

Wiederholung:

zeitunabhängige SDG:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1)$$

Separationsatz: $\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot Y_{\ell m_\ell}(\vartheta, \varphi)$

↗ Kugelflächenfktn.
Eigenfktn. von $\hat{L}^2$ u. $\hat{L}_z$

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m_\ell} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m_\ell}$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m_\ell} = \hbar m_\ell Y_{\ell m_\ell}$$

$$m_\ell = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell \quad (2\ell+1) \text{ Werte}$$

Einsetzen
in (1)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

Substitution: $u(r) = r R(r)$

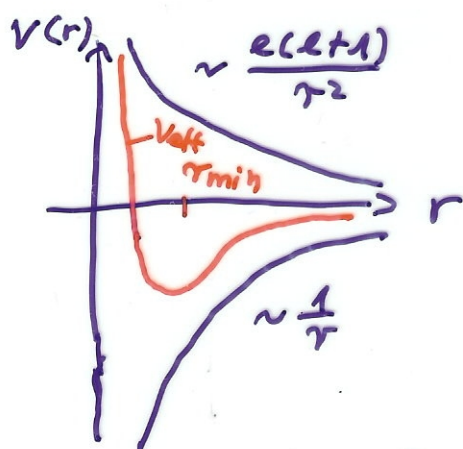
→ 1dim SDG:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] u(r) = E u(r) \quad (2)$$

7.2 Energiezustände des Wasserstoffatoms

Coulombpotential: $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sim \frac{1}{r}$

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{-V_{\text{eff}}} \right] u(r) = 0 \quad (3)$$



$$\frac{dV_{\text{eff}}}{dr} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow r_{\text{min}} = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 m} \cdot \hbar^2 l(l+1)$$

$$r \rightarrow \infty: \quad \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot u(r) = 0 \quad (E < 0)$$

Lsg: $u_1(r) \sim e^{-K \cdot r}$, $u_2(r) \sim e^{+K \cdot r}$ $\downarrow$

$$K^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$r \rightarrow 0: \quad \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \approx 0$$

Lsg: $u_1(r) \sim r^{l+1}$, $u_2(r) \sim r^{-l}$ $\downarrow$

Ansatz: $u(r) \sim e^{-K \cdot r} \cdot r^{l+1} \cdot P(r)$

mit Polynom $P(r) = \sum_{\mu} a_{\mu} r^{\mu}$ (endlich)

...

$$E_n = - \frac{m e^4}{2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} = - \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot a_0} \cdot \frac{1}{2n^2}$$

Bohrscher Radius:

$$a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{e^2 m}$$

$$= 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

$$R_{ne} = \frac{\mu(r)}{r} =$$

$$\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{n^2 (n+l)!} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \cdot e^{-r/(n \cdot a_0)} \cdot \left(\frac{2r}{n \cdot a_0}\right) \cdot$$

$$L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

↖ zugeordnetes Laguerre Polynom

$$L_p^k(z) = \frac{d^k}{dz^k} L_p(z) \quad k \leq p$$

Gewöhnliches Laguerre Polynom:

$$L_p(z) = e^z \frac{d^p}{dz^p} (z^p e^{-z}) \quad p = 0, 1, \dots$$

Zusammenfassung: $\psi_{n\ell m_\ell}(r, \vartheta, \varphi) = R_{ne}(r) \cdot Y_{\ell m_\ell}(\vartheta, \varphi)$

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

$$\ell = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, +\ell$$

Zu jeder Hauptquantenzahl n gibt es
 $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$ Wellenfunktionen $\rightarrow$ System entartet
 hinsichtlich ℓ u. m_ℓ

