

# Wellen und Quantenphysik

## 1. Eigenschaften von Wellen

## 2. Interferenz und Beugung

## 3. Relativitätstheorie

## 4. Welle-Teilchen Dualismus

## 5. Atome

- Die frühe Atomphysik
- Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms
- Atome mit vielen Elektronen

## 6. Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

# Schrödinger Gleichung des H-Atoms

# Atome

## Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 1

Beim Wasserstoffatom ist ein Elektron durch die Coulomb-Kraft an ein Proton gebunden und die Hamilton Funktion, d.h. die Energie des Elektrons ist

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Hamilton Operator  $(\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla)$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Die Schrödinger Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 1

## Kommentar

Die rot unterstrichene Gleichung gibt die Hamiltonfunktion für das Wasserstoffatom im einfachsten Fall.

Die kinetische Energie wird um die potentielle Energie des Elektrons im Kraftfeld des Atomkerns ergänzt.

Der Atomkern besteht aus einem Proton.

Wird der Impuls durch den Impulsoperator ersetzt, dann ergibt sich der Hamiltonoperator, der mit der rot umrandeten Formel angegeben ist.

Die blau geschriebene Formel gibt die Schrödingergleichung.

## Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 2

stehende Welle, wenn der Hamilton Operator die Zeit nicht explizit enthält

$$\underline{\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}}$$

zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$E\varphi(\vec{r}) = \hat{H}\varphi(\vec{r})$$

Die potentielle Energie hängt nur vom Abstand zum Kern ab

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

→ Laplace Operator in Kugelkoordinaten

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 2

## Kommentar

Da der Hamiltonoperator die Zeit nicht explizit enthält, ergibt sich die Wellenfunktion aus dem Produkt einer Funktion, die nur vom Ort abhängt und einer komplexen Exponentialfunktion, die eine Schwingung mit der Kreisfrequenz  $E/\hbar$  beschreibt.

Mit diesem Lösungsansatz reduziert sich die Schrödingergleichung auf die zeitunabhängige Schrödingergleichung, mit der die Energieeigenwerte bestimmt werden können.

Da die potentielle Energie nur vom Abstand zwischen dem Elektron und dem Atomkern abhängt, ist es sinnvoll für  $\nabla^2$  (d.h. den Laplace Operator) Kugelkoordinaten zu verwenden.

Die grau geschriebene Formel wurde bereits im vorhergehenden Abschnitt bei der Diskussion des Drehimpulsoperators benötigt.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 3

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \\
 &\quad + \frac{1}{2mr^2} (-\hbar^2) \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}
 \end{aligned}$$

Eigenwertgleichung für den Drehimpulsoperator

$$\hat{L}^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 3

## Kommentar

Mit dieser Formel nimmt der Hamiltonoperator die Gestalt an, die im rot umrandeten Feld angegeben ist.

Der blau geschriebenen Term ist der Differentialoperator für den quadrierten Drehimpuls.

Die Eigenfunktionen und Eigenwerte des Drehimpulsoperators wurden im vorhergehenden Abschnitt diskutiert und sind wohl bekannt.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 4

zeitunabhängige Schrödinger Gleichung für das Wasserstoffatom

$$E\varphi(\vec{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) \varphi(\vec{r})$$

Ansatz für die ortsabhängige Wellenfunktion

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

Eigenwertgleichung für die radiale Wellenfunktion

$$E_{n,\ell} R_{n,\ell}(r) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) R_{n,\ell}(r)$$

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + E_{pot}$$

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 4

## Kommentar 1

Damit ergibt sich die rot unterstrichene zeitunabhängige Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom.

Die ortsabhängige Wellenfunktion kann als ein Produkt aufgeschrieben werden, das aus einer Kugelflächenfunktionen und einer radialen Wellenfunktion besteht, die nur vom Abstand  $r$  zum Kern abhängt.

Neben den Drehimpulsquantenzahlen  $\ell$  und  $m$  gibt es nun zusätzlich die Hauptquantenzahl  $n$ .

Die radiale Wellenfunktion hängt von der Hauptquantenzahl  $n$  und der Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  ab.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 4

## Kommentar 2

Die Quantenzahl  $m$  hat keinen Einfluss auf die radiale Wellenfunktion, da die z-Komponente des Drehimpulsoperators nur in  $L^2$  nicht aber explizit im Hamiltonoperator auftritt.

Damit kann die Eigenwertgleichung für die radiale Wellenfunktion aufgeschrieben werden.

Der Operator für das Drehimpulsquadrat wird durch seine Eigenwerte ersetzt.

Die Energieeigenwerte können grundsätzlich von der Hauptquantenzahl  $n$  und der Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  abhängen.

Die grau geschriebene Formel zeigt zum Vergleich den klassischen Ausdruck für die Energie.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 4

# Kommentar 3

Die Energie ist die Summe aus der kinetischen Energie und der potentiellen Energie aufgrund der Anziehungskraft zwischen dem Elektron und dem Atomkern.

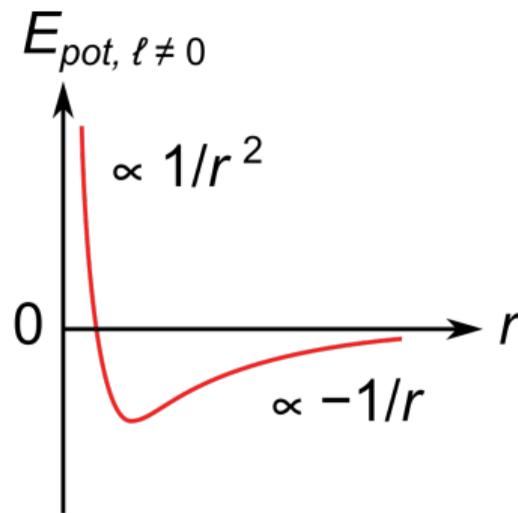
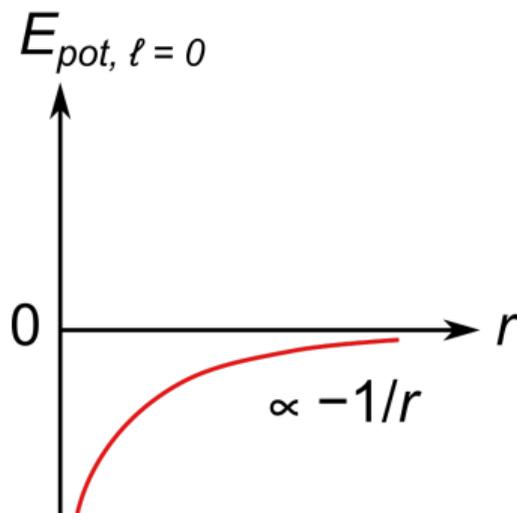
Wie in der klassischen Physik enthält die Schrödingergleichung einen Term für die radiale kinetische Energie und einen Term für die transversale kinetische Energie.

