Übungen QM I Vorbereitungskurs

Blatt 2 – Lösungen

1. Drehimpulsrelationen:

   (a) Für diese Aufgabe benötigen wir die Definition des Kreuzprodukts mit Hilfe des ϵ-Tensors:

$$(\vec{a} \times \vec{b})_k = \epsilon_{ijk} a_i b_j \quad \text{Summenkonvention!} \tag{1}$$

Zusätzlich werden die beiden in der Aufgabenstellung angegebenen Relationen für den Tensor und der Kommutator zwischen Impuls und Ortsoperator verwendet werden.

$$\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} \tag{2}$$

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} \tag{3}$$

$$[r_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_j, \hat{L}_k] &\overset{\text{vgl. 1}}{=} [r_h p_i \epsilon_{hij}, r_l p_m \epsilon_{lmk}] = \epsilon_{hij}\epsilon_{lmk}[r_h p_i, r_l p_m] = \\
&= \epsilon_{hij}\epsilon_{lmk}(r_l r_h \underbrace{[p_i, p_m]}_{=0} + r_h [p_i, r_l] p_m + r_l [r_h, p_m] p_i + \underbrace{[r_h, r_l]}_{=0} p_m p_i) = \\
&\overset{\text{vgl. 4}}{=} i\hbar \epsilon_{hij}\epsilon_{lmk}(r_l p_i \delta_{hm} - r_h p_m \delta_{il}) = \\
&= i\hbar(\epsilon_{mij} \underbrace{\epsilon_{lmk}}_{=-\epsilon_{mlk}} r_l p_i - \underbrace{\epsilon_{hij}}_{=-\epsilon_{ihj}} \epsilon_{imk} r_h p_m) = \\
&\overset{\text{vgl. 3}}{=} i\hbar(-r_l p_i(\delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{ik}\delta_{jl}) + r_h p_m(\delta_{hm}\delta_{jk} - \delta_{hk}\delta_{jm})) = \\
&= i\hbar(-r_l p_l \delta_{jk} + r_j p_k + r_m p_m \delta_{jk} - r_k p_j) = \\
&= i\hbar(r_j p_k - r_k p_j) = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l
\end{aligned}$$

   (b)

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_+] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x + i\hat{L}_y] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x] + i[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_y] = 0$$

Denn jede beliebige Komponente des Drehimpulsoperators kommutiert mit seinem Betrag:

$$\begin{aligned}
[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_i] &= [\hat{L}_i^2 + \hat{L}_j^2 + \hat{L}_k^2, \hat{L}_+] = [\hat{L}_j^2, \hat{L}_i] + [\hat{L}_k^2, \hat{L}_i] = \\
&= \hat{L}_j[\hat{L}_j, \hat{L}_i] + [\hat{L}_j, \hat{L}_i]\hat{L}_j + \hat{L}_k[\hat{L}_k, \hat{L}_i] + [\hat{L}_k, \hat{L}_i]\hat{L}_k = \\
&= i\hbar \underbrace{\epsilon_{jik}}_{=-\epsilon_{kij}} \hat{L}_j\hat{L}_k + i\hbar \underbrace{\epsilon_{jik}}_{=-\epsilon_{kij}} \hat{L}_k\hat{L}_j + i\hbar\epsilon_{kij}\hat{L}_k\hat{L}_j + i\hbar\epsilon_{kij}\hat{L}_j\hat{L}_k = 0
\end{aligned}$$

   (c)

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = \\
&= i\hbar\hat{L}_y \mp i(i\hbar\hat{L}_x) = \\
&= \pm\hbar\hat{L}_x + i\hbar\hat{L}_y = \\
&= \pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) = \pm\hbar\hat{L}_\pm
\end{aligned}$$