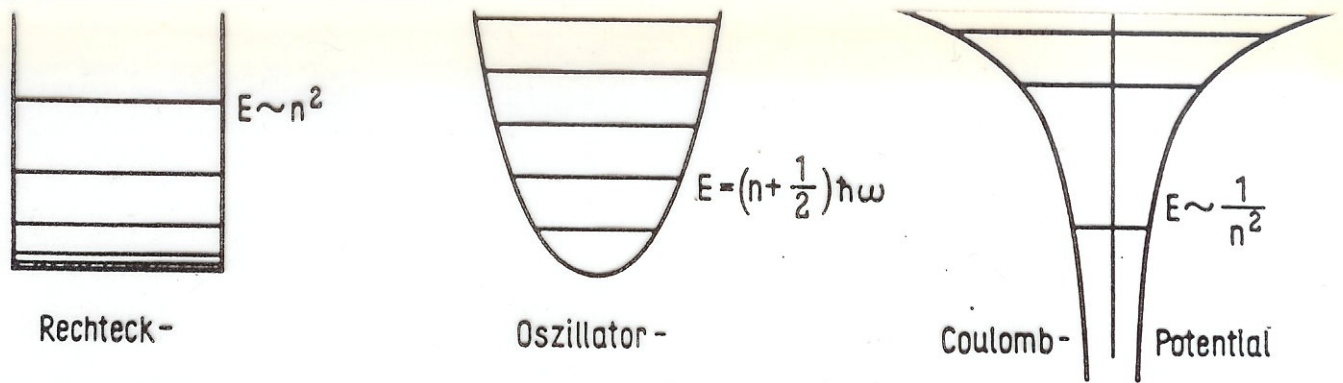


Fig. 29 Vergleich der Energiestufen in verschiedenen Potentialen

Tab. 4 Einige vollständige Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms.

Quantenzahlen			Eigenfunktionen $\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi)$
n	ℓ	m	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	± 1	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3}\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \vartheta$
3	1	± 1	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6}\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
3	2	± 1	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

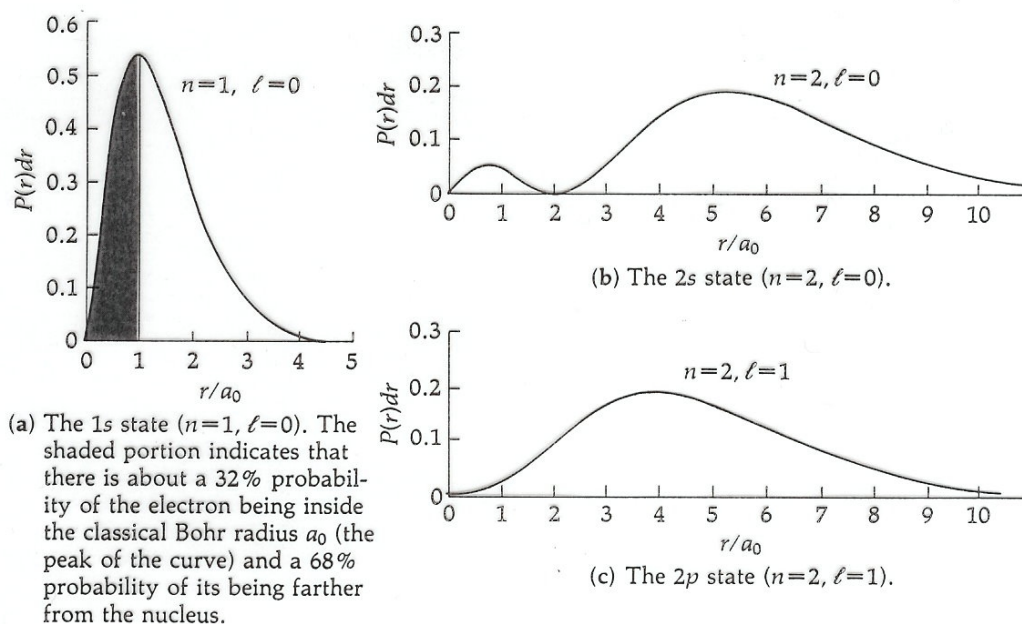


FIGURE 44-8

The radial probability density function $P(r)$ for the three lowest states of hydrogen.

$P(r)$, for the 1s state of hydrogen. As shown in Example 44-4, the maximum of the curve in Figure 44-8a occurs at $r = a_0 = 0.0529$ nm (the Bohr $n=1$ radius). The shaded portion is 32.3% of the total area under the curve, indicating that during this fraction of its time, the electron is closer to the nucleus than the Bohr radius.

