5. Wasserstoffatom

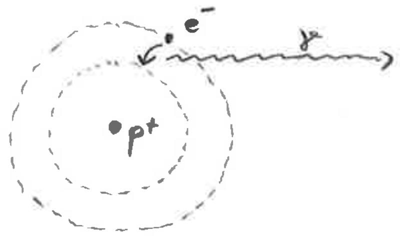
- H-Atom : häufigstes Element im Universum!

  ⇔ Erdkruste: kommt fast nicht vor.

  → gebunden (H_2O, H_2, ...)

  ((ca. 40% $_{26}Fe$, 28% $_8O$, 15% $_{14}Si$, ...))

- theoretisch einfaches System



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

⇒ Energie-EW der gebundenen Zustände experimentell bekannt!

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

Rydberg-Formel	⇒ 1912	Bohr'sches Atommodell	⇒ QM
Feinstruktur	⇔ 1928	Dirac-Glg.	⇔ relativistische QM
Lamb-Shift	⇒ 1947	Bethe	⇒ Quantenelektrodynamik (→ Quantenfeldtheorie)

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

5.1 Zweikörperproblem; Radialgleichung

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

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

führe nun (wie in der Mechanik) Relativ- und Schwerpunktkoord. ein:

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

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

daraus folgt $[\hat{r}_k, \hat{P}_\ell] = i\hbar(\delta_{k\ell} - \delta_{k\ell}) = 0$

$$[\hat{R}_k, \hat{p}_\ell] = \frac{m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2}\, i\hbar\,(\delta_{k\ell} - \delta_{k\ell}) = 0$$

$$[\hat{r}_k, \hat{p}_\ell] = \frac{m_2 + m_1}{m_1 + m_2}\, i\hbar\, \delta_{k\ell} = i\hbar\,\delta_{k\ell} = [\hat{R}_k, \hat{P}_\ell]$$

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

$$\frac{\hat{\vec{p}}^{(1)2}}{2m_1} + \frac{\hat{\vec{p}}^{(2)2}}{2m_2} = \ldots = \frac{1}{2M}\hat{\vec{P}}^2 + \frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}^2$$

wobei $M \equiv m_1 + m_2$ die Gesamtmasse ist,

und μ als "reduzierte" Masse bezeichnet wird:

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

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

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

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

→ zeitunabh. Schrödinger-Glg.: $\left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\vec{r}})\right]|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

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

Zentralkraft: in den meisten Fällen (z.B. $V_{Coul} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}^{(1)} - \vec{r}^{(2)}|}$, V_{Grav}, ...) hängt V nur von $|\vec{r}|$ ab → Kugelkoord.! (s.z.B. §4.3, S.51)

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

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

Theorem aus §3.2, Skript S. 32

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

$\Rightarrow$ $\psi(\vec{r}) \equiv R(r)\, Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$ "Separationsansatz"

((oder abstrakt $|\psi\rangle = |R\rangle\, |\ell m\rangle$))

damit erhalten wir die <u>Radialgleichung</u>

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

mit <u>Normierung</u> $\int_0^\infty dr\, r^2 |R(r)|^2 \overset{!}{=} 1$ ((denn $\int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi\, |Y_{\ell m}|^2 = 1$))

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

$\rightarrow$ die Energie-EW sind <u>entartet</u>: E unabhängig von m

(da m in der Radialglg. nicht vorkommt)

$\Rightarrow$ die Energien sind $(2\ell+1)$-fach "entartet"

$\rightarrow$ aus historischen Gründen wählt man die folgende

<u>Notation</u>:

$\ell =$	0	1	2	3	4	5	...
$\Leftrightarrow$	S	P	D	F	G	H	...

$\rightarrow$ kleine Vereinfachung der obigen Radialglg. durch Ansatz $R(r) \equiv \frac{u(r)}{r}$

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

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

$\Leftrightarrow$ <u>Radialgleichung</u> $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_r^2 + V_{eff}(r) \right\} u(r) = E\, u(r)$

mit <u>effektivem Potential</u> $V_{eff}(r) = V(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}}_{\text{Rotationsenergie}}$, $\quad (r > 0)$

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

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

z.B