

6.2 Energiespektrum

[Fließbach: 99, Griffiths 4.9]

Wir betrachten das Coulomb-Potential:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad ; \quad Z=1 \text{ für Wasserstoff.}$$

Die Radialgleichung lautet (vgl. Seite 84)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right\} u(r) = E u(r),$$

mit den Randbedingungen $u(0) = u(\infty) = 0$.

Schritte:

(i) Was passiert bei grossen Abständen ($r \rightarrow \infty$)?

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' \approx E u \quad * \quad E > 0 \Rightarrow \text{Oszillationen} \quad \nrightarrow \quad u(\infty) = 0 \\ \Rightarrow E < 0 \quad !$$

(ii) Notation: $E =: -\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \Rightarrow u(r) \sim e^{-kr}$ für $r \rightarrow \infty$.

(iii) Notation: $\begin{cases} s := dr \\ s_0 := \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \frac{Ze^2}{r} \end{cases}$ Dividiere auf beiden Seiten durch $-\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} !$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{d^2}{ds^2} - \frac{l(l+1)}{s^2} + \frac{s_0}{s} - 1 \right\} u(s) = 0$$

(iv) Asymptotisches Verhalten:

$$* \quad s \rightarrow \infty \Rightarrow u(s) \sim e^{-s} \\ * \quad s \rightarrow 0 \Rightarrow u''(s) \approx \frac{l(l+1)}{s^2} u(s) \quad ; \quad \text{Ansatz } u(s) \sim s^\alpha \\ \alpha(\alpha-1) = l(l+1) \\ \alpha = l+1 \quad \vee \quad \alpha = -l \quad \nrightarrow \quad u(0) = 0$$

(v) Globaler Ansatz:

$$u(s) =: s^{l+1} e^{-s} w(s) \\ u'(s) = (l+1)s^l e^{-s} w - s^{l+1} e^{-s} w' + s^{l+1} e^{-s} w'' \\ u''(s) = l(l+1)s^{l-1} e^{-s} w - (l+1)s^l e^{-s} w' + (l+1)s^l e^{-s} w'' \\ - (l+1)s^l e^{-s} w + s^{l+1} e^{-s} w'' - s^{l+1} e^{-s} w''' \\ + (l+1)s^l e^{-s} w' - s^{l+1} e^{-s} w'' + s^{l+1} e^{-s} w''' \\ = s^l e^{-s} \left\{ \left[\frac{l(l+1)}{s} - 2l(l+1) + s \right] w + 2[l+1-s] w' + s w'' \right\}$$

$$\Rightarrow [-2(l+1) + s_0] w + 2[l+1-s] w' + s w'' = 0.$$

(vi) Potenzreihe: $w(s) = \sum_k a_k s^k$
 $w'(s) = \sum_k a_k k s^{k-1}$
 $w''(s) = \sum_k a_k k(k-1) s^{k-2}$

$$\Rightarrow \sum_k \left\{ [-2(l+1) + s_0] a_k s^k + \underbrace{2(l+1) k a_k s^{k-1}}_{k \rightarrow k+1} - \underbrace{2 k a_k s^k}_{k \rightarrow k+1} + \underbrace{k(k-1) a_k s^{k-1}}_{k \rightarrow k+1} \right\} = 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_k \left\{ [s_0 - 2(k+l+1)] a_k + (k+1) [2(l+1) + k] a_{k+1} \right\} s^k = 0 \quad \forall s$$

$$\Rightarrow [2(k+l+1) - s_0] a_k = (k+1) [2(l+1) + k] a_{k+1} \quad \forall k$$

(vii) Wähle $k = -1 \Rightarrow a_{-1} = 0$. Also $k \geq 0$.

(viii) Für $k = 0, 1, 2, \dots$: $\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2(k+l+1) - s_0}{(k+1)(2l+k+2)}$

(ix) Für $k \gg 1$:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \approx \frac{2k}{k^2} = \frac{2}{k} \Rightarrow a_k \sim \frac{2^k}{(k-1)!}$$

$$\Rightarrow w(s) \sim \sum_k \frac{2^k s^k}{(k-1)!}$$

$$\sim 2s \sum_k \frac{(2s)^{k-1}}{(k-1)!}$$

$$\sim 2s e^{2s} \stackrel{s \rightarrow \infty}{\sim} u(s) \sim e^{-s}$$

(x) Also muss die Reihe abbrechen!

• $\exists n \in \{1, 2, \dots\}$ so dass $s_0 = 2n$ gilt!

