Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Institut für Theoretische Physik

Theorie des Wasserstoffatoms bei Betrachtung der Schrödinger-Gleichung im Impulsraum nach Vladimir Aleksandrovich Fock

Im Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie
WS 2013/2014

Matthias Post (380296)

Inhaltsverzeichnis

1 Motivation

Bei der Betrachtung von wasserstoffähnlichen Atomen ist für $E < 0$ bekanntlich ein diskretes Energiespektrum vorzufinden. Dieses ist bekanntlich durch $E_n = -ZR\frac{1}{n^2}$ gegeben. Es stellt sich heraus, dass diese Energiewerte jeweils mehreren Zuständen $|nlm>$ zugeordnet sind, sie sind also entartet. Während die Entartung in Bezug auf die magnetische Quantenzahl m mit der gewöhnlichen Drehgruppe O(3) verbunden war, musste eine zu l zugehörige Transformationsgruppe noch gefunden werden. Die Entartung der Wasserstoffenergieniveaus in Bezug auf die Drehimpulsquantenzahl l war lange Zeit ungeklärt, weswegen sie auch "zufällige Entartung" genannt wurde. Es stellt sich heraus, dass dies die vierdimensionale Drehgruppe O(4) ist.

Es ist ein bekannter Weg, diese Symmetrie durch die Erhaltung des Pauli-Runge-Lenz-Operators $\vec{M} = \frac{1}{2m}(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p} - \frac{\kappa}{r}\vec{r})$ zu erklären. Dafür wird der Kommutator $[\vec{M}, H]$ betrachtet, welcher verschwindet und damit die Erhaltung von $\vec{M}$ ausdrückt, und die durch $\vec{M}' = \sqrt{-\frac{m}{2E}}\vec{M}'$ und $\vec{L}$ gegebenen Kommutatorbeziehungen als Lie-Algebra der $SO(4)$-Gruppe definiert.[4] Thema dieser Ausarbeitung soll dagegen sein, diese Symmetrie durch den Vergleich der Schrödinger-Gleichung im Impulsraum mit der Integralgleichung für vierdimensionale Kugelflächenfunktionen zu erklären, wie es von Wladimir Alexandrowitsch Fock 1935 vorgestellt wurde.[1] Es wird sich herausstellen, dass diese übereinstimmen.

2 Schrödinger-Gleichung

Zunächst soll die Schrödinger-Gleichung für das Coulomb-Potential im Impulsraum hergeleitet werden. Dazu wird die Wellenfunktion der Schrödinger-Gleichung im Ortsraum fouriertransformiert. Anschließend werden die Impulskoordinaten p_i als stereographische Projektion der Einheitssphäre aufgefasst und die Gleichung dementsprechend angepasst, um sie im nächsten Abschnitt mit der Integralgleichung für vierdimensionale Kugelflächenfunktionen vergleichen zu können.

2.1 Schrödinger-Gleichung im Impulsraum

Die stationäre Schrödinger-Gleichung im Ortsraum

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{x}} - E + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x}) \;=\; 0 \tag{2.1}$$

mit dem Coulomb-Potential

$$V(\vec{x}) = \frac{\kappa}{|\vec{x}|} = \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} \tag{2.2}$$

lässt sich durch Fouriertransformation

$$\psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\;\tilde{\psi}(\vec{p}\,')\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\vec{x}} \tag{2.3}$$

als Schrödinger-Gleichung im Impulsraum schreiben. Einsetzen von (2.3) in (2.1) liefert

$$\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\vec{x}}\left[\frac{\vec{p}\,'^2}{2m} - E + V(\vec{x})\right]\tilde{\psi}(\vec{p}\,') \;= 0 \quad . \tag{2.4}$$

Multiplizieren mit $e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}$ und anschließendes integrieren über das Volumenelement d^3x führt zu

$$\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\,'-\vec{p})\vec{x}}\left[\frac{\vec{p}\,'^2}{2m} - E + V(\vec{x})\right]\tilde{\psi}(\vec{p}\,') \;= 0 \quad . \tag{2.5}$$

