Wiederholung

B Wasserstoffatom

1. Lsg. der EW-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right] u_{kl}(r) = E_{kl}\, u_{kl}(r)$$

$$\rho = \frac{r}{a} \quad ; \quad \lambda_{kl} = \sqrt{-\frac{E_{kl}}{E_I}}$$

$$u = e^{-\lambda_{kl}\rho}\, y_{kl}(\rho)$$

y Polynome, muss abbrechen

Forderung: Rekursion bricht ab

$$\lambda_{kl} = \frac{1}{(k+l)}$$

$$\Rightarrow E_{kl} = -\frac{E}{(k+l)^2}$$

; $k + l$ müssen ganzzahlig sein

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = k + l = n \quad \text{Hauptquantenzahl}}$$

$$y_{kl} = \rho^{l+1}$$

Polynom vom Grad $k-1$ $(k \geq 1)$

hat also k Terme, alle $\neq 0$

Rekursionsformel mit $\lambda_{kl} = \frac{1}{(k+l)}$

$$c_q = \frac{2}{q}\,\frac{1}{(q+2l+1)}\,\underbrace{\frac{1}{(k+l)}}_{\lambda}\,(q + l \underbrace{- k - l}_{-\frac{1}{\lambda}})\, c_{q-1}$$

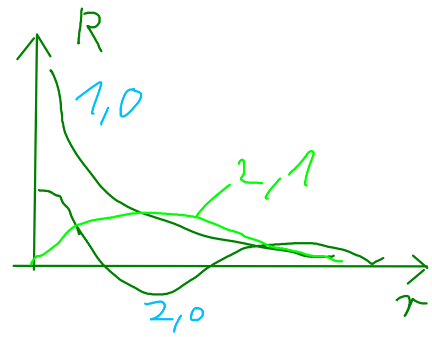
$$1 \leq q \leq k-1$$

$$c_q = \left(\frac{2}{k+l}\right)^q \frac{1}{q!}\,\frac{(2l+1)!}{(q+2l+1)!}\,(-1)^q\,\frac{(k-1)!}{(k-q-1)!}\, c_0$$

mit Normierungsbedingung $\Rightarrow c_0$

Beispiel

$$R = \frac{1}{r} u$$



$$R_{n=1,\ell=0}(r) = 2\,(a_0)^{-\frac{3}{2}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{n=2,\ell=0}(r) = 2\,(a_0)^{-\frac{3}{2}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{n=2,\ell=1} = 2\,(a_0)^{-\frac{3}{2}}\,\frac{1}{\sqrt{3}}\,\frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Bis auf Normierung identisch mit verallgemeinerten Laguerre-Polynomen

$$L_n^m(z) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!}\, e^z z^{-m} \frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}}\left(e^{-z} z^n\right)$$

$$L_n(z) = L_n^0(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n}\left(e^{-z} z^n\right)$$

einbauen

$$R(\rho) = -\frac{Z}{n^2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}}\; e^{-\frac{\rho}{n}}\left(\frac{2\rho}{n}\right) L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right)$$

Hinweis: L_n^m sind Orthonormalpolynome

$$\int P_{\{index\}} \cdot P^*_{\{index'\}} \cdot \text{Gewicht} = \delta_{\{index\}\{index'\}}$$

2 Diskussion der Resultate

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$ Ladung dimensionslose Größe, Feinstrukturkonstante

$$\approx \frac{1}{137}$$

$$E_I = \frac{1}{2}\frac{\mu e^4}{\hbar^2} = \frac{1}{2}\alpha^2 \underbrace{\mu c^2}_{\text{Energie}} = 13{,}6\,eV = R_y$$

$$e = \frac{-q}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}}, \quad q = 1{,}6\cdot 10^{-19}\,C$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{1}{\alpha}\lambda_{compton} \approx 0{,}52\,Å$$

de Broglie ?