Die blau markierten Terme ergeben zusammen eine effektive potentielle Energie.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 5

## Die effektive potentielle Energie

$$E_{pot, \ell}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$



# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 5

## Kommentar 1

Die effektive potentielle Energie enthält den Beitrag der Zentrifugalkraft und den Beitrag der elektrischen Anziehungskraft, der durch die Zentrifugalkraft vermindert wird.

s-Elektronen, die keinen Bahndrehimpuls haben, haben nur einen radialen Impuls und es wirkt ausschließlich die elektrische Anziehungskraft.

Da das Elektron den Atomkern im wesentlichen ungestört durchdringen kann, würde es im Rahmen der klassischen Physik zu einer linearen Pendelbewegung mit dem Atomkern als Mittelpunkt kommen, solange die kinetische Energie des Elektrons von Null verschieden ist.

Die Unschärferelation bedingt für das Elektron, dass es stets eine kinetische Energie haben muss, und nicht im Kern zur Ruhe kommen kann.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 5

## Kommentar 2

Das Elektron wird immer in einem endlichen Volumen um den Kern herum zu finden sein, wobei die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Elektron am Ort des Atomkerns am größten ist und mit zunehmendem Abstand abnimmt.

Die Unschärferelation bedingt außerdem, dass die Oszillation durch den Kern nicht auf eine bestimmte Richtung festgelegt werden kann.

Es muss eine Impulsunschärfe in allen drei Koordinatenrichtungen geben.

Diese Tatsache führt zu den kugelförmigen s-Orbitalen.

Hat das Elektron zusätzlich einen transversalen Impuls, dann ist der Bahndrehimpuls nicht gleich Null und die Zentrifugalkraft verhindert, dass das Elektron bis zum Kern vordringen kann.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 5

## Kommentar 3

Da die Zentrifugalkraft umso größer wird, je näher das Elektron an den Atomkern kommt, wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Elektron kleiner, wenn es sich dem Atomkern nähert.

Am Ort des Atomkerns verschwindet die Aufenthaltswahrscheinlichkeit vollständig, da die Zentrifugalkraft unendlich groß würde.

Diese Diskussion zeigt, dass s-Elektronen sehr speziell sind, da sie nicht nur dem Kern sehr nahe kommen, sondern sich auch im Kern selbst befinden können.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 6

Radiale Wellenfunktionen habe die Form

$$R_{n,\ell}(r) = f_{n,\ell}(r) \cdot e^{-r/na_B}$$

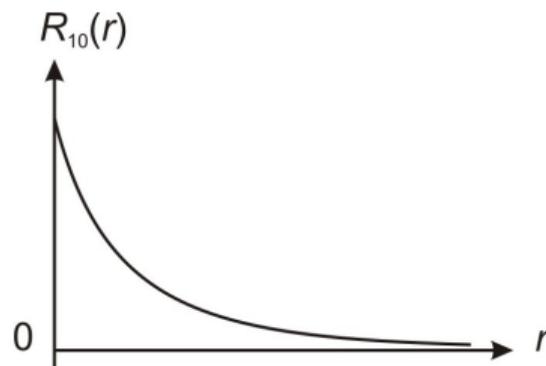
Dabei bezeichnet  $f_{n,\ell}(r)$  ein Polynom, dessen Gestalt von  $n$  und  $\ell$  abhängt

$n = 1$ : Die radiale Wellenfunktion des Grundzustands ist ein einfacher exponentieller Abfall

$$R_{10}(r) \propto e^{-r/a_B}$$

und

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}$$



# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 6

## Kommentar 1

Die genaue Gestalt der Wellenfunktion gibt die Lösung der Schrödingergleichung.

Die rot umrandete Formel zeigt, die grundsätzliche Form der radialen Wellenfunktion.

Die radiale Wellenfunktion wird aus dem Produkt zweier Funktionen berechnet.

Sie besteht aus einem Polynom der Koordinate  $r$ , das von den Quantenzahlen  $n$  und  $\ell$  abhängt und einer Exponentialfunktion, die das Abklingen der Wellenfunktion mit zunehmendem Abstand beschreibt.

Die Abklinglänge ergibt sich aus dem Bohrschen Radius multipliziert mit der Hauptquantenzahl  $n$ .

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 6

## Kommentar 2

Der kleinste Abstand zum Atomkern ergibt sich für die Hauptquantenzahl  $n = 1$ .

Es zeigt sich, dass für diese kleinen Abstände, das Elektron nur gebunden ist, wenn es keinen Bahndrehimpuls hat.

Schon ein Bahndrehimpuls mit der Quantenzahl  $\ell = 1$  erhöht die Energie so, dass es keinen gebundenen Zustand mehr gibt.

Die radiale Wellenfunktion für die Hauptquantenzahl  $n = 1$  ist durch eine abklingende Exponentialfunktion gegeben.

Wird diese Exponentialfunktion in die Schrödingergleichung eingesetzt, ergibt sich für die Energie des Elektrons der Wert  $-13,6$  eV.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 6

## Kommentar 3

Das entspricht der maximalen Bindungsenergie, wie man sie aus den Spektren des Wasserstoffatoms erwartet.

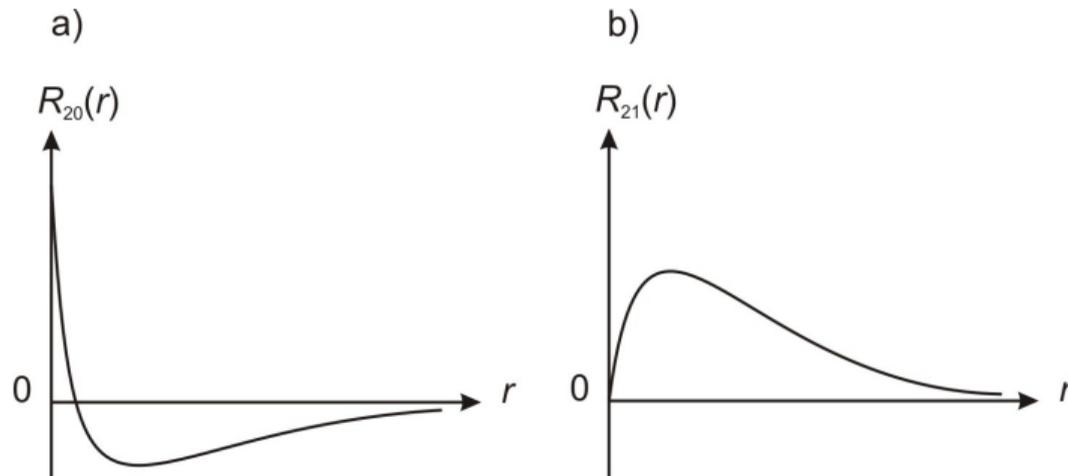
Der Grundzustand des Wasserstoffatoms ist ein 1s-Orbital.

