

English Summary:

3.4 Hydrogen atom

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

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

$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$	$n = 1, 2, 3, \dots$
	$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
	$m = -l, \dots, +l$

} n^2 -fold degeneracy

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

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 vom Grad q)

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

(Polynome vom Grad $q-p$ mit $q-p$ verschiedenen positiven Nullstellen)

erfüllen die Dgl.

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

vgl. radiale Schrödingergl.

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

$$p = 2l+1$$

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

Normierte Eigenfunktionen:

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

$l=0$: 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: $\kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = \frac{1}{a_0 n}$

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

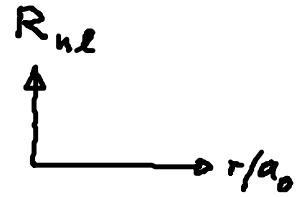
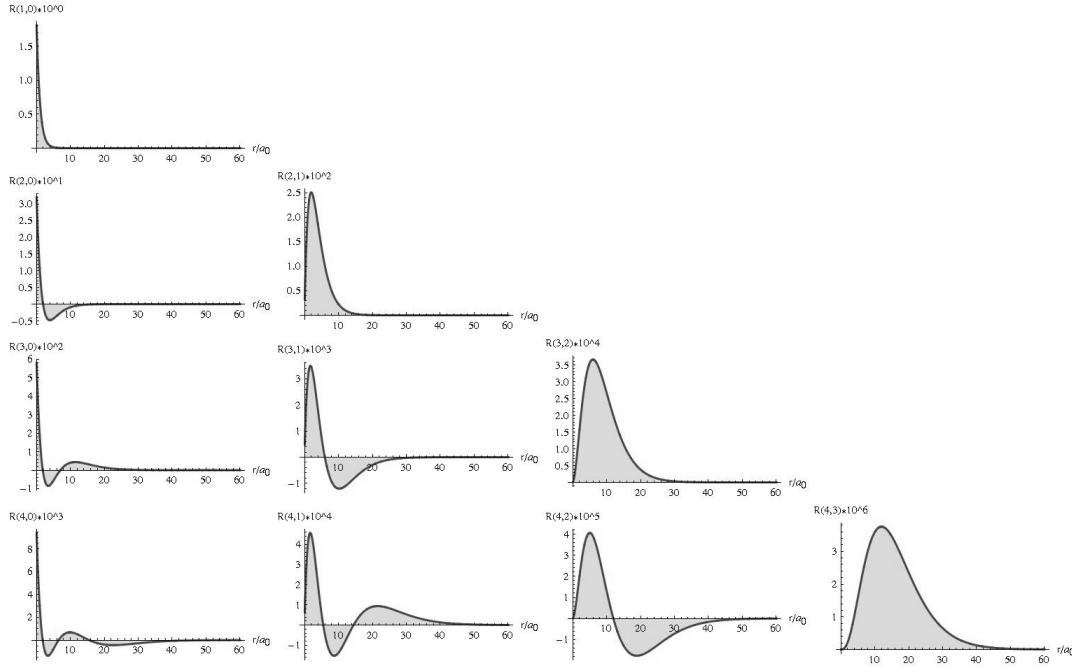
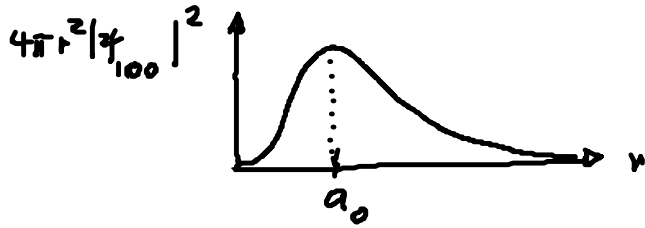
$l=n-1$: Zustände mit maximalem Bahndrehimpuls ($\hat{=}$ klass. Kreisbahn)

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

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 OWL:
Hydrogen orbitals
 (Mathematica)
 Visualisierungen

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

3.5 Magnetisches Moment und Zeeman-Effekt

Hamilton-Op. mit äußerem 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 $B < 10^5 \text{ G}$

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

↓
 Diamagnetismus

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

(wegen $\underline{B} = \nabla \times \underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} (\underbrace{\nabla \cdot \underline{r}}_3) - \frac{1}{2} (\underbrace{\underline{B} \cdot \nabla}_{\underline{B}}) \underline{r} = \underline{B}$)

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

Schrödinger-Gl.:

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

(Drehimpuls eigenzustände)

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

μ_B magn. Moment

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

↑
kinet. Drehimpuls

Normaler Zeeman-Effekt:

Atom im homog. Magnetfeld:

$$\left(H_0 - \mu_B B - E \right) \psi = 0, \quad \mu_B = \frac{e \hbar}{2m_0} m$$

Hamilton-Op.
ohne B-Feld

$-\mu_B$ 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