Komplette Lösung für das Wasserstoffatom

Zeitunabhängige Schrödingergleichung: $H\,\psi_{nlm}(\vec{x}) = E_n\,\psi_{nlm}(\vec{x})$

$$E_n = -R_H\,\frac{1}{n^2}, \qquad R_H = \frac{m\,e^4}{2\hbar^2} = \frac{\alpha^2\,mc^2}{2} = 13.6\,\mathrm{eV}$$ (Rydberg-Konstante)

$$\psi_{nlm}(\vec{x}) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\,\tilde{u}_{nl}(r) = \frac{1}{r}\,\mathcal{N}u(r)$$

Normierung

$$\tilde{u}_{nl}(r) = \left\{\frac{(l+n)!}{a_\mathrm{B}\,(n-l-1)}\right\}^{1/2} \frac{1}{n(2l+1)!}\,\rho^{l+1}\,\mathrm{e}^{-\rho}\,{}_1F_1(l+1-n,\,2l+2,\,2\rho), \qquad \rho = \frac{r}{n\,a_\mathrm{B}}$$

Bohrscher Radius: $a_\mathrm{B} = \dfrac{\hbar^2}{m_e\,e^2} = 0.529\,177\ldots\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$

Spektroskopische Notation:

$n = 1, 2, 3, \ldots, \qquad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$

l	0	1	2	3	....
Bezeichnung	s	p	d	f	....

Radiale Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Wellenfunktionen $R_{nl}(r)$:

l	0	1	2	3	....
Bezeichnung	s	p	d	f	....

$n = 1:$ $$R_{1\mathrm{s}}(r) = \frac{2}{a_\mathrm{B}^{3/2}}\,\mathrm{e}^{-r/a_\mathrm{B}}$$

$n = 2:$ $$R_{2\mathrm{s}}(r) = \frac{1}{r}\frac{1}{\sqrt{2a_\mathrm{B}}}\left(\frac{r}{a_\mathrm{B}}\right)\left\{1-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_\mathrm{B}}\right)\right\}\mathrm{e}^{-r/(2a_\mathrm{B})}\,, \qquad R_{2\mathrm{p}}(r) = \frac{1}{2\sqrt{3}r}\frac{1}{\sqrt{2a_\mathrm{B}}}\left(\frac{r}{a_\mathrm{B}}\right)^2\mathrm{e}^{-r/(2a_\mathrm{B})}$$

$n = 3:$ $$R_{3\mathrm{s}}(r) = \frac{1}{r}\frac{1}{\sqrt{3a_\mathrm{B}}}\left(\frac{2r}{3a_\mathrm{B}}\right)\left\{1-\left(\frac{2r}{3a_\mathrm{B}}\right)+\frac{1}{6}\left(\frac{2r}{3a_\mathrm{B}}\right)^2\right\}\mathrm{e}^{-r/(3a_\mathrm{B})}\,,$$

$$R_{3\mathrm{p}}(r) = \frac{\sqrt{2}}{3r}\frac{1}{\sqrt{3a_\mathrm{B}}}\left(\frac{2r}{3a_\mathrm{B}}\right)^2\left\{1-\frac{1}{4}\left(\frac{2r}{3a_\mathrm{B}}\right)\right\}\mathrm{e}^{-r/(3a_\mathrm{B})}\,, \qquad R_{3\mathrm{d}}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{5!}r}\frac{1}{\sqrt{3a_\mathrm{B}}}\left(\frac{2r}{3a_\mathrm{B}}\right)^3\mathrm{e}^{-r/(3a_\mathrm{B})}$$

5.3 Normaler Zeeman-Effekt

Wie verhalten sich die Energieniveaus des H-Atoms unter Einwirkung eines äußeren Magnetfeldes?

Abschnitt 1.5: geladenes Teilchen in elektrischen und magnetischen Feldern

Schrödinger-Gl.:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi \quad ; \quad \begin{array}{l}\vec{A}\text{: Vektorpotenzial} \\ \phi\text{: skalares Pot.}\end{array}$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\vec{p}^{\,2} - \frac{e}{c}(\vec{p}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{p}) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2\right) + e\phi$$

Vertauscht $\vec{p}$ mit $\vec{A}$?

$$[\vec{p}, \vec{A}] = \frac{\hbar}{i}\left\{\vec{\nabla}\cdot\vec{A} - \vec{A}\cdot\vec{\nabla}\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}) + \cancel{\vec{A}\cdot\vec{\nabla}} - \cancel{\vec{A}\cdot\vec{\nabla}}\right\} = \frac{\hbar}{i}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})$$

$$\rightarrow \quad \vec{p}\cdot\vec{A} = \vec{A}\cdot\vec{p} + \frac{\hbar}{i}\operatorname{div}\vec{A}$$

Falls $\operatorname{div}\vec{A} \equiv 0$ ist

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p}^{\,2} - 2\frac{e}{c}\vec{A}\cdot\vec{p} + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2\right) + e\phi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e}{mc}\frac{\hbar}{i}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi$$

Wann ist $\operatorname{div} \vec{A} = 0$?

