

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	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

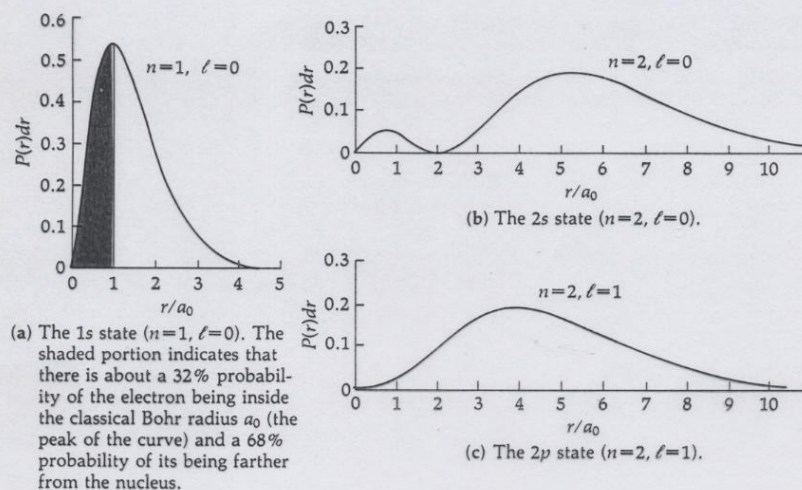


FIGURE 44-8

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.

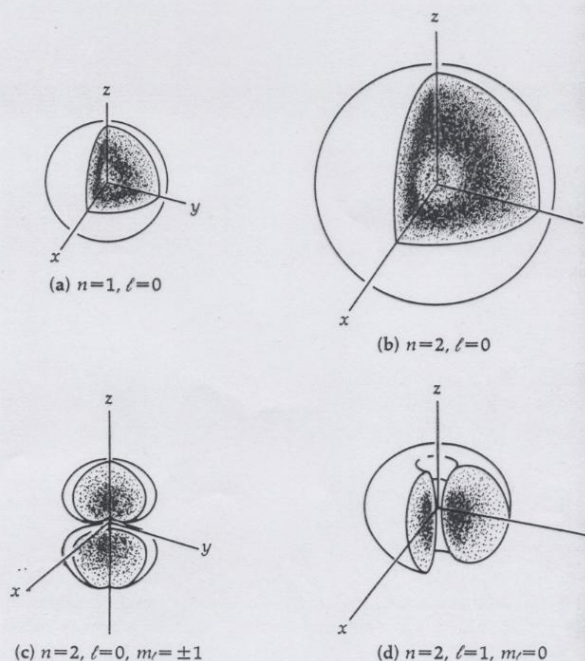


FIGURE 44-9

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.