Die ersten zwei Teilterme liefern mithilfe der Fouriertransformation der Delta-Distribution $(2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p}\,' - \vec{p}) = \int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\,'-\vec{p})\vec{x}}$

$$\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\,'-\vec{p})\vec{x}}\left[\frac{\vec{p}\,'^2}{2m} - E\right]\tilde{\psi}(\vec{p}\,') \;= \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\,\tilde{\psi}(\vec{p}) - E\,\tilde{\psi}(\vec{p}) \quad . \tag{2.6}$$

Nach Einsetzen des Coulomb-Potentials (2.2) in den dritten Teilterm

$$\tilde{V}(\vec{p}-\vec{p}\,') = \int d^3x\, V(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{x}} = \int d^3x\, \frac{\kappa}{|\vec{x}|} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{x}} \tag{2.7}$$

stellt sich heraus, dass das Integral nicht konvergiert. Dieses Problem lässt sich dadurch beheben, indem ein Zusatzterm $e^{-\alpha|x|}$ eingeführt wird, der anschließend durch den Grenzwert $\alpha \to 0$ beseitigt wird. Eine anschließende Transformation in Kugelkoordinaten liefert

$$\tilde{V}(\vec{p}-\vec{p}\,') = \lim_{\alpha\to 0} \int_0^\infty dr\, r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta\; \frac{\kappa}{r}\; e^{-(\alpha+\frac{i}{\hbar}|\vec{p}-\vec{p}\,'|\cos\theta)r} \quad . \tag{2.8}$$

Die Substitution $y = \cos\theta$ vereinfacht das Integral zu

$$\tilde{V}(\vec{p}-\vec{p}\,') = 2\pi\kappa \lim_{\alpha\to 0} \int_0^\infty dr\, r \int_{-1}^{1} dy\, e^{-(\alpha+\frac{i}{\hbar}|\vec{p}-\vec{p}\,'|y)r} \tag{2.9}$$

und wird gelöst mit

$$\tilde{V}(\vec{p}-\vec{p}\,') = \frac{4\pi\hbar^2\kappa}{|\vec{p}-\vec{p}\,'|^2} \quad . \tag{2.10}$$

Einsetzen von (2.6) und (2.10) in (2.5) liefert die Schrödinger-Gleichung für wasserstoffähnliche Atome im Impulsraum

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\tilde{\psi}(\vec{p}) - \frac{Ze^2}{2\pi^2\hbar} \int \frac{\tilde{\psi}(\vec{p}\,')d^3p'}{|\vec{p}-\vec{p}\,'|^2} = E\tilde{\psi}(\vec{p})\,. \tag{2.11}$$

2.2 Stereographische Projektion

Die vier Komponenten von $\vec{p}$ lassen sich als stereographische Projektion der vierdimensionalen euklidischen Einheitskugel $(r = 1, \alpha, \theta, \varphi)$ auffassen. Die Koordinaten der Sphäre lassen sich auf das Volumen $(\frac{p_x}{p_0}, \frac{p_y}{p_0}, \frac{p_z}{p_0}, 0)$, wobei $p_0 = \sqrt{-2mE}$ der gemittelte quadratische Impuls ist, projizieren, indem eine Gerade vom Südpol der Kugel durch den Punkt auf der Kugeloberfläche (ξ, η, ζ, χ) einen eindeutigen Schnittpunkt mit dem Volumen einnimmt, also

$$\vec{g}(t, p_x, p_y, p_z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} p_x/p_0 \\ p_y/p_0 \\ p_z/p_0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{2.12}$$

