellungsunabhängigen Definitionen von p_r und $\boldsymbol{L}$ ableiten lässt (Aufgabe 6.1.2). Mit (6.13) lautet nun der **Hamilton-Operator** des Teilchens im Zentralfeld:

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2\right) + V(r) \qquad (r \neq 0)\ . \tag{6.14}$$

Dieser Ausdruck erinnert stark an den Energiesatz der Klassischen Mechanik ((2.260), Bd. 1), der sich ganz analog aufschlüsseln lässt. Die kinetische Energie besteht aus einer radialen *Translationsenergie* $p_r^2/2m$ und einer *Rotationsenergie* $\boldsymbol{L}^2/2m\,r^2$. Der Term $m\,r^2$ ist mit dem Trägheitsmoment bezüglich des Koordinatenursprungs identisch. Hinzu kommt dann noch die potentielle Energie $V(r)$.

Das Ziel besteht auch im Fall der Zentralpotentiale natürlich darin, die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung** zu lösen, d. h. Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamilton-Operators aufzuspüren:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2m\,r^2} + V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\,\psi(\boldsymbol{r})\ . \tag{6.15}$$

Wir können als Lösung allerdings nur solche Wellenfunktionen zulassen, die die Bedingung (6.10) erfüllen. Nur für diese ist (6.15) im **ganzen** Raum einschließlich des kritischen Punktes $r = 0$ mit der Schrödinger-Gleichung $H\,\psi = E\,\psi$ äquivalent. Hilfreich bei der praktischen Lösung von (6.15) ist die Tatsache, dass wegen (6.6) $\psi(\boldsymbol{r})$ simultane Eigenfunktion zu H, $\boldsymbol{L}^2$ und L_z sein muss. Da der Winkelanteil in (6.15) allein durch $\boldsymbol{L}^2$ bestimmt wird, liegt der folgende **Separationsansatz** nahe:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)\,Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)\ . \tag{6.16}$$

Dabei sind die $Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)$ die in Abschn. 5.1.6 als simultane Eigenfunktionen von $\boldsymbol{L}^2$ und L_z eingeführten Kugelflächenfunktionen, die natürlich nicht mehr bestimmt zu werden brauchen, sondern als bekannt vorausgesetzt werden können:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}^2\,Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi) &= \hbar^2 l(l+1)\,Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)\ ,\\ L_z\,Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi) &= \hbar\,m_l\,Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)\ .\end{aligned}$$

Benutzen wir den Ansatz (6.16) in (6.15), dann können wir den Operator $\boldsymbol{L}^2$ durch seinen Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ ersetzen und anschließend die Gleichung durch $Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)$ dividieren. Übrig bleibt eine Differentialgleichung für $R(r)$, die man als *Radialgleichung* bezeichnet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m\,r^2} + V(r)\right]R(r) = E\,R(r)\ . \tag{6.17}$$

Wir sehen, dass die *magnetische Quantenzahl* m_l nirgendwo auftaucht. Die sich ergebenden Eigenenergien E werden also in jedem Fall, d. h. für jedes beliebige Zentralfeld, $(2l+1)$-fach entartet sein, entsprechend der Anzahl der möglichen m_l-Werte (5.63). Sie werden

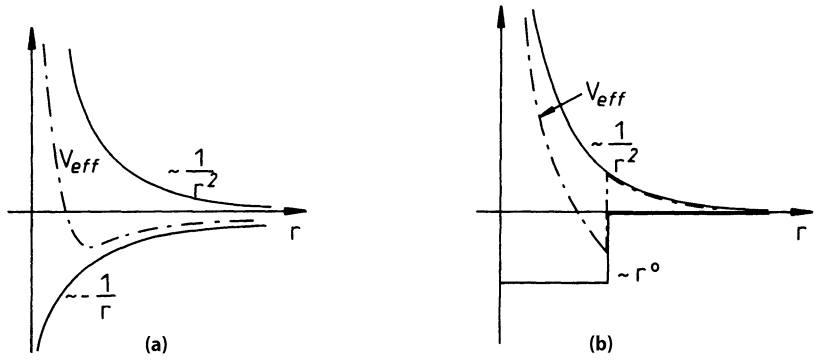

Abb. 6.1 Zwei Beispiele für die r-Abhängigkeit effektiver Zentralpotentiale: **a** Coulomb-Potential; **b** Kastenpotential

jedoch in der Regel von der Quantenzahl l abhängen. Eine Ausnahme stellt lediglich das **Coulomb-Potential** ($\sim 1/r$) dar, für das die Energieniveaus auch bezüglich l entartet sind (*zufällige Entartung*, s. Abschn. 6.2).

