5. Wasserstoffatom

- H-Atom: häufigstes Element im Universum!

  $\leftrightarrow$ Erdkruste: kommt fast nicht vor.
  $\rightarrow$ gebunden (H_2O, $H_2, ..$)

- **theoretisch einfaches** System

  Spektrallinien experimentell sehr genau vermessen, auch in Abhängigkeit von externen elektr. oder magnetischen Feldern

  $\Rightarrow$ Energie-EW der gebundenen Zustände experimentell bekannt!

- genaue Betrachtung dieses Systems hat wiederholt zur Entdeckung völlig neuer "Welten" geführt:

Rydberg-Formel	$\Rightarrow$	1912	Bohr'sches Atommodell	$\Rightarrow$	QM
Fermistruktur	$\Leftrightarrow$	1928	Dirac-Gleichung	$\Leftrightarrow$	relativistische QM
Lamb-Shift	$\Rightarrow$	1947	Bethe	$\Rightarrow$	Quantenelektrodynamik ($\rightarrow$ Quantenfeldtheorie)

- heute spielen ähnliche Systeme, z.B. Positronium (e^+e^-) und Quarkonium $(c\bar{c}, b\bar{b}, \cdots)$ sowie Antiwasserstoff (p^-e^+) eine wichtige Rolle in der Elementarteilchenphysik

5.1 Zweikörperproblem; Radialgleichung

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

$$[\hat{r}_k^{(1)}, \hat{p}_l^{(1)}] = i\hbar\delta_{kl} = [\hat{r}_k^{(2)}, \hat{p}_l^{(2)}]\,, \quad \text{Rest} = 0$$

führe nun (wie in der Mechanik) **Relativ- und Schwerpunktkoordinaten** ein

$$\begin{aligned} \hat{\vec{R}} &\equiv \frac{m_1\hat{\vec{r}}^{(1)} + m_2\hat{\vec{r}}^{(2)}}{m_1+m_2}\,; \quad \hat{\vec{r}} \equiv \hat{\vec{r}}^{(1)} - \hat{\vec{r}}^{(2)} \\ \hat{\vec{P}} &\equiv \hat{\vec{p}}^{(1)} + \hat{\vec{p}}^{(2)}\,; \quad \hat{\vec{p}} \equiv \frac{m_2\hat{\vec{p}}^{(1)} - m_1\hat{\vec{p}}^{(2)}}{m_1+m_2} \end{aligned}$$

daraus folgt

$$\begin{aligned}
[\hat{r}_k, \hat{P}_l] &= i\hbar(\delta_{kl} - \delta_{kl}) = 0 \\
[\hat{R}_k, \hat{p}_l] &= \frac{m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2} i\hbar(\delta_{kl} - \delta_{kl}) = 0 \\
[\hat{r}_k, \hat{p}_l] &= \frac{m_2+m_1}{m_1+m_2} i\hbar\delta_{kl} = i\hbar\delta_{kl} = [\hat{R}_k, \hat{P}_l]
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{p}}^{(1)} &= \frac{m_1}{m_1+m_2}\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{p}}; \quad \hat{\vec{p}}^{(2)} = \frac{m_2}{m_1+m_2}\hat{\vec{P}} - \hat{\vec{p}} \\
\Rightarrow \qquad & \frac{\hat{\vec{p}^{(1)}}^2}{2m_1} + \frac{\hat{\vec{p}^{(2)}}^2}{2m_2} = \cdots = \frac{1}{2M}\hat{\vec{P}}^2 + \frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}^2
\end{aligned}$$

wobei $M \equiv m_1 m_2$ die **Gesamtmasse** ist,
und μ als **"reduzierte" Masse** bezeichnet wird:

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

für $m_2 \ll m_1$ (z.B. $m_{\text{Elektron}} \ll m_{\text{Proton}}$) gilt $M \approx m_1\,,\ \mu \approx m_2$

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

$\longrightarrow$ falls nun $V(\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{r}}) \to V(\hat{\vec{r}})$ nur von der Relativkoordinate abhängt, bleibt der Gesamtimpuls des Zweitkörpersystems erhalten ($[\hat{H}, \hat{\vec{P}}] = 0$). Der entsprechende Beitrag zur Gesamtenergie ist "trivial", und interessiert kaum.

$\longrightarrow$ **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:** $[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\vec{r}})]|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

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

Zentralkraft: in den meisten Fällen (z.B. $V_{\text{Coul}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}^{(1)} - \vec{r}^{(2)}|}, V_{\text{Grav}}, \cdots$) hängt V nur von $|\vec{r}|$ ab $\to$ Kugelkoord! (s. z.B. §4.3, S.51)

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

wir wissen (Übg. Aufg. 31): $[\hat{H}, \hat{\vec{L}}] = 0$

$\Rightarrow \psi(\vec{r})$ kann als Eigenzustand von $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_3$ gewählt werden (s. S.32)

$\Rightarrow \psi(\vec{r}) \equiv R(r) Y_{lm}(\theta, \psi)$ "Separationsansatz" damit erhalten wir die **Radialgleichung**

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

mit **Normierung** $\int_0^\infty dr\; r^2 |R(r)|^2 \stackrel{!}{=} 1$ und **Randbedingungen**:

- Normierung möglich $\Rightarrow \lim_{r\to\infty} R(r) = 0$
- $|\psi(\vec{r})|^2$ endlich $\Rightarrow \lim_{r\to 0} R(r) < \infty$

$\longrightarrow$ die Energie-EW sind **entartet**: E unabhängig von m
(da m in der Radialgleichung nicht vorkommt)
$\Rightarrow$ die Energien sind $(2l+1)$-fach "entartet"

$\longrightarrow$ aus historischen Gründen wählt man die folgende **Notation**:

$$\begin{aligned} l &= 0\,1\,2\,3\,4\,5 \cdots \\ &\Leftrightarrow SPDFGH \cdots \end{aligned}$$

$\longrightarrow$ kleine Vereinfachung der obigen Radialgleichung durch Ansatz $R(r) \equiv \frac{u(r)}{r}$
$\Rightarrow \partial_r R = -\frac{u}{r^2} + \frac{u'}{r}, \partial_r^2 R = 2\frac{u}{r^3} - 2\frac{u'}{r^2} + \frac{u''}{r}$
$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\frac{u}{r} + V(r)\frac{u}{r} = E\frac{u}{r}$
$\Leftrightarrow$ **Radialgleichung** $\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_r^2 + V_{\text{eff}}(r)\right\} u(r) = Eu(r)$
mit **effektivem Potential** $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}}_{\text{Rotationsenergie}}\;,\quad (r > 0)$
Normierung $\int_0^\infty dr |u(r)|^2 = 1$,
Randbedingungen $u(0) = 0 = u(\infty)$