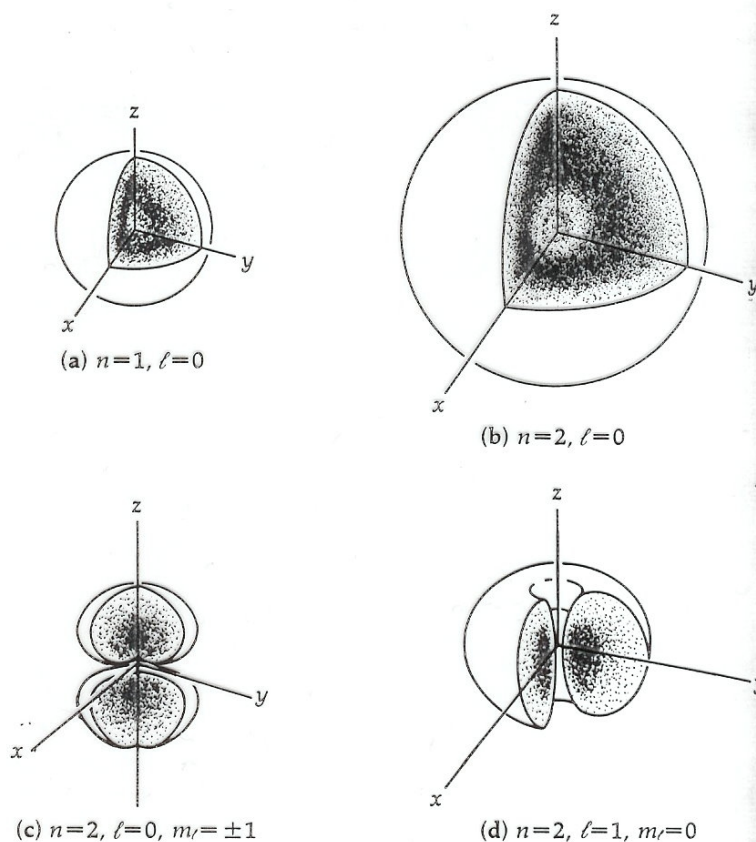
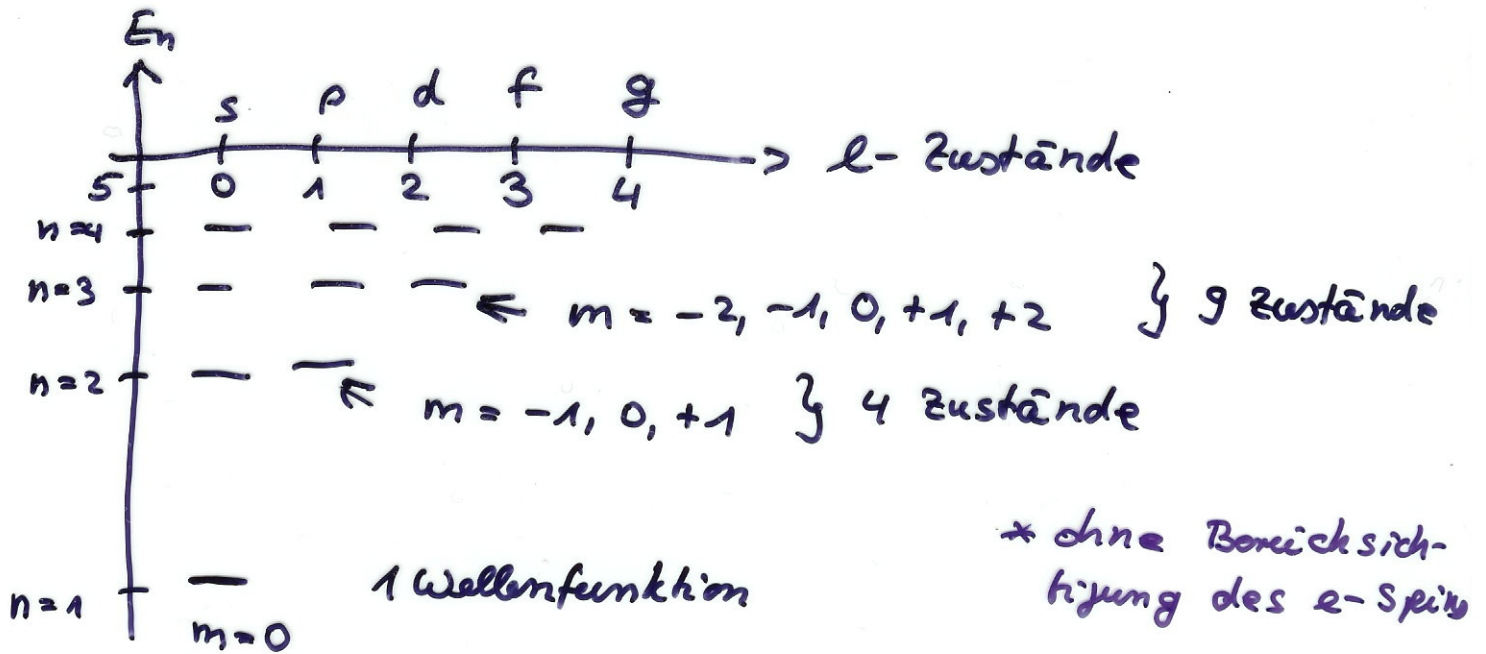