Die Eins steht für die Hauptquantenzahl  $n = 1$  und der Buchstabe s für die Drehimpulsquantenzahl  $\ell = 0$ .

Bemerkenswert an diesem Ergebnis ist, dass die verwendete Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom allein auf der klassischen Hamiltonfunktion des Elektrons basiert und keine freien Parameter oder Zusatzannahmen benötigt.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 7

$n = 2$ : Es gibt ein s-Orbital und drei p-Orbitale



$$\underline{R_{21}(r) \propto r e^{-r/2a_B}} \quad \text{und} \quad E_2 = -\frac{13,6 \text{ eV}}{2^2}$$

$$\underline{R_{20}(r) \propto \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) e^{-r/2a_B}} \quad \text{und} \quad E_2 = -\frac{13,6 \text{ eV}}{2^2}$$

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 7

## Kommentar 1

Für die Hauptquantenzahl  $n = 2$  ist der mittlere Abstand zwischen dem Atomkern und dem Elektron schon so groß, dass ein Drehimpuls mit  $\ell = 1$  möglich wird.

Für diese Drehimpulsquantenzahl wächst die radiale Wellenfunktion linear mit dem Abstand zum Kern an und wird durch die Exponentialfunktion für größere Abstände wieder auf Null gedrückt.

Diesen Verlauf der radialen Wellenfunktion  $R_{21}$  zeigt die Skizze b).

Setzt man den rot unterstrichenen Ansatz für die Wellenfunktion  $R_{21}$  in die Schrödingergleichung ein, dann ergibt sich für die Energie des Elektrons der Wert  $-13,6 \text{ (eV)}/2^2$ .

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 7

## Kommentar 2

Wird ein s-Elektron betrachtet, das keinen Bahndrehimpuls hat, dann gibt es auch keinen Beitrag der Rotation zur Energie des Elektrons.

Statt dessen muss die kinetische Energie in radialer Richtung erhöht werden.

In der radialen Wellenfunktion führt das dazu, dass durch eine zusätzliche Nullstelle die Ableitung der radialen Wellenfunktion größere Werte annehmen kann.

Außerdem muss beachtet werden, dass die radiale Wellenfunktion für  $r \rightarrow 0$  einen endlichen Wert haben muss, da das Elektron bis zum Kern vordringen kann.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 7

# Kommentar 3

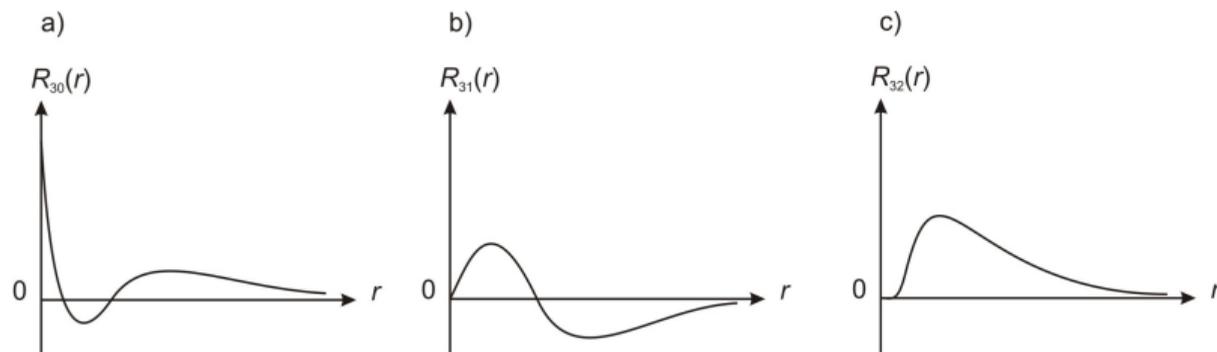
Wird der zweite rot unterstrichene Ansatz für die Wellenfunktion  $R_{20}$  eingesetzt, dann ergibt sich der Koeffizient  $1/2$  im Polynom und für die Energie  $-13,6 \text{ (eV)}/2^2$ .

Ein s- und ein p-Elektron haben zwar unterschiedliche radiale Wellenfunktionen aber die gleiche Bindungsenergie.

Die Bindungsenergie für die Hauptquantenzahl  $n = 2$  hat den Wert, der aus den optischen Spektren des Wasserstoffatoms bestimmt werden kann.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 8

$n = 3$ : Es gibt ein s-Orbital, drei p-Orbitale und fünf d-Orbitale



$$R_{30}(r) \propto \left( 27 - \frac{18r}{a_B} + \frac{2r^2}{a_B^2} \right) e^{-r/3a_B} \quad \text{and} \quad R_{31}(r) \propto \frac{r}{a_B} \left( 1 - \frac{r}{6a_B} \right) e^{-r/3a_B}$$

$$\underline{R_{32}(r) \propto r^2 e^{-r/3a_B}}$$

and

$$E_3 = -\frac{13,6 \text{ eV}}{3^2}$$

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 8

## Kommentar 1

Für die Hauptquantenzahl  $n = 3$  kann der Drehimpuls maximal auf  $\ell = 2$  erhöht werden.

Für die Drehimpulsquantenzahl  $\ell = 2$  wächst die radiale Wellenfunktion zunächst mit  $r^2$  an, um für größere Abstände durch die Exponentialfunktion wieder auf Null gedrückt zu werden.

Den Verlauf der radialen Wellenfunktion  $R_{32}$  zeigt die Skizze c).

Wird der Drehimpuls erniedrigt, so muss die kinetische Energie in radialer Richtung schrittweise durch das Hinzufügen von Nullstellen in der radialen Wellenfunktion erhöht werden.

