

V) Mehrkörperprobleme mit Wechselwirkung:

Wasserstoffatom / -molekül, Drehimpulse

zu unterscheiden:

a) Keine WW zwischen Spin \vec{s} und Bahn (\vec{r}, \vec{L}) : $\vec{\psi} = \chi_{\pm}(\vec{s}) \varphi_n^{\pm}(\vec{r})$
 (χ muß festgelegt werden)
 φ^{\pm} genügen beide der Schrödingergleichung

Bsp.: Wasserstoffatom ohne Spin-Bahn-Kopplung

b) Spin-Bahn-Kopplung: $\vec{\psi}$ kann nicht mehr als Produkt v. Spin u. Bahn Funktion geschrieben werden

Bsp.: $\vec{L} \cdot \vec{s}$ - Kopplung in H

1. Zweiteilchenproblem

$$\text{Hamiltonfunktion: } H = T + V = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

1,2: Indizes der beiden Teilchen, Paarwechselwirkung: $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$

Analog zum Keplerproblem: Schwerpunkt und Relativkoordinaten (\vec{R}, \vec{r} : Ort, $\vec{\Pi}, \vec{p}$: Impuls)

$$\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} \equiv \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{p} \equiv \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{\Pi} \equiv \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

Einsetzen in H mit diesen bereits geschickt gewählten Koeffizienten f. $\vec{\Pi}, \vec{p}$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \frac{\vec{\Pi}^2}{2M} + V(\vec{r})$$

mit $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, $M = m_1 + m_2$ als reduzierte / Gesamtmasse

In dieser Hamiltonfunktion sind Schwerpunkt- und Relativbewegung separierbar.

Quantisierung: $H \rightarrow \underline{H} = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} + \frac{\vec{\Pi}^2}{2M} + V(\vec{r})$

Ziel: Lösung der Schrödinger-Gleichung $\underline{H} \psi_g(\vec{r}, \vec{R}) = E_g \psi_g(\vec{r}, \vec{R})$
 g : Gesamt, E_g : Gesamtenergie d. Zweiteilchenproblems

Ansatz f. Separation über freie Teilchen f. Schwerpunkt.

$$\psi_g(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}}{\sqrt{V}} \psi(\vec{r}), \text{ einzeln:}$$

$$\left(\frac{\vec{P}^2}{2\mu} + \frac{\vec{\Pi}^2}{2M} + V(\vec{r}) \right) \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r}) \right) = E_g e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r})$$

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r, \quad \vec{\Pi} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_R$$

$$\left(\frac{\vec{P}^2}{2\mu} \psi(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \psi(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = E_g \psi(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

$$\left[\frac{\vec{P}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \left(E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \right) \psi(\vec{r})$$

⏟

$$\underline{H}_{rel} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \text{ mit } E = E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$$

Bemerkungen:

- a) man erhält eine Schrödingergleichung f. Relativbewegung auf
- b) Gesamtenergie ist Relativ + Schwerkraftenergie: $E_g = E + \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$
- c) wenn $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$, so Verwendung v. Kugelkoordinaten

2. Zweikörperproblem: Radialgleichung

wenn $V(r)$ so separabel: $\psi(\vec{r}) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) R(r)$, $R(r)$ ist gesucht!

$R(r)$: Radialanteil, beware von $\underline{I} = \frac{\vec{L}^2}{2\mu}$ aus vorheriger VL, $m \rightarrow \mu$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\underline{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) R(r) = E Y_{lm}(\vartheta, \varphi) R(r)$$

$$\underline{L}^2 = \underline{L}^2(\vartheta, \varphi)$$

Verwendung d. Eigenwertproblems $\underline{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$l = 0, 1, 2, 3 \dots$ quantisiert

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right) R(r) = E R(r)$$

$\hat{=}$ Eigenwertgleichung f. $R(r)$.

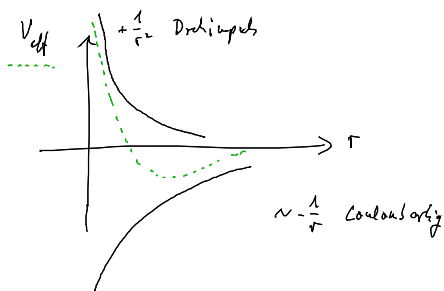
Ansatz $R = \frac{u(r)}{r}$ verwende u. Differentialgleichung beachten, $u(r)$ gesucht

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right) u(r) = E u(r)$$

Analogie zu Keplerproblem:

a) effektives Potential $V_{\text{eff}} = V_{\text{Drehimpuls}} + V(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)$

b) Skizze f. Coulombpotential $V(r)$



c) es existieren gebundene und ungebundene Lösungen

3. Das Wasserstoffatom

- Proton (m_p), Elektron (m_e), Coulombpotential $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

- betrachte wir gebundene Zustände $E < 0$

- es existieren auch ungebundene Zustände, $E \geq 0$ (modifiziert Stone Velle)

3.1 Radialbewegung im Coulombfeld, Potenzreihenansatz

zu lösen:
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) u(r) = 0$$

a) dimensionslose Schrödinger-Gleichung f. $u(r)$

$$k \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu(-E)}, \text{ sinnvoll weil } E < 0, [k] = \frac{1}{\text{Meter}}$$

dimensionslose Variable $\rho = kr$

$$\rho_0 \equiv \frac{e^2}{\hbar} \frac{\sqrt{2\mu}}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{-E}}$$

um die um Dgl. in ρ abzuwickeln ($\tilde{u}(\rho)$): $r \rightarrow \rho = kr$

$$\downarrow \left(\frac{\partial}{\partial \rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) u(\rho) = 0$$

b) Asymptotische Verhalten von $u(\rho)$

um Ansatz f. $u(\rho)$ zu bekommen, $\rho \rightarrow 0$ (i), $\rho \rightarrow \infty$ (ii) ansetzen

i/ $\rho \rightarrow 0$:

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

$$u(\rho) = A \rho^{l+1} + B \rho^{-l} \quad (2 \text{ unabh. Lsg.})$$

$$\text{weil } R = \frac{u}{r} \text{ muss } u(r=0) \rightarrow 0$$

daher muss ρ^{l+1} zugeordnet, $B = 0$.

ii) $\rho \rightarrow \infty$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - 1 \right) u(\rho) = 0$$

$$u(\rho) = A e^{-\rho} + B e^{+\rho} \quad (\text{Zunabhängige Lösungen})$$

mit Normierung gewährleistet sein $u_{\rho} \rightarrow B = 0$

c) Ansatz f. $u(\rho)$ mit asymptotischen Verhalten

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1} \cdot e^{-\rho} w(\rho)$$

einsetzen in voll Dgl. f. $u(\rho)$ aus (a), Buchhaltung!

↓ Dgl $w(\rho)$:

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} w(\rho) + 2(\ell+1-\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} w(\rho) + (-2(\ell+1) + \rho_0) w(\rho) = 0$$