FIGURE 44-9

One way of representing the probability density for the 1s, 2s, and 2p states of the hydrogen atom. (We have drawn rather artificial boundaries to the distributions; the probability of finding an electron outside the boundary of a cloud is less than about 10%.) In each case, the nucleus is at the coordinate origin. The greater the cloud density, the greater the probability of finding the electron in that region.

Termschema:



Wasserstoff: zufällige l -Entartung

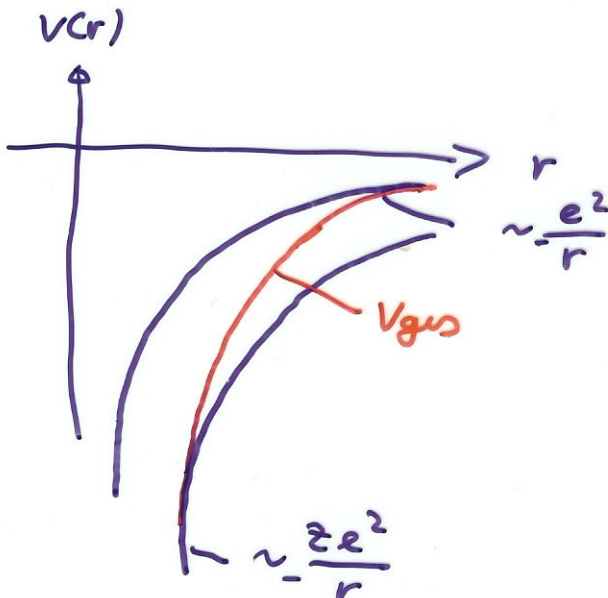
Alkali-Atome: l -Entartung aufgehoben



e^-

r groß: Kernladung $+Ze$ wird bis auf eine Ladungseinheit durch die inneren e kompensiert