$\lambda_c = \frac{\hbar}{\mu c}$ minimale Länge, auf der ein Teilchen der Masse μ lokalisiert werden kann ($p \sim \mu c$; $E \sim \frac{1}{2}\mu c^2$)

$a_0 = 137 \cdot \lambda_c$

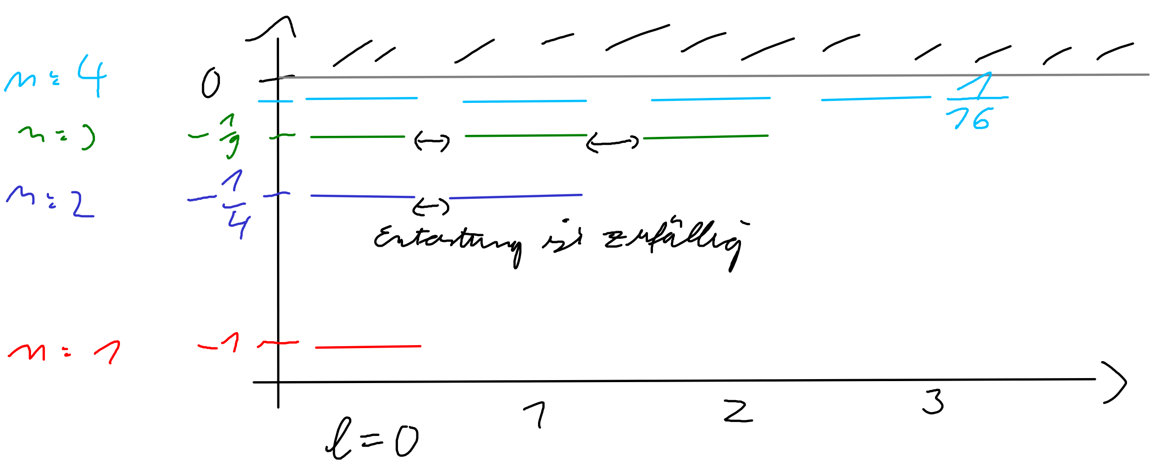
Bindungsenergie $\approx \frac{1}{n^2}\frac{\alpha^2}{2} m_e c^2$ ist viel kleiner als die Ruheenergie

$\Rightarrow$ nichtrelativistische Behandlung gerechtfertigt

(Bei schweren Kernen ist dies jedoch der Fall)

Entartung

$n = k + l$



Für festes $n = k + l$ können die Werte $l = 0, 1, \ldots, n-1$ beitragen

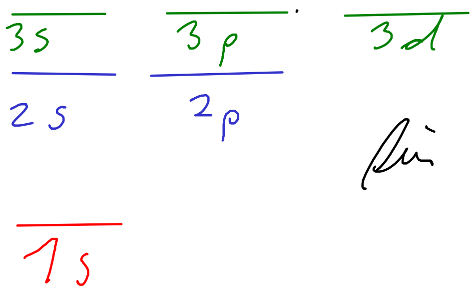
Jeder l-Wert ist seinerseits $(2l+1)$ fach entartet.

Insgesamt: für festes n: $\sum_{l=0,1,\dots,n-1} (2l+1) = n^2$

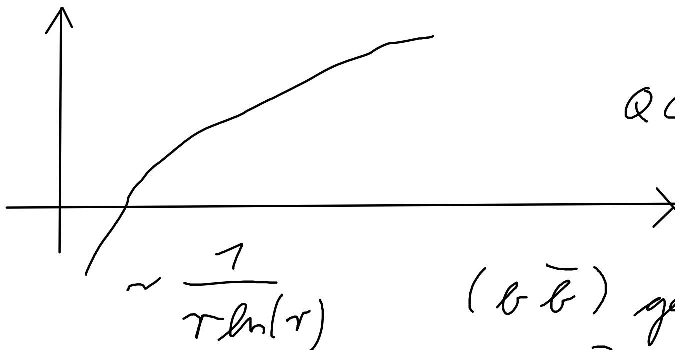
l	1	2	3	4
Bez	s	p	d	f

Historisch halt...