   (d)

$$\begin{aligned}
\hat{L}_\mp\hat{L}_\pm &= (\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y)(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) = \\
&= \hat{L}_x^2 \pm i\hat{L}_x\hat{L}_y \mp i\hat{L}_y\hat{L}_x + \hat{L}_y^2 = \\
&= \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \pm i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \\
&= \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \pm i(i\hbar\hat{L}_z) = \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z
\end{aligned}$$

(e)

$$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla}) = -i\hbar r(\hat{e}_r \times \vec{\nabla}) =$$

$$= -i\hbar r \left(\underbrace{\hat{e}_r \times \hat{e}_\theta}_{=\hat{e}_\phi} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \underbrace{\hat{e}_r \times \hat{e}_\phi}_{=-\hat{e}_\theta} \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

Nun müssen nur noch die Definitionen der Einheitsvektoren eingesetzt werden:

$$\hat{e}_\phi = \begin{pmatrix} -\sin\phi \\ \cos\phi \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{e}_\theta = \begin{pmatrix} \cos\phi\cos\theta \\ \sin\phi\cos\theta \\ -\sin\theta \end{pmatrix}$$

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \begin{pmatrix} -\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial\phi} \end{pmatrix}$$

2. Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator:

(a) Die Schrödingergleichung für das Oszillatorpotential $V = \frac{m\omega^2}{2}r^2$ lautet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2+z^2) - (E_x+E_y+E_z)\right]\psi(\vec{r}) = 0$$

Diese Summe aus drei eindimensionalen Oszillator-Hamiltonoperatoren erlaubt einen Produktansatz aus Lösungen des eindimensionalen Oszillators.

$$\psi(\vec{r}) = \phi(x)\phi(y)\phi(z) \qquad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2 - E_{x_i}\right)\phi(x_i) = 0$$

Für die Energieeigenwerte gilt:

$$E_{x_i} = \hbar\omega\left(n_{x_i} + \frac{1}{2}\right) \qquad n_{x_i} \in \mathbb{N}_0$$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right) \qquad n = n_x + n_y + n_z \in \mathbb{N}_0$$

(b) Energieentartung

- Grundzustand: $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$$n = 0 \quad \Rightarrow \quad n_x = n_y = n_z = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{keine Enartung}$$

- 1. angeregter Zustand: $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$

$$n = 1 \quad \Rightarrow \quad (n_x, n_y, n_z) = \begin{cases} (1,0,0) \\ (0,1,0) \\ (0,0,1) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \text{3-fache Entartung}$$

- 2. angeregter Zustand: $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$

$$n = 2 \quad \Rightarrow \quad (n_x, n_y, n_z) = \begin{cases} (2,0,0)\ (0,1,1) \\ (0,2,0)\ (1,0,1) \\ (0,0,2)\ (1,1,0) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \text{6-fache Entartung}$$

- 3. angeregter Zustand: $E_3 = \frac{9}{2}\hbar\omega$

$$n = 3 \quad \Rightarrow \quad (n_x, n_y, n_z) = \begin{cases} (3,0,0)\ (2,1,0)\ (2,0,1) \\ (0,3,0)\ (0,2,1)\ (1,2,0)\ (1,1,1) \\ (0,0,3)\ (1,0,2)\ (0,1,2) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \text{10-fache Entartung}$$

(c) Energieentartung bei der radialsymmetrischen Berechnung: $E_{nl} = \hbar\omega(2n + l + \frac{3}{2})$

- $E_{nl} = E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow && n = 0 = l = m \\ &\Rightarrow && \text{keine Entartung} \end{aligned}$$

- $E_{nl} = E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow && n = 0 \quad l = 1 && \Rightarrow && m = -1, 0, 1 \\ &\Rightarrow && \text{3-fache Entartung} \end{aligned}$$

- $E_{nl} = E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow && n = 0 \quad l = 2 && \Rightarrow && m = -2, -1, 0, 1, 2 \\ &\Rightarrow && n = 1 \quad l = m = 0 \\ &\Rightarrow && \text{6-fache Entartung} \end{aligned}$$

- $E_{nl} = E_3 = \frac{9}{2}\hbar\omega$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow && n = 0 \quad l = 3 && \Rightarrow && m = -3 - 2, -1, 0, 1, 2, 3 \\ &\Rightarrow && n = 2 \quad l = 1 && \Rightarrow && m = -1, 0, 1 \\ &\Rightarrow && \text{10-fache Entartung} \end{aligned}$$

3. Wasserstoff:

(a) Ansatz $w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ in die angegebene Gleichung einsetzen:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [a_k k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l+1)a_k k \rho^{k-1} - 2a_k k \rho^k + (\rho_0 - 2l - 2)a_k \rho^k] = 0$$

Indexverschiebung um in jedem Summanden die k-te Potenz von ρ zu erzeugen.

$$\sum_{k=0}^{\infty} [a_{k+1}(k+1)k\rho^k + 2(l+1)(k+1)a_{k+1}\rho^k + (\rho_0 - 2l - 2 - 2k)a_k \rho^k] = 0$$

Dadurch wird eine Rekursionsvorschrift definiert:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2k - (\rho_0 - 2l - 2)}{(k+1)(k + 2(l+1))}$$

Da für große k sich die Koeffizienten wie die der Taylorentwicklung von $\exp(2\rho)$ verhalten, muss die Reihe bei einem endlichen Index N abbrechen um so die Normierbarkeit der Gesamtwellenfunktion zu gewährleisten.

$$2(N + l + 1) = \rho_0 \qquad \Rightarrow \qquad \rho_0 = 2n \qquad n = N + l + 1$$

Nach Einsetzen der Definition von $\rho_0 = \sqrt{\frac{2\mu}{|E|}}\frac{Ze^2}{\hbar}$ und unter Berücksichtigung, dass Bindungszustände durch eine negative Energie gekennzeichnet sind, erhält man für die Bindungsenergie den Ausdruck:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2n^2\hbar^2}$$

(b)

$$l = n - 1 \qquad \Rightarrow \qquad \rho_0 = 2(n + n - 1 + 1) = 2n$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \qquad \frac{a_{k+1}}{a_k} &= \frac{2k - (\rho_0 - 2l - 2)}{(k+1)(k + 2(l+1))} = \\ &= \frac{2k}{(k+1)(k+2n)} \end{aligned}$$

Diese Rekursionsformel bricht nach dem nullten Glied ab.

$$\Rightarrow \qquad w(\rho) = const \qquad \Rightarrow \qquad u(\rho) = const\ \rho^{l+1}\exp(-\rho)$$

$$\rho = \kappa \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \qquad |E_n| = \frac{e^2}{2a_0 n^2} \qquad \Rightarrow \qquad \kappa = \frac{1}{a_0 n}$$

Dadurch lässt sich die Radialwellenfunktion für diesen Fall schreiben:

$$R_{n,n-1}(r) = const\ \left(\frac{r}{a_0}\right)^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{a_0 n}\right)$$

(c) In der Berechnug der Erwartungswerte werden wir immer auf Integrale der gleichen Struktur treffen. Deshalb wollen wir zuerst den allgemeinen Fall lösen:

$$\int_0^\infty dr r^n \exp(-\alpha r) = \underbrace{\left[-\frac{1}{\alpha} r^n \exp(-\alpha r)\right]_0^\infty}_{=0} + \frac{n}{\alpha}\int_0^\infty dr r^{n-1}\exp(-\alpha r) = \ldots =$$
$$= \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

Nun muss zuerst der Normierungsfaktor von $R_{n,n-1}(r)$ berechnet werden.

$$\int_0^\infty dr r^2 const^2\ \left(\frac{r}{a_0}\right)^{2n-2} \exp\left(-\frac{2r}{na_0}\right) = const^2\ \frac{1}{a_0^{2n-2}}\int_0^\infty dr r^{2n}\exp\left(-\frac{2r}{na_0}\right) =$$
$$= const^2\ (2n)! a_0^3 \left(\frac{n}{2}\right)^{2n+1} = 1$$
$$\Rightarrow \quad const^2 = \frac{1}{(2n)! a_0^3}\left(\frac{2}{n}\right)^{2n+1}$$

$$\begin{aligned}
\langle r\rangle &= const^2\ \frac{1}{a_0^{2n-2}}\int_0^\infty dr r^{2n+1}\exp\left(-\frac{2r}{na_0}\right) = \\
&= const^2\ \frac{1}{a_0^{2n-2}}(2n+1)!\left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+2} = \\
&= \frac{(2n+1)!}{(2n)!} a_0 \frac{n}{2} = \\
&= a_0 n\left(n+\frac{1}{2}\right) \\
\langle r^2\rangle &= const^2\ \frac{1}{a_0^{2n-2}}\int_0^\infty dr r^{2n+2}\exp\left(-\frac{2r}{na_0}\right) = \\
&= const^2\ \frac{1}{a_0^{2n-2}}(2n+2)!\left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+3} = \\
&= \frac{(2n+2)!}{(2n)!} a_0^2 \frac{n^2}{4} = \\
&= a_0^2 n^2 (n+1)\left(n+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

(d) Die Radiale Unschärfe ist definiert als: $(\Delta r)^2 = \langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2$

$$\begin{aligned}
(\Delta r)^2 &= a_0^2 n^2 (n+1)\left(n+\frac{1}{2}\right) - a_0^2 n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 = \\
&= a_0^2 n^2 \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) \\
\Rightarrow \quad \Delta r &= a_0 n\sqrt{\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \\
\Rightarrow \quad \frac{\Delta r}{\langle r\rangle} &= \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \xrightarrow{n\to\infty} 0
\end{aligned}$$

Für Zustände mit großer Hauptquantenzahl verschwindet die relative radiale Unschärfe und es kommt zu einer dem Bohrschen Atommodell ähnlichen Lokalisierung auf festen Radien (vgl. Rydbergatome)

4. Sphärischer Potentialtopf:

(a) Schrödingergleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\hat{\vec{L}}^2}{r^2\hbar^2}\right)-V_0\ \Theta(a-r)-E\right]R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)=0$$

Für die beiden Bereiche $r<a$ und $r>a$ gilt:

$$\text{Innenraum:}\quad \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}\right]R_l^{(i)}(r)=0$$

$$\text{Außenraum:}\quad \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2m+E}{\hbar^2}\right]R_l^{(a)}(r)=0$$

Führt man die dimensionslose Größe $z=\kappa r$ ein, wobei für κ gilt:

$$\kappa_i=\sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}}\qquad\qquad \kappa_a=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

vereinfacht sich die Schrödingergleichung zur Besseldifferentialgleichung.

$$\left[\frac{\kappa^2}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)-\frac{\kappa^2 l(l+1)}{z^2}+\kappa^2\right]R_l(z)=0$$

$$\left[\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)-\frac{l(l+1)}{z^2}+1\right]R_l(z)=0$$

Für kleine Radien, also für $z\to 0$ kann die 1 vernachlässigt werden und die Gleichung durch den Ansatz $R_l(z)=const\ z^\alpha$ gelöst werden.

$$\alpha(\alpha+1)z^{\alpha-2}=l(l+1)z^{\alpha-2}$$

$$\Rightarrow \alpha=l \text{ oder } \underbrace{\alpha=-l-1}_{\lim_{z\to0}R_l(z)=\infty}$$

$$\Rightarrow R_l(z)\xrightarrow{z\to0} const\ z^l$$

(b) • $l=0$

$$\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)\frac{\sin z}{z}=\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}(z\cos z-\sin z)=$$
$$=\frac{1}{z^2}(\cos z-z\sin z-\cos z)=$$
$$=-j_0(z)$$

$$\Rightarrow\left[\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)+1\right]j_0(z)=0$$

$$\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)\frac{-\cos z}{z}=\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}(z\sin z+\cos z)=$$
$$=\frac{1}{z^2}(\sin z+z\cos z-\sin z)=$$
$$=-n_0(z)$$

$$\Rightarrow\left[\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)+1\right]n_0(z)=0$$

• $l=1$

$$\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)j_1(z)=\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\cos z-\frac{2\sin z}{z}\right)-n_0(z)=$$
$$=-\frac{\sin z}{z^2}-n_0(z)-\frac{2z\cos z-2\sin z}{z^4}=$$
$$=-j_1(z)+\frac{2j_1(z)}{z^2}$$

$$\Rightarrow\left[\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)-\frac{2}{z^2}+1\right]j_1(z)=0$$

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right)n_1(z) &= \frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\sin z + \frac{2\cos z}{z}\right) + j_0(z) = \\
&= -\frac{\cos z}{z^2} + j_0(z) - \frac{2z\sin z - 2\cos z}{z^4} = \\
&= -n_1(z) + \frac{2n_1(z)}{z^2}
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \left[\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{2}{z^2} + 1\right]n_1(z) = 0
$$

(c) Wie in Teilaufgabe c) gezeigt wurde, sind die Bessel- und Neumannfunktionen Lösungen der Schrödingergleichung.

- $E > 0$: Hierfür ist κ sowohl im Innen- wie Außenraum reell.
  Innenraum: Für $z \to 0$ gilt:

$$
\begin{aligned}
j_0(z) &\to 1 \\
n_0(z) &\to \infty \\
j_1(z) &= \frac{\sin z - z\cos z}{z^2} \to \frac{\cos z - \cos z + z\sin z}{2z} \to 0 \\
n_1(z) &= -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \to -\infty
\end{aligned}
$$

  Da die Lösung auch in $z = 0$ regulär sein soll, lautet die Wellenfunktion für $l = 0, 1$ im Innenraum:

$$
\begin{aligned}
\psi_{00}^{(i)}(\vec{r}) &= C_0 j_0(\kappa_i r) Y_{00}(\theta, \phi) \\
\psi_{1m}^{(i)}(\vec{r}) &= C_1 j_1(\kappa_i r) Y_{1m}(\theta, \phi)
\end{aligned}
$$

  Im Außenraum setzt sich die Wellenfunktion aus einer Linearkombination von Bessel- und Neumannfunktionen zusammen:

$$
\begin{aligned}
\psi_{00}^{(a)}(\vec{r}) &= (A_0 j_0(\kappa_a r) + B_0 n_0(\kappa_a r)) Y_{00}(\theta, \phi) \\
\psi_{1m}^{(a)}(\vec{r}) &= (A_1 j_1(\kappa_a r) + B_1 n_1(\kappa_a r)) Y_{1m}(\theta, \phi)
\end{aligned}
$$

- $-V_0 < E < 0$: Hier ist κ im Innenraum zwar immer noch reell, im Außenraum aber rein imaginar.
  Innenraum: Gleiche Lösung wie für $E > 0$
  Außenraum: Auf Grund des imaginären κ bietet es sich an im Außenraum die Lösungen mit Hilfe der Hankelfunktionen anzugeben.

$$
h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + i n_l(z) \qquad\qquad h_l^{(2)}(z) = j_l(z) - i n_l(z)
$$

  Da diese Funktionen Linearkombinationen aus den Bessel- und Neumannfunktionen darstellen, lösen auch sie die Schrödingergleichung.

$$
\begin{aligned}
h_0^{(1)}(z) &= \frac{1}{z}(\sin z - i\cos z) = -\frac{i}{z}\exp(iz) \\
h_0^{(2)}(z) &= \frac{1}{z}(\sin z + i\cos z) = \frac{i}{z}\exp(-iz) \\
h_1^{(1)}(z) &= \frac{1}{z^2}(\sin z - i\cos z) - \frac{1}{z}(\cos z + i\sin z) = \\
&= -\frac{i}{z^2}\exp(iz) - \frac{1}{z}\exp(iz) \\
h_1^{(2)}(z) &= \frac{1}{z^2}(\sin z + i\cos z) - \frac{1}{z}(\cos z - i\sin z) = \\
&= \frac{i}{z^2}\exp(-iz) - \frac{1}{z}\exp(-iz)
\end{aligned}
$$

