5. Das Wasserstoffatom

Zweikörperproblem ; Zentralpotenzial

$m_p \gg m_e$; $m_p/m_e = 1836$

$m_p \simeq 938$ MeV

$m_e \simeq 0.511$ keV

5.1 Schwerpunkts- und Relativbewegung

Allgemein: Masse m_1 Ort $\vec{x}_1$

" m_2 " $\vec{x}_2$

Zwischen den Teilchen wirke ein Potenzial $V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$

Hamiltonoperator:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$$

Wie in der klassischen Mechanik führen wir Schwerpunkts- und Relativkoordinaten ein:

$$\vec{r}_s = \frac{1}{M}\sum_i m_i \vec{x}_i \quad , \quad M = \sum_i m_i$$

$$\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad , \quad r \equiv |\vec{r}|$$

$$\left.\begin{aligned} M\vec{r}_s &= m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2 \\ \vec{r} &= \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{aligned} \vec{x}_1 &= \vec{r}_s + \frac{m_2}{M}\vec{r} \\ \vec{x}_2 &= \vec{r}_s - \frac{m_1}{M}\vec{r} \end{aligned}$$

Drücke Laplace-Operatoren Δ_1, Δ_2 durch Ableitungen nach $\vec{r}_S$ und $\vec{r}$ aus

$$\Delta_1 = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial x_{1,i}^2} \quad , \quad \Delta_2 = \Sigma \ldots$$

Schreibe $x_{1,i} \equiv x_1$ (das folgende gilt komponentenweise)

$$x_{1,i} = r_{S,i} + \frac{m_2}{M} r_i$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial r_S}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r_S} + \frac{\partial r}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial r_S} + \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \ldots = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial r_S} - \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{1}{m_1} \left\{ \frac{m_1^2}{M^2} \frac{\partial^2}{\partial r_S^2} + 2 \frac{m_1}{M} \frac{\partial^2}{\partial r_S \partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right\} \quad (1)$$

$$\frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{m_2} \left\{ \frac{m_2^2}{M^2} \frac{\partial^2}{\partial r_S^2} - 2 \frac{m_2}{M} \frac{\partial^2}{\partial r_S \partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right\} \quad (2)$$

(1) + (2):

$$\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{\cancel{m_1 + m_2}}{M^{\cancel{2}}} \frac{\partial^2}{\partial r_S^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial r_S \partial r} \underbrace{\left(\frac{1}{M} - \frac{1}{M} \right)}_{0}$$

$$+ \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

$$= \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial r_S^2} + \frac{m_2 + m_1}{m_1 m_2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \quad , \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \; ;$$

reduzierte Masse

$$\frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx \frac{m_e m_p}{m_p} = m_e \; ; \quad \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + (m_e/m_p)} = \underline{1{,}0005447 m_e}$$

Hamilton-Operator des Zweiteilchensystems läßt sich als Summe der Operatoren der Schwerpunkts- und Relativbewegung schreiben:

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_S}_{H_S} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)}_{H_{rel}}$$

nicht „relativistisch“

$$\Delta_S \equiv \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial r_{S,i}^2}, \quad \Delta \equiv \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$$

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \underset{\text{Kugel-koord.}}{=} \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \vec{l}^{\,2}}{2mr} + V(r)$$

$$r = \sqrt{\vec{r}^{\,2}}$$

5.2 Radialgleichung

Coulomb-Potenzial: $V(r) = -\frac{e^2}{r}$

e: Elementarladung

$$H \equiv H_{rel} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \vec{l}^{\,2}}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

Separationsansatz: $\psi_{\alpha lm}(\vec{x}) = R_{\alpha l}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$$\vec{l}^{\,2}\, Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

