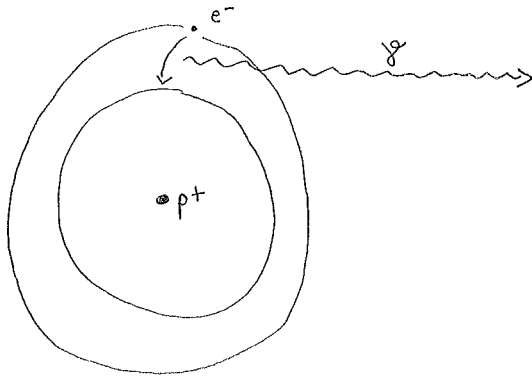


6. Das Wasserstoffatom

Erstaunlicherweise hat die genaue Betrachtung dieses esoterischen (unter irdischen Bedingungen!) aber theoretisch einfachen Systems immer wieder zur Entdeckung von neuen Naturgesetzen geführt!

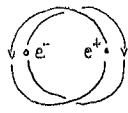


Spektrallinien experimentell sehr genau gemessen (auch in Abhängigkeit von möglichen externen magnetischen oder elektrischen Feldern)

⇒

Energie-Eigenwerte der gebundenen Zustände sind bekannt.

- Rydberg-Formel ⇒ 1912 Bohrsches Atommodell ⇒ Quantenmechanik
- Feinstruktur ⇔ 1928 Dirac-Gleichung ⇔ Relativistische Quantenmechanik
- Lamb-Shift ⇒ 1947 Bethe ⇒ Quantenelektrodynamik (Quantenfeldtheorie)

Heute spielen analoge Systeme, z.B. Positronium  und Quarkonium (e → c bzw. b) sowie Antiwasserstoff (p-e+) eine wichtige Rolle in der Elementarteilchenphysik.

6.1 Zweikörperproblem und Radialgleichung [Fließbach 24; Griffiths 4.9]

$$\hat{H} = \left\{ \frac{[\hat{p}^{(1)}]^2}{2m_1} + \frac{[\hat{p}^{(2)}]^2}{2m_2} + V(\hat{r}^{(1)}, \hat{r}^{(2)}) \right\} \mathbb{1} + \hat{H}_S(\hat{S}^{(1)}, \hat{S}^{(2)})$$

werden vorerst vernachlässigt

$$[\hat{X}_k^{(1)}, \hat{p}_l^{(1)}] = [\hat{X}_k^{(2)}, \hat{p}_l^{(2)}] = i\hbar \delta_{kl}$$

Alle anderen Vertauschungen verschwinden.

Relativ- und Schwerpunktkoordinaten

$$\hat{\vec{R}} := \frac{m_1 \hat{\vec{r}}^{(1)} + m_2 \hat{\vec{r}}^{(2)}}{m_1 + m_2} ; \quad \hat{\vec{r}} := \hat{\vec{r}}^{(1)} - \hat{\vec{r}}^{(2)}$$

$$\hat{\vec{p}} := \hat{\vec{p}}^{(1)} + \hat{\vec{p}}^{(2)} ; \quad \hat{\vec{p}} := \frac{m_2 \hat{\vec{p}}^{(1)} - m_1 \hat{\vec{p}}^{(2)}}{m_1 + m_2}$$

Es folgt:

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar (\delta_{kl} - \delta_{kl}) = \hat{0}$$

$$[\hat{X}_k, \hat{p}_l] = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} i\hbar (\delta_{kl} - \delta_{kl}) = \hat{0}$$

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2} i\hbar \delta_{kl} = [\hat{X}_k, \hat{p}_l]$$

Und auch:

$$\hat{\vec{p}}^{(1)} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} ; \quad \hat{\vec{p}}^{(2)} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}$$

$$\Rightarrow \frac{[\hat{\vec{p}}^{(1)}]^2}{2m_1} + \frac{[\hat{\vec{p}}^{(2)}]^2}{2m_2} = \dots = \frac{1}{2M} \hat{\vec{p}}^2 + \frac{1}{2\mu} \hat{\vec{p}}^2$$

wobei $M := m_1 + m_2$ die Gesamtmasse und μ die "reduzierte" Masse ist:

$$\frac{1}{\mu} := \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \Leftrightarrow \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Für $m_2 \ll m_1$ gilt $M \approx m_1$, $\mu \approx m_2$.

