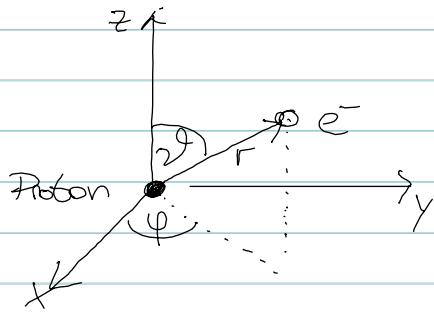


Vorlesung 29.11.2013

5. Elektronische Struktur von Atomen

5.1 H-Atom



Def. Energie: H-Atom, H-ähnliche Ionen:
 $\text{He}^+, \text{Li}^{2+}$

$$\left| V = -\frac{Ze^2}{r} \right| \text{ Coulomb-Potential}$$

Hamilton-Op.: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$

Schrödingergl.: $\hat{H}\psi(r, \vartheta, \varphi) = E\psi(r, \vartheta, \varphi)$

Ansatz für die WF: $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$

zentral symm. Problem \rightarrow Polarkoord.

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0$$

Sp Separation in drei Gleichungen

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m^2 \quad (1)$$

$$\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin^2 \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \Theta + \lambda \Theta = 0 \quad (2)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R = 0 \quad (3)$$

mit den Konstanten μ und $\lambda = l(l+1)$

l = Drehimpulsquantenzahl (\rightarrow siehe Starrer Rotator)
 m = magnetische Quantenzahl (statt „ j “ jetzt „ l “)

Winkelabhängiger Anteil der WF

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \Theta(\vartheta) \phi(\varphi)$$

$$\Theta(\vartheta) \phi(\varphi) = \underbrace{\Theta(l, m)}_{\text{zugeordnete Legendre-Polynome}} \cdot \phi(m) = Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 \Theta(\vartheta) \phi(\varphi) = \underbrace{\hbar^2 l(l+1)}_{\text{Eigenwert von Op. } \hat{L}^2} \Theta(\vartheta) \phi(\varphi)$$

l = Drehimpuls q. z.

\hookrightarrow räumliche Verteilung von e^-

$l=0$ s-Zustand (Orbital)

$l=1$ p-Zustand

$l=2$ d-Zustand

$l=3$ f-Zustand

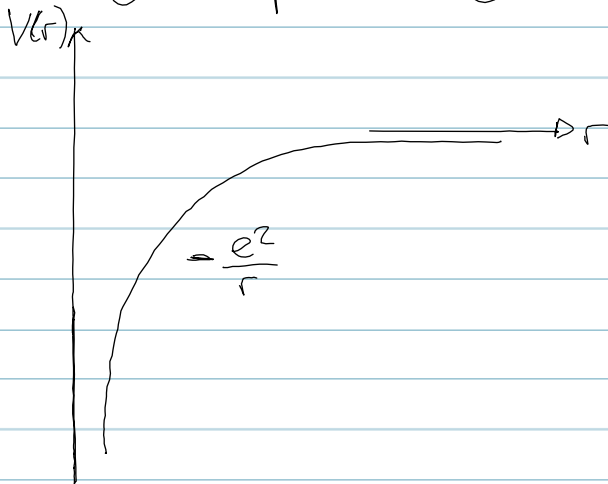
\vdots \vdots

Radialer Anteil des WF

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{ze^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Energienullpunkt: abgetrenntes e^-



Lsg. für positive Energien:

↳ freies e^- für $E > 0$

↳ kontinuierl. Spektrum: freies e^- kann beliebige E_{kin} annehmen

Lsg. für negative Energien:

↳ gebundenes e^-

Glb (3) umformen → zugeordnete Laguerre-Gleichung

Randbed.: eindeutig, stetig, integrierbar

↳ diskrete Energieniveaus (Bindungszustände)