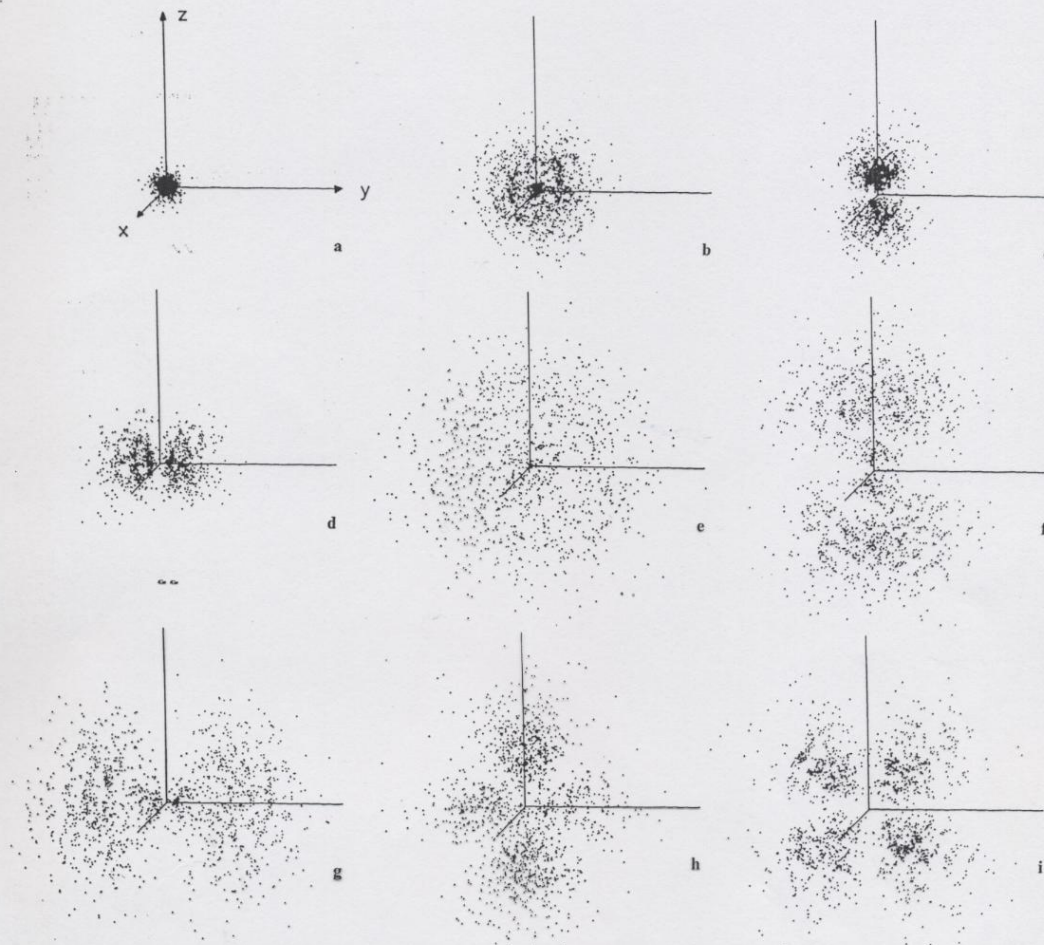


Abb. 10.4a-i. Die Dichteverteilung (= Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$) des Elektrons im H-Atom, dargestellt durch verschieden starke Punktierung (nach H. Ohno). Hierbei liegen die folgenden Wellenfunktionen zugrunde:

a) (10.82), $n=1$, $l=0$, $m=0$

b) (10.82), $n=2$, $l=0$, $m=0$

c) (10.82), $n=2$, $l=1$, $m=0$

d) die Linearkombination $(\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}) \frac{i}{\sqrt{2}}$

e) (10.82), $n=3$, $l=0$, $m=0$

f) $\psi_{3,1,0}$

g) die Linearkombination $(\psi_{3,1,1} + \psi_{3,1,-1}) \frac{i}{\sqrt{2}}$

h) $\psi_{3,2,0}$

i) die Linearkombination $(\psi_{3,2,1} + \psi_{3,2,-1}) \frac{i}{\sqrt{2}}$

Die genannten Linearkombinationen sind ebenfalls Lösungen der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffproblems mit den Energien E_n , sie sind jedoch nicht mehr Eigenfunktionen zu l_z .

Ergebnis: unabhängig von $V(r)$
 mit als Voraussetzung:

- Wellen
- Quadratintegrierbar
- Eindeutigkeit
- Kugelsymmetrie.

7.2 Energiezustände des Wasserstoffatoms

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_n + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) u = 0$$

Ausatz: $u_n(r) = r^{l+1} \cdot e^{-r/a_0 n} G_l(r)$

[wobei $a_0 = \frac{\hbar^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{e^2 m}$ Bohrscher Radius]

G Polynom mit n Elementen

Für $n \rightarrow \infty$: $\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_n \cdot u = 0$

$\Rightarrow u(r) = A \cdot e^{-r/a_0 n}$

$$E_n = - \frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

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

$$\Rightarrow u(r) = B \cdot r^{l+1}$$

Generell:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} \left(\frac{r}{n \cdot a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{n \cdot a_0}\right)^l \cdot e^{-\frac{r}{n \cdot a_0}} \cdot \sum_{m=0}^{2l+1} \left(\frac{r}{n \cdot a_0}\right)^m$$

Zugeordnete Laguerre-Polynome

Zusammenfassung:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

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

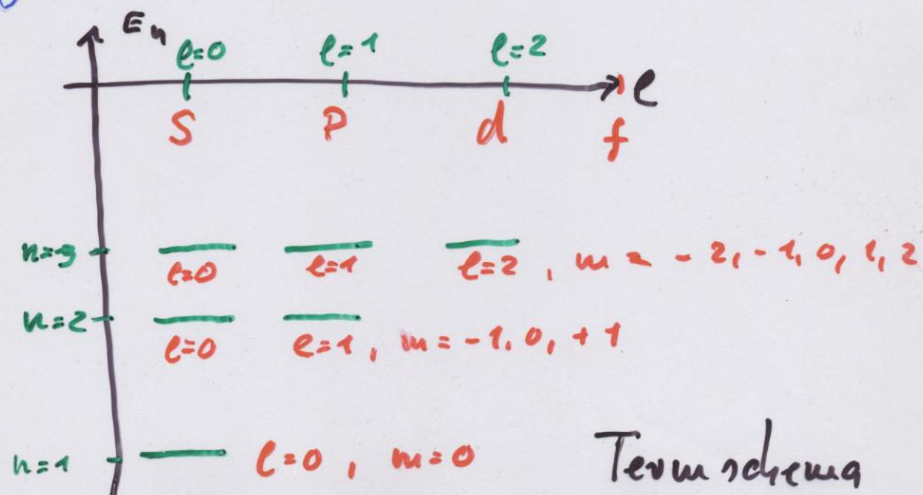
$$\ell = 0, 1, \dots, n-1$$

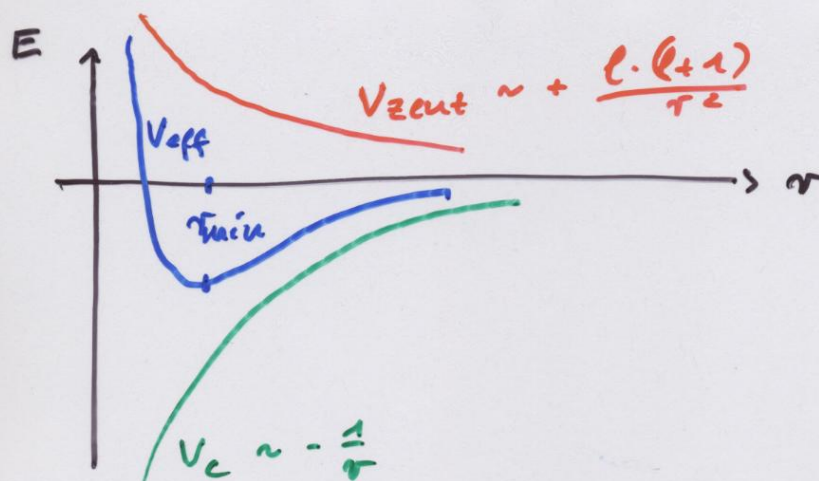
$$m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, 1, \dots, +\ell$$

Zu jeder Hauptquantenzahl n gibt es
 $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$ Wellenfunktionen
 $\ell=0$

$$E_n = - \frac{m e^4}{2 \hbar^2 (4 \pi \epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad : \text{für } n^2 \text{ verschiedene Zustände!}$$

$\hat{=}$ System ist entartet.





$$r_{min} = l(l+1) \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{e^2 m}$$

7.3. Bahn- und Spin-Magnetismus

7.3.1 klassisch

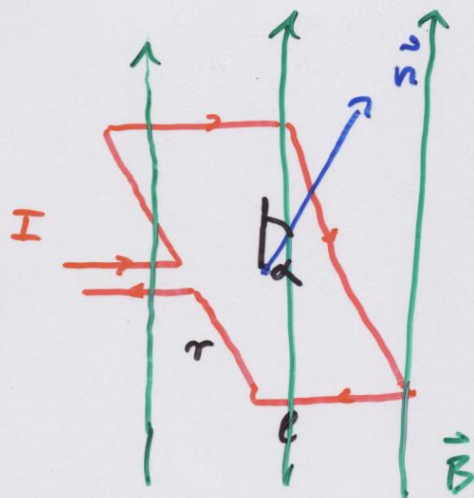
Elektron auf Kreisbahn:

Kreisstrom $\Rightarrow$ Magn. Moment

a) Magnet. Moment

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

($\vec{\mu} = \frac{1}{c} I A \vec{n}$ im Gaußschen System)
 $\uparrow$ Flächennormal



$$A = 2\pi \cdot l$$

(i) Schleife erhält Drehmoment :