Betrachte konstantes, homogenes Magnetfeld

Wähle $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x} \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, denn

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \equiv \partial_i A_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \partial_i B_j x_k = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} B_j \underbrace{\frac{\partial x_k}{\partial x_i}}_{\delta_{ik}} = 0$$

~~Damit wird der Hamilton-Operator zu~~

$$\cancel{H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e}{mc} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla} + \frac{e^2}{\;}}$$

Faktor $\frac{1}{2}$ in $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x}$ nötig, damit $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$:

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_i = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} A_k = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} \frac{\partial}{\partial x_j} B_l x_m$$

($\vec{B}$ konstant)

$$= \frac{1}{2} \left(\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} \right) \delta_{jm} B_l$$

$$= \frac{1}{2} \Big(\underbrace{\delta_{jj}}_{=3} - 1 \Big) \delta_{il} B_l = B_i \Rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} \quad \checkmark$$

Damit wird der Hamilton-Operator zu

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e}{mc} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e}{2mc} \frac{\hbar}{i} \vec{B} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}) + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \vec{\mu}\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi$$

mit $\vec{\mu} := \frac{e}{2mc}\vec{L}$ (magnetisches Moment)

Nimmt man die Masse des Atomkerns (= Proton) als unendlich groß an, so ist

$$\vec{\mu} \approx -\frac{|e|\vec{L}}{2m_e c} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e c}\vec{l} \equiv -\mu_B \vec{l}$$

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c} \quad \text{(Bohrsches Magneton)}$$

Berechne nun die Auswirkungen auf das Spektrum für schwache Felder, d.h. $\vec{A}^2 \ll |\vec{A}|$

$\rightarrow$ vernachlässige quadratischen Term in $\vec{A}$

$$H = H_0 + H_{mag} \quad ; \quad m_r = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad \text{(reduzierte Masse)}$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m_r} + e\phi = -\frac{\hbar^2}{2m_r}\Delta - \frac{e^2}{r} \quad \text{(Hamilton-Op. ohne Magnetfeld)}$$

$$H_{mag} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

Wähle $\vec{B}$ entlang z-Achse: $\vec{B} = (0, 0, B)$

$$\Rightarrow \vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{e\hbar}{2m_e c} l_3 B$$

Zeitunabhängige Schrödinger-Gl.:

$$H\,\psi_{nlm}(\vec{x}) = \left(H_0 + H_{mag}\right) R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$= -\frac{R_H}{n^2}\,\psi_{nlm}(\vec{x}) - \frac{e\hbar B}{2m_r c}\, l_3\, R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

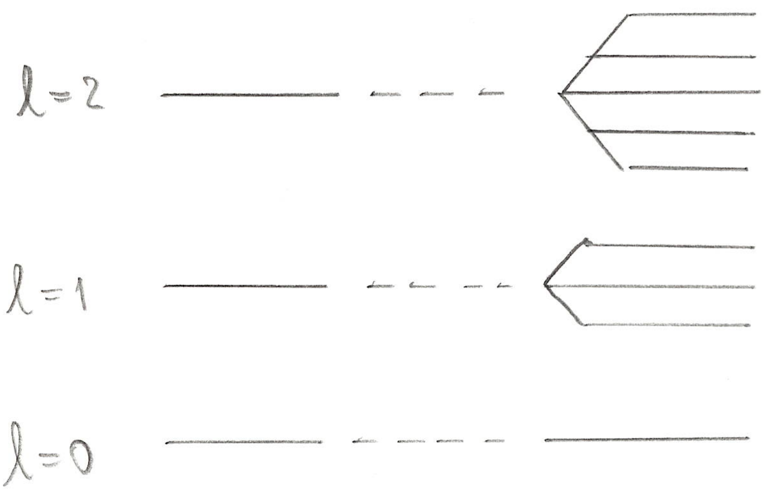
$$= \left\{ E_n + \hbar\frac{|e|\,B}{2m_r c}\, m \right\} \psi_{nlm}(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \quad E = E_n + m\hbar\omega_L \quad , \quad m = -l, -l+1, \ldots, +l$$

$$\omega_L = \frac{|e|\,B}{2m_r c}$$ LARMOR-Frequenz

↪ Ein äußeres homogenes Magnetfeld führt zu einer $(2l+1)$-fachen Aufspaltung der Energieniveaus (P. Zeeman 1896)

↪ Die $(2l+1)$-fache Entartung für gegebenes l ist aufgehoben



Experimentell beobachtet für Atome mit Gesamtspin $=0$ (z.B. He, Ca, Mg, Zn, ...)

jedoch **nicht** für Wasserstoffatom, bzw. Alkalime-talle selber