r klein: keine Abschirmung



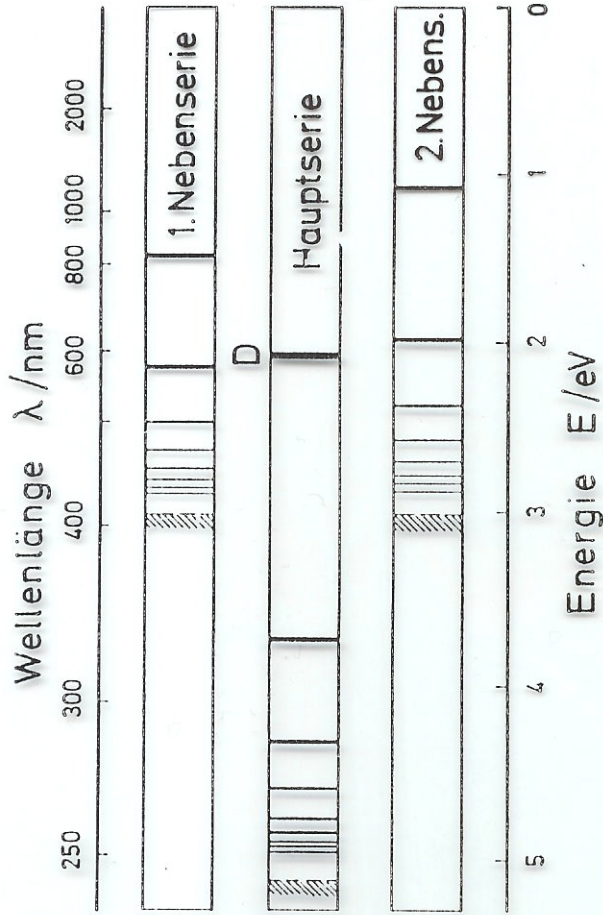
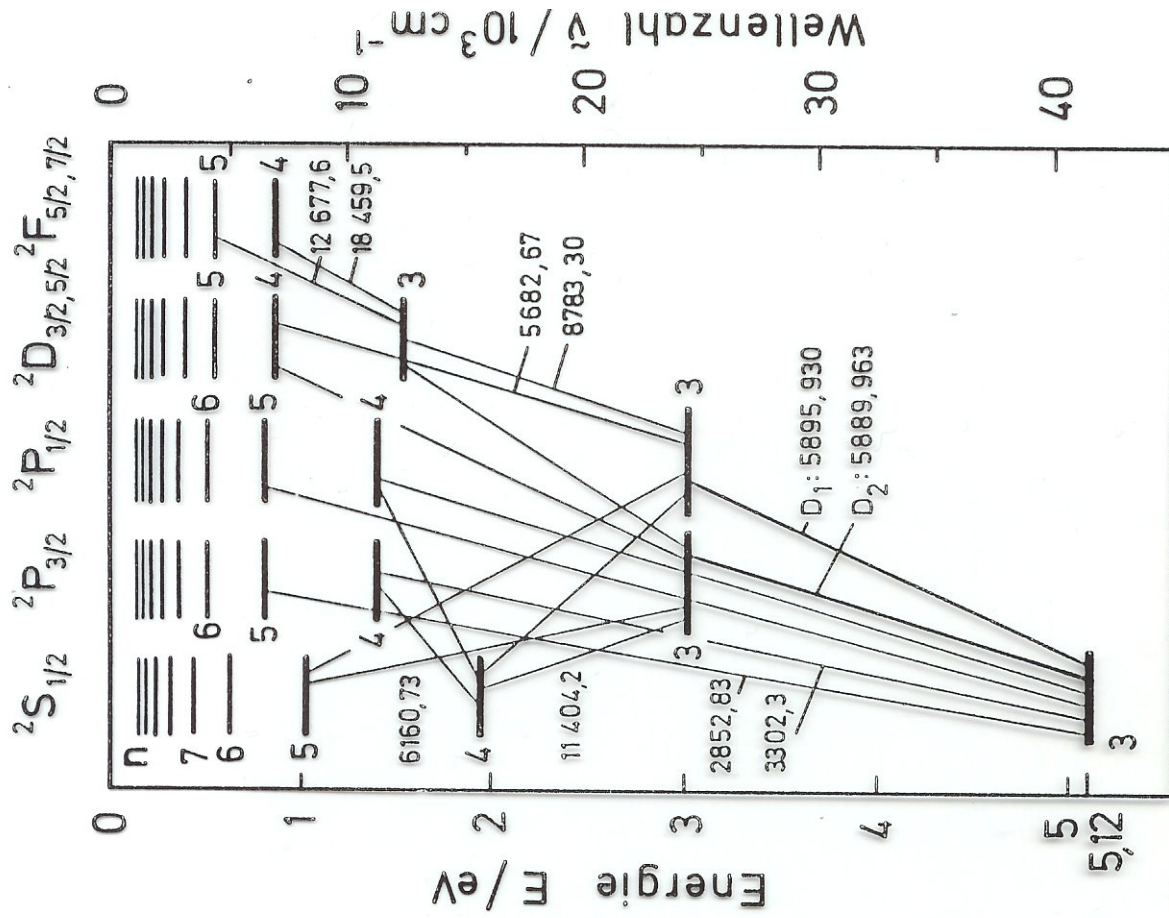


Abb. 11.6. Die drei kürzestwelligen Spektralserien des Natrium-Atoms. Die Seriengrenzen sind gestrichelt eingezeichnet. Das Emissionsspektrum ist eine Überlagerung dieser Serien. In Absorption beobachtet man normalerweise nur die Hauptserie, da im Grundzustand des Na-Atoms der höchste besetzte Term der $3s$ -Term ist. – Die gelbe Farbe von Natriumlampen wird durch die längstwellige Resonanzlinie der Hauptserie, Übergang $3s \leftrightarrow 3p$, hervorgerufen. Das ist die aus historischen Gründen sogenannte Natrium-D-Linie.

