

bisher

in Relativkoordinaten

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbb{R}^3} + V(r) - E \right) \psi(r) = 0$$

Separation

$$\psi(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

"kemen" wir längst

Ausatz

$$u_{nl}(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^{l+1} w(\rho)$$

mit  $\rho := 2\kappa r$

$$\kappa := \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}$$

$$\gamma := \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e_0^2}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{2\kappa}$$

Potenzreihe für  $w(\rho) \rightarrow$  Abbruchbedingung

$$\boxed{\rho_0 + l + 1 - \gamma = 0}$$

$\geq 0$ , Koeffizient des höchsten Potenzreihengliedes

$\Rightarrow \gamma = \rho_0 + l + 1$  auch ganzzahlig

Hier detailliert weiter

$$E = - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = - \frac{m e^4}{2 \hbar^2 (4\pi \epsilon_0)^2} \frac{1}{\gamma^2} = - \frac{R_H}{n^2} =: E_n$$

mit  $R_H = \frac{m e^4}{2 \hbar^2 (4\pi \epsilon_0)^2} \approx 13,6 \text{ eV}$

↑  
Rydberg-Energie

und  $n := \gamma = 1, 2, 3, \dots$  "Hauptquantenzahl"

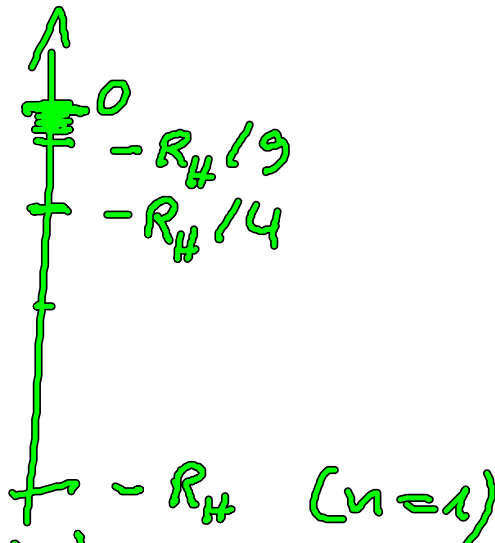
Zusammenfassung

- Die Energien hängen nur von der Hauptquantenzahl  $n$  ab

$$E_n = - \frac{R_H}{n^2} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

-  $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$

$\Rightarrow$  Energie-Diskretisierung für gebundene Zustände. Abstände der Niveaus werden mit wachsendem  $n$  immer kleiner.



Diskretisierung ist ein Quanteneffekt



$$l_0 + l + 1 - n = 0$$

$$\Rightarrow l = n - 1 - l_0 \quad \leftarrow \geq 0$$

außerdem:

$$l \leq n - 1$$

Zu jedem  $l$  durchläuft die "magnetische Quantenzahl"  $m$  die Werte

$$m = -l, \dots, l$$

$\Rightarrow$  gesamt Entartungsgrad des Niveaus zu festem  $n$

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \equiv g_n$$

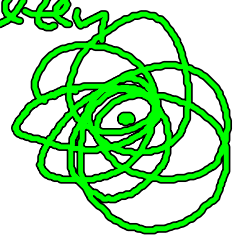
### Bemerkung

i) Die Entartung bezügl.  $m$  ist typisch für jedes Zentralpotential

Die Entartung bezügl.  $l$  ist eine Besonderheit des Coulomb-Potentials  $V(r) \sim \frac{1}{r}$

$\Rightarrow$  Lenz'scher Vektor ist erhalten

Klassisch:  anstatt



ii) Bisher nicht beachtet: Spin  $s = \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}$$

(Theorie dazu später)

$\Rightarrow$  Voller Entastungsgrad:  $g_n = 2 \sqrt{l^2}$

## Termschema des H-Atoms

$n$	$l$	$m$	$g_n$	
1	0	0	1	"K-Schale"
2	0 (s)	0	4	'L-Schale'
	1 (p)	0, $\pm 1$		
3	0 (s)	0	9	'M-Schale'
	1 (p)	0, $\pm 1$		
	2 (d)	0, $\pm 1, \pm 2$		

ohne Spin

Bem

(Mit relativistischer Quantenmechanik)

weitere Aufspaltung durch Spin-Bahn-WK

$\Rightarrow$  Feinstruktur

und WK zwischen Elektronen und Kernspin

$\Rightarrow$  Hyperfeinstruktur

Eigenfunktionen zu den gebundenen

Zuständen

Wir hatten

$$\psi(r) = \psi_{nlm}(r) \approx \underbrace{\frac{u_{nl}(r)}{r}}_{R_{nl}(r)} Y_{lm}(\omega, \varphi)$$

mit  $u_{nl}(r) = e^{-\kappa r} r^{l+1} \tilde{w}_{nl}(r)$

$$\tilde{w}_{nl}(s) = \sum_{\mu=0}^{\mu_0} a_{\mu} s^{\mu}$$
$$s = 2\kappa r$$

$$w_{nl}(s) = D_{nl} L_{n+l}^{2l+1}(s)$$

↑ "zugeordnete Laguerre-Polynome"