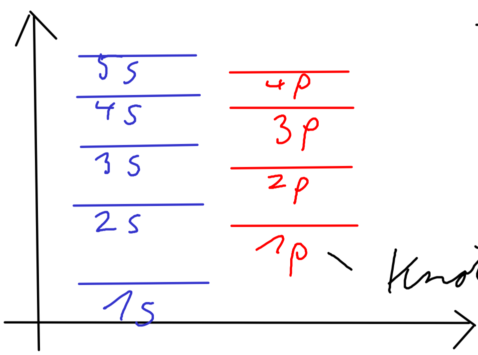
Zustand charakterisiert durch Hauptquantenzahl und Drehimpuls



für allgemeines Potential unzweckmäßig



$(b\bar{b})$ gebundener Zustand



~ Knotenzahl der Radialfunktion

Wasserstoffartige Systeme

Deuterium (pn - Kern)

$(\mu^+ e^-)$ kein starke WW (nur leptonisch)

$(p \mu^-)$ kleiner Radius

$(e^+ e^-)$ Positronium (kein starke WW)

hohe Genauigkeit für QM - Edyn.

$(p \pi^-)$ hadronische WW

C Dichten und Ströme beim Wasserstoffatom

(stationär + statisch)

1 Ohne Magnetfeld

Ausgangspunkt

$$\phi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

Dichte: $|\phi|^2 = |R_{n\ell}(r)|^2\, |Y_\ell^m(\theta,\varphi)|^2$ unabhängig von φ

Strom $\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{2\mu}\left(\phi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \phi + \text{const}\right)$

Zerlege ϕ in Betrag und Phase

$$\phi(\vec{r}) = \alpha(\vec{r})\, e^{i\xi(\vec{r})} \quad , \alpha(\vec{r}) \text{ reell}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \rho(\vec{r}) = \alpha^2(\vec{r}) \\ \hline \vec{j}(\vec{r}) = \alpha^2(\vec{r})\, \vec{\nabla}\xi(\vec{r}) \end{array}} \quad \begin{array}{l} \text{Dichte} \\ \text{Strom} \end{array}$$

[Gegeben sei ρ und $\vec{j}$, können wir dann ϕ konstruieren?

Anwendung auf $\phi_{n\ell m}$

$$\alpha_{n\ell m}(\vec{r}) = |R_{n\ell}(r)|\, |Y_\ell^m(\theta,\varphi)|$$

$$\xi_{n\ell m}(\vec{r}) = m\varphi$$

Gradient in Polar (Kugel-) Koordinaten

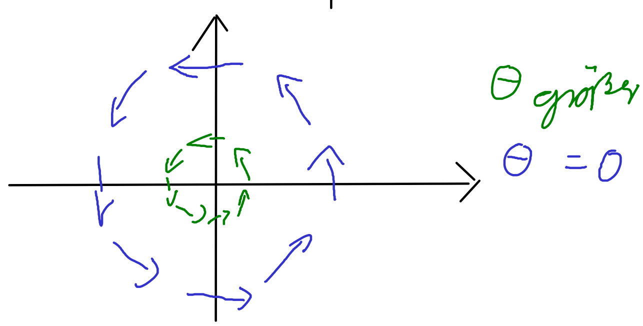
$$\vec{\nabla} = \vec{e}_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\partial_\varphi + \vec{e}_\theta \frac{1}{r}\partial_\theta + \vec{e}_r \partial_r$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar}{\mu} \rho \frac{1}{r \sin\Theta} m \vec{e}_\varphi$$

[Frage: was ergibt sich für $\vec{\nabla}\vec{j}$?]

Stromdichte zeigt in $\vec{e}_\varphi$ Richtung und ist unabhängig von φ

Blick von oben auf Atom ($m \neq 0$)



Wie bei Drehbewegung um z-Achse