Abb. 11.7. Termschema des Natrium-Atoms, sogenanntes Grotrian-Diagramm. Einige der kürzestwelligen Übergänge aus der Hauptserie, den beiden Nebenserien und der Bergmannserie sind eingezeichnet. Die Zahlen im Diagramm bedeuten Wellenlängen der betreffenden Übergänge in Å. Die am oberen Bildrand eingetragenen Termsymbole enthalten bereits die Quantenzahlen für die Multiplizität und den Gesamtdrehimpuls. Diese werden in Kapitel 12 und 17 erklärt



7.3 Bahn- und Spin-Magnetismus

7.3.1. klassische Einführung

Elektron auf kreisbahn

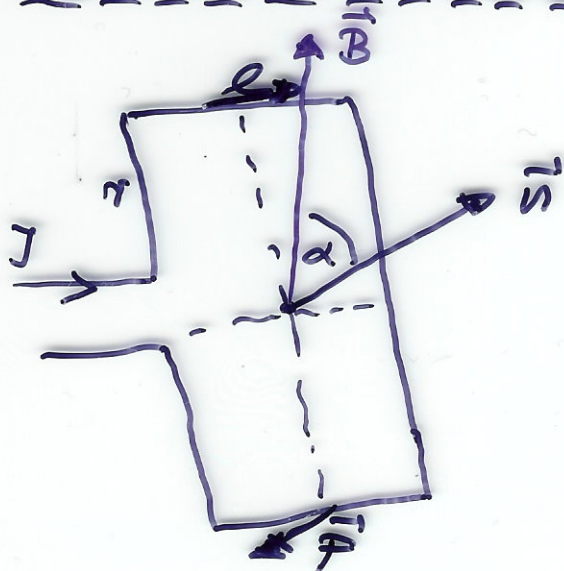
→ Kreisstrom

ED → magn. Dipol feld

= magn. Moment



a) Magnetisches Moment



$$\vec{\mu} = I \cdot A \vec{n} \quad [\text{Am}^2]$$

$\vec{n}$: Flächennormale

Homogenes Magnetfeld $\vec{H}$
der Flussdichte $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$

→ Leiterschleife erfährt
Drehmoment $\vec{D}$

$$\vec{D} = 2 \cdot (\vec{r} \times \vec{F}) = 2 \cdot (\vec{r} \times q \cdot \vec{v} \times \vec{B})$$

$$\alpha = 90^\circ, \vec{n} \perp \vec{B}: D = 2 \cdot r \cdot q \cdot v \cdot B = \underbrace{2 \cdot r \cdot l}_A \cdot \underbrace{\frac{q \cdot v}{e}}_J \cdot B$$

$$= \mu \cdot B$$

Allgemein: $\vec{D} = \vec{\mu} \times \vec{B}$

$$V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \int_{\pi/2}^{\alpha} D \, d\alpha = \int_{\pi/2}^{\alpha} \mu \cdot B \sin \alpha \, d\alpha = -\mu B \cdot \cos \alpha$$

H-Atom - 1 Elektron: $J = \frac{q}{T} = \frac{-e\omega}{2\pi}$

$$\begin{aligned} \rightarrow \mu &= J \cdot A = - \frac{e\omega}{2\pi} \cdot \pi r^2 \\ &= - \frac{e}{2m} |\vec{L}| \\ \vec{\mu} &= - \frac{e}{2m} \vec{L} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T &= \frac{2\pi}{\omega} \\ A &= \pi r^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\vec{L}| &= m|\vec{v}| \cdot |\vec{r}| = m\omega r^2 \\ v &= \omega \cdot r \end{aligned}$$

QM: Bohrsches Magneton

$$\begin{aligned} \mu_B &= \frac{e}{2m} \hbar = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 \\ &= 0.58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \underline{\mu = \frac{e}{2m} \hbar \sqrt{L(L+1)}} = \mu_B \cdot \sqrt{L(L+1)}$$