Die Sphäre im $\mathbb{R}^4$ ist durch

$$\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 + \chi^2 - 1 = 0 \tag{2.13}$$

bestimmt, woraus mit (2.12)

$$t_\circ^2 \frac{p_x}{p_0}^2 + t_\circ^2 \frac{p_y}{p_0}^2 + t_\circ^2 \frac{p_z}{p_0}^2 + (1 - t_\circ)^2 - 1 = 0 \tag{2.14}$$

$$\Rightarrow \qquad t_\circ = \frac{2}{\frac{p_x}{p_0}^2 + \frac{p_y}{p_0}^2 + \frac{p_z}{p_0}^2 + 1} = \frac{2p_0^2}{p_0^2 + p^2} \tag{2.15}$$

folgt. Mit (2.12) ergeben sich nun die rechtwinklig zueinander stehenden Koordinaten der Einheitskugel

$$\xi = \frac{2p_0 p_x}{p_0^2 + p^2} = \sin\alpha \sin\theta \cos\varphi \tag{2.16}$$

$$\eta = \frac{2p_0 p_y}{p_0^2 + p^2} = \sin\alpha \sin\theta \sin\varphi \tag{2.17}$$

$$\zeta = \frac{2p_0 p_z}{p_0^2 + p^2} = \sin\alpha \cos\theta \tag{2.18}$$

$$\chi = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2} = \cos\alpha \quad , \tag{2.19}$$

beziehungsweise in der Rücktransformation

$$\frac{p_x}{p_0} = \frac{\xi}{1 - \chi}, \quad \frac{p_y}{p_0} = \frac{\eta}{1 - \chi}, \quad \frac{p_z}{p_0} = \frac{\zeta}{1 - \chi} \quad . \tag{2.20}$$

Durch die Projektion entsteht also auch eine Verbindung zwischen dem Flächenelement auf der Einheitskugel $d\Omega = \sin^2\alpha\, d\alpha \sin\theta d\theta d\varphi$ und dem Volumenelement im Impulsraum: $d^3p = dp_x dp_y dp_z = p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi$. Nach bilden der zugehörigen Funktionaldeterminante ergibt sich

$$d^3p = \left(\frac{p_0^2 + p^2}{2p_0}\right)^3 d\Omega \quad . \tag{2.21}$$

Im nächsten Schritt soll die Schrödinger-Gleichung (2.11) mithilfe dieser neu erhaltenen Beziehungen durch die stereographische Projektion (2.16 - 2.21) umgeformt werden. Dazu wird die geschickt gewählte und durch $\frac{1}{2\pi^2} \int |\Psi(\alpha, \theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1$ normierte Funktion

$$\Psi(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{\pi}{\sqrt{8}} \frac{(p_0^2 + p^2)^2}{p_0^{3/2}} \, \tilde{\psi}(\vec{p}) \tag{2.22}$$

in (2.11) eingesetzt.

$$\left[\frac{p^2}{2m} - E\tilde{\psi}(\vec{p})\right] \tilde{\psi}(\vec{p}) \quad = \quad \frac{Ze^2}{2\pi^2\hbar} \int \frac{\tilde{\psi}(\vec{p}\,')d^3p'}{|\vec{p} - \vec{p}\,'|^2} \tag{2.23}$$

$$\Leftrightarrow \quad \left[\frac{p^2}{2m} - E\tilde{\psi}(\vec{p})\right] \frac{\Psi(\alpha, \theta, \varphi)}{(p_0^2 + p^2)^2} \quad = \quad \frac{Ze^2}{2\pi^2\hbar} \int \frac{\Psi(\alpha', \theta', \varphi')}{(p_0^2 + p'^2)^2} \frac{\left(\frac{p_0^2 + p'^2}{2p_0}\right)^3 d\Omega'}{|\vec{p}(\alpha, \theta, \varphi) - \vec{p}\,'(\alpha', \theta', \varphi')|^2} \tag{2.24}$$

Mithilfe von $p_0 = \sqrt{-2mE}$ und der Abkürzung $\lambda = \frac{Zme^2}{hp_0}$ folgt

$$\Psi(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{\lambda}{2\pi^2} \int \frac{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)}{4p_0^2 \, |\vec{p} - \vec{p}\,'|^2} \, \Psi(\alpha', \theta', \varphi') \, d\Omega' \quad . \tag{2.25}$$

