Übungen zur Quantenmechanik I

Lösungen zu Blatt 5 (Hausübung)

Hausübung 7 (Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten)

(a) Benutzen wir die angegebene Gleichung für den Laplaceoperator in Kugelkoordinaten, können wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten einfach hinschreiben:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+V(r)\right]\psi(\vec{x})=E\psi(\vec{x}). \tag{1}$$

(b) Es gilt

$$\hat{\vec{L}}^2\psi(\vec{x})=-\hbar^2(\vec{x}\times\vec{\nabla})\cdot(\vec{x}\times\vec{\nabla})\psi(\vec{x}). \tag{2}$$

Berechnen wir also zunächst

$$\begin{aligned}(\vec{x}\times\vec{\nabla})\psi(\vec{x})&=r\vec{e}_r\times\left(\vec{e}_\vartheta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi(\vec{x})\\&=\vec{e}_\varphi\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial\vartheta}-\vec{e}_\vartheta\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial\varphi}.\end{aligned} \tag{3}$$

Dabei haben wir erst von Gl. (13), dann von Gl. (12) auf dem Übungsblatt Gebrauch gemacht. Nun müssen wir denselben Operator nochmals anwenden. Dabei ist aber zu beachten, daß $\vec{e}_\varphi$ und $\vec{e}_\vartheta$ selbst von ϑ und φ abhängen:

$$\begin{aligned}(\vec{x}\times\vec{\nabla})\cdot(\vec{x}\times\vec{\nabla})\psi(x)&=\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}-\vec{e}_\vartheta\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial\vartheta}-\vec{e}_\vartheta\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial\varphi}\right)\\&=\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)-\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\frac{\vec{e}_\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right)-\frac{\vec{e}_\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)\\&\quad+\frac{\vec{e}_\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\vec{e}_\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right).\end{aligned} \tag{4}$$

Mit Hilfe der Entwicklung (11) der Kugelkoordinateneinheitsvektoren nach kartesischen Koordinaten auf dem Übungsblatt findet man sofort die benötigten Ableitungen

$$\frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\vartheta}=0,\quad\frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\varphi}=-\vec{e}_r\sin\vartheta-\vec{e}_\vartheta\cos\vartheta,\quad\frac{\partial\vec{e}_\vartheta}{\partial\vartheta}=-\vec{e}_r,\quad\frac{\partial\vec{e}_\vartheta}{\partial\varphi}=\vec{e}_\varphi\cos\vartheta. \tag{5}$$

Anwendung der Produktregel auf (4) ergibt schließlich unter Verwendung dieser Gleichungen

$$\begin{aligned}(\vec{x}\times\vec{\nabla})\cdot(\vec{x}\times\vec{\nabla})\psi&=\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2}+\cot\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\\&=\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}.\end{aligned} \tag{6}$$

Dies mit $-\hbar^2$ multipliziert ergibt dann $\hat{\vec{L}}^2$ in Kugelkoordinaten.

Vergleicht man dies mit (1), findet man in der Tat

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{\vec{L}}^2\psi + V(r)\psi. \tag{7}$$

Es ist dabei wichtig zu bemerken, daß im mittleren Term kein Operatorordnungsproblem auftritt, da ja r^2 und $\hat{\vec{L}}^2$ vertauschen.

In der klassischen Mechanik schreiben wir zunächst die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^2 - V(r) \tag{8}$$

in Kugelkoordinaten um. Da

$$\dot{\vec{x}} = \dot{r}\vec{e}_r + r\dot{\vec{e}}_r = \dot{r}\vec{e}_r + \vec{e}_\vartheta\, r\dot{\vartheta} + \vec{e}_\varphi r\sin\vartheta\,\dot{\varphi}, \tag{9}$$

folgt

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\left[\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi}\sin\vartheta)^2 + r^2\dot{\vartheta}^2\right] - V(r). \tag{10}$$

Die kanonisch konjugierten Impulse sind

$$p_r = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{r}} = m\dot{r}, \quad p_\vartheta = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\vartheta}} = mr^2\dot{\vartheta}, \quad p_\varphi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} = m^2r^2\sin^2\vartheta\dot{\varphi}. \tag{11}$$

Die Hamiltonfunktion ist also

$$\mathcal{H} = \dot{r}p_r + \dot{\vartheta}p_\vartheta + \dot{\varphi}p_\varphi - \mathcal{L} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2}\left(p_\vartheta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\vartheta}\right) + V(r). \tag{12}$$

Nun ist aber der Drehimpuls

$$\vec{L} = m\vec{x}\times\dot{\vec{x}} = mr^2(\vec{e}_\varphi\dot{\vartheta} - \vec{e}_\vartheta\sin\vartheta\dot{\varphi}) = \vec{e}_\varphi p_\vartheta - \vec{e}_\vartheta p_\varphi, \tag{13}$$

d.h.

$$\vec{L}^2 = p_\vartheta^2 + p_\varphi^2, \tag{14}$$

so daß

$$\mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2}\vec{L}^2 + V(r) \tag{15}$$

ist. Durch naives „kanonisches quantisieren" würden wir nun identifizieren

$$p_r \to \hat{p}_r = \vec{e}_r\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial r} \tag{16}$$

und damit

$$\mathcal{H} \to \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2mr^2}\hat{\vec{L}}^2 + V(r) \quad \text{(FALSCH!)}. \tag{17}$$

Der zweite und dritte Term sind zwar korrekt, während der erste nachweislich falsch ist, wie der Vergleich mit (7) zeigt. Die kanonische Quantisierung funktioniert i.a. nur in kartesischen Koordinaten, weil nur die kartesischen Basisvektoren ortsunabhängig sind. Die korrekte Rechnung verwendet die geometrischen Eigenschaften des Nablaoperators, welche zu dem auf dem Übungsblatt angegebenen Ausdruck für den Laplaceoperator führt, wobei die Ableitungen der Kugelkoordinateneinheitsvektoren nach r, ϑ und φ bei der Berechnung von $\Delta = \vec{\nabla}^2$ berücksichtigt wurden (wie bei unserer Berechnung von $\hat{\vec{L}}^2$, welche zu (6) geführt hat).

Eine systematischere Methode zur Quantisierung klassischer Systeme ist Verwendung von Symmetrieeigenschaften der Hamiltonfunktion (z.B. Galileiinvarianz, Rotationsinvarianz etc.). Den dazu benötigten mathematischen Formalismus, wie Symmetrien in der Quantenmechanik behandelt werden, werden wir in der Vorlesung erst etwas später kennenlernen.

(c) Zur Berechnung von $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}_z \psi = \vec{e}_z \frac{\hbar}{\mathrm{i}} (\vec{x} \times \nabla) \psi \stackrel{(6)}{=} \vec{e}_z \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial \varphi} \right) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi}. \tag{18}$$

Dabei haben wir im letzten Schritt die Gln. (11) auf dem Übungsblatt benutzt.