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

Für $\alpha = 90^\circ$:

$$D = 2\pi l \cdot B \cdot \frac{qv}{c} = A \cdot I \cdot B$$

$$= \mu \cdot B$$

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

(ii) Energie :

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

$$= \vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

* 1 Elektron im Atom

$$I = \frac{q}{T} = -\frac{e\omega}{2\pi}$$

$$\mu = A \cdot I = -\frac{e\omega}{2\pi} A$$

$\downarrow$
 $\frac{1}{2} \omega^2$

$$l = m \cdot v \cdot r = m \omega r^2$$

$$\Rightarrow \mu = -\frac{1}{2} e \omega r^2 \quad \boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{l}}$$

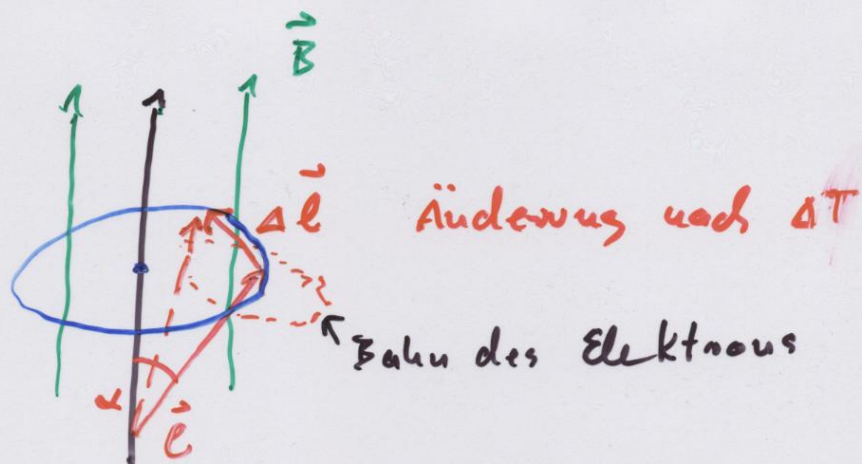
$$\mu_B = \frac{e}{2m} \hbar = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$$
$$= 0,58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$$

Bohrsches Magneton

b) Präzession im Magnetfeld

Drehmoment $\Rightarrow$ Präzession (Analog zum Kreis)

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



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

$$\Rightarrow \frac{dl}{dt} = l \cdot \omega_L \sin \alpha$$

$$= \mu \cdot B \cdot \sin \alpha$$

$$\Rightarrow \omega_L = \frac{\mu B}{\hbar} \quad \text{Larmorfrequenz}$$

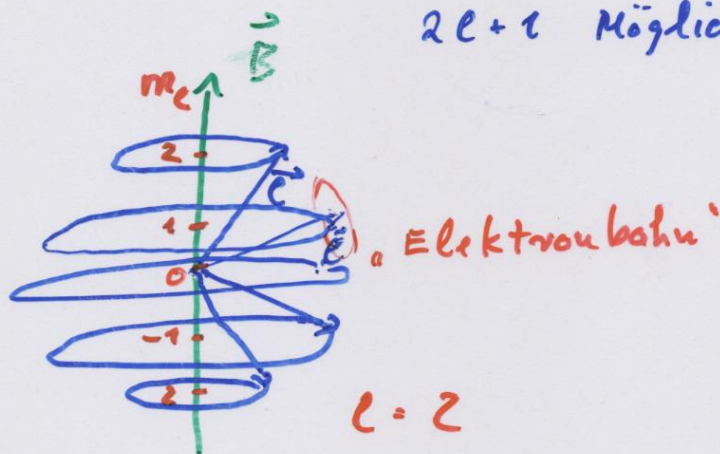
$$= \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot B \quad (QM)$$

Drehimpulsquantelung =

diskrete Werte l, l_z

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

$2l+1$ Möglichkeiten



Messbar:

Präzession: Komponenten
in x, y -Richtung mitteln
sich weg. Nur Komponente
 $\parallel B$ ist messbar.

Änderung der Drehimpulsrichtung $\parallel \vec{B}$:

$$\text{Für } \Delta m_l = 1 :$$

$$\begin{aligned} \Delta V_{\text{mag}} &= -\Delta \mu_z \cdot B \\ &= -\mu_B \cdot \Delta m_l \cdot B \\ &= -\mu_B \cdot B \hat{=} -\hbar \omega_L \end{aligned}$$