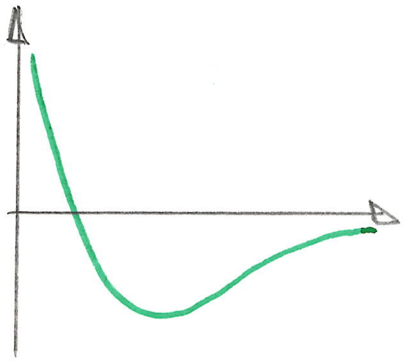
Anschließende Division durch Y_{lm} führt auf (siehe Abschnitt 4.4)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\left\{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}\right\}R(r)=E\,R(r)$$

Mit $u(r)\equiv r\,R(r)$ (Abschnitt 4.4) erhält man nach Division durch $\hbar^2/2m$

$$u''-\left\{\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2me^2}{\hbar^2 r}-\frac{2mE}{\hbar^2}\right\}u=0$$ [c.f. (*) in 4.4:]

V_{eff}



$E<0$: gebundene Zustände

$E>0$: Streuzustände

Gebundene Zustände $E<0$

$E=-|E|$: definiere Wellenvektor $k^2=\frac{2m|E|}{\hbar^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}$

$\rho:=kr$ (dimensionslos)

$$k^2\frac{d^2u}{d\rho^2}-\left\{\frac{l(l+1)}{\rho^2}k^2-\frac{2me^2}{\hbar^2 k\rho}k^2+k^2\right\}u=0$$

$$\gamma:=\frac{2me^2}{\hbar^2 k}$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}-\left\{\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{\gamma}{\rho}+1\right\}u=0$$

Lösung der Radialgleichung liefert Energieeigenwerte und -funktionen $R_{\alpha l}(r)=\frac{1}{r}u(r)$

Folgende Effekte werden dabei vernachlässigt:

- Spin
- relativistische Effekte
- Kernstruktur
- Wechselwirkung mit quant. e.m. Feld (QED)

Betrachte zunächst das asymptotische Verhalten der Radialfunktion:

Terme $\propto \frac{u}{\rho}$, u relativ zu u/ρ^2 unterdrückt

$$\rho \to 0 : \qquad u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u = 0$$

D.h. wie in Abschnitt 4.4 findet man eine

regulare Lösung: $u(\rho) \sim \rho^{l+1}$ und eine

physikalisch nicht sinnvolle irreguläre Lösung: $u(\rho) \sim \rho^{-l}$

Für $\rho \to \infty$ ist $u'' \approx u$, daher $u(\rho) \underset{\rho \to \infty}{\sim} e^{-\rho}$

Mache daher den Ansatz: $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho)$

Damit erhält man

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

Einsetzen in

$$u'' - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\bar{\gamma}}{\rho} + 1 \right) u = 0$$ und Division durch $\rho^l e^{-\rho}$

führt auf

$$w''\rho + w' 2(l+1-\rho)$$
$$+ w\left[\cancel{l(l+1)\rho^{-1}} - 2(l+1) + \cancel{\rho} - \cancel{l(l+1)\rho^{-1}} + \bar{\gamma} - \cancel{\rho} \right] = 0$$

from term propto u

$$\Rightarrow \quad \boxed{\rho w'' + 2(l+1-\rho) w' + (\bar{\gamma} - 2(l+1)) w = 0} \quad (**)$$

DGL 2. Ordnung, aber nicht mit konstanten Koeffizienten

Einschub: Potenzreihenlösungen für DGLn 2. Ordnung

$$p(x) y'' + q(x) y' + r(x) y = 0, \qquad y = y(x)$$

x_0 heißt singulärer Punkt, falls $p(x_0) = 0$

I. A. sind Lösungen der DGL nicht analytisch in x_0, d.h. die Lösung ist nicht als Taylorreihe darstellbar mit nicht verschwindendem Konvergenzradius.

Eine solche Lösung existiert nur dann wenn x_0 ein regulärer Punkt ist, d.h.

$$\lim_{x \to x_0} \frac{q(x)}{p(x)} (x - x_0) < \infty \quad \text{und} \quad \lim_{x \to x_0} \frac{r(x)}{p(x)} (x - x_0)^2 < \infty$$

$\Rightarrow$ Lösungsansatz: $y(x) = \sum_m a_m x^m$