Für ein p-Elektron gibt es eine Nullstelle und für ein s-Elektron zwei Nullstellen.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 8

## Kommentar 2

Das Polynom vor der Exponentialfunktion ist auch für ein s-Elektron bzw. p-Elektron ein Polynom 2. Ordnung, wobei  $R_{31}$  für  $r \rightarrow 0$  gegen Null streben muss, während die radiale Wellenfunktion für ein s-Elektron  $R_{30}$  für  $r \rightarrow 0$  einen endlichen Wert behalten muss.

Mit diesen Überlegungen kann man die Ansätze für die radialen Wellenfunktionen aufschreiben.

Die Koeffizienten in den Polynomen ergeben sich, wenn die radialen Wellenfunktionen in die Schrödingergleichung eingesetzt werden.

Für die Energie des Elektrons ergibt sich in allen drei Fällen der erwartete Wert von  $-13,6 \text{ eV}/3^2$ .

Die drei Skizzen zeigen schematisch den Verlauf der radialen Wellenfunktionen.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 9

Die Wahrscheinlichkeit das Elektron im Volumenelement  $dV$  zu finden ist

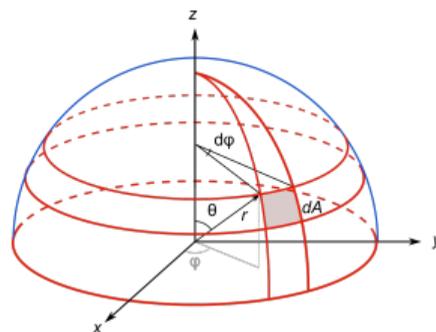
$$\underline{\psi(\vec{r})\psi(\vec{r})^* dV}$$

mit dem Volumenelement in  
Kugelkoordinaten

$$\underline{dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi}$$

ergibt sich die Wahrscheinlichkeit

$$\psi\psi^* dV = r^2 R_{n,\ell}^2 dr \cdot Y_{\ell,m} Y_{\ell,m}^* \sin \theta d\theta d\varphi$$



Üblicherweise wird  $r^2 R_{n,\ell}^2$  aufgetragen.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 9

## Kommentar

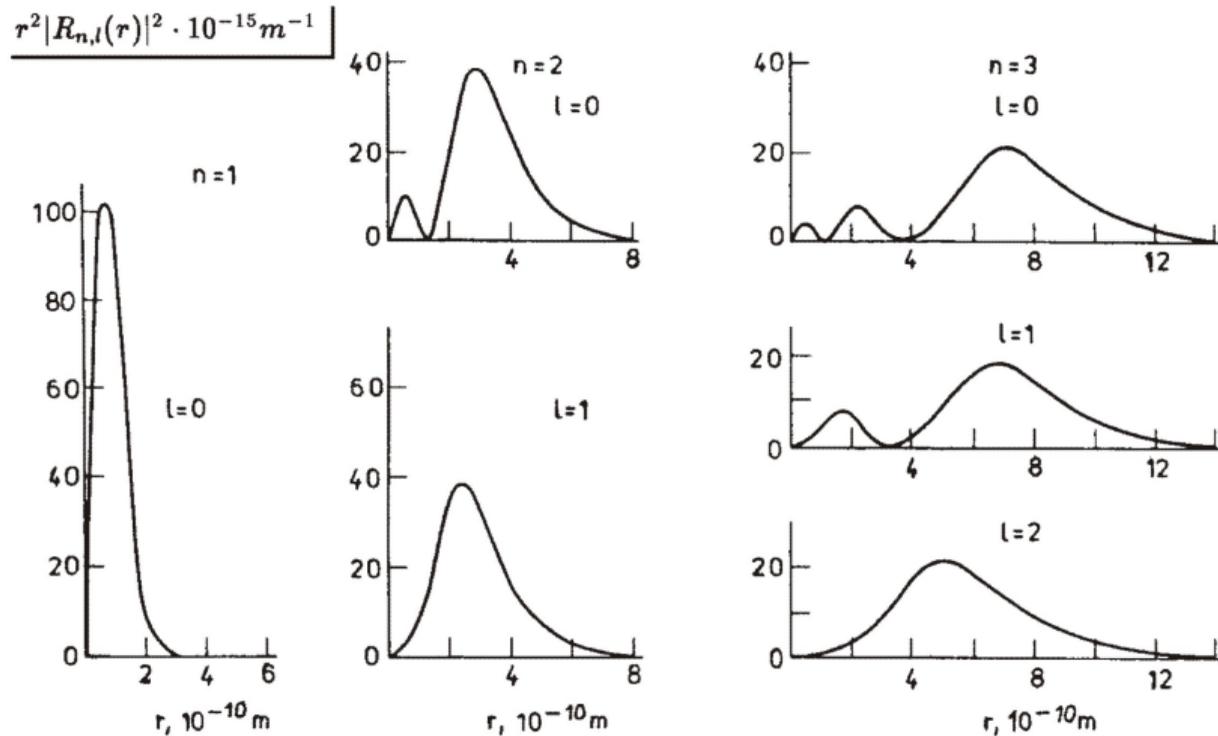
Die erste rot unterstrichene Formel gibt allgemein die Wahrscheinlichkeit dafür an, das Elektron am Ort  $\vec{r}$  im Volumenelement  $dV$  zu finden.

Die zweite rot unterstrichene Formel gibt das Volumenelement in Kugelkoordinaten.

Die rot umrandete Formel gibt die Wahrscheinlichkeit das Elektron zu finden in Kugelkoordinaten an.

Zur Veranschaulichung der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte wird üblicherweise das Produkt  $r^2 R_{n,\ell}^2$  gezeichnet.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 10



# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 10

## Kommentar 1

Die Abbildung zeigt die radialen Wahrscheinlichkeitsdichten für die Hauptquantenzahlen  $n = 1, 2$  und  $3$ .

Der Bohrsche Radius beträgt rund  $0,5 \cdot 10^{-10}$  m.

Man erkennt wie mit zunehmender Hauptquantenzahl  $n$  das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte zu größeren Abständen verschoben wird.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 10

## Kommentar 2

Der transversale Anteil der kinetischen Energie ist am größten, wenn die Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  den größten möglichen Wert annimmt.

Wird der Drehimpuls des Elektrons und damit die transversale kinetische Energie reduziert, dann muss die radiale kinetische Energie schrittweise erhöht werden, wenn die Bindungsenergie des Elektrons unverändert bleiben soll.

In der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte erkennt man die Verlagerung der kinetischen Energie daran, dass sich schrittweise die Zahl der Nullstellen erhöht.