Energie ist wieder quantisiert!

• $w(s)$ ist ein Polynom („Zugeordnetes Laguerre-Polynom“).

• Für eine gegebene „Hauptquantenzahl“ n :

$$k+l+1 = n, \quad k \in \{0, 1, \dots\}$$

$$\Rightarrow l = n-1-k$$

$$\Rightarrow l = 0, 1, \dots, n-1.$$

Zusammenfassung:

- Die Energie-Eigenzustände werden durch drei Quantenzahlen spezifiziert:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m = -l, \dots, +l$$

(Dazu kommen noch die Spinguantenzahlen.)

- Energie-Eigenwerte:

$$S_0 = \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \frac{Ze^2}{2e} = 2n; \quad E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{Ze^2}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{4\mu^2}{\hbar^2 k^2} = 4n^2$$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{1}{2} \mu c^2 \cdot Z^2 \cdot \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \cdot \frac{1}{n^2}$$

- Entartung:

$$2^2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 4n^2$$

↑
Spins (Elektron, Proton)

"Rydberg-Formel"

- Definitionen:

* "Feinstrukturkonstante": $\alpha := \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137,04}$

* "Rydberg-Konstante": $= \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 \approx 13,605 \text{ eV}$

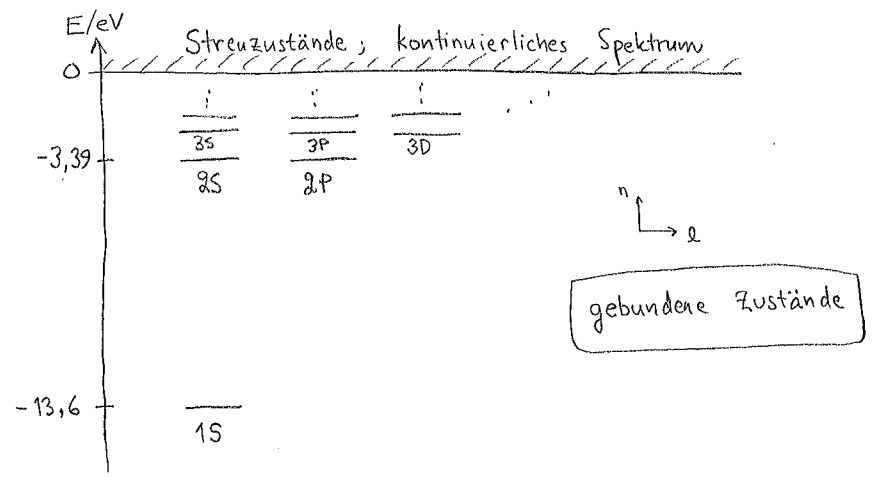
* "Bohr-Radius": $a := \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar c}{\mu c^2} \approx 0,53 \text{ \AA}$
↑
 10^{-10} m

Hier $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$ und $Z=1$
↑
 $\approx \frac{1}{2000}$

$$\Rightarrow E_n \approx -\frac{1}{2} m_e c^2 \cdot \frac{\alpha^2}{n^2} \approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

Auch: $E_n = -\frac{e^2}{2a} \cdot \frac{1}{n^2}$

Graphisch:



Eine genauere Betrachtung löst die Entartung auf;

Spin spielt dann auch eine Rolle.

Notation: $n l j_e$, mit $j_e = l + \frac{1}{2}$ oder $l - \frac{1}{2}$ (Gesamtdrehimpuls des Elektrons)

↳

* Feinstruktur (relativistische Korrekturen aus der Dirac-Gleichung):

E_n hängt von j_e ab:

$$|E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{3/2}}| = |E_{2P_{1/2}} - E_{2D_{3/2}}| = \mathcal{O}(\alpha^4)$$

* Lamb-Shift (relativistische Korrekturen aus der QED):

E_n hängt von l ab:

$$|E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}}| = \mathcal{O}(\alpha^5 \ln \frac{1}{\alpha})$$

* Hyperfeinstruktur (Korrekturen wegen Spin des Protons):

E_n hängt von Eigenwert von $(\hat{S}^{(e)} + \hat{S}^{(p)})^2$ ab:

$$|E_{1S_{1/2}}^{(0)} - E_{1S_{1/2}}^{(1)}| = \mathcal{O}(\alpha^4 \frac{m_e}{m_p})$$

(Die entsprechende Wellenlänge: $\lambda = 21 \text{ cm}$.
 Diese spielt eine wichtige Rolle in der Astronomie!)