Nach einigen länglichen Rechenschritten (siehe Anhang A.1) ist schließlich die finale Darstellung der Schrödinger-Gleichung erreicht. Sie lautet

$$\boxed{\Psi(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{\lambda}{2\pi^2} \int \frac{\Psi(\alpha', \theta', \varphi') d\Omega'}{4 \sin^2 \frac{\omega}{2}}} \quad , \tag{2.26}$$

wobei

$$4 \sin^2 \frac{\omega}{2} = (\xi - \xi')^2 + (\eta - \eta')^2 + (\zeta - \zeta')^2 + (\chi - \chi')^2 \tag{2.27}$$

das Abstandsquadrat der Punkte $(\alpha, \theta, \varphi)$ und $(\alpha', \theta', \varphi')$ ist. ω bezeichnet somit die Bogenlänge des Kreisstückes zwischen diesen Punkten auf der Einheitskugel.

3 Integralgleichung der Kugelfunktionen einer Kugel im $\mathbb{R}^4$

Im Folgenden soll mithilfe der Laplace-Gleichung und der Nutzung der Greenschen Funktion G eine Gleichung für harmonische Funktionen $u(x_1, x_2, x_3, x_4)$ hergeleitet werden. Diese wird dann anschließend mit dem zuvor in Abschnitt 2 ermittelten Zusammenhang (2.26) verglichen.

Zunächst werden die Kugelkoordinaten in vier Dimensionen

$$x_1 = r\xi = r\sin\alpha\sin\theta\cos\varphi\,, \tag{3.1}$$
$$x_2 = r\eta = r\sin\alpha\sin\theta\sin\varphi\,, \tag{3.2}$$
$$x_3 = r\zeta = r\sin\alpha\cos\theta \text{ und} \tag{3.3}$$
$$x_4 = r\chi = r\cos\alpha \tag{3.4}$$

betrachtet. Dabei gilt für harmonische Funktionen $u(x_1, x_2, x_3, x_4)$ innerhalb der Kugel die Laplace-Gleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_4^2} = \Delta u = 0\,. \tag{3.5}$$

3.1 Greensche Funktion G

Mit der Greenschen Funktion G, für die

$$\Delta G(\vec{x}, \vec{x}') = -2\pi^2 \delta(\vec{x} - \vec{x}') \tag{3.6}$$

gelte und die auf der Kugel der Randbedingung

$$\frac{\partial G}{\partial r'} + G = 0 \quad \text{für} \quad r' = 1 \tag{3.7}$$

genügen soll, kann eine Ausdrucksform der gesuchten harmonischen Funktion $u(x_1, x_2, x_3, x_4)$ gefunden werden. Dazu wird die 2. Greensche Identität [2]

$$\int\limits_V (\varphi\Delta\psi - \psi\Delta\varphi) d^4x = \oint\limits_{S(V)} \left(\varphi\frac{\partial\psi}{\partial n} - \psi\frac{\partial\varphi}{\partial n}\right) df \tag{3.8}$$

ausgenutzt, indem in diesem Fall $\varphi = u$ und $\psi = G$. gesetzt wird:

$$\int\limits_V (u(\vec{x}')\Delta_{\vec{x}'}G - G\Delta_{\vec{x}'}u(\vec{x}'))d^4x' = \int \left(u\frac{\partial G}{\partial r'} - G\frac{\partial u}{\partial r'}\right) d\Omega'\,. \tag{3.9}$$

Daher gilt mit (3.6-3.8) im Inneren der Einheitskugel für harmonische Funktionen u:

$$u(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{1}{2\pi^2} \int \left(\frac{\partial u}{\partial r'} + u\right)_{r'=1} G\, d\Omega'\,. \tag{3.10}$$