  Da $z = \kappa_a r = i\tilde{\kappa}r$ mit $\tilde{\kappa} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$ dürfen die möglichen Lösungen $h_l^{(2)}$ aus Gründen der Normierbarkeit nicht in der Wellenfunktion auftreten.

$$
\begin{aligned}
\psi_{00}^{(a)}(r) &= A_0 h_0^{(1)}(z) Y_{00}(\theta, \phi) \\
\psi_{1m}^{(a)}(r) &= A_1 h_1^{(1)}(z) Y_{1m}(\theta, \phi)
\end{aligned}
$$

(d) Das Verhalten der Wellenfunktion bei großen Radien wird durch die Bessel- und Neumannfunktionen bestimmt. Allgemein kann man diese Funktionen über

$$
\begin{aligned}
j_l(z) &= (-1)^l z^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\sin z}{z} \\
n_l(z) &= -(-1)^l z^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\cos z}{z}
\end{aligned}
$$

definieren. Für große Radien zählt in führender Ordnung nur der Term, in dem alle Ableitungen auf die trigonometrische Funktion wirken. Alle anderen Beiträge sind von der Ordnung $\mathcal{O}(1/z^2)$.

$$
\begin{aligned}
j_l(z) &\xrightarrow{\text{große } z} (-1)^l z^l \frac{1}{z^{l+1}} \frac{d^l}{dz^l} \sin z = (-1)^l \frac{1}{2iz} \frac{d^l}{dz^l} \left(e^{iz} - e^{-iz}\right) = \\
&= \frac{1}{2iz} \left((-i)^l e^{-iz} - (i)^l e^{-iz}\right) = \\
&= \frac{1}{2iz} \left(e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{-iz} - e^{il\frac{\pi}{2}} e^{-iz}\right) = \\
&= \frac{1}{z} \sin\left(z - l\frac{\pi}{2}\right) \\
n_l(z) &\xrightarrow{\text{große } z} -(-1)^l z^l \frac{1}{z^{l+1}} \frac{d^l}{dz^l} \cos z = -\frac{1}{z} \cos\left(z - l\frac{\pi}{2}\right)
\end{aligned}
$$

Für die Hankelfunktionen gilt dann:

$$
\begin{aligned}
h_l^{(1)}(z) &\xrightarrow{\text{große } z} -\frac{i}{z} e^{iz - il\frac{\pi}{2}} \\
h_l^{(2)}(z) &\xrightarrow{\text{große } z} \frac{i}{z} e^{-iz + il\frac{\pi}{2}}
\end{aligned}
$$

Mit diesen Kenntnissen kann nun das Verhalten der Wellenfunktion für große Radien angegeben werden:

- $E > 0$:

$$
\begin{aligned}
\psi_{00}^{(a)}(\vec{r}) &: \quad \text{keine Veränderung} \\
\psi_{1m}^{(a)}(\vec{r}) &\to \left(A_1 \frac{\sin(\kappa_a r - \pi/2)}{\kappa_a r} - B_1 \frac{\cos(\kappa_a r - \pi/2)}{\kappa_a r}\right) Y_{1m}(\theta, \phi)
\end{aligned}
$$

- $-V_0 < E < 0$:

$$
\begin{aligned}
\psi_{00}^{(a)}(\vec{r}) &: \quad \text{keine Veränderung} \\
\psi_{1m}^{(a)}(\vec{r}) &\to -i \frac{A_1}{\kappa_a r} e^{-\kappa_a r - i\frac{\pi}{2}} \quad \text{Kugelwelle}
\end{aligned}
$$