Erhöht sich die radiale kinetische Energie dann verschiebt sich auch das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte zu größeren Abständen vom Kern.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 10

## Kommentar 3

Beim Wasserstoffatom wird durch die Verlagerung der kinetischen Energie vom transversalen zum radialen Anteil die Bindungsenergie des Elektrons nicht geändert.

Dieses Ergebnis resultiert daraus, dass die potentielle Energie des Elektrons im elektrischen Feld des Atomkerns umgekehrt proportional zum Abstand ist.

Wird diese Abhängigkeit auch nur geringfügig verändert, dann ändert sich auch die Bindungsenergie des Elektrons, wenn die Anteile der radialen und transversalen kinetischen Energie verändert werden.

Die Energieeigenwerte hängen dann sowohl von der Hauptquantenzahl  $n$  als auch von der Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  ab.

# Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom 11

Energieeigenwerte:  
(Wie im Experiment)

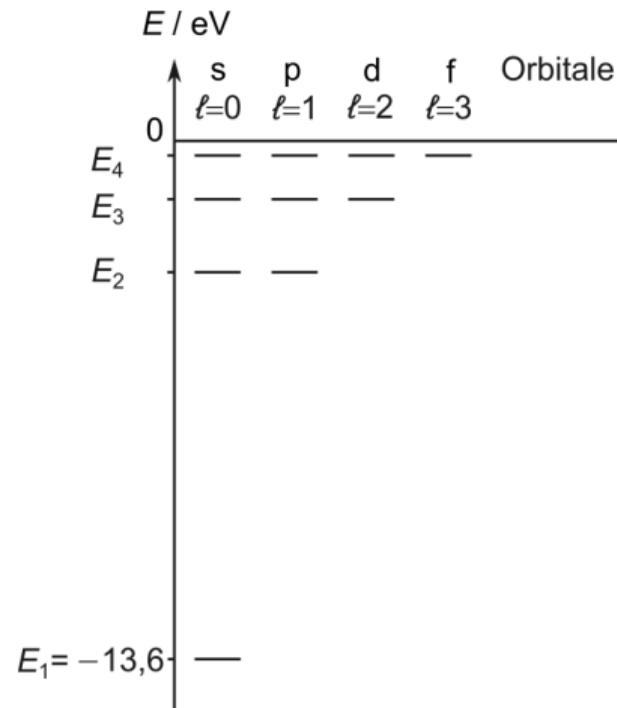
$$E_n = -13,6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$$

mit

$$n = 1, 2, \dots$$

und

$$l < n$$



# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 11

## Kommentar 1

Das Energieniveauschema auf der rechten Seite fasst die Ergebnisse der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom zusammen.

Die Energieeigenwerte des Elektrons entsprechen dem, was man mit Hilfe der optischen Spektroskopie aus den Serien des Wasserstoffspektrums bestimmen kann.

Im Gegensatz zum Bohrschen Atommodell sind keine Annahmen zur Quantisierung erforderlich.

Es zeigt sich, dass die Energieeigenwerte der Schrödingergleichung in der Regel von mehreren Eigenfunktionen realisiert werden.

Die Lösung der Schrödingergleichung ergibt, dass die Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  immer kleiner als die Hauptquantenzahl  $n$  sein muss.

# Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms 11

## Kommentar 2

Der Grundzustand wird durch ein s-Orbital realisiert.

Für den ersten angeregten Zustand gibt es ein s- und drei p-Orbitale.

Der zweite angeregte Zustand mit der Hauptquantenzahl  $n=3$  wird durch ein s- drei p- und fünf d-Orbitale realisiert.

Mit der Hauptquantenzahl  $n=4$  kommen die f-Orbitale hinzu.

f entspricht der Drehimpulsquantenzahl  $\ell = 3$ , zu der es 7 Eigenfunktionen gibt.

# Zeeman Effekt

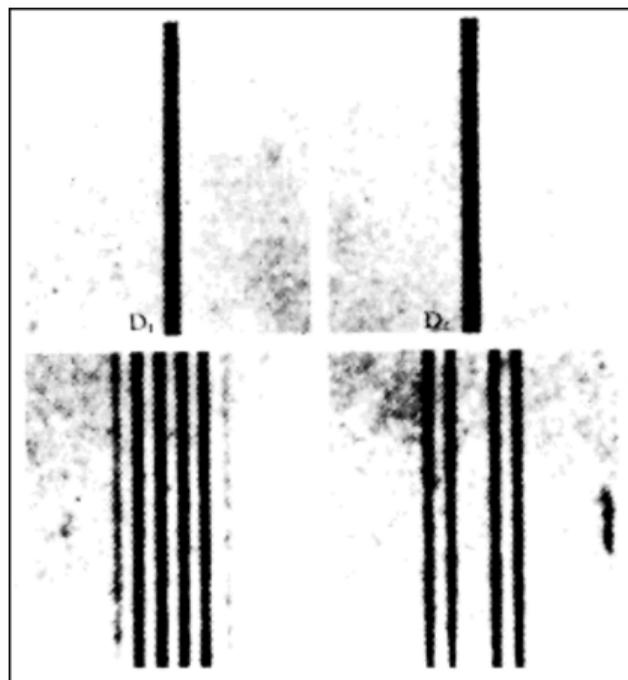
# Atome

## Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- **normaler Zeeman Effekt**
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

# normaler Zeeman Effekt 1

1896 beobachtet Pieter Zeeman die Aufspaltung der Natrium D-Linien in einem starken magnetischen Feld



# Kommentar

1896 beobachtet Pieter Zeeman die Aufspaltung der Natrium D-Linien in einem starken magnetischen Feld.

Den Zeeman Effekt kann man bereits mit der klassischen Elektrodynamik soweit verstehen, dass Lorentz 1899 ohne Quantenphysik und ohne eine korrekte Vorstellung vom Aufbau der Atome schließen konnte, dass Elektronen die Ursache für die Emission von Licht bei Atomen sind.

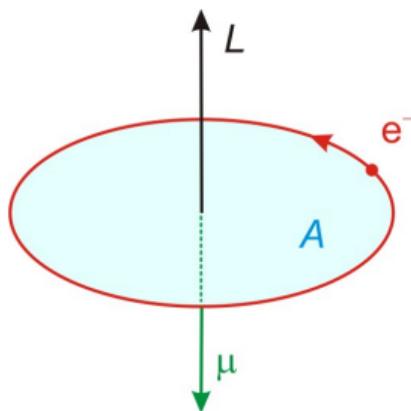
Allerdings wird im Rahmen der klassischen Elektrodynamik eine Aufspaltung in drei Komponenten erwartet.