(da $L(L+1)$ EW zum Operator $\hat{L}^2$)

b) Präzession im Magnetfeld

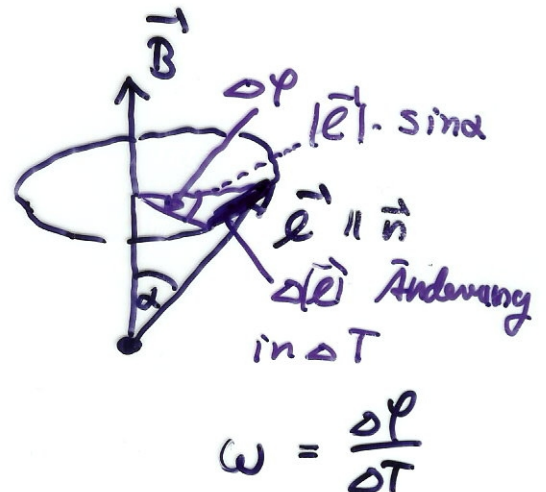
Drehmoment $\Rightarrow$ Präzession um $\vec{B}$ -Richtung
(analog zum Kreisel)

$$\vec{D} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \frac{d\vec{L}}{dt}$$

$$\Delta \vec{L} \parallel \vec{D}$$

$$|\Delta \vec{L}| = |\vec{L}| \sin \alpha \cdot \omega_L \cdot \Delta T$$

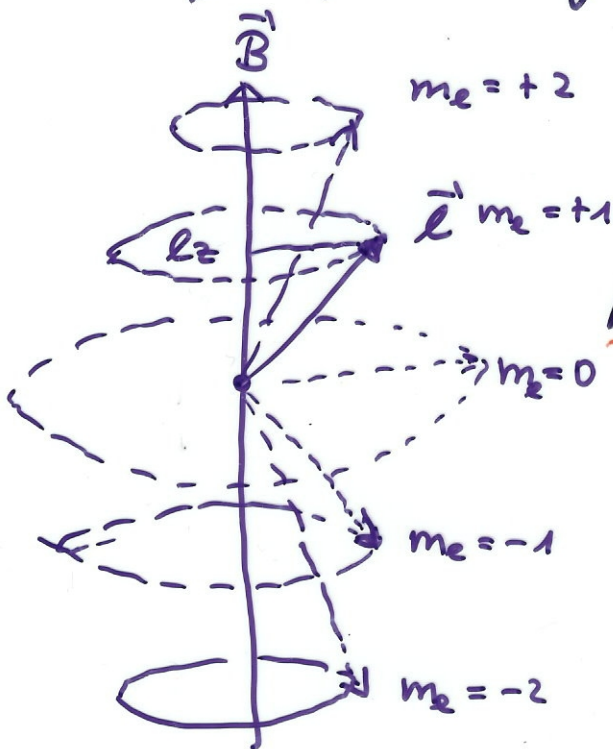
$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} \frac{d\vec{L}}{dt} &= |\vec{L}| \sin \alpha \cdot \omega_L \\ &= \mu \cdot B \cdot \sin \alpha \end{aligned} \right\} \omega_L = \frac{\mu \cdot B}{|\vec{L}|} \quad \text{Larmor-Frequenz}$$



$$\text{QM: } \omega_L = \frac{\mu \cdot B}{\hbar} = \frac{\mu_B \cdot \sqrt{l(l+1)} \cdot B}{\hbar}$$

$$\underline{\omega_L} = \underline{\frac{\mu_B \cdot B}{\hbar}}$$

Drehimpulsquantelung: diskrete Werte von l, l_z



$$m_l = +2 \quad l_z = m_l \cdot \hbar \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

magn. Quantenzahl

$$\underline{\mu_{l,z}} = -\frac{e}{2m} l_z = -\frac{e\hbar}{2m} m_l$$

$$= \underline{-m_l \mu_B}$$

Präzession:

Komponenten in x, y -Richtung
mitteln sich weg und sind
daher nicht meßbar.

Änderung der Drehimpulsrichtung um $\Delta m_l = 1$

$$\Delta V_{\text{mag}} = -\Delta \mu_z \cdot B = -\Delta m_l \cdot \mu_B \cdot B$$

$$= -\mu_B \cdot B = \omega_L \cdot \hbar$$