Eine Greensche Funktion G kann mit

$$G = \frac{1}{2R^2} + \frac{1}{2R_1^2} \quad , \tag{3.11}$$

$$\text{wobei} \qquad R^2 = r^2 - 2rr'\cos\omega + r'^2 \quad \text{und} \quad R_1^2 = 1 - 2rr'\cos\omega + r^2 r'^2 \quad , \tag{3.12}$$

gefunden werden. Als Beweis werden die Forderungen (3.6) und (3.7) an G nachgewiesen. Nach (2.27) ist $\cos\omega = \frac{1}{rr'}(x_1x_1' + x_2x_2' + x_3x_3' + x_4x_4')$, womit für (3.12)

$$\begin{aligned} R^2 &= (x_1 - x_1')^2 + (x_2 - x_2')^2 + (x_3 - x_3')^2 + (x_4 - x_4')^2 \quad \text{und} \\ R_1^2 &= 1 - 2(x_1x_1' + x_2x_2' + x_3x_3' + x_4x_4') + (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2)(x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2 + x_4'^2) \end{aligned}$$

gilt. Zweifache Ableitung vom G nach den Variablen x_i liefert nach langer Rechnung [1] für $x_i \neq x_i'$ Null. Für $\vec{x} \to \vec{x}'$ ist leicht ersichtlich, dass $G \to \infty$, also damit auch $\Delta G \propto \delta(\vec{x} - \vec{x}')$. In den ursprünglichen Koordinaten $(r, \alpha\theta\varphi)$ lässt sich (3.6) leicht zeigen. Ableitung nach r' liefert

$$\frac{\partial G}{\partial r'} = \frac{r\cos\omega - r'}{(r^2 - 2rr'\cos\omega + r'^2)^2} + \frac{r\cos\omega - r'r^2}{(1 - 2rr'\cos\omega + r^2r'^2)^2} \overset{r'=1}{\equiv} \frac{1}{2r\cos\omega - r^2 - 1} = -G(r' = 1) \quad .$$

$\square$

3.2 Harmonische Funktion u

Damit ist die Greensche Funktion G in (3.10) bekannt. Wir nutzen nutzen nun aus, dass $u(x_1, x_2, x_3, x_4)$ als harmonisches Polynom

$$u = r^{n-1}\Psi_n(\alpha, \theta, \varphi) \tag{3.13}$$

geschrieben werden kann. Für dieses gilt

$$\frac{\partial u}{\partial r'} + u\Big|_{r=1} = ((n-1)r^{n-2} + r^{n-1})\Psi_n(\alpha, \theta, \varphi)\Big|_{r=1} = n\Psi_n(\alpha, \theta, \varphi)\,. \tag{3.14}$$

Dieser Term kann nun zusammen mit G in (3.10) für $r' = 1$ eingesetzt werden, sodass

$$r^{n-1}\Psi_n(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{n}{2\pi^2}\int \frac{\Psi(\alpha', \theta', \varphi')d\Omega'}{1 - 2r\cos\omega + r^2}\,. \tag{3.15}$$

Diese Gleichung ist in Bezug auf r eine Identität, ist also auch für $r = 1$ gültig:

$$\Psi_n(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{n}{2\pi^2}\int \frac{\Psi(\alpha', \theta', \varphi')d\Omega'}{2(1 - \cos\omega)}\,. \tag{3.16}$$

Damit haben wir die Integralgleichung für harmonische Funktionen auf eine Form gebracht, die der Schrödinger-Gleichung (2.26) entspricht. Es ist zu sehen, dass $\lambda = n$ somit die Rolle einer Hauptquantenzahl einnimmt. Außerdem ist durch diese Beziehung zu sehen, dass es sich bei der Transformationsgruppe der Schrödinger-Gleichung für wasserstoffähnliche Atome um die vierdimensionale Drehgruppe $SO(4)$ handelt. Es gilt damit wie erwartet

$$E = -2mp_0^2 = -\frac{Z^2me^4}{2\hbar n^2} = -RZ^2\frac{1}{n^2}\,. \tag{3.17}$$