Der von Pieter Zeeman beobachtete Effekt fügt sich nicht in dieses Bild und wird deshalb traditionellerweise als anomaler Zeeman Effekt bezeichnet.

# normaler Zeeman Effekt 2

Die Bahnbewegung des Elektrons führt zu einem magnetischen Moment

$$\mu = AI$$



$$I = -\frac{e}{T} = -e \frac{v}{2\pi r}$$

$$\mu = \pi r^2 \cdot \frac{-ev}{2\pi r} = -\frac{erv}{2} = -\frac{ermv}{2m}$$

$$\mu = -\frac{eL}{2m} = -\mu_B \frac{L}{\hbar}$$

## normaler Zeeman Effekt 2

## Kommentar 1

Der Zeeman Effekt beschreibt den Einfluss, den ein homogenes Magnetfeld auf die Energieniveaus der Elektronen und damit auf die Spektrallinien der Atome hat.

Die Elektronen bewegen sich um den Atomkern, so dass man sich vorstellen kann, dass der Atomkern von einem elektrischen Strom umflossen wird.

Dieser elektrische Strom führt zu einem magnetischen Moment, das reagiert, wenn sich das Atom in einem magnetischen Feld befindet.

Das magnetische Moment ist als das Produkt aus der Fläche und dem Strom definiert, der die Fläche in einer geschlossenen Schleife umfließt.

In der Quantenphysik kann das Elektron nur durch seine Wellenfunktion beschrieben werden und es gibt beliebig viele Bahnen des Elektrons um den Atomkern.

## normaler Zeeman Effekt 2

## Kommentar 2

Im folgenden wird im Sinne des Bohrschen Atommodells eine Kreisbahn des Elektrons betrachtet, so dass mittels der klassischen Physik der Drehimpuls bestimmt ist, der später durch den quantisierten Drehimpuls ersetzt werden kann.

Die Skizze zeigt einen Ringstrom, der sich aus der Bewegung eines Elektrons um eine kreisförmige Fläche ergibt.

Der Strom ist als Ladung pro Zeit definiert.

Für den Ringstrom der Skizze ergibt sich der Strom als die negative Elementarladung  $e$  des Elektrons geteilt durch die Umlaufdauer  $T$  auf seiner Bahn um die Kreisfläche.

Die Umlaufdauer wiederum ergibt sich aus dem Kreisumfang geteilt durch die Geschwindigkeit  $v$ .

# normaler Zeeman Effekt 2

# Kommentar 3

Wird der Strom mit der Kreisfläche  $\pi r^2$  multipliziert, dann kürzt sich der Bahnradius und im Zähler bleibt das Produkt aus Bahnradius und Geschwindigkeit.

Wird die Formel mit der Masse des Elektrons erweitert, dann steht im Zähler der Drehimpuls des Elektrons.

Das magnetische Moment ist proportional zum Bahndrehimpuls des Elektrons.

Der Proportionalitätsfaktor ergibt sich aus dem Quotienten von Elementarladung und der doppelten Masse des Elektrons.

Da der Drehimpuls in Einheiten von  $\hbar$  gemessen wird, wird die Formel mit  $\hbar$  erweitert.

# normaler Zeeman Effekt 2

# Kommentar 4

Die Proportionalitätskonstante ist das Bohrsche Magneton  $\mu_B$ .

Wie der Drehimpuls ist das magnetischen Moment der Elektronenbahn ein Vektor.

Das magnetische Moment ist aufgrund der negativen Ladung des Elektrons entgegengesetzt zum Drehimpuls orientiert.

Die Skizze veranschaulicht diese Situation.

Es ist bemerkenswert, dass mit dem Bohrschen Atommodell die richtige Formel für das magnetische Moment hergeleitet werden kann.

Die gleiche Formel ergibt sich mit der Schrödinger Gleichung, jedoch mit einem enormen theoretischen Aufwand.

# normaler Zeeman Effekt 3

## Bohrsches Magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 = 5,8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$$

Die potentielle Energie eines magnetischen Moments  $\vec{\mu}$  in einem homogenen  $\vec{B}$ -field ist

$$E_{pot} = -\vec{\mu}\vec{B} = \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \vec{B}$$

Hamilton Operator (ersetze  $\vec{p}$  durch  $-i\hbar\nabla$  und damit  $\vec{L}$  durch  $\hat{\vec{L}}$ )

$$\hat{H}_{Zee} = \mu_B \frac{\hat{\vec{L}}}{\hbar} \vec{B}$$

# normaler Zeeman Effekt 3

# Kommentar 1

Die potentielle Energie eines magnetischen Moments im Magnetfeld ist durch die rot unterstrichene Formel gegeben.

Die potentielle Energie ist am kleinsten, wenn das magnetische Moment parallel zum Magnetfeld orientiert ist.

In diese Formel kann der soeben bestimmte Ausdruck für das magnetische Moment eingesetzt werden und es ergibt sich die grau geschriebene Formel.

Die potentielle Energie ist ein Teil der Hamiltonfunktion.

Gemäß Schrödinger muss in der Hamiltonfunktion der Impuls durch den Operator des Impulses ersetzt werden, so dass sich der Hamiltonoperator ergibt.

## normaler Zeeman Effekt 3

## Kommentar 2

Wird in der Definition des Drehimpulses  $r \times p$  der Impuls durch den zugehörigen Operator ersetzt, dann ergibt sich der Drehimpulsoperator.

Die potentielle Energie des magnetischen Moments wird dadurch ein Teil des Hamiltonoperators.

Dieser magnetische Anteil wird Zeemanoperator genannt und ist in der rot umrandeten Formel angegeben.

Obwohl die Herleitung der Formel auf einer klassischen Elektronenbahn beruht, ist das Ergebnis der Rechnung exakt, d.h. es stimmt mit dem Ergebnis überein, das sich ergibt, wenn die Elektrodynamik in den Hamiltonoperator aufgenommen wird.

# normaler Zeeman Effekt 4

## Eigenwertgleichung

$B$  definiert die z-Richtung und mit  $\hat{L}_z Y_{\ell,m} = m\hbar Y_{\ell,m}$  ergibt sich

$$\hat{H}_{Zee} Y_{\ell,m} = \mu_B \frac{\hat{L}_z}{\hbar} B Y_{\ell,m} = m\mu_B B Y_{\ell,m}$$

## Energieeigenwerte

$$E_{Zee} = m\mu_B B$$

und  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

# normaler Zeeman Effekt 4

## Kommentar

Definiert die Richtung des Magnetfelds die  $z$ -Richtung, dann wird im Zeemanoperator nur die  $z$ -Komponente des Drehimpulsoperators benötigt.

