

## English Summary:

### 3.4 Hydrogen atom

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad , \quad \psi_{nlm}(r) \sim (2\kappa r)^l e^{-\kappa r} w(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\kappa := \frac{1}{a_0} \sqrt{2m|E|}$$

$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$$

$$\left. \begin{array}{l} n=1,2,3,\dots \\ l=0,1,2,\dots,n-1 \\ m=-l, \dots, +l \end{array} \right\} n^2\text{-fold degeneracy}$$

n	l	m	Energie - Entartung
1	0 (s)	0	1-fach K-Schale
2	0 (s) 1 (p)	0, ±1	4-fach L-Schale
3	0 (s) 1 (p) 2 (d)	0, ±1 0, ±1, ±2	9-fach M-Schale
4	0 (s) 1 (p) 2 (d) 3 (f)	0, ±1 0, ±1, ±2 0, ±1, ±2, ±3	16-fach N-Schale

Eigenfunktionen :  $\rho := 2\kappa r$

$w(\rho)$  hängen mit den Laguerre'schen Polynomen zusammen.

Erzeugende Funktion der Laguerre-Polynome  $L_q(x)$  :

$$F(x, s) := \frac{1}{1-s} \exp\left\{-x \frac{s}{1-s}\right\} = \sum_{q=0}^{\infty} L_q(x) \frac{s^q}{q!}$$

$$\text{mit } L_q := \left( \frac{\partial^q F}{\partial s^q} \right)_{s=0} \stackrel{\text{ohne Beweis}}{=} e^x \frac{d^q}{dx^q} (e^{-x} x^q)$$

(Polynom von Grad q)

Zugeordnete Laguerre-Polynome  $L_q^P(x) := \frac{d^q}{dx^q} L_q(x)$

(Polynome vom Grad  $q-p$  mit  $q-p$  verschiedenen positiven Nullstellen)  
 erfüllen die Dgl.

$$x L_q^p + \underbrace{(p+1-x)}_{2(l+1)} L_q^{p'} + \underbrace{(q-p)}_{n-l-1} L_q^p = 0$$

mit radiale Schrödingergl.  $\rightarrow$

Also  $w_{nl}(r) = A L_{n+l}^{2l+1}(r)$

$$p = 2l+1$$

$$q = p + n - l - 1 = l + n$$

Normierte Eigenfunktionen:

$$\psi_{nlm}(r) = \underbrace{\left[ \frac{(n-l-1)! (2x)^3}{2^n ((n+l)!)^3} \right]^{1/2}}_{n-l-1 \text{ radiale Knoten}} (2xr)^l e^{-\kappa r} L_{n+l}^{2l+1}(2xr) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$l=0$ : kugelsymm. Eigenfkt. mit  $n-1$  Knotenflächen

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

mit Bohr'schem Radius  $a_0 := \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}$

Es gilt:  $\kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = \frac{1}{a_0 n}$

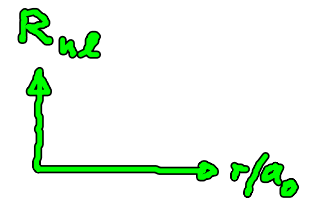
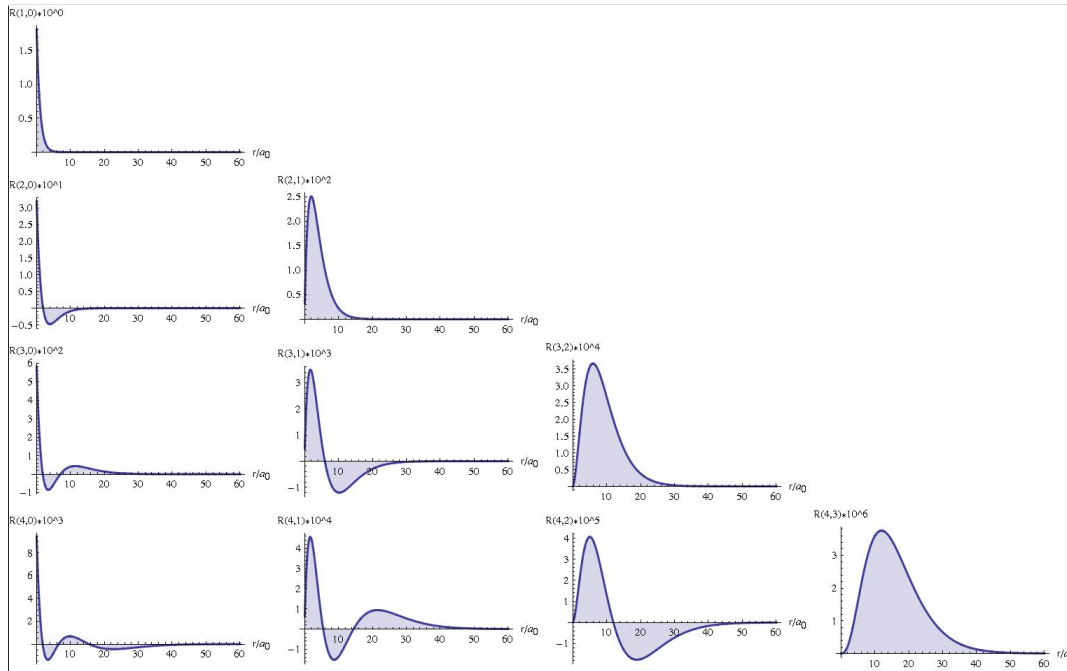
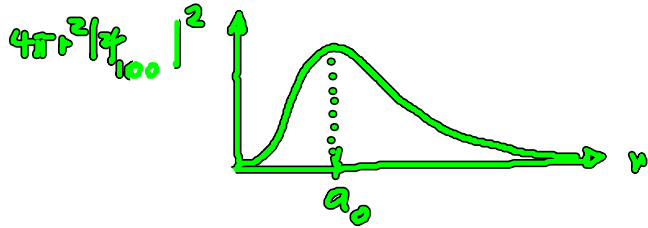
$$\psi_{n00} \sim e^{-\frac{r}{a_0 n}} L_n^1(2xr)$$