Bisweilen empfiehlt sich noch die Substitution,

$$u(r) = r\,R(r)\,, \tag{6.18}$$

mit der wegen

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\,(r\,R(r)) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\,(R(r) + r\,R'(r)) = 2R'(r) + r\,R''(r)$$

aus der Radialgleichung (6.17) eine formal einfache, eindimensionale Schrödinger-Gleichung wird,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V_{\mathrm{eff}}(r)\right] u(r) = E\,u(r)\,, \tag{6.19}$$

die ein Teilchen der Masse m im *effektiven Zentralpotential*

$$V_{\mathrm{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m\,r^2} \tag{6.20}$$

beschreibt. Man bezeichnet den zweiten Summanden als *Zentrifugalbarriere*, die in jedem Fall abstoßend ist und quadratisch mit dem Abstand vom Kraftzentrum abnimmt (Abb. 6.1).

Die Struktur des *effektiven* Potentials weicht in der Regel durchaus drastisch von der des *wahren* Potentials ab. – Auch in der Klassischen Mechanik hatte sich das Konzept des *effektiven* Potentials bei Zentralkraftproblemen als nützlich erwiesen. Damit erhielt der

Energiesatz für die dreidimensionale Bewegung nämlich mathematisch dieselbe Struktur wie der stets integrable der eindimensionalen Bewegung. Das effektive Zentralpotential ((2.255), Bd. 1) hatte dabei genau die Gestalt (6.20); nur ist natürlich $\hbar^2 l(l+1)$ durch das klassische Drehimpulsquadrat $\boldsymbol{L}^2 = \text{const}$ zu ersetzen.

Die Forderung (6.10) an die Lösungswellenfunktion $\psi(\boldsymbol{r})$ überträgt sich mit (6.16) und (6.18) auf $u(r)$ in der Form:

$$u(0) = 0 \,. \tag{6.21}$$

$\psi(\boldsymbol{r})$ soll ferner, zumindest für gebundene Zustände, quadratintegrabel sein. Wegen (5.103),

$$\int \mathrm{d}\,\Omega \left| Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \right|^2 = 1 \,,$$

bedeutet das für $u(r)$:

$$\int \mathrm{d}^3 r \, |\psi(\boldsymbol{r})|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r \, r^2 \, |R(r)|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r \, |u(r)|^2 < \infty \,. \tag{6.22}$$

Diese Bedingung, die schärfer ist als (6.11), verlangt, dass $|u(r)|$ für $r \to \infty$ stärker als $1/\sqrt{r}$ auf Null abfällt.

Mit der wichtigen Randbedingung (6.21) wird das Eigenwertproblem (6.19) offensichtlich völlig äquivalent zu der Lösung einer **eindimensionalen** Schrödinger-Gleichung mit dem Potential:

$$\widehat{V}(q) = \begin{cases} V_{\text{eff}}(q) & \text{für } q > 0 \,, \\ \infty & \text{für } q \le 0 \end{cases} \tag{6.23}$$

Viele der in Kap. 4 für eindimensionale Potentialprobleme abgeleiteten Aussagen werden sich deshalb direkt übernehmen lassen.

6.1.2 Lösungsstruktur

Bevor wir im Detail einige konkrete Zentralpotentiale diskutieren, wollen wir uns einen ersten, noch allgemeinen Überblick über die zu erwartenden Lösungsstrukturen verschaffen. Wir wollen allerdings voraussetzen, dass das Potential im Unendlichen mindestens wie $1/r$ verschwindet und im Nullpunkt entweder regulär ist oder aber dort schwächer als $-1/r^2 \to -\infty$ divergiert. Für alle $0 < r < \infty$ sei $V(r) \le 0$:

$$\begin{aligned} &\lim_{r \to \infty} r \, V(r) = 0 \qquad (\text{oder const}) \,, \\ &\lim_{r \to 0} r^2 V(r) = 0 \,. \end{aligned} \tag{6.24}$$

Das sind für die meisten der uns interessierenden Zentralpotentiale realistische Annahmen. Das Oszillatorpotential $c\,r^2$ scheidet hier allerdings aus! Wegen der ersten Bedingung müssen wir nach unseren allgemeinen Überlegungen in Abschn. 4.1 für $E > 0$ ein kontinuierliches Spektrum erwarten. Gebundene Zustände mit diskreten Energieeigenwerten können nur für $E < 0$ auftreten.

1. *Verhalten für* $r \to 0$

   Im effektiven Potential (6.20) dominiert für $r \to 0$ wegen (6.24) der Zentrifugalterm, sodass wir näherungsweise statt (6.19) die folgende Differentialgleichung zu lösen haben:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u(r) = 0\,.$$

   Diese hat die beiden linear unabhängigen Lösungen:

$$u_1(r) \sim r^{l+1}\,; \qquad u_2(r) \sim r^{-l}\,.$$

   Mit $u_2(r)$ lässt sich für $l > 0$ allerdings die Randbedingung (6.21) nicht erfüllen. Sie scheidet demnach aus (*irreguläre* Lösung). Auch für $l = 0$ ist $u_2(r)$ unbrauchbar, weil dann die zugehörige Wellenfunktion $(\psi(\boldsymbol{r}) \sim (1/r)\,u(r))$ einen $1/r$-Term enthielte, mit dem wegen $\Delta(1/r) = -4\pi\,\delta(\boldsymbol{r})$ ((1.69), Bd. 3) die Schrödinger-Gleichung nicht zu befriedigen wäre. Es bleibt deshalb als *reguläre Lösung*:

$$r \to 0\,: \quad u(r) \sim r^{l+1}\,. \tag{6.25}$$

2. *Verhalten für* $r \to \infty$

   Jetzt wird das gesamte effektive Potential unbedeutend, und (6.19) vereinfacht sich zu:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + E\right) u(r) = 0\,.$$

