

Wiederholung: Wasserstoffproblem

• Energie-EU: $\psi(r) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ (12.10)

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

mit $\rho = \frac{r}{a_0}$
 $z = \frac{E}{R_y}$ } $\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + z \right] u(\rho) = 0$ (12.14)

• asymptotisches Verhalten: $\rightarrow u(\rho) = e^{-\alpha \rho} \rho^{l+1} w(\rho)$ (12.18)

• neue Koord: $x = 2\alpha \rho = 2\sqrt{|E|} \rho$ (12.20) mit $\alpha = \sqrt{|E|}$

$$\rightarrow x \frac{d^2}{dx^2} w(x) + [2(l+1) - x] \frac{d}{dx} w(x) + (\frac{1}{2} - l - 1) w(x) = 0$$
 (12.21)

• Lsg: $w(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$ mit $a_{m+1} = \frac{l+1+m-\frac{1}{2}}{(m+1)(m+2l+2)} a_m$ (12.22)

• Normierbarkeit von $u(\rho) \rightarrow a_{n+1} = 0 \dots \rightarrow \alpha = \frac{1}{l+n+1} = \frac{1}{n}$

$$\xrightarrow{\rho = \frac{r}{a_0}} z = \frac{E}{R_y} = -\alpha^2$$

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad \text{Hauptquantenzahl}$$
$$l = 0, 1, \dots, n-1$$
$$\text{Entartung: } 2n^2$$
(12.24)

e) Radialteil der Energieeigenfktn:

• Rekursionsformel (12.22) $\xrightarrow{\alpha = \frac{1}{n}}$ (12.18) $u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{n}} \rho^{l+1} w(x = \frac{2\rho}{n})$

$$\rightarrow R(r) = \frac{u(\frac{r}{a_0})}{r}$$

• „Mathematischer Weg“:

(i) Laguerre-Polynome, Grad r :

$$L_r(x) = e^x \frac{d^r}{dx^r} (x^r e^{-x})$$
 (12.25)

$$\text{Dgl: } [x \frac{d^2}{dx^2} + (1-x) \frac{d}{dx} + r] L_r(x) = 0$$
 (12.26)

Eigenschaften:

(1) VONS auf $[0, \infty)$ mit Gewichtsfkt. e^{-x}

(2) Orthogonalisierung:

$$\int_0^{\infty} dx e^{-x} L_r(x) L_s(x) = r! s! \delta_{rs}$$

(ii) Zugeschnittene Laguerre Polynome, Grad $r-s$:

$$L_r^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_r(x) \quad (12.27)$$

$$\frac{d}{dx^s} (12.25) \rightarrow \text{Dgl: } \left[x \frac{d^2}{dx^2} + (s+1-x) \frac{d}{dx} + (r-s) \right] L_r^s(x) = 0 \quad (12.28)$$

Eigenschaften: (1) $r-s$ verschiedene, positive Nullstellen

$$(2) L_r^s(x) = \sum_{k=0}^{r-s} (-1)^{k+s} \frac{(r!)^2}{k!(k+s)!(r-k-s)!} x^k \quad (12.29)$$

(3) Normierung:

$$\int_0^{\infty} dx x^{s+1} e^{-x} [L_r^s(x)]^2 = \frac{(2r-s+1)(r!)^3}{(r-s)!} \quad (12.30)$$

• Ugl. (12.28) mit Ugl. (12.21) für $w(x)$ $[\alpha = \frac{1}{2} !]$

$$\rightarrow \left. \begin{array}{l} s = 2l+1 \\ r = n+l \end{array} \right\} w(x) = L_{n+l}^{2l+1}(x) \quad (12.31)$$

f) Energieeigenfktn. des Coulomb-Potentials:

• mit (12.10), $R = \frac{r}{a_B}$, (12.18)

$$\rightarrow \Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\text{mit } R_{nl}(r) = -\frac{1}{a_B^{3/2}} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_B}\right)^l e^{-\frac{r}{na_B}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_B}\right)$$

Normierungsfaktor: $\int dr r^2 |R(r)|^2 = 1!$ (12.32)

Orthogonalisierung: $\int d^3x \Psi_{nlm}^* \Psi_{n'l'm'} = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

Bem: (i) R_{nl} mit $n-l-1$ positive Nullstellen (Knoten)

(ii) R_{nl} unabh. von m !

