

bisher

in Relativkoordinaten

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

Separation

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

"kernen" wir längst

Ansatz

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

mit $\rho := 2\kappa r$

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

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

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

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

≥ 0 , Koeffizient des höchsten Potenzreihengliedes

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

hier detailliert weiter

$$E = - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = - \frac{m e_0^4}{2 \hbar^2 (4\pi \epsilon_0)^2} \frac{1}{\gamma^2} = - \frac{R_H}{n^2} =: E_n$$

mit $R_H = \frac{m e_0^4}{2 \hbar^2 (4\pi \epsilon_0)^2} \approx 13,6 \text{ eV}$

↑
Rydberg-Energie

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

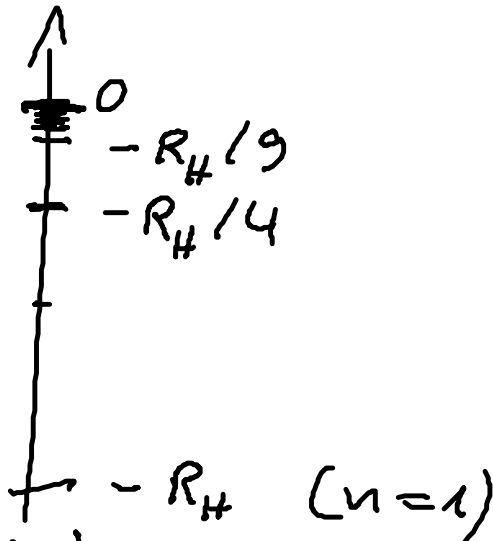
Zusammenfassung

- 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

1885 Johann Jakob Balmer

$$\lambda \sim \frac{m^2}{m^2 - 2^2} \quad \text{d.h.} \quad \nu \sim \frac{m^2 - 2^2}{m^2} \sim \frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \sim E_2 - E_m$$

↑ Lichtwellenlängen ↑ Frequenz

1913 Niels Bohr

- postuliert einfach diskrete Bahnen, auf denen die Elektronen keine Energie abstrahlen
- berechnet Radius des Wasserstoffatoms zu $a_0 = 0,55 \text{ \AA}$

1925 Heisenbergsche Matrizenmechanik

1926 Schrödingergleichung

Zerstückung des Energieniveaus

Zu jedem n durchläuft die "Bahndrehimpuls-Quantenzahl" l die Werte

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

↙ obere Schranke, da

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

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

außerdem:

$$l \leq n - 1$$

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

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

\Rightarrow gesamtter 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 Volles Entastungsgrad: $g_n = 2 \sqrt{l}$

Termenschema des H-Atoms

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

Bem

(Mit relativistischer Quantenmechanik)

weitere Aufspaltung durch Spin-Bahn-WW

\Rightarrow Feinstruktur

und WW zwischen Elektronen und Kernspins

\Rightarrow Hyperfeinstruktur

Eigenfunktionen zu den gebundenen

Zuständen

Wir hatten

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

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

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

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

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

(Bohrscher Radius)

iii) Speziell $l=0$ ("s-Zustände")

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

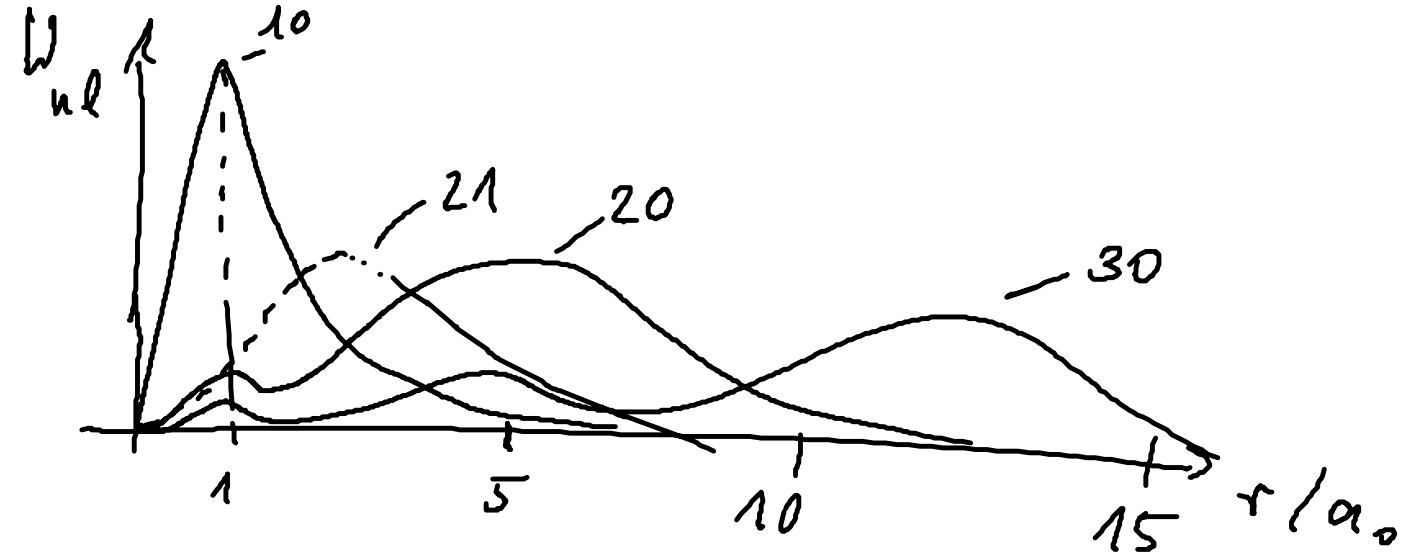
alle diese Funktionen sind $\neq 0$ für $r \rightarrow 0$
 \Rightarrow s-Zustände haben endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern

iv) Speziell $l=n-1$ (Zustände mit maximalem 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"

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



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	(l=2)	
4	K	Sc	Ti	Zn
5			(l=2)	
6		Ce...		
7				

Kern instabil
(sehr)

- Spätestens ab Sc hängt Energie entscheidend von l ab
- Alles nicht so einfach, da Vielteilchen-

systeme