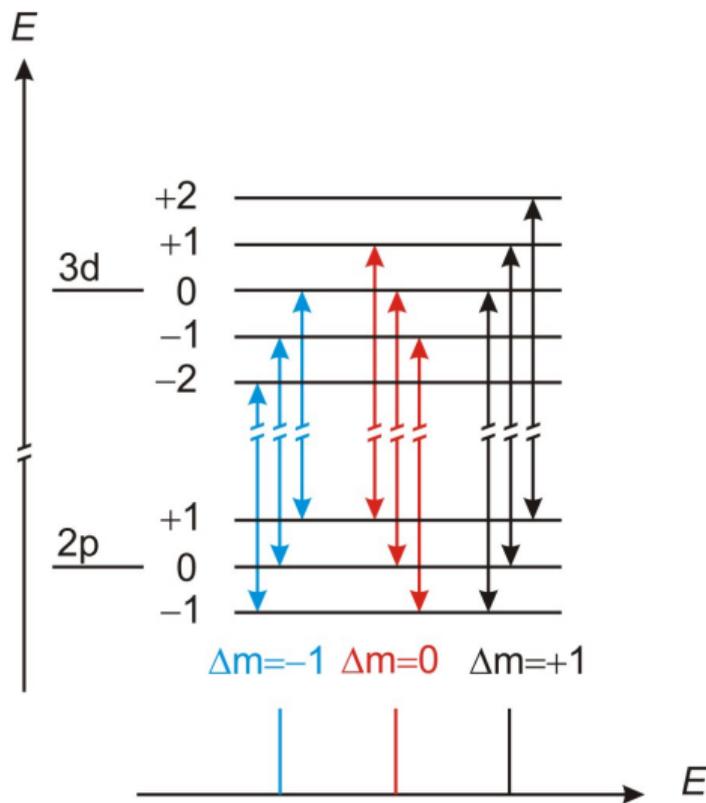
Mit der Eigenwertgleichung für die  $z$ -Komponente des Drehimpulses ergibt sich die Eigenwertgleichung des Zeemanoperators.

Die rot umrandete Formel gibt die Eigenwerte des Zeemanoperators.

Die zusätzliche Energie aufgrund eines Magnetfelds ist proportional zur Stärke des Magnetfelds und proportional zur Drehimpulsquantenzahl  $m$ .

Die Bahndrehimpulsquantenzahl  $m$  wird deshalb manchmal auch magnetische Quantenzahl genannt.

# normaler Zeeman Effekt 5



Aufspaltung der Spektralline um

$$\Delta m = -1 : \Delta E = -\mu_B B$$

$$\Delta m = 0 : \Delta E = 0$$

$$\Delta m = +1 : \Delta E = +\mu_B B$$

in 3 Komponenten!

# normaler Zeeman Effekt 5

# Kommentar 1

Die Energieeigenwerte, für die es ohne Magnetfeld mehrere Eigenfunktionen gibt, spalten gemäß ihrer magnetischen Quantenzahl in unterschiedliche Energieeigenwerte auf.

Die Abbildung zeigt die erwartete Aufspaltung eines 2p und eines 3d Niveaus.

Gemäß der Schrödingergleichung sind elektrische Dipolübergänge zwischen diesen Energieniveaus erlaubt.

Für die Drehimpulsquantenzahl  $\ell$  gilt die Auswahlregel  $\Delta\ell = \pm 1$ .

Für die magnetische Quantenzahl gilt die Auswahlregel  $\Delta m = 0$  und  $\pm 1$ .

# normaler Zeeman Effekt 5

# Kommentar 2

In der Skizze sind die Übergänge mit der Auswahlregel  $\Delta m = -1$  blau eingezeichnet.

Die Energie dieser Übergänge ist im Vergleich zur Übergangsenergie ohne Magnetfeld um den Betrag  $\mu_B \cdot B$  erniedrigt.

Die Übergänge mit der Auswahlregel  $\Delta m = 0$  sind in der Skizze rot eingezeichnet.

Für diese Spektrallinien ergibt sich keine Energieverschiebung.

Die Übergänge mit der Auswahlregel  $\Delta m = +1$  sind in der Skizze schwarz eingezeichnet.

Für diese Übergänge erhöht sich die Übergangsenergie um den Betrag  $\mu_B \cdot B$ .

# normaler Zeeman Effekt 5

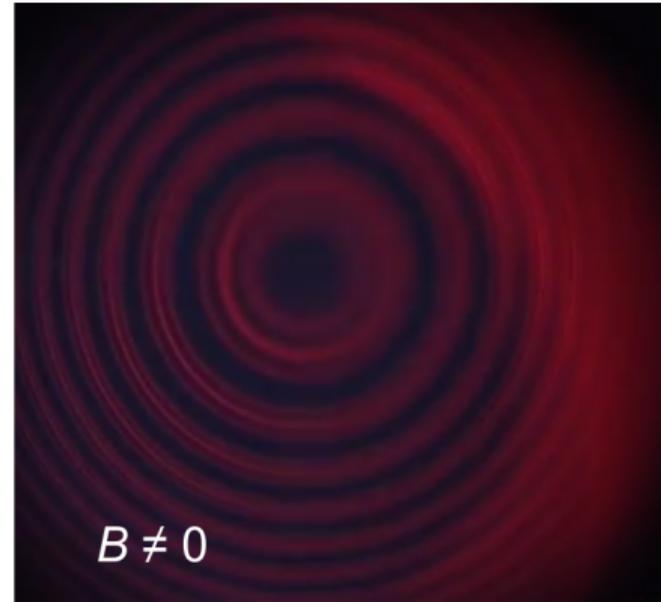
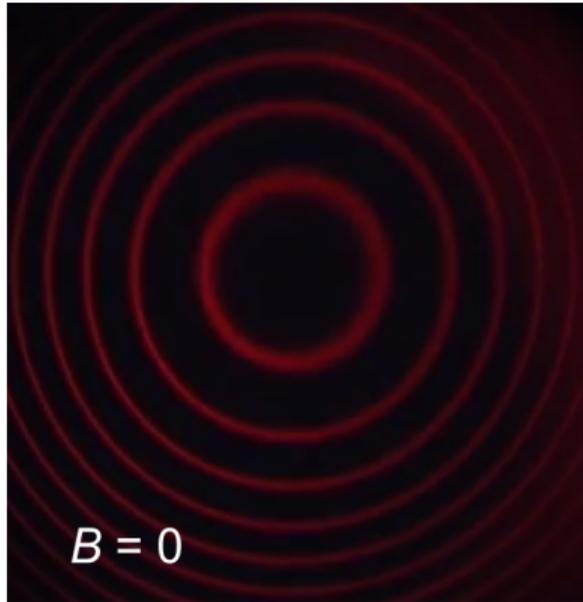
# Kommentar 3

Mit diesem Ergebnis kann erwartet werden, dass die Spektrallinien der Atome in einem Magnetfeld in drei Komponenten aufspalten.

