

3.2 Das Zentralkraftproblem, (Anhang C)

Ziel dieses Abschnittes ist es, quantenmechanische Zweikörperprobleme mit kugelsymmetrischem Zweikörperpotential lösen zu lernen. Als wichtigstes Beispiel dazu werden wir die Quantenmechanik des Wasserstoffatoms entwickeln, insbesondere das Balmer-Spektrum und die Rutherford'sche Formel für den Wirkungsquerschnitt herleiten.

Von nun an bezeichnen \vec{x} und \vec{p} Orts- und Impulsoperator, die auf den Hilbertraum der quadratintegrierbaren Wellenfunktionen wirken. In der Ortsraumdarstellung haben wir

$$x_j : \text{Multiplikationsoperator} \quad (42)$$

$$p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j};$$

in der Impulsraumdarstellung

$$x_j = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j}, \quad (43)$$

p_j : Multiplikationsoperator.

Es gelten die Heisenberg'schen Vertauschungsrelationen

$$[p_j, x_k] = \delta_{jk} \frac{\hbar}{i} \quad (44)$$

Gemäss Gl. (83), Kap. 2, ist der Hamiltonoperator für ein Zweiteilchensystem (ohne äusseres e.m. Feld)

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \quad (45)$$

Wir nehmen an, dass

$$V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1, -\vec{x}_2); \quad (46)$$

V ist kugelsymmetrisch (rotationsinvariant), falls

$$V(\vec{x}_1, -\vec{x}_2) = V(|\vec{x}_1, -\vec{x}_2|)$$

Es empfiehlt sich, genau wie in der klassischen Mechanik

Schwerpunkts- und Relativkoordinaten zu benutzen:

$$\text{Schwerpunktsmasse: } M = m_1 + m_2 \quad (47)$$

$$\text{Reduzierte Masse: } m = \frac{m_1 m_2}{M}$$

$$\text{Ort des Schwerpunktes: } \vec{X} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{M} \quad (48)$$

$$\text{Relativkoordinaten: } \vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$$

$$\text{Schwerpunktsimpuls: } \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (49)$$

Relativimpuls: $\vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}_2 - m_1 \vec{p}_1}{M}$ (50) 20.

Aus (44) folgt nun, dass

$$\begin{aligned} [P_j, X_k] &= [p_{1j} + p_{2j}, \frac{m_1 x_{1k} + m_2 x_{2k}}{M}] \\ &= \delta_{jk} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{m_1}{M} + \frac{m_2}{M} \right) = \delta_{jk} \frac{\hbar}{i}, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [p_j, x_k] &= \frac{1}{M} [m_2 p_{1j} - m_1 p_{2j}, x_{1k} - x_{2k}] \\ &= \delta_{jk} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{M} (m_2 + m_1) = \delta_{jk} \frac{\hbar}{i}, \end{aligned}$$

d.h. \vec{P} und \vec{X} , resp. \vec{p} und \vec{x} sind zueinander konjugierte Operatoren in dem Sinne, dass für sie wieder die Heisenberg'schen Vertauschungsrelationen gelten. Aus (48) und (42) folgt, dass in der

Ortsraumdarstellung

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}}, \quad \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (51)$$

Denn

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \quad (21)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\hbar}{i} (1-1) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}}$$

Ähnlich verifiziert man die Gl. für \vec{p} .

Sei $H_0 = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}$. Dann gilt:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} \right) \quad (52)$$

Dann

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} = \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} = \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} - \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$$

$$\Rightarrow H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \frac{m_1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} + \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right)$$

$$+ \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \frac{m_2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} - \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$$

woraus (52) unmittelbar folgt.

Der in (45) definierte Hamiltonoperator H hat

also die Form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \quad (53)$$

und wirkt auf Wellenfunktionen

$$\begin{aligned}\psi(\vec{X}, \vec{x}) &\in \mathcal{H}_2 \simeq L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, d^3X d^3x) \\ &= L^2(\mathbb{R}^3, d^3X) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x).\end{aligned}$$

(Man bemerke, dass die Transformation (48) die Jacobi-Determinante 1 hat, so dass $d^3x_1 d^3x_2 = d^3X d^3x$.)

Nun betrachten wir die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{X}, \vec{x}, t) = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right) \right] \psi(\vec{X}, \vec{x}, t) \quad (54)$$

Zur Lösung machen wir den Separationsansatz:

$$\psi(\vec{X}, \vec{x}, t) = \Phi(\vec{X}, t) \varphi(\vec{x}, t). \quad (55)$$

Eingesetzt in (54) folgen die zwei Gleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{X}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} \Phi(\vec{X}, t) \quad (56)$$

(Freie Schrödingergl. für Schwerpunktsbewegung)

und

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right) \varphi(\vec{x}, t) \quad (57)$$

Die allgemeine Lösung von (54) ist eine Linearkombination von Lösungen der Form (55); (Superpositionsprinzip,

Wir setzen $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2}$, $H_r = H_0 + V$;

("r" für "relativ"). Wir wollen nun fragen, unter welchen Annahmen über V die Gl. (57) globale Lösungen hat. Sei A ein Operator, der auf einem im Hilbertraum \mathcal{H} dicht liegenden Bereich $D(A)$ definiert und abgeschlossen ist. A ist selbstadjungiert, falls $D(A^*) = D(A)$ und $A = A^*$ auf $D(A)$. Wir betrachten die Schrödingergl.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H \psi_t, \quad \psi_t \in \mathcal{H}. \quad (58)$$

Satz 1. Falls der Operator H selbstadjungiert ist, hat die Gl. (58) globale Lösungen:

$$\psi_t = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \psi_0, \quad \text{wo } \left\{ e^{-\frac{iHt}{\hbar}} : t \in \mathbb{R} \right\} \quad (59)$$

eine auf dem ganzen Hilbertraum \mathcal{H} definierte, einparametrische, unitäre Gruppe ist; insb. ist sie linear und erhält das Skalarprodukt von \mathcal{H} :

$$\langle \psi_t, \varphi_t \rangle = \langle \psi_0, \varphi_0 \rangle, \quad \forall t.$$

Ein Operator U auf \mathcal{H} ist unitär, falls U linear

ist und $U^* = U^{-1}$. Dann folgt

$$\langle U\psi, U\varphi \rangle = \langle \psi, U^*U\varphi \rangle = \langle \psi, U^{-1}U\varphi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle.$$

Nun fragen wir, wann der Hamiltonoperator $H_r = H_0 + V$ selbstadjungiert ist. Für $V=0$, $H_r = H_0$, haben wir diese Frage in Abschnitt 2.2 durch explizite Rechnung beantwortet, (Glu. (34) - (37)). Ein effizientes Kriterium für die Selbstadjungiertheit von H_r ist im folgenden Satz formuliert.

Satz 2. (Kato-Kriterium) Falls für alle $\varphi \in D(H_0)$

$$\|V\varphi\| \leq a \|H_0\varphi\| + b \|\varphi\|, \quad (60)$$

wo $a < 1$ und $b < \infty$, dann ist $H_{rel.} = H_0 + V$ selbstadjungiert auf $D(H_0)$, (und (58) hat eine globale, die Norm von ψ erhaltende Lösung).

In der folgenden Diskussion sei (60) stets vorausgesetzt. Wir wollen nun das Verhalten der Lösungen der Schrödinger gl. (58) für $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ und $H = H_r = H_0 + V$ untersuchen.

(1) Gebundene Zustände: ψ_t ist eine gebundene Lösung von (58), falls $\forall \varepsilon > 0$ ex. $R < \infty$ so, dass

$$\sup_t \int_{|\vec{x}| \geq R} |\psi_t(\vec{x})|^2 d^3x \leq \varepsilon \quad (61)$$

(2) Entweichende Zustände (Streu Lösungen): ψ_t ist eine "entweichende" oder "ungebundene" Lösung von (58), falls $\forall R < \infty$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{|\vec{x}| \leq R} |\psi_t(\vec{x})|^2 d^3x = 0 \quad (62)$$

Eine Lösung von (58) heisst stationär, falls

$$\psi_t(\vec{x}) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} u(\vec{x}), \quad (63)$$

wo u zeitunabhängig ist. Die Funktion u erfüllt dann die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right) u(\vec{x}) = E u(\vec{x}) \quad (64)$$

Eine Lösung, u_E , von (64) ist eine Eigenfunktion

von $H_r = H_0 + V$, falls $u_E \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$; E heisst dann Eigenwert von H_r .

Der Abschluss der Menge aller Eigenwerte von H_r heisst diskretes Spektrum, $\sigma_d(H_r)$ von H_r .

Seien $u_E, u_{E'}$ zwei Eigenfunktionen von H_r mit $E \neq E'$

Dann gilt

$$\begin{aligned} E \langle u_{E'}, u_E \rangle &= \langle u_{E'}, H_r u_E \rangle = \langle H_r u_{E'}, u_E \rangle \\ &= E' \langle u_{E'}, u_E \rangle. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (E - E') \langle u_{E'}, u_E \rangle = 0 \Rightarrow \langle u_{E'}, u_E \rangle = 0, \quad (65)$$

d.h. Eigenfuns. zu verschiedenen Eigenwerten von H_r sind orthogonal. E heisst entartet, falls (64) mehrere

linear unabhängige Lösungen hat. Diese kann man

dann vermöge der Linearität von (64) (Superpositionsprinzip) orthonormieren; (Gram-Schmitt Verfahren). Es

folgt, dass es im Unterraum \mathcal{H}_d von $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ der

Eigenfunktionen von H_r eine orthonormale Basis $\{u_n(\vec{x})\}_{n=1}^{\infty}$

gibt.

Satz 3. Es gelte (60); $\psi_{\vec{x}}$ ist eine gebundene Lösung

$$\text{von (58)} \Leftrightarrow \psi_{\vec{x}}(\vec{x}) = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} u_n(\vec{x}), \quad (66)$$

258 E_n : Eigenwert von H_n zur Eigenfu. u_n

$$c_n = \langle u_n, \psi_{t=0} \rangle, \sum_n |c_n|^2 = \|\psi_0\|^2. \quad (67)$$

Satz 4. (Ruelle) Es gelte (60); ψ_t ist eine entweichende Lösung von (58) $\iff \psi_0 \perp \mathcal{R}_d$.

Korollar. $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) = \underbrace{\{\text{gebundene Zust.}\}}_{\mathcal{R}_d} \oplus \underbrace{\{\text{entw. Zust.}\}}_{\mathcal{R}_d^\perp}$

●) Stationäre Beschreibung entweichender Lösungen.

Gegeben seien H_r und Energie $E \in \mathbb{R}$. Die Folge

$\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ ist eine Weyl Folge zu (H_r, E) , falls

$$\left. \begin{aligned} &\|\psi_n\| = 1, \text{ für alle } n, \\ &\int_{|\vec{x}| \leq R} |\psi_n(\vec{x})|^2 d^3x \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \quad \forall R < \infty \\ &\|(H - E)\psi_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \end{aligned} \right\} \quad (68)$$

Man sagt, eine Energie E gehöre zum Spektrum, $\sigma(H_r)$,

von H_r , falls $H - E$ keinen beschränkten inversen

Operator hat. Falls $E \in \sigma(H_r)$, aber E kein Eigenwert

von H_r ist ($E \notin \sigma_d(H_r)$), dann sagt man E gehöre zum

kontinuierlichen Spektrum, $\sigma_c(H_r)$, von H_r .

Man hat dann, dass

$$\sigma(H_r) = \sigma_d(H_r) \cup \sigma_c(H_r). \quad (69) \quad \underline{28.}$$

Satz 5. (Weyl Kriterium)

E gehört zum kontinuierlichen Spektrum von $H_r \Leftrightarrow$

Es gibt zu (H_r, E) eine Weyl-Folge $\{\psi_n\}$.

Satz 6. E gehört zum Spektrum von $H_r \Leftrightarrow$ Die Gl.

(64) hat mindestens eine lokal quadratintegrierbare,

polynomial beschränkte Lösung u_E , (d.h. $|u_E(\vec{x})|/(|\vec{x}|+1)^N$

ist in $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, für ein $N < \infty$).

Jede Wellenfunktion $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ kann nach den

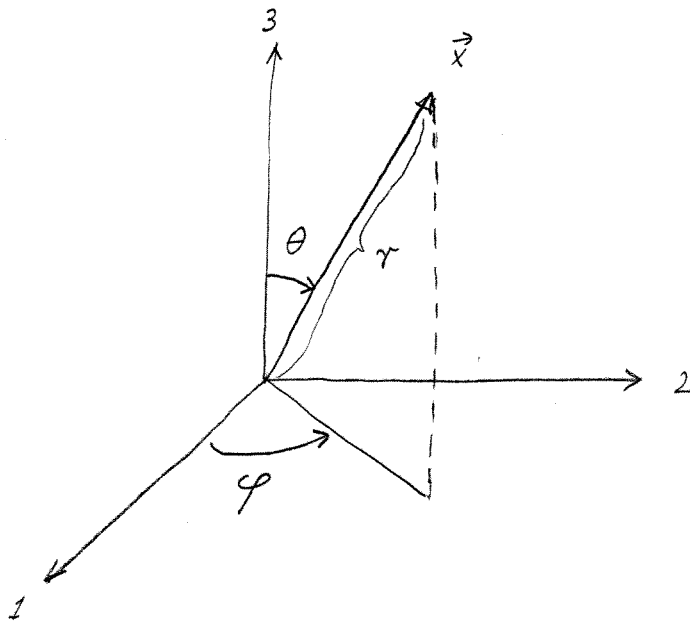
polynomial beschränkten Lösungen der stationären Schrödinger-Gl. (64), mit $E \in \sigma(H_r)$, entwickelt werden; ("Vollständigkeit der Lösungen von (64)").

Die Beweise der Sätze 1-6 gehört in eine Vorlesung über Funktionalanalysis.

Nun wollen wir (64) für alle $E \in \sigma(H_r)$ für den Fall lösen, dass $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$ kugelsymmetrisch ist.

Dazu benutzen wir sphärische Polarkoordinaten:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (70)$$



Wir drücken $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ in Polarkoordinaten aus.

Falls wir im klassischen Ausdruck für den Drehimpuls \vec{L} den Impuls \vec{p} durch den Operator $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$ ersetzen, erhalten wir den Drehimpulsoperator

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (71)$$

Durch Umrechnen auf Polarkoordinaten findet man

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \Lambda, \quad \text{wo } \Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (72)$$

der Laplace Operator auf der Sphäre S^2 ist. Wir finden dann

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad (73)$$

also

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2 \quad (74)$$

Die Gleichung

$$(H_0 + V(r)) \varphi(r, \theta, \varphi) = E \varphi(r, \theta, \varphi) \quad (75)$$

lösen wir wieder durch einen Separationsansatz;

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = X(r) Y(\theta, \varphi) \quad (76)$$

Sei $Y(\theta, \varphi)$ eine Eigenfunktion des Operators Λ zum Eigenwert $-\ell(\ell+1)$, wo ℓ zunächst noch unbekannt ist. Dann folgt aus (75) die Gl. für X :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] X(r) = E X(r) \quad (77)$$

Bevor wir (77) lösen, müssen wir nun die Eigenwerte und Eigenfunktionen von Λ bestimmen. Das führt uns auf die Theorie der Kugelfunktionen, die wir schon aus der Vorlesung über Elektrodynamik kennen.

Der im Studium des Operators Λ natürliche Hilbertraum ist $L^2(S^2, d\Omega)$, wo

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi,$$

$0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Man sieht leicht, dass

Λ auf $L^2(S^2, d\Omega)$ symmetrisch (tatsächlich selbst-

adjungiert) und strikte negativ ist. Wir wollen nun das Eigenwertproblem

$$\Delta Y = -\lambda Y, \quad Y \in L^2(S^2, d\Omega) \quad (78)$$

allgemein lösen. Da $\Delta \leq 0$, (d.h. $\langle \psi, \Delta \psi \rangle \leq 0$, $\forall \psi \in L^2(S^2, d\Omega)$), ist $\lambda \geq 0$, und wir können $\lambda = l(l+1)$ schreiben. Mit (73) und (78) finden wir,

dass

$$\begin{aligned} \Delta(r^l Y) &= [l(l-1) + 2l - l(l+1)] r^{l-2} Y \\ &= 0, \end{aligned} \quad (79)$$

d.h. wenn Y eine Lösung zum Eigenwertproblem (78) mit Eigenwert $-\lambda = -l(l+1)$ ist, dann ist $r^l Y$ eine harmonische Funktion. Die harmonischen Funktionen

des Laplace-Operators können wie folgt bestimmt werden: Sei $f(u, t)$ eine glatte Funktion von u und

t ; $u \in \mathbb{C}$, $t \in [-\pi, \pi]$. Wir definieren

$$F(z) = \int_{-\pi}^{\pi} f(z + ix \cos t + iy \sin t, t) dt \quad (80)$$

Dann erfüllt F die Laplace-Gleichung:

$$\Delta F = \int_{-\pi}^{\pi} (1 - \cos^2 t - \sin^2 t) \frac{\partial^2 f}{\partial u^2}(\dots, t) dt = 0$$

Die harmonischen Funktionen, die zu Eigenfunktionen von Δ gehören, sind homogen in $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$; siehe (79).

Daher müssen wir $f(u, t)$ von der Form

$$f(u, t) = u^l g(t) \quad (81)$$

wählen, mit $g(t)$ periodisch auf $[-\pi, \pi]$.

Für $l = 0, 1, 2, \dots$ konstruieren wir $(2l+1)$ homogene Polynome vom Grad l , die harmonisch sind:

$$P_l^m(\vec{x}) = \int_{-\pi}^{\pi} (z + ix \cos t + iy \sin t)^l e^{imt} dt, \quad (82)$$

$m = -l, -l+1, \dots, l$. (Für $|m| > l$ ist (82) offensichtlich = 0!) Für $\vec{x} = r(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ finden wir

$$P_l^m(\vec{x}) = r^l Y_l^m(\theta, \varphi), \quad \text{wobei}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{4\pi} Y_l^m(\theta, \varphi) &= \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos(t-\varphi))^l e^{imt} dt \\ &= \int_{-\pi-\varphi}^{\pi-\varphi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos \tau)^l e^{im(\tau+\varphi)} d\tau \\ &= e^{im\varphi} \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos \tau)^l e^{im\tau} d\tau, \end{aligned} \quad (83)$$

und in der letzten Gl. haben wir die Periodizität des Integranden zum Verschieben der Integrationsgrenzen benutzt.

Die Funktionen Y_l^m heissen Kugelfunktionen und sind Eigenfunktionen von Δ zum Eigenwert $-l(l+1)$; $l=0, 1, 2, \dots$.

Eigenschaften der Kugelfunktionen:

(1) $\{Y_l^m\}_{m=-l}^l$ sind linear unabhängig.

(2) $\int \overline{Y_l^m} Y_{l'}^{m'} d\Omega = \delta^{mm'} \delta_{ll'}$, (Orthogonalität)

(Orth. in m, m' : $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} d\varphi = \delta^{mm'}$!

Orth. in l, l' : Da Δ symm. und $Y_l^m, Y_{l'}^{m'}$ zu versch. Eigenwerten von Δ gehören, falls $l \neq l'$, sind $Y_l^m, Y_{l'}^{m'}$ zu einander orthogonal!)

(3) $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi) \Rightarrow Y_l^m(\theta, \varphi)$

ist Eigenfu. von L_z zum Eigenwert $\hbar m$.

(4) Parität: Für $(\theta, \varphi) \mapsto (\pi - \theta, \varphi + \pi)$

$$Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi);$$

(aus 1. Gl. in (83)!))

(5) $\overline{Y_l^m(\theta, \varphi)} = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$

34.

(6) Vollständigkeit: Die Funktionen $\{Y_l^m\}$,

$m = -l, -l+1, \dots, l$, $l = 0, 1, 2, \dots$ bilden ein VONS im Hilbertraum $L^2(S^2, d\Omega)$. (Kann mit Hilfe des Satzes von Weierstrass bewiesen werden!)

$$\Rightarrow \sigma(\Lambda) = \{-l(l+1)\}_{l=0}^{\infty}.$$

(7) Zusammenhang mit Legendre Polynomen:

Def. $P_l(z) = \frac{1}{l! 2^l} \frac{d^l}{dz^l} (z^2-1)^l$, $-1 \leq z \leq 1$.

$$P_l^m(z) = (-1)^m (1-z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dz^m} P_l(z) \quad (84)$$

Für $z = \cos \theta$ findet man (mit Hilfe des Satzes von Cauchy):

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (85)$$

insbesondere

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad (86)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$.

(8) Additions theorem:

$$\sum_{m=-l}^l \overline{Y_l^m(\vec{n})} Y_l^m(\vec{n}') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \angle(\vec{n}, \vec{n}')), \quad (87)$$

wo \vec{n}, \vec{n}' Einheitsvektoren im \mathbb{R}^3 sind.

Nach diesem kurzen Exkurs in die Theorie der Kugelfunktionen kehren wir nun zum Studium der radialen Schrödingergl. (77) zurück: Für

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_l(r)$$

erfüllt $\chi_l(r)$ die Gl.:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] \chi_l(r) = E_l \chi_l(r) \quad (88)$$

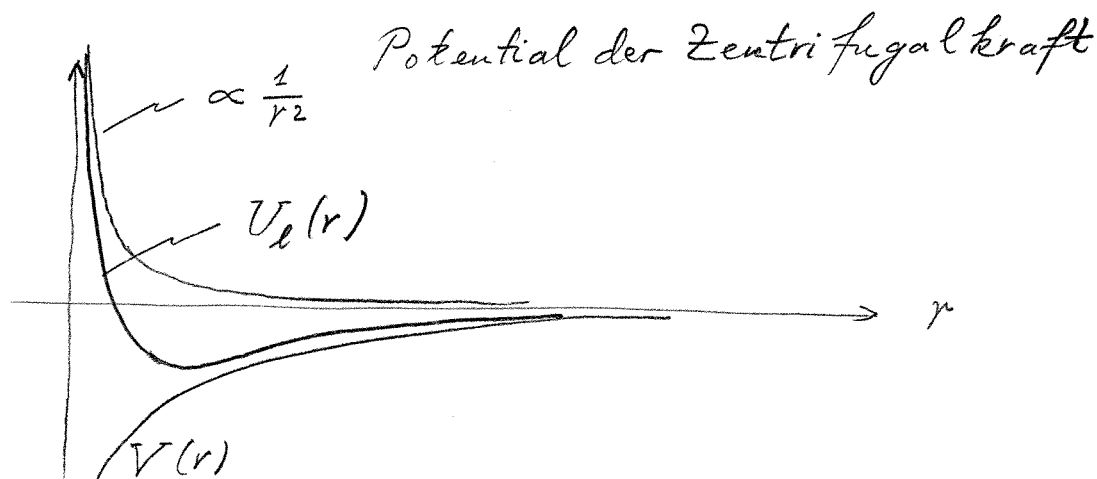
Setzen wir

$$y_l(r) = r \chi_l(r),$$

so finden wir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r) \right] y_l(r) = E_l y_l(r), \quad (89)$$

$$U_l(r) = \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}} + V(r)$$



Gl. (89) beschreibt ein eindimensionales q.m. Problem im Potential $V_\ell(r)$, das bei $r=0$ wie $\frac{1}{r^2}$ nach $+\infty$ divergiert, (für $|V(r)| < \frac{a}{r^{2-\varepsilon}}$, $\varepsilon > 0$, bei $r \approx 0$).

Mit Hilfe von Satz 5 (Weyl Kriterium) zeigt man leicht, dass für Potentiale $V(r)$, die für $r \rightarrow \infty$ gegen 0 streben, jedes $E = E_\ell \geq 0$ zum kontinuierlichen Spektrum des radialen Schrödinger Operators

$$h_\ell \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_\ell(r)$$

gehört, (wo $\frac{d^2}{dr^2}$ mit Dirichlet Randbed. bei $r=0$ definiert und auf $L^2([0, \infty), dr)$ selbstadjungiert ist). Aus Satz 6 folgt dann, dass (89) zu jeder Energie $E = E_\ell > 0$ mindestens eine polynomial beschränkte Lösung besitzt.

Es ist auch leicht zu zeigen, dass es zu (h_ℓ, E) , $E < 0$, keine Weyl Folgen gibt. Daher sind beschränkte Lösungen von (89) zu $E_\ell < 0$ automatisch Eigenfunktionen. Solche gibt es nur, wenn

$V(r)$ wenigstens stückweise negativ ist. Dann kann man versuchen, die Existenz von Lösungen von (89) zu $E_0 < 0$ mit dem folgenden Prinzip nachzuweisen: Falls es eine Wellenfunktion $y_0 \in L^2([0, \infty), dr)$ gibt, für welche

$$\langle y_0, h_0 y_0 \rangle < 0,$$

dann hat (89) mind. eine Lösung für ein $E_0 < 0$.

Beschränkte Lösungen von (89) können mit Hilfe der Theorie der gewöhnlichen Differentialgl. konstruiert werden, für alle $E_0 \in \sigma(h_0)$; (Jost Theorie). Bevor wir uns dieser Angelegenheit annehmen, wollen wir aber ein Beispiel diskutieren:

Das Wasserstoffatom.

$$V(r) = - \frac{Ze^2}{r}$$

Atomare Einheiten.

Bohrradius: $a = \frac{\hbar^2}{Ze^2 m}$

Atomare Energieeinheit: $\frac{Z^2 e^4 m}{2 \hbar^2} = \frac{Ze^2}{2a}$

(Für $Z=1$, erhalten 1 Rydberg!)

Setzen

$$r = a \rho, \quad E = \frac{Ze^2}{2a} \varepsilon. \quad (90) \quad \overset{38}{}$$

Dann wird aus der radialen Schrödingergl. die Gleichung

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right] y_l(\rho) = \varepsilon y_l(\rho). \quad (91)$$

Wir suchen die polynomial beschränkten Lösungen von (91).

Wie in den Übungen behandelt, lösen wir zuerst die zu (91) gehörigen asymptotischen Dgln. für $\rho \rightarrow 0$ und $\rho \rightarrow \infty$:

Für $\rho \rightarrow 0$ wird aus (91)

$$-\frac{d^2}{d\rho^2} \overset{\circ}{y}_l + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \overset{\circ}{y}_l = 0, \quad (92)$$

mit Lösung $\overset{\circ}{y}_l(\rho) = \rho^{s+1}$, $s = l$ oder $s = -(l+1)$

Für $s = -(l+1)$, $l \geq 1$, ist aber $\overset{\circ}{y}_l$ nicht quadrat-integrierbar bei $\rho = 0$. Für $l = 0$ verletzt $\overset{\circ}{y}_l = 1$

die Dirichlet-Randbed. $\overset{\circ}{y}_l(0) = 0$. Darum kommt

nur die Lösung $\overset{\circ}{y}_l(\rho) = \rho^{l+1}$, $l = 0, 1, 2, \dots$, in Frage

Für $\rho \rightarrow \infty$ wird aus (91)

$$\frac{d^2 \overset{\infty}{y}}{d\rho^2} + \varepsilon \overset{\infty}{y} = 0 \quad (93)$$

mit den Lösungen

$$\ddot{y}^\infty(r) = a_1 e^{\sqrt{-\varepsilon} \rho} + a_2 e^{-\sqrt{-\varepsilon} \rho} \tag{94}$$

Wir unterscheiden zwei Fälle:

(1) $\varepsilon < 0$: Dann muss $a_1 = 0$, damit $\ddot{y}^\infty(r)$ polynomial beschränkt bleibt.

(2) $\varepsilon > 0$: Dann sind alle Lösungen von (93) im ∞ beschränkt. ($\varepsilon > 0 \Rightarrow E > 0 \Rightarrow E$ gehört nach Satz 5 zum kontinuierlichen Spektrum von h_l . Dieser Fall ist für die Streutheorie wichtig.)

Wir diskutieren nun zunächst Fall (1). Wir führen die folgende Substitution aus:

$$z = 2\sqrt{-\varepsilon} \rho, \quad n = \frac{l}{\sqrt{-\varepsilon}}. \tag{95}$$

Dann wird aus (91) die Gl.

$$y_l'' + \left(\frac{n}{z} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) y_l = 0 \tag{96}$$

Für die Lösung machen wir einen Ansatz, der zwischen y_l^0 und y^∞ interpoliert, nämlich

$$y_l(z) = z^{l+1} e^{-\frac{1}{2}z} w(z), \text{ mit } w(0) \neq 0. \tag{97}$$

Eingesetzt in (96) ergibt sich

$$z w'' + (2l+2-z) w' + (n-l-1) w = 0. \quad (98)$$

Diese Differentialgl. ist aus der Theorie der konfluenten, hypergeometrischen Funktionen bekannt. Die Dgl. für die

konfluente, hypergeom. Funktion ist

$$z w'' + (\gamma - z) w' - \alpha w = 0. \quad (99)$$

Für ihre Lösung machen wir den Potenzreihenansatz:

$$w(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k \quad (100)$$

Eingesetzt in (99) folgt

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{ (k+1)(k+\gamma) a_{k+1} - (k+\alpha) a_k \} z^k = 0$$

Es folgen die Rekursionsformeln:

$$a_{k+1} = \frac{k+\alpha}{(k+1)(k+\gamma)} a_k, \text{ also}$$

$$a_k = \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+k-1)}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+k-1)} \frac{1}{k!} a_0 \quad (101)$$

Für w erhalten wir die konfluente, hypergeometrische Reihe

$$w(z) \equiv F(\alpha, \gamma; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+k-1)}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+k-1)} \frac{1}{k!} z^k, \quad (102)$$

für $a_0 = 1$.

Verhalten von F für $z \rightarrow \infty$: Für grosse k 41.

finden wir, dass $a_{k+1} \sim \frac{1}{k+1} a_k$, d.h. $a_k \sim \frac{1}{k!}$,
und daher $F(\alpha, \gamma; z) \approx e^z$, für $z \rightarrow \infty$, es sei denn...

Damit folgt für y_l aus (97)

$$y_l(z) = z^{l+1} e^{z/2},$$

d.h. $y_l(z)$ ist nicht polynomial beschränkt, es sei

denn $a_k = 0$, für k gross genug, d.h.

$$-\alpha = 0, 1, 2, \dots, \quad \gamma \neq \alpha, \quad (103)$$

wie man aus (101) ersieht. Für das Wasserstoffatom ist

$$\alpha = l+1 - n, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (104)$$

so dass (103) erfüllt ist, falls

$n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{und} \quad n \geq l+1$

(105)

Damit folgt aus (95), dass $\varepsilon = -\frac{1}{n^2}$, und daher

mit (90)

$E = E_n = -\frac{Ze^2}{2an^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$

(106)

mit der Bedingung, dass $l \leq n-1$.

Formel (106) reproduziert das Balmer Spektrum. Die zu-

gehörigen Eigenfunktionen des Coulomb Hamilton-Operators sind gemäss (76), (88), (89), (90), (95) und (102):

$$\psi_{nl}^m(\vec{x}) = C_{nl} e^{-\sqrt{-\epsilon} \frac{r}{a}} \frac{1}{r} \left(\frac{2\sqrt{-\epsilon} r}{a} \right)^{l+1} F(l+1-n, 2l+2; \frac{2\sqrt{-\epsilon} r}{a}) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (107)$$

wo die Konstanten C_{nl} Normierungskonstanten sind.

Zum Eigenwert $E_n = -\frac{Ze^2}{2an^2}$ gehören

$$\sum_{l=0}^{n-1} \left(\sum_{m=-l}^l 1 \right) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2$$

linear unabhängige Eigenfunktionen, d.h. E_n ist n^2 -fach entartet. Aus der Theorie der konfluenten, hypergeometrischen Funktionen folgt, dass

$$\|\psi_{nl}^m\|_2^2 = 1 \Leftrightarrow C_{nl} = \frac{1}{n} \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \quad (108)$$

(Siehe z. B. A. Messiah, Vol. 1)

und

$$\langle \psi_{nl}^m, \psi_{n'l'}^{m'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta^{mm'} \quad (109)$$

(Orthogonalitätsrelationen)

Der Beweis von (108) wird weggelassen, aber (109) folgt aus der allg. Theorie der Eigenwertprobleme für selbstadjungierte Operatoren; (Übung!).

Das kontinuierliche Spektrum des Wasserstoffatoms. 4.

Wir wollen nun die Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right] \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (110)$$

für die Relativbewegung zweier Teilchen mit

Ladungen $Z_1 e$, $Z_2 e$ für den Fall, dass $E \geq 0$,

●) (d.h. E gehört zum kontinuierlichen Spektrum von H_r ,

direkt lösen. Es stellt sich heraus, dass es nicht nötig

ist, die Winkelvariablen θ, φ von der Variablen r

durch Entwicklung nach Kugelfunktionen zu separieren

Wir schreiben

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2, \quad \gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}, \quad (111)$$

und finden dann, dass (110) in die Gl.

$$\left(\Delta + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi(\vec{x}) = 0 \quad (112)$$

übergeht. Wir machen für die Lösung den Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} f(u), \quad (113)$$

wo \vec{k} ein Wellenvektor mit $|\vec{k}| = k$ ist und

$$u = ik \left(r - \frac{\vec{k} \cdot \vec{x}}{k} \right). \quad (114)$$

Legen wir die z -Achse unseres Koordinatensystems in die ⁴⁴
Richtung von \vec{k} , so finden wir

$$\psi(\vec{x}) = e^{ikz} f(u), \quad u = ik(r-z).$$

Setzen wir diesen Ansatz in (113) ein, so ergibt sich für f die Gleichung

$$\left[u \frac{d^2}{du^2} + (1-u) \frac{d}{du} + ij \right] f(u) = 0. \quad (115)$$

- Dies kann man durch Umrechnen des Laplace Operators auf die Koordinaten r, u, φ verifizieren; unser Ansatz für ψ hängt dann nicht von φ ab.

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = ik \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial u} + \text{Abl. nach } \varphi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = ik \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right) \frac{\partial}{\partial u} - k^2 \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \text{---''---}$$

● Ebenso

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = ik \left(\frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3} \right) \frac{\partial}{\partial u} - k^2 \frac{y^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \text{---''---}$$

Schliesslich

$$\frac{\partial}{\partial z} (e^{ikz} f(u)) = ik \left[e^{ikz} f(u) + e^{ikz} \frac{df}{du} \left(\frac{z}{r} - 1 \right) \right]$$

Also

$$\Delta \psi = e^{ikr} (ik) \left[\left(2ik \left(\frac{z}{r} - 1 \right) + \left(\frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} \right) + \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right) + \left(\frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3} \right) \right) \frac{df}{du} \right]$$

$$\begin{aligned}
& + ik \left(\frac{y^2}{r^2} + \frac{z^2}{r^2} + \frac{x^2}{r^2} - 2 \frac{z}{r} + 1 \right) \frac{d^2 f}{du^2} \Big] \\
& = e^{ikz} \left[-k^2 f + \left(\frac{2}{r} + \frac{2ik(z-r)}{r} \right) \frac{df}{du} - \frac{2k^2}{r} (r-z) \frac{d^2 f}{du^2} \right] \quad (116)
\end{aligned}$$

Einsetzen von (116) in (112) und Kürzen mit $2 \frac{e^{ikz}}{r} ik$ ergibt (115).

Die Gl. (115) ist, wie (98), ein Spezialfall der konfluenten, hypergeometrischen Differentialgleichung.

Die Lösung wird mit

$$f(u) = F(-ix, 1; u) \equiv F(-ix | 1 | u)$$

bezeichnet. Damit wird die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (112)

$$\psi(\vec{x}) \equiv \psi_k(\vec{x}) = A e^{ikz} F(-ix | 1 | ik(r-z)) \quad (117)$$

Damit wir mit diesem Resultat etwas anfangen können, müssen wir nun die konfluente, hypergeometrische Funktion $F(\alpha, \gamma; z)$ genauer studieren.

Exkurs über konfluente, hypergeometrische Funktionen.

Dgl. ist

$$z \frac{d^2 w}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{dw}{dz} - \alpha w = 0 \quad (118)$$

Potenzreihenansatz für Lösung:

$$w(z) = z^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k, \text{ mit } a_0 \neq 0. \quad (119)$$

Eingesetzt in (118) finden wir

$$\begin{aligned} [s(s-1) + s\gamma] a_0 z^{s-1} + z^s \sum_{k=0}^{\infty} [(\gamma + k + s)(k + s + 1) a_{k+1} \\ - (k + s + \alpha) a_k] z^k = 0, \forall z. \quad (120) \end{aligned}$$

Also

$$\left. \begin{aligned} s(s-1) + s\gamma &= 0 \\ a_{k+1} &= \frac{k + s + \alpha}{(k + s + \gamma)(k + s + 1)} a_k \end{aligned} \right\} \quad (121)$$

Daraus erhalten wir $s=0$ oder $s=1-\gamma$. Für $s=0$,

ist (119) die hypergeometrische Reihe, die wir schon

kennen:

$$F(\alpha/\gamma/z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)} \cdot \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma+k)} \frac{1}{k!} z^k, \quad (122)$$

wo Γ die Γ -Funktion bedeutet:

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt, \quad (\operatorname{Re} z > 0). \quad (123)$$

Die Funktion $F(\alpha/\gamma/z)$ ist ganz analytisch so lange

$-\gamma \neq 0, 1, 2, \dots$. Für $-\alpha = 0, 1, 2, \dots$ ist $F(\alpha/\gamma/z)$

ein Polynom vom Grad $-\alpha$. Nun betrachten wir die

● Lösung mit $s = 1 - \gamma$. Wir setzen $w = z^{1-\gamma} v$ und erhalten für v die Gleichung

$$z v'' + (2 - \gamma - z) v' - (1 + \alpha - \gamma) v = 0, \quad (124)$$

mit $v(0) \neq 0$. Vergleich von (124) mit (118) zeigt,

dass

$$v(z) = F(1 + \alpha - \gamma / 2 - \gamma / z).$$

● Wir schliessen, dass

$$\left. \begin{aligned} &F(\alpha/\gamma/z), \quad \gamma \neq 0, -1, -2, \dots, \text{ und} \\ &z^{1-\gamma} F(1 + \alpha - \gamma, 2 - \gamma, z), \quad \gamma \neq 2, 3, 4, \dots, \end{aligned} \right\} (125)$$

die zwei Lösungen von (118) sind. Für $\gamma = 1$ sind

sie identisch, aber für $\gamma \neq 1$ sind sie linear unab-

hängig. $F(\alpha/\gamma/z)$ ist regulär bei $z = 0$.

Integraldarstellung der konfl., hypergeom. Funktion. 48

Wir lösen nun (118) mit einer Integraldarstellung:

$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{tz} f(t) dt, \quad C, f \text{ unbekannt}$$

Eingesetzt in (118) findet man

$$\int_C e^{tz} [z t^2 + (r-z)t - \alpha] f(t) dt = 0, \quad \forall z.$$

Nun ist $z e^{tz} = \frac{d}{dt} e^{tz}$. Wir benützen diese Gleichung und integrieren partiell. Das ergibt

$$\int_C \frac{d}{dt} [e^{tz} t(t-1) f(t)] dt + \int_C e^{tz} \left[-\frac{d}{dt} (t(t-1) f(t)) + r t f(t) - \alpha f(t) \right] dt =$$

Wir wählen die Kontur C so, dass der erste Term verschwindet. Dann erhalten wir für f die Differentialgleichung

$$-\frac{d}{dt} (t(t-1) f(t)) + (r t - \alpha) f(t) = 0$$

mit der Lösung

$$f(t) = t^{\alpha-1} (t-1)^{r-\alpha-1}.$$

Daher

$$w_1(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{tz} t^{\alpha-1} (t-1)^{r-\alpha-1} dt, \quad (126)$$

mit der Bedingung, dass

$$\int_C \frac{d}{dt} [e^{tz} t^\alpha (t-1)^{\gamma-\alpha}] dt = 0. \tag{127}$$

Wegen (125) ist dann auch

$$w_2(z) = \frac{z^{1-\gamma}}{2\pi i} \int_{C'} e^{tz} t^{\alpha-\gamma} (t-1)^{-\alpha} dt \tag{128}$$

eine Lösung, wobei C' die Bedingung

$$\int_{C'} \frac{d}{dt} [e^{tz} t^{\alpha-\gamma+1} (t-1)^{-\alpha+1}] dt \tag{129}$$

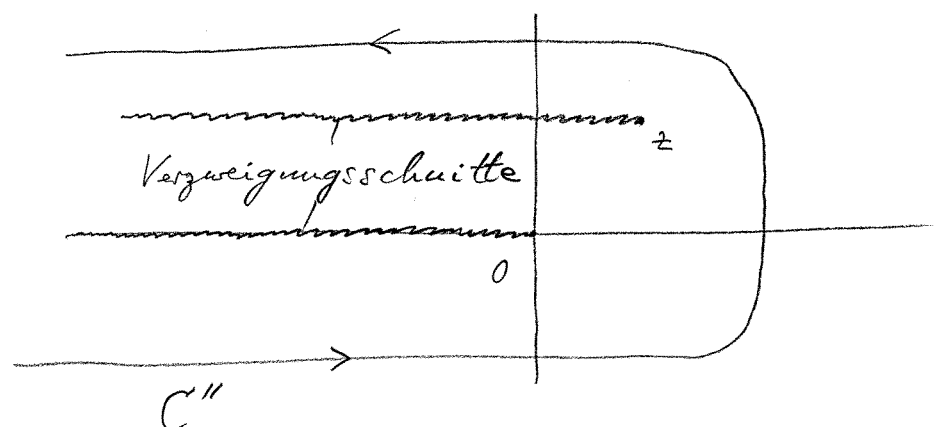
erfüllen muss. (128) kann man auch wie folgt schreiben.

$$w_2(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C'} e^{tz} (tz)^{\alpha-\gamma} (tz-z)^{-\alpha} z dt$$

$$\stackrel{tz=\tau}{=} \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^\tau \tau^{\alpha-\gamma} (\tau-z)^{-\alpha} d\tau \tag{130}$$

mit $\int_{C''} \frac{d}{d\tau} [e^\tau \tau^{\alpha-\gamma+1} (\tau-z)^{-\alpha+1}] d\tau = 0 \tag{131}$

Bedg. (131) für C'' ist erfüllt, falls C'' wie in Figur



Definieren $\tau^{\alpha-\gamma+1}, (\tau-z)^{-\alpha+1}$ mit Hauptast des Log.

Man bemerke, dass $w_2(z)$, def. durch (130), bei $z=0$ regulär ist und für $\alpha = 0, -1, -2, \dots$, ein Polynom ist. Also gilt

$$w_2(z) = A(\gamma) F(\alpha/\gamma|z), \quad (132)$$

wo $A(\gamma) = w_2(0)$, ($F(\alpha/\gamma|0) = 1$).

Für $A(\gamma)$ haben wir nach (130) die Integraldarstellung

$$A(\gamma) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{-\gamma} d\tau. \quad (133)$$

Dies definiert eine ganze Funktion von γ . Nun haben wir

$$\begin{aligned} A(\gamma+1) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{-\gamma-1} d\tau = -\frac{1}{\gamma} \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \frac{d}{d\tau} \tau^{-\gamma} d\tau \\ &= \frac{1}{\gamma} \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{-\gamma} d\tau = \frac{1}{\gamma} A(\gamma). \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$A(1) = e^{\tau} \Big|_{\tau=0} = 1.$$

Also gilt

$$A(\gamma) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)}, \quad (134)$$

wo Γ die in (123) definierte Γ -Funktion ist. Gl. (133)

ist die sog. Hankel-Darstellung der Γ -Funktion.

Damit haben wir, dass

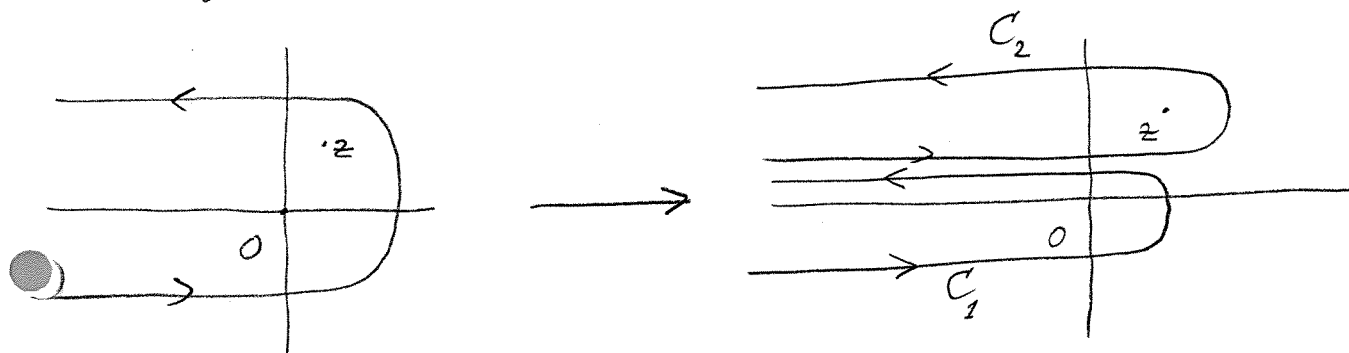
$$F(\alpha/\gamma|z) = \Gamma(\gamma) w_2(z),$$

d.h.

$$F(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{\alpha-\gamma} (\tau-z)^{-\alpha} d\tau \quad (135)$$

Asymptotik von $F(\alpha/\gamma/z)$: Wir spalten die Kontur C''

in zwei Teile auf,



und setzen

$$\Phi_s(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_s} e^{\tau} \tau^{\alpha-\gamma} (\tau-z)^{-\alpha} d\tau \quad (136)$$

Dann ist

$$F(\alpha/\gamma/z) = \Phi_1(\alpha/\gamma/z) + \Phi_2(\alpha/\gamma/z).$$

● Für $s=2$ setzen wir $\tau' = \tau - z$ und finden

$$\begin{aligned} \Phi_2(\alpha/\gamma/z) &= e^z \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_1} e^{\tau'} (\tau')^{-\alpha} (\tau'+z)^{\alpha-\gamma} d\tau' \\ &= e^z \Phi_1(\gamma-\alpha/\gamma/-z). \end{aligned} \quad (137)$$

Es genügt also Φ_1 zu diskutieren. Dazu benutzen wir,

dass

$$\begin{aligned} (\tau-z)^{-\alpha} &= (-z)^{-\alpha} \left(1 - \frac{\tau}{z}\right)^{-\alpha} = (-z)^{-\alpha} \sum_{n=0}^N \binom{-\alpha}{n} \left(-\frac{\tau}{z}\right)^n \\ &\quad + \mathcal{R}_N(\tau, z), \end{aligned} \quad (138)$$

wo $R_N(\tau, z)$ das Restglied einer Taylorentwicklung in $\frac{1}{z}$ darstellt. Einsetzen von (138) in (136) für $s=1$ liefert:

$$\Phi_1(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{-\alpha} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\alpha-\gamma+1+n)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\alpha-\gamma+1)n!} \left(-\frac{1}{z}\right)^n \right\} + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|^{N+1}\right) \quad (139)$$

(Das Abschätzen des Restgliedes sei dem Leser als Übung empfohlen.) Gl. (137) gibt nun

$$\Phi_2(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\Gamma(\gamma-\alpha+n)\Gamma(1-\alpha+n)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(1-\alpha)n!} \left(\frac{1}{z}\right)^n \right\} + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|^{N+1}\right) \quad (140)$$

Speziell für $N=1$ finden wir

$$F(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{-\alpha} \left[1 + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|\right) \right] + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} \left[1 + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|\right) \right]. \quad (141)$$

Anwendung auf Coulomb - Problem.

Nach (117) haben wir, dass

$$\psi_k(\vec{x}) = A e^{ikz} F(-i\gamma/1/ik(r-z)), \quad (142)$$

mit $\gamma = \frac{z_1 z_2 e^2 m}{k^2 k}$, (beachte (111)).

Wir wählen $A = \Gamma(1+i\gamma) e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}$ und finden aus (141) und

(142), dass

$$\psi_k(\vec{x}) = \underbrace{\psi_i(\vec{x})}_{\text{"incident"}} + \underbrace{\psi_s(\vec{x})}_{\text{"scattered"}}, \quad (143)$$

wo

$$\psi_i(\vec{x}) = e^{i[kz + \gamma \ln k(r-z)]} \left[1 + O\left(\frac{1}{|r-z|}\right) \right] \quad (144)$$

und

$$\psi_s(\vec{x}) = -\frac{\gamma}{k(r-z)} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} e^{i[kr - \gamma \ln k(r-z)]} \times \left[1 + O\left(\frac{1}{|r-z|}\right) \right] \quad (145)$$

$$=: \frac{1}{r} \exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)] f(\theta),$$

wo

$$f(\theta) = -\frac{\gamma}{dk \sin^2 \theta/2} \exp[-i\gamma \ln(\sin^2 \theta/2) + 2i\sigma_0], \quad (146)$$

mit $\sigma_0 = \arg \Gamma(1+i\gamma)$. (Haben benutzt, dass

$$1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \theta/2.)$$

Wählen wir die z -Achse in Richtung eines Einheitsvektors $\vec{e} \in S^2$ und setzen $\vec{k} = k\vec{e}$, so erhalten wir für jeden Wellenvektor $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ eine Lösung $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ zur

Energie $\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \geq 0$. Die Funktionen

$$\{\psi_{nl}^m(\vec{x}), \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) : -l \leq m \leq l, l=0,1,2,\dots, n \geq l+1, \vec{k} \in \mathbb{R}^3\}$$

sind vollständig in $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, d.h. jede Wellen-

5

Funktion $\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ hat eine Entwicklung

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{m,l,n} a_{nl}^m \psi_{nl}^m(\vec{x}) + \int A(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) d^3k. \quad (147)$$

Daraus bekommen wir auch leicht die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung.

Coulomb - Streuung.

Wir benutzen nun (143) - (146) zur Berechnung des Rutherford'schen Streuquerschnittes. Wir wollen ψ_i

in (143) als einfallende Welle interpretieren. Dazu berechnen wir den einfallenden Teilchenstrom

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar}{2mi} [\psi_i^* \vec{\nabla} \psi_i - \psi_i \vec{\nabla} \psi_i^*]. \quad (148)$$

Benutzen wir die asymptotische Formel (144), so finden wir

$$\vec{J}_i = (0, 0, J), \quad \text{wobei}$$

$$J = \frac{\hbar k}{m} \left(1 - \frac{ik}{r} + O\left(\frac{1}{|r-z|^2}\right) \right) \quad (149)$$

$$\rightarrow 0 \quad \text{für } |r-z| \rightarrow \infty,$$

$$\approx v$$

$$\text{d.h. e.g. } z \rightarrow -\infty.$$

Die Dichte des einfallenden Stromes ist $|\psi_i|^2 = 1$.

Für die Streuwelle ψ_s berechnen wir

$$\vec{J}_s(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi_s^* \vec{\nabla} \psi_s - \psi_s \vec{\nabla} \psi_s^*](\vec{x})$$

$$= \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} J_\theta,$$

was

$$J_\theta = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} = v |f(\theta)|^2 / r^2, \quad (150)$$

und die Dichte ist $|\psi_s(\vec{x})|^2 = |f(\theta)|^2 / r^2$.

Definition des differentiellen Wirkungsquerschnitts.

$N_i = \#$ Teilchen pro Volumeneinheit im einfallenden Strahl

$J_i = N_i v$ (Stromdichte), $v =$ Teilchengeschwindigkeit

$N_s = \#$ Teilchen, die pro Zeiteinheit in den Raumwinkel $d\Omega$ um $\Omega = (\theta, \varphi)$ gestreut werden

Offensichtlich ist N_s proportional zu J_i , d.h.

$$N_s = J_i \Sigma(\Omega) d\Omega. \quad (151)$$

Die Grösse $\Sigma(\Omega)$ hat die Dimension einer Fläche, die für die Streuung der einfallenden Teilchen an einem Target charakteristisch ist. Vernachlässigt man Mehrfachstreuung und Phasenkohärenz zwischen ver-

56.
schiedenen Streuzentren, so ist $\Sigma(\Omega)$ proportional
zur Zahl, N , der Streuzentren:

$$\Sigma(\Omega) = N \sigma(\Omega). \quad (152)$$

Man nennt $\sigma(\Omega)$ den differentiellen Wirkungsquer-
schnitt.

Wenden wir diese Überlegungen auf ein einziges

● Coulomb-Streuzentrum an, so haben wir:

$$N_s = J_\theta \cdot r^2 d\Omega \quad (d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi).$$

$$= v |f(\theta)|^2 d\Omega$$

$$J_i = v, \quad N = 1.$$

Damit finden wir

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \theta/2}$$
$$= \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (152)$$

Das ist die Rutherford'sche Streuformel. Die Größe

$f(\theta)$ heisst Streuamplitude.