[1] z.B. leicht lösbar mit Wolfram Mathematica

4 Explizite Darstellung

Die Funktion Ψ aus (2.26) beziehungsweise (3.16) lässt sich explizit als

$$\Psi(\alpha,\theta,\varphi) = \Pi_l(n,\alpha) Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{4.1}$$

ausdrücken. Dabei sind Y_{lm} die sphärisch harmonischen Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad , \tag{4.2}$$

wobei die P_l^m die zugeordneten Legendre-Polynome

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l \tag{4.3}$$

darstellen.[2] Die $\Pi_l(n,\alpha)$ können als

$$\Pi_l(n,\alpha) = \frac{M_l}{\sin^{l+1}\alpha}\int_0^\alpha \cos(n\beta)\frac{\cos\beta-\cos\alpha}{l!}d\beta \text{ , oder} \tag{4.4}$$

$$\Pi_l(n,\alpha) = \frac{\sin^l\alpha}{M_l}\frac{d^{l+1}(\cos(n\alpha))}{d\cos(\alpha)^{l+1}} \quad \text{mit } M_l = \sqrt{n^2(n^2-1)...(n^2-l^2)} \tag{4.5}$$

definiert werden. Für $l=0$ wird Π_l also zu $\Pi_0(n,\alpha) = \frac{\sin(n\alpha)}{\sin\alpha}$.

5 Additionstheorem

Nachdem nun der Zusammenhang zwischen der Schrödinger-Gleichung und der Integralgleichung im vierdimensionalen Raum gezeigt wurde, soll nun ein Additionstheorem hergeleitet werden. Ausgehend von der Integralgleichung (3.15) wollen wir deren Nenner nach Potenzen von r entwickeln:

$$\frac{1}{1-2r\cos\omega+r^2} \doteq 1+2r\cos\omega+\frac{r^2}{2}(4\cos(2\omega)+2)+\ldots=\sum_{k=1}^{\infty}r^{k-1}\frac{\sin(k\omega)}{\sin\omega}\,. \tag{5.1}$$

Einsetzen in (3.15) liefert

$$r^{n-1}\Psi_n(\alpha,\theta,\varphi)=\frac{n}{2\pi^2}\int\Psi_n(\alpha',\theta',\varphi')\sum_{k=1}^{\infty}r^{k-1}\frac{\sin(k\omega)}{\sin\omega}d\Omega'\,, \tag{5.2}$$

beziehungsweise

$$\delta_{kn}\Psi_n(\alpha,\theta,\varphi)=\frac{n}{2\pi^2}\int\Psi_n(\alpha',\theta',\varphi')\frac{\sin(k\omega)}{\sin\omega}d\Omega' \tag{5.3}$$

für die einzelnen Koeffizienten. Die Funktion $n\frac{\sin(n\omega)}{\sin\omega}$ kann, da $\omega=\omega(\alpha',\theta',\varphi')$, nach den $\Psi_{nlm}(\alpha',\theta',\varphi')$ entwickelt werden:

$$n\frac{\sin(n\omega)}{\sin\omega}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}c_{nlm}\Psi_{nlm}(\alpha',\theta',\varphi')\,. \tag{5.4}$$

Die Entwicklungskoeffizienten c_{nlm} sind wie gewohnt dann durch

$$c_{nlm}=\frac{1}{2\pi^2}\int d\Omega'\,n\frac{\sin(n\omega)}{\sin\omega}\Psi^*_{nlm}(\alpha',\theta',\varphi') \tag{5.5}$$

definiert. Ausnutzen von (5.3) für $k=n$ führt schließlich zum Additionstheorem für vierdimensionale Kugelflächenfunktionen:

$$\boxed{n\frac{\sin(n\omega)}{\sin\omega}=\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l}\Psi^*_{nlm}(\alpha,\theta,\varphi)\Psi_{nlm}(\alpha',\theta',\varphi')}\,. \tag{5.6}$$

Zum Vergleich lautet das Additionstheorem der dreidimensionale sphärisch harmonischen Funktionen

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi)\,, \tag{5.7}$$

wobei $\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi - \varphi')$, woraus

$$n\frac{\sin(n\omega)}{\sin\omega} = \sum_{l=0}^{n-1} \Pi_l(n, \alpha)\Pi_l(n, \alpha')(2l+1)P_l(\cos\gamma) \tag{5.8}$$

folgt. Dieses Additionstheorem ist bei der Berechnung von Normierungskonstanten der Projektion einer Wellenfunktion φ der Gestalt

$$N = \sum_{l,m} |\int \psi^*_{nlm}\varphi\, d\tau|^2 \tag{5.9}$$

hilfreich, die beispielsweise in der Theorie des Compton-Effekts bei gebundenen Elektronen auftauchen. Hier wird die Summierung dann enorm vereinfacht.

6 Streuzustände

Bei Streuzuständen, also Zuständen mit $E > 0$, wird keine Kugel, sondern ein zweischaliges Hyperboloid betrachtet. Damit geschieht ein Wechsel von der riemannschen zur hyperbolischen (Lobatschewski-) Geometrie. Die Mäntel entsprechen den Impulsbereichen $0 < p < \sqrt{2mE}$ und $\sqrt{2mE} < p < \infty$.

Im Allgemeinen ist es jedoch einfacher bei einem kontinuierlichen Spektrum, zuerst mit einem entsprechenden diskreten Spektrum zu rechnen und zum Schluss n rein imaginär zu betrachten, da sich die $\Pi_l(n, \alpha)$ aus (4.4) für imaginäre Zahlen nur um einen Faktor unterscheiden.

Literatur

[1] Fock, Wladimir Alexandrowitsch (1935): Zur Theorie des Wasserstoffatoms - In: Zeitschrift für Physik, Band 98, Seite 145-154

[2] Nolting, Wolfgang (2011): Grundkurs Theoretische Physik 3, 9. Auflage

[3] Klasen, Michael (2012): Vorlesungsskript vom 10.10.2012, http://pauli.uni-muenster.de/tp/menu/studium/archiv/physik-iii-ws-201213/uebungen.html

[4] Reinhardt, Hugo (1012): Quantenmechanik 1: Pfadintegralformulierung und Operatorformalismus, Kapitel 19.5

7 Anhang

Beweis von (2.25) ⇔ (2.26):

$$
\begin{aligned}
\sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) &= \xi^2+\eta^2+\zeta^2+\chi^2+\xi'^2+\eta'^2+\zeta'^2+\chi'^2-2(\xi\xi'+\eta\eta'+\zeta\zeta'+\chi\chi') \qquad \text{(A.1)}\\
&= 2-2(\xi\xi'+\eta\eta'+\zeta\zeta'+\chi\chi')\\
&= 2-2\left[\frac{4p_0^2p_xp_x'}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}+\frac{4p_0^2p_yp_y'}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}+\frac{4p_0^2p_zp_z'}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}+\frac{(p_0^2-p^2)(p_0^2-p'^2)}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}\right]\\
&= \frac{4p_0^2}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}\left[\frac{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}{2p_0^2}-2(p_xp_x'+p_yp_y'+p_zp_z')-\frac{(p_0^2-p^2)(p_0^2-p'^2)}{2p_0^2}\right]\\
&= \frac{4p_0^2}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}\left[\frac{1}{2p_0^2}(p_0^2p^2+p_0^2p'^2)-2(p_xp_x'+p_yp_y'+p_zp_z')\right]\\
&= \frac{4p_0^2}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}\left[(p_x-p_x')^2+(p_y-p_y')^2+(p_z-p_z')^2\right]\\
&= \frac{4p_0^2\,|\vec{p}-\vec{p}'|^2}{(p_0^2+p^2)(p_0^2+p'^2)}
\end{aligned}
$$

□