$l=n-1$ : Zustände mit maximalem Bahndrehimpuls  
 ( $\cong$  klass. Kreisbahn)

$$\psi_{n,n-1,m} \sim r^{n-1} e^{-\frac{r}{a_0 n}} \begin{matrix} \rightarrow 0, l \neq 0 \\ \rightarrow 0 \end{matrix}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf Kugelchale  
 mit Radius  $r$  und Breite  $dr$ :

$$\int d\Omega r^2 |\psi_{nlm}|^2 dr \quad (Y_l^m \text{ normiert})$$



s. Webseite DWL:  
Hydrogen orbitals  
 (Mathematik)  
 Visualisierungen

H-Orbitale  $w_{nl}(r) \sim L_{n+l}^{2l+1}(2r/a_0)$

### 3.5 Magnetisches Moment und Zeeman-Effekt

Hamilton-Op. mit äußeren Magnetfeld

$$H = \frac{1}{2m_0} (\underline{p} - e\underline{A})^2 + V(r) \quad (e < 0 \text{ für Elektron!})$$

kugelsymm.

$$= \frac{1}{2m_0} (\underbrace{p^2}_{\text{Coulomb-Eichung}} - 2e\underline{A} \cdot \underline{p} + e^2 A^2) + V(r)$$

→ für Atome vernachlässigbar,  
 wenn  $\langle L_z \rangle \neq 0$  für  $B < 10^5 \text{ G}$

$$\approx \frac{1}{2m_0} (\underline{p}^2 - 2e\underline{A} \cdot \underline{p}) + V(r)$$

↓  
 diamagnetisch

homogenes Magnetfeld:  $\underline{A} = \frac{1}{2} (\underline{B} \times \underline{r})$

$$(\text{wegen } \underline{B} = \nabla \times \underline{A} = \underbrace{\frac{1}{2} \underline{B} (\nabla \cdot \underline{r})}_{\underline{B}} - \underbrace{\frac{1}{2} (\underline{B} \cdot \nabla) \underline{r}}_{\underline{B}} = \underline{B})$$

Somit

$$\frac{\hbar}{i} (\underline{A} \cdot \underline{\nabla} \psi) = \frac{\hbar}{2i} (\underline{B} \times \underline{r}) \cdot \underline{\nabla} \psi = \frac{\hbar}{2i} \underline{B} \cdot (\underline{r} \times \underline{\nabla}) \psi = \frac{1}{2} (\underline{B} \cdot \underline{L}) \psi$$

Annahme:  $\underline{B} = (0, 0, B) \Rightarrow \underline{B} \cdot \underline{L} = B L_3$

Schrodinger-Gl.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi + \left( V - E - \underbrace{\frac{e}{2m_0} B L_3}_{=\hbar m \psi} \right) \psi = 0$$

(Drehimpuls eigenzustände)

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi + \left( V(r) - E - \underbrace{\frac{e}{2m_0} \hbar m B}_{\mu_B \text{ magn. Moment}} \right) \psi = 0$$

(klass.:  $\underline{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \underline{B}} = \frac{e}{2m_0} \underline{L}$ )

↑  
kinet. Drehimpuls

Normaler Zeeman-Effekt:

Atom in homog. Magnetfeld:

$$\underbrace{(H_0 - \mu_B B - E)}_{\text{Hamilton-Op. ohne B-Feld}} \psi = 0, \quad \mu_B = \frac{e \hbar}{2m_0} m$$

-  $\mu_B$  Bohr'sches Magneton  
( $e < 0$ )

$$H_0 \psi_{nlm} = E_{nl} \psi_{nlm}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = E_{nl} - \frac{\hbar e B}{2m_0} m}$$

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

Aufhebung der  $m$ -Entartung

→ Aufspaltung  
in  $(2l+1)$  Niveaus  
(Multipletts)

$m =$  magnet. Quantenzahl

NB : anomaler Zeeman-Effekt  $\rightarrow$  H-Atom  
(reines  $\frac{1}{r}$ -Pot.:  
l-Entartung  $E_n$ )

Atome mit ungerader Kernladungszahl:

Spin-Bahn-Zustände  $\rightarrow$  Kap. 5