Dieser Zeemaneffekt wird bei vielen Atomen beobachtet und gemäß der Tradition „normaler“ Zeemaneffekt genannt.

# normaler Zeeman Effekt 6

Zeeman Effect der roten Cadmium Linie ( $\lambda = 643.8 \text{ nm}$ )

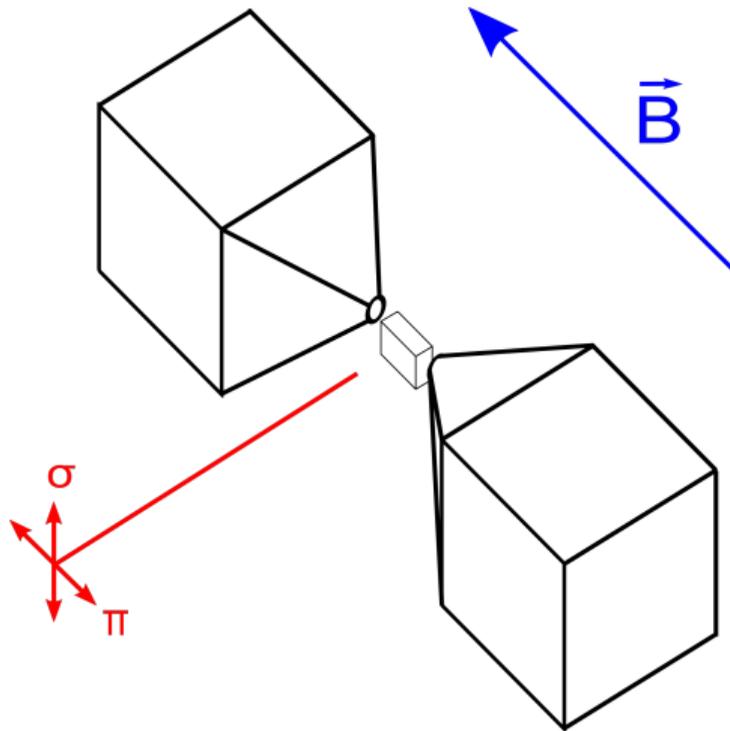


# normaler Zeeman Effekt 6

# Kommentar

Das Video zeigt die Aufspaltung der roten Spektrallinie von Cadmium, die ich bereits in der 2. Vorlesung bei der Besprechung des Fabry-Perot Interferometers gezeigt habe.

# normaler Zeeman Effekt 7



# normaler Zeeman Effekt 7

## Kommentar

Die Skizze zeigt die experimentelle Anordnung.

Mit  $\pi$  wird die Polarisierung von Licht bezeichnet, bei der das elektrische Feld der Welle parallel zum Magnetfeld oszilliert.

Dieses Licht ergibt sich aus Übergängen, welche die Auswahlregel  $\Delta m = 0$  befolgen.

Mit  $\sigma$  wird die Polarisierung von Licht bezeichnet, bei der das elektrische Feld senkrecht zum Magnetfeld oszilliert.

Das  $\sigma$ -polarisiert Licht entspricht im Energieniveauschema den blau und schwarz gezeichneten Übergängen, welche die Auswahlregel  $\Delta m = \pm 1$  befolgen.

# Revision

# Revision

## 1

1. Das Elektron des Wasserstoffatoms befindet sich in einem Quantenzustand mit der Hauptquantenzahl  $n$ . Welche anderen Quantenzahlen charakterisieren den Quantenzustand des Elektrons?
2. Welche Werte haben diese Quantenzahlen?
3. Skizzieren Sie die radialen Wellenfunktionen  $R_{n,\ell}$  für ein Elektron mit der Hauptquantenzahl  $n = 4$ .
4. Skizzieren Sie die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte  $r^2 R_{n,\ell}^2$  für ein Elektron mit der Hauptquantenzahl  $n = 4$ .
5. Begründen Sie den Verlauf dieser Funktionen.
6. Wie hängt das magnetische Moment der Elektronenbahn mit dem Drehimpuls zusammen?
7. Schreiben Sie die Formel für das Bohrsche Magneton auf.

# Revision

# 2

8. Wie ändert sich die Energie eines Elektrons, wenn sich das Atom in einem magnetischen Feld befindet?
9. Skizzieren Sie die Aufspaltung der Energieniveaus eines f-Elektrons in einem magnetischen Feld.
10. Schreiben Sie den Zeeman-Operator auf.

# Inhaltsverzeichnis

# Inhaltsverzeichnis

## 1. Vorlesung

- Eindimensionale Wellengleichung
- Reflexion und Transmission
- Stehende Wellen
- Dreidimensionale Wellen
- Schallwellen

## 2. Vorlesung

- Elektromagnetische Wellen
- Kohärenz
- Michelson Interferometer
- Interferenz an dünnen Schichten
- Beugung am Doppelspalt
- Beugung am Gitter

# Inhaltsverzeichnis

## 3. Vorlesung

- Fabry-Perot Interferometer
- Beugung am Einzelspalt
- Bragg'sches Gesetz
- Laue Bedingung
- Michelson Morley Experiment

## 4. Vorlesung

- Die Einsteinschen Postulate
- Lorentz Transformation
- Zeitdilatation und Längenkontraktion
- Das Experiment von Hall und Rossi
- Zwillingsparadoxon
- „sichtbare Effekte“ der Lorentz Transformation
- Der invariante Abstand
- Relativistische Invarianten
- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik

# Inhaltsverzeichnis

## 5. Vorlesung

- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik
- Wärmestrahlung

## 6. Vorlesung

- Plancksches Strahlungsgesetz
- Laser

## 7. Vorlesung

- Photoelektrischer Effekt
- Compton Effekt
- Materiewellen

## 8. Vorlesung

- Unschärferelationen
- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell

# Inhaltsverzeichnis

## 9. Vorlesung

- Die Spektren der Alkalimetalle
- Die Spektren der Röntgenstrahlung
- Das Frank-Hertz Experiment
- Die Schrödinger Gleichung
- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls