Die algebraische Bestimmung des Wasserstoffspektrums

geg.: Teilchen im Zentralpotential

$$V(r) = -\frac{k}{r} \qquad k \in \mathbb{R}; \; k > 0$$

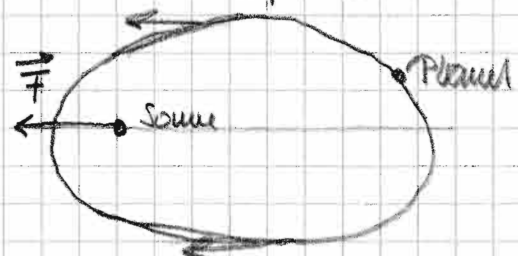
ges.: Eigenenergien des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \hat{V}$$

Lösungsstrategie: Nutzung von Symmetrien $\longleftrightarrow$ Erhaltungsgrößen

In der klassischen Mechanik ist der Runge-Lenz-Vektor zeitlich konstant

$$\vec{F} = \frac{1}{m}\left(\vec{p} \times \vec{L}\right) + V\vec{x}$$



$$\frac{d\vec{F}}{dt} = 0.$$

Bemerkung: $$|\vec{F}|^2 = \frac{1}{m^2}\vec{p}^{\,2}\cdot\vec{L}^2 + \underbrace{V^2 x^2}_{k^2} + \frac{2V}{m}(\vec{x}\times\vec{p})\vec{L}$$

$$= \frac{2}{m} E_{Ges} L^2 + k^2$$

$$\varepsilon^2 = 1 + \frac{2}{mk^2} E_{Ges} L^2$$

$$\Rightarrow \quad |\vec{F}| = k\cdot\varepsilon \qquad (0)$$

Übergang zur ~~klassischen Mechanik~~ QM: Korrespondenzprinzip

$$\hat{\vec{F}} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{p}}\right) + \hat{V}\vec{x}$$ Runge-Lenz-Operator

Drehimpulseigenschaften:

$$L_i = \varepsilon_{ijk}\, x_j\, p_k \qquad (1)$$

$$[\vec{L}, \hat{A}] = 0 \quad ; \quad \hat{A} \text{ .. skalarer Operator}$$

$$[L_i, V_j] = \varepsilon_{ijk} V_k \quad ; \quad \vec{V} \text{ .. Vektoroperator}$$

Runge - Lenz - Komponenten:

$$F_a = \frac{1}{2m}\, \varepsilon_{abc} \left(p_b L_c - L_b p_c \right) + V x_a$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\vec{p}^{\,2} x_a + x_a \vec{p}^{\,2} - \vec{p}\,\vec{x}\, p_a - p_a\, \vec{x}\vec{p} \right) + V x_a \qquad (2)$$

Nutze: $L_b p_c = [L_b, p_c] + p_c L_b$

$$F_a = \frac{1}{m} \left(\varepsilon_{abc}\, p_b L_c - i\hbar p_a \right) + V x_a \qquad (2^*)$$

Eigenschaften des Runge - Lenz - Operators:

- $L_a x_a = \varepsilon_{abc}\, x_b p_c x_a = \varepsilon_{abc}\, x_b x_a p_c = 0.$
- $L_a p_a = 0$

$\Rightarrow \; L_a \cdot F_a = F_a L_a = 0$

$\Rightarrow \; \boxed{\vec{L}\vec{F} = 0}$ (vgl. klassische Mechanik) (3)

- $[\vec{F}, H] = 0$ (4)

  ↳ gleiche Eigenfunktionen → Erhaltungsgröße

- $[F_a, F_b] = -2i\hbar/m \; H \varepsilon_{abc} L_c$ (5)

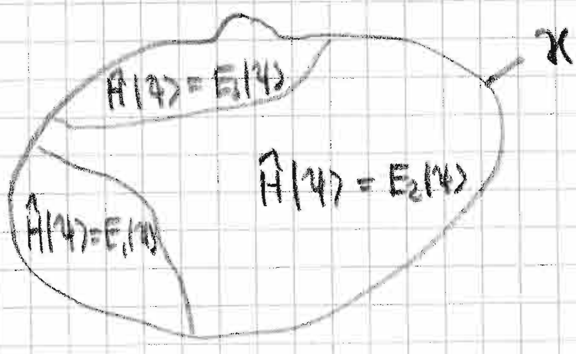
- $(\vec{F})^2 = \frac{2}{m} (\vec{L}^2 + \hbar^2) + k^2$ (6)

  ($\hbar \to 0$ gibt Gleichung (0))

Bisher

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ — $\mathcal{H}$

Nun: Unterteile $\mathcal{H}$ in Unterräume konstanter Energie



Betrachte das Problem in $\mathcal{H}_\alpha$ mit $\hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$, $|\psi_\alpha\rangle \in \mathcal{H}_\alpha$.

