Wiederholung: Wasserstoffproblem

- Energie-EV: $\varphi(\underline{r}) = R(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ (12.10)

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

mit $\left.\begin{array}{l}\rho = \frac{r}{a_B}\\ \varepsilon = \frac{E}{R_y}\end{array}\right\}$ $\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \varepsilon\right] u(\rho) = 0$ (12.14)

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

mit $\alpha = \sqrt{|\varepsilon|}$

- neue Koord.: $x = 2\alpha\rho = 2\sqrt{|\varepsilon|}\,\rho$ (12.20)

$$\longrightarrow x\frac{d^2}{dx^2}w(x) + [2(l+1)-x]\frac{d}{dx}w(x) + \left(\frac{1}{\alpha} - l - 1\right)w(x) = 0 \quad (12.21)$$

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

- Normierbarkeit von $u(\rho) \longrightarrow a_{n_r+1} = 0 \ldots \longrightarrow \alpha = \frac{1}{l+n_r+1} = \frac{1}{n}$

$\xrightarrow{\varepsilon = \frac{E}{R_y} = -\alpha^2}$

$$\boxed{\begin{array}{ll} E_n = -\frac{R_y}{n^2}, & n = 1,2,\ldots \quad \text{Hauptquantenzahl} \\ & l = 0,1,\ldots,n-1 \qquad (12.24) \\ & \text{Entartung: } 2n^2 \end{array}}$$

e) Radialteil der Energieeigenfktn:

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

$$\longrightarrow R(r) = \frac{u\left(\frac{r}{a_B}\right)}{r}$$

- „Mathematiker-Weg":

(i) Laguerresche Polynome, Grad r:

$$\boxed{\begin{array}{l} L_r(x) = e^x \frac{d^r}{dx^r}\left(x^r e^{-x}\right) \qquad (12.25) \\[1em] \text{Dgl: } \left[x\frac{d^2}{dx^2} + (1-x)\frac{d}{dx} + r\right] L_r(x) = 0 \qquad (12.26) \end{array}}$$

Eigenschaften:

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

(2) Orthonormierung:

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

(ii) Zugeordnete Laguerresche Polynome, Grad $r-s$:

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

$$\frac{d}{dx^s}(12.26) \rightarrow \text{Dgl: } \left[x\frac{d^2}{dx^2} + (s+1-x)\frac{d}{dx} + (r-s)\right] L_r^s(x) = 0 \qquad (12.28)$$

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

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

(3) Normierung:

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

- Vgl. (12.28) mit Dgl. (12.21) für $w(x)$ $\quad [\alpha = \frac{1}{n}\ !]$

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

f) Energieeigenfktn. des Coulomb-Potentials:

- mit (12.10), $R = \frac{u}{r}$, (12.18)

$$\longrightarrow \boxed{\begin{array}{l} \varphi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \\ \text{mit } R_{nl}(r) = \underbrace{-\frac{1}{a_B^{3/2}} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}}_{\substack{\text{Normierungsfaktor:} \\ \int dr\, r^2 |R(r)|^2 = 1\,!}} \left(\frac{2r}{na_B}\right)^l e^{-\frac{r}{na_B}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_B}\right) \qquad (12.32) \\ \text{Orthonormierung: } \int d^3x\, \varphi_{nlm}^* \varphi_{n'l'm'} = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \end{array}}$$

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

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

(iii) Deutung (12.33)

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

$\xrightarrow{\int |\psi_{nlm}|^2 d\Omega}$ $|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$ ... Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kugelschale mit Radius r und Dicke dr

· Bsp: $R_{nl}(r)$, $|R_{nl}(r)|\, r^2$ ... s. Aufstellung

$l=0$ ... 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: $\langle r\rangle = \frac{a_B}{2}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$

(o.B.) $(\Delta r)^2 = \frac{a_B^2}{4}\left[n^4 + 2n^2 - l^2(l+1)^2\right]$

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

$l=0$ = typ. QM-Zustand, kugelsymmetrisch

klassisch: Teilchen fliegt auf Kern zu!

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

· Zweikörperproblem: $m = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K} = \frac{m_e}{1+\frac{m_e}{m_K}}$ m_K ... Kernmasse

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

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

$\Big\}$ Unterschied meßbar im Termschema!

· **Aufhebung** der l-Entartung von E_n:

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

Bsp: Alkali-Metalle

spürt $U_{eff}(r) \not\sim \frac{1}{r}$

$Z-1$ e^- in abgeschlossene Schalen

(ii) H-Atom: durch relativ. Effekte

Quantifiziere durch Sommerfeldsche Feinstrukturkonst. (12.34)

$$\boxed{\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137{,}087}}$$

Feinstruktur

Korrektur von E_n:

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

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

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

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

(3) Darwin-Term

relativistische Zitterbewegung des e^-

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

(4) Lambshift: Ww von e^- mit Nullpkts. schwingung des quantisierten em. Feldes

$$\longrightarrow \Delta E_n \sim \alpha^3 \ln\alpha \, E_n$$

(5) Hyperfeinstruktur: Ww e^--Spins & Kern-Spin

$$\Delta E_n \sim \Delta E_{\text{Feinstruktur}} \underbrace{\frac{m_e}{m_K}}_{\frac{1}{2000}}$$

· **Aufhebung**: der m-Entartung von E_n

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

13. Der Elektronenspin - Vervollständigung der QT

· Motivation:

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

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

(ii) exp. Befunde:

$\left.\begin{array}{l}\text{(1) Stern – Gerlach Versuch} \\ \quad = \text{anomale Zeeman-Effekt} \\ \text{(2) Feinstruktur von Atomspektren}\end{array}\right\} \longrightarrow$ Evidenz für halbzahligen Drehimpuls = Spin!

13.1 Elektronen im Magnetfeld

· vorläufig!

· e^- im em Feld: s. Kap. 3.3 b) mit $q = -e$ & $m = m_e$

skalares Pot.

Hamiltonian: $$H = \frac{1}{2m_e}\left(\underline{p} + e\underset{\text{Vektorpot.}}{\underline{A}}(\underline{r},t)\right)^2 \underbrace{- e\varphi(\underline{r},t)}_{U(\underline{r},t)} \qquad (13.1)$$

· konstantes Magnetfeld $\underline{B}$:

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

in (13.1)

$$H = \frac{\underline{p}^2}{2m} - e\varphi(\underline{r},t) - \frac{e}{4m}\underbrace{\underline{p}\cdot(\underline{r}\times\underline{B})}_{(\underline{r}\times\underline{B})\cdot\underline{p}} - \frac{e}{4m}(\underline{r}\times\underline{B})\cdot\underline{p} + \frac{e^2}{8m}(\underline{r}\times\underline{B})^2$$

$$= -(\underline{B}\times\underline{r})\cdot\underline{p} \qquad B_z \cdot L_z$$

$$= -\underline{B}\cdot(\underline{r}\times\underline{p}) = -\underline{B}\cdot\underline{L}$$

also:

$$\boxed{\begin{aligned} H &= H_0 + H_{1L} + H_2 \\ \text{mit } H_0 &= \frac{\underline{p}^2}{2m} - e\varphi(\underline{r},t) \quad \ldots\ e^- \text{ im Potential} \\ H_{1L} &= +\frac{e}{2m}\,\underline{B}\cdot\underline{L} \\ H_2 &= \frac{e^2}{8m}\,(\underline{r}\times\underline{B})^2 \end{aligned}\Bigg\}\ \ldots\ e^- \text{ im homogenen } \underline{B}} \qquad (13.3)$$