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{r}})$$

Falls jetzt V nur von der Relativkoordinate $\hat{\vec{r}}$ abhängig ist, bleibt der Gesamtimpuls erhalten ($[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = \hat{0}$). Der entsprechende Beitrag zur Gesamtenergie ist "trivial" und interessiert uns kaum.

So lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung dann

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\vec{r}}) \right] |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

bzw.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Zentralkraft

In meisten Fällen (z.B. $V = -\frac{Ze^2}{|\vec{r}(t) - \vec{r}(e)|}$) hängt V nur von $|\vec{r}|$ ab. Dann lohnt es sich, in Kugelkoordinaten überzugehen. Seite 71:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] + \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 + V(r) \right\} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}).$$

Aufgabe 4.9:

$[\hat{H}, \hat{L}] = 0 \Rightarrow \Psi(\vec{r})$ kann als Eigenzustand von \hat{L}^2 und \hat{L}_z gewählt werden

$\Rightarrow \Psi(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ "Separationsansatz"
 [oder abstrakt: $|\Psi\rangle = |R\rangle |lm\rangle$]

Radialgleichung:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right\} R(r) = E R(r)$$

Normierung:

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 = 1. \quad \left(\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{lm}|^2 = 1. \right)$$

Randbedingungen:

- * Normierung $\Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} R(r) = 0.$
- * $|\Psi(\vec{r})|^2$ endlich $\Rightarrow \lim_{r \rightarrow 0} R(r) < \infty.$ *

Entartung:

Die Energie-Eigenwerte sind unabhängig von m [weil m in der Radialgleichung nicht auftaucht]
 \Rightarrow die Energien sind $(2l+1)$ -mal "entartet".

Notation:

Aus historischen Gründen:

$l = 0$	1	2	3	4	5	...
$\Leftrightarrow S$	P	D	F	G	H	
	s	p	d	f	g	h

\leftarrow grosse Buchstaben für Gesamtsystem
 \leftarrow kleine Buchstaben für einzelne Teilchen

* Hier wird vielleicht zu viel verlangt: auch $R(r) \propto \frac{1}{r}$ wäre integrierbar bei $r \rightarrow 0^+$. Dann bräuchten wir aber $\nabla^2(\frac{1}{r}) = -4\pi \delta^{(3)}(\vec{r})$ in $V(r)$!

Das Problem kann noch ein wenig vereinfacht werden, indem wir eine „skalierte“ Radialfunktion einführen:

$$R(r) =: \frac{u(r)}{r} \quad \Leftrightarrow \quad u(r) = R(r) \cdot r$$

$$\frac{\partial R}{\partial r} = -\frac{u}{r^2} + \frac{u'}{r} \quad \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} = 2\frac{u}{r^3} - 2\frac{u'}{r^2} + \frac{u''}{r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{u''}{r} - 2\frac{u'}{r^2} + 2\frac{u}{r^3} - 2\frac{u}{r^3} + 2\frac{u'}{r^2} \right] + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \frac{u}{r} + V(r) \frac{u}{r} = E \frac{u}{r} \quad | \cdot r$$

Also: Radialgleichung:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \right\} u(r) = E u(r)$$

„Effektives Potential“:

$$V_{\text{eff}}(r) := V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \quad ; \quad r > 0$$

↑ „Rotationsenergie“

Normierung:

$$\int_0^\infty dr |u(r)|^2 = 1$$

Randbedingungen:

$$u(0) = u(\infty) = 0$$

Graphisch:

Integrierbarkeit
 $R(0)$ endlich oder divergiert langsamer als $\frac{1}{r}$