↑ Normierungsfaktor

## Eigenschaften

- (i)  $R_{nl}(r)$  hat  $n-1-l$  Nullstellen ("Knoten") für  $r > 0$
- (ii) Speziell Grundzustandsfunktion

$$n=1 \quad l=0 \Rightarrow R_{10}(r) \text{ hat keine Knoten}$$
$$\text{und } \psi_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$\psi_{100}(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$\text{mit } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m e^2} \approx 0,529 \text{ \AA}$$

(Bohrscher Radius)

iii) Speziell  $l=0$  ("s-Zustände")

$$\psi_{n00}(r) \sim e^{-\frac{r}{a_0 n}} L_n^1(2r/a_0 n)$$

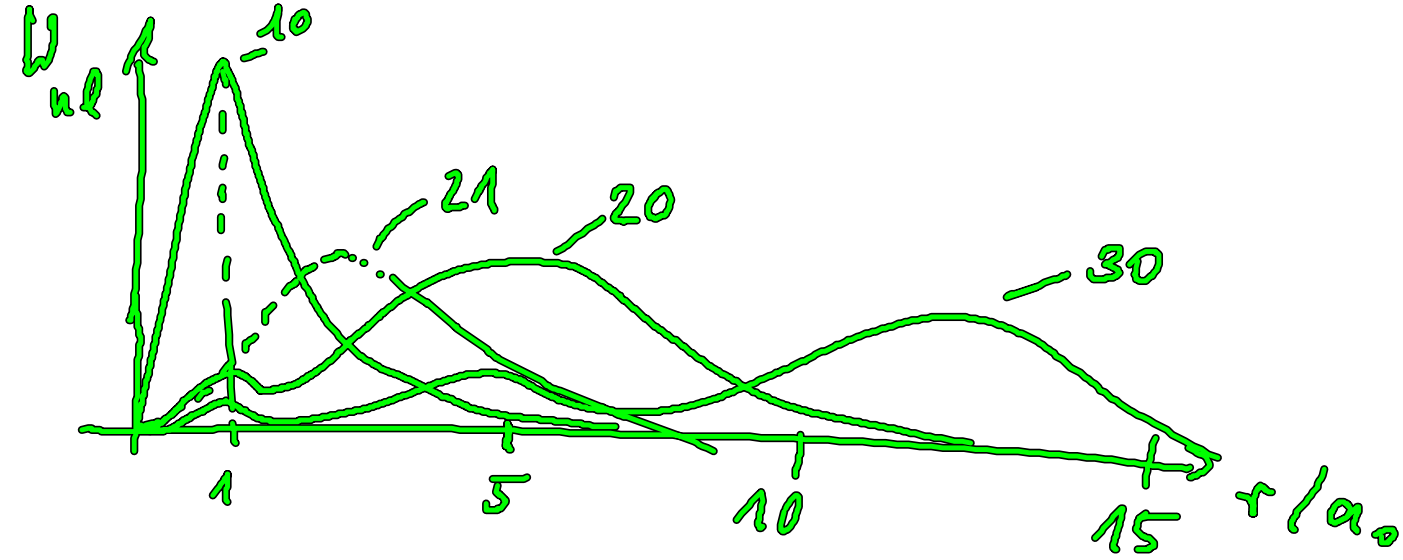
alle diese Funktionen sind  $\neq 0$  für  $r \rightarrow 0$   
 $\Rightarrow$  s-Zustände haben endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern

iv) Speziell  $l=n-1$  (Zustände mit maximalen Drehimpuls)

$$\psi_{n,n-1,m} \sim r^{n-1} e^{-\frac{r}{a_0 n}} \Rightarrow \text{keine Knoten}$$

Häufig betrachtet man die "radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte"

$$\begin{aligned} W_{nl}(r) dr &= r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\psi_{nlm}(r)|^2 \\ &= r^2 |R_{nl}(r)|^2 dr \quad \leftarrow \text{da } \psi_{nlm} \text{ normiert} \\ &= |u_{nl}(r)|^2 dr \end{aligned}$$



## Periodensystem

	$l=0$ (s)	$l=1$ (p)	$l=2$ (d)	$l=3$ (f)
$n=1$	H He			
$n=2$	Li Be	B ... Ne		
$n=3$	Na Mg	Al ... Ar	(lens)	
4	K	Sc	Ti	Zn
5				(lens)
6		Ce...		
7				

Kern instabil  
(sch)

- Späterstens ab Sc hängt Energie entscheidend von  $l$  ab
- Aber nicht so einfach, da Vielteilchen-



systeme