   Mit der Abkürzung

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,(-E) \tag{6.26}$$

   ergeben sich die beiden linear unabhängigen Lösungen:

$$u_1(r) \sim \mathrm{e}^{-\kappa r}\,; \quad u_2(r) \sim \mathrm{e}^{+\kappa r}\,.$$

   Nach unseren Annahmen (6.24) zum Potential $V(r)$ sind gebundene Zustände nur für $E < 0$ zu erwarten. κ ist dann positiv-reell, und $u_2(r)$ divergiert für $r \to \infty$. Die Lösung $u_2(r)$ verletzt somit die Normierungsbedingung (6.22):

$$r \to \infty\,: \quad u(r) \sim \mathrm{e}^{-\kappa r} \qquad (E < 0)\,. \tag{6.27}$$

Für gebundene Zustände ($E < 0$) legen die beiden asymptotischen Lösungen (6.25) und (6.27) den folgenden **Ansatz** für die vollständige Lösung nahe:

$$u(r) = \mathrm{e}^{-\kappa r}\, r^{l+1}\, P(r)\ , \tag{6.28}$$

$$P(r) = \sum_{\mu} \alpha_\mu\, r^\mu\ . \tag{6.29}$$

Wir werden darauf im nächsten Abschnitt bei der Behandlung des Coulomb-Potentials zurückkommen. Dabei wird insbesondere zu untersuchen sein, ob die Reihe $P(r)$ nach endlich vielen Termen abbricht. Die Argumentation wird der *Sommerfeld'schen Polynommethode* entsprechen, die wir in Abschn. 4.4.5 bei der Diskussion des harmonischen Oszillators eingeführt haben.

Für $E > 0$ lässt sich die Wellenfunktion nicht mehr im eigentlichen Sinne normieren. Sie zeigt oszillatorisches Verhalten (Abschn. 4.1: *klassisch erlaubtes* Gebiet bis $r \to \infty$). Die korrekte vollständige Lösung muss, wie in Kap. 4 des Öfteren durchgeführt, durch *stetiges Anstückeln* an die für $r \to 0$ reguläre Lösung (6.25) gefunden werden.

6.1.3 Aufgaben

Aufgabe 6.1.1

Die klasssiche Definition des *Radialimpulses*

$$p_r^{\mathrm{kl}} = \frac{1}{r}\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})$$

muss in der Quantenmechanik wegen der Nicht-Vertauschbarkeit der Operatoren $\boldsymbol{r}$ und $\boldsymbol{p}$ *symmetrisiert* werden:

$$p_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\ .$$

1. Zeigen Sie, dass für den Radialimpuls gilt:

$$p_r = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{1}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}\,r\ .$$

2. Verifizieren Sie, dass p_r der zu $r = |\boldsymbol{r}|$ kanonisch konjugierte Impuls ist.
3. Zeigen Sie, dass p_r hermitesch ist. Welche Bedingungen sind dazu an die Wellenfunktionen zu stellen?

Aufgabe 6.1.2

Verifizieren Sie mit Hilfe der allgemeinen Definitionen für den Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ und den Radialimpuls p_r,

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}\,; \quad p_r = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\frac{1}{r}\right],$$

die folgenden Operatoridentitäten:

1. $\boldsymbol{L}^2 = \mathrm{i}\hbar\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + \boldsymbol{r}^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2$,
2. $p_r = \frac{1}{r}\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}$,
3. $\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \frac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2$.

Aufgabe 6.1.3

Begründen Sie, warum der Radialimpuls p_r nicht als Observable interpretiert werden kann. Untersuchen Sie dazu das Eigenwertproblem des Operators p_r.

Aufgabe 6.1.4

1. Beweisen Sie die folgende Aussage:

   Ist H ein Hamilton-Operator mit diskretem nach unten beschränktem Spektrum, so ist der Zustand $|\psi\rangle$, der den Erwartungswert

   $$\langle H\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle$$

   minimal macht, gerade der Eigenzustand zum niedrigsten Eigenwert von H.
2. Ein Teilchen bewege sich in einem Zentralpotential. Die gebundenen Eigenzustände werden dann durch die Drehimpulsquantenzahl l unterschieden. Es sei E_l^* der minimale Eigenwert zu einem festen l. Zeigen Sie mit Hilfe von Teil 1), dass für $l_1 < l_2$ stets $E_{l_1}^* < E_{l_2}^*$ gilt.

http://www.springer.com/978-3-662-44229-6

Grundkurs Theoretische Physik 5/2
Quantenmechanik – Methoden und Anwendungen
Nolting, W.
2015, XVII, 630 S. 53 Abb., Softcover
ISBN: 978-3-662-44229-6