(iii) Deutung

(12.38)

$|Y_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega \dots$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ort r, ϑ, φ in $r^2 dr d\Omega$

$\int |Y_{nlm}|^2 d\Omega$

$|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \dots$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kugelschale mit Radius r und Dicke dr

• Bsp: $R_{nl}(r), |R_{nl}(r)|^2 r^2 \dots$ s. Aufskl. 12.38

$l=0 \dots$ größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit nahe des Kerns bei $r=0$

Grund: $R_{n0}(r=0) \neq 0, R_{nl}(r=0) = 0$ für $l \geq 1$

g) Bemerkungen:

• Mittelwerte: $\langle r \rangle = \frac{a_0}{2} [3n^2 - l(l+1)]$

(o.B.)

$$(\Delta r)^2 = \frac{a_0^2}{4} [n^4 + 2n^2 - l^2(l+1)^2]$$

$l=0: \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{3} \sqrt{1 + \frac{2}{n^2}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{3}$, immer relative Unschärfe

$l=0 =$ typ. $0M$ -Zustand,

kugelsymmetrisch

Klassisch: Teilchen fliegt auf Kern zu!

$l=n-1: \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \dots$ klassische Bahnen für $n \rightarrow \infty$

• Zweikörperproblem: $m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}}$ $m_p \dots$ Kernmasse

H-Atom: $m_p = m_p, \frac{m_e}{m_p} = 0,00054463$

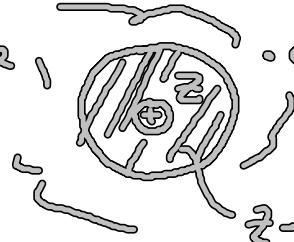
Deuterium: $m_p = m_p + m_n, \frac{m_e}{m_p} = 0,000272315$

} Unterschied messbar im Fernschema!

• Aufhebung der l-Entartung von E_n :

(i) Abweichung vom Coulomb-Potential: $\sim \frac{1}{r}$

Bsp: Alkali-Metalle, e^- spürt $U_{eff}(r) \neq \frac{1}{r}$



$z-1 e^-$ in abgeschlossener Schalen

(ii) H-Atom: durch relativ. Effekte

Quantifiziere durch Sommerfeldsche Feinstrukturkonst. (12.34)

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036}$$

(1) relativ. Korrektur der e^- -Masse:

$$\frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m_e^3 c^2}$$

Störhamiltonian

Feinstruktur

Korrektur von E_n :

$$\Delta E_n \sim \alpha^2 E_n$$

(2) Spin-Bahn-Kopplung des e^- : $\underline{S} \leftrightarrow \underline{L}$

(3) Darwin-Term

relativistische Zitterbewegung des e^-

$$\rightarrow \text{Korrektur} \sim |\psi_{nlm}(0)|^2 = |\psi_{nl=0m}(0)|^2 (l=0!)$$

(4) Lamb shift: WW von e^- mit Nullppts. Schw. des quantisierten em. Feldes

$$\rightarrow \Delta E_n \sim \alpha^3 \ln \alpha E_n$$

(5) Hyperfeinstruktur: WW e^- -Spin & Kern-Spin

$$\Delta E_n \sim \Delta E_{\text{Feinstruktur}} \frac{m_e}{m_p} \approx \frac{1}{2000}$$

• Aufhebung der m-Entartung von E_n

durch $\underline{B}, \underline{E}$ -Feld || z-Achse

13. Der Elektronen spin-Vervollständigung der QT

• Motivation:

(i) bisher: Bahndrehimpuls mit $l=0,1,2,\dots$ [s. Kap. 11.2/4]

Was bedeutet: $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ für quantenmechan. Teilchen?

(ii) exp. Befunde:

- (1) Stern-Gerlach Versuch
= anomale Zeeman-Effekt
- (2) Feinstruktur von Atomspektren

} → Evidenz für
halbzahligen
Drehimpuls
= Spin!

13.1 Elektronen im Magnetfeld

• verfügbar!

• e^- in em Feld: s. Kap. 3.3 b) mit $q = -e$ & $m = m_e$
↙ skalares Pot.

Hamiltonian:
$$H = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r},t))^2 - e\varphi(\mathbf{r},t) \quad (13.1)$$

↙ Vektorpot. ↘ $U(\mathbf{r},t)$

• konstantes Magnetfeld \mathbf{B} :

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} \quad \text{mit } \mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (13.2)$$

in (13.1)

$$\begin{aligned} H &= \frac{B^2}{2m} - e\varphi(\mathbf{r},t) - \frac{e}{4m} \underbrace{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{B})}_{(\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{p}} - \frac{e}{4m} (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{8m} (\mathbf{r} \times \mathbf{B})^2 \\ &= -(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \qquad \qquad \qquad B_z \cdot L_z \\ &= -\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \end{aligned}$$

also:

$$H = H_0 + H_{1L} + H_2$$

mit $H_0 = \frac{p^2}{2m} - e\varphi(\underline{r}, t)$... e^- im Potential

$$H_{1L} = + \frac{e}{2m} \underline{p} \cdot \underline{E}$$

$$H_2 = \frac{e^2}{8m} (\underline{r} \times \underline{E})^2$$

} ... e^- im homogenen \underline{E}

(13.3)