In $\mathcal{H}_\alpha$ gilt dann:

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} L_k$$

$$[L_i, F_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} F_k \qquad (7)$$

$$[F_i, F_j] = -\frac{2E_\alpha}{m} \cdot i\hbar\varepsilon_{ijk} L_k$$

Führen Linearkombination $\vec{D}^\pm$ ein:

$$\vec{D}^\pm = \frac{1}{2}\left(\vec{L} \pm \sqrt{\frac{m}{-2E_\alpha}}\,\vec{F}\right) \qquad E_\alpha < 0 \qquad (8)$$

Dann gilt:

$$[D_i^\pm, D_j^\pm] = \frac{1}{4}\left\{[L_i, L_j] + \sqrt{\frac{m}{-2E_\alpha}}\left[[L_i, F_j] + [F_i, L_j]\right] + \frac{m}{-2E_\alpha}[F_i, F_j]\right\}$$

Mit (7):
$$[D_i^\pm, D_j^\pm] = \frac{1}{4}\left(2i\hbar\varepsilon_{ijk} L_k + 2\sqrt{\frac{m}{-2E_\alpha}}\, i\hbar\varepsilon_{ijk} F_k\right)$$

$$= i\hbar\varepsilon_{ijk} D_k^\pm \qquad (9)$$

$$[D_i^+, D_j^-] = 0.$$

$\Rightarrow$ $\vec{D}^\pm$ ist Drehimpuls

$\Rightarrow$ Eigenwerte bekannt

$$(\vec{D}^\pm)^2 = \frac{1}{4}\left(\vec{L}^2 + \frac{m}{-2E_\alpha}\left(\frac{2E_\alpha}{m}(\vec{L}^2 + \hbar^2) + k^2\right)\right)$$

$$\Rightarrow \left(\vec{D}^{\pm}\right)^2 = \frac{1}{4}\left(-\hbar^2 - \frac{m}{2E_\alpha}k^2\right) \qquad (*)$$

Da $\vec{D}^{\pm}$ ~~...~~ aus $\vec{L}$ und $\vec{F}$ mit H vertauschen, vertauscht auch $\vec{D}^{\pm}$ mit H.

$$[\vec{L}, H] = [\vec{F}, H] = 0.$$

$$\Rightarrow [(\vec{D}^{\pm})^2, H] = 0, \quad [D_z^{\pm}, H] = 0. \qquad ((\vec{D}^+)^2 = (\vec{D}^-)^2)$$

→ vollständiger Satz kommutierender Observabler gefunden

$$\{H, (\vec{D}^+)^2, D_z^+, D_z^-\}$$

Aus $(*)$ wird dann

$$4\hbar^2\alpha(\alpha+1) = -\hbar^2 - \frac{m}{2E_\alpha}k^2 \qquad \alpha \text{ halbzahlig}$$

$$\rightarrow \underbrace{4\alpha^2 + 4\alpha + 1}_{(2\alpha+1)^2 = n^2} = -\frac{mk^2}{2\hbar^2 E_\alpha}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{mk^2}{2\hbar^2 n^2}} \qquad \text{„H-Spektrum"}$$

→ Auch Entartung diskutierbar!

Ein Eigenzustand zu H ist durch drei Quantenzahlen bestimmt:

$$n, m_\alpha^+, m_\alpha^-.$$

α hängt linear mit n zusammen und gibt keine neue Information. Für n bzw. α fest gilt:

$$m_\alpha^+ = -\alpha, -\alpha+\tfrac{1}{2}, \ldots, 0, \ldots, \alpha-\tfrac{1}{2}, \alpha \qquad (2\alpha+1 = n \text{ Werte})$$

$$m_\alpha^- = -\alpha, -\alpha+\tfrac{1}{2}, \ldots, 0, \ldots, \alpha-\tfrac{1}{2}, \alpha \qquad (2\alpha+1 = n \text{ Werte})$$

$\Rightarrow$ Zustand mit festem n ist n^2-fach entartet