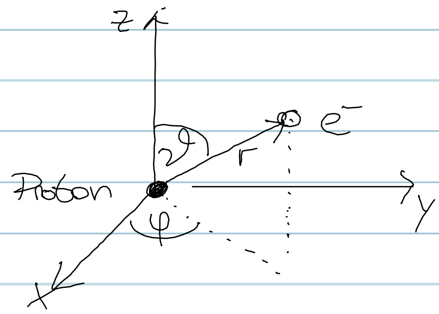
To hear and view this Pencast PDF on your computer,
click here to get the latest version of Adobe® Reader®

Vorlesung 29.11.2013

5. Elektronische Struktur von Atomen

5.1 H-Atom



Pot. Energie: H-Atom, H-ähnliche Ionen: He^{+}, Li^{2+}

$$\boxed{V = -\frac{Ze^2}{r}}$$ 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: $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\cdot\Theta(\vartheta)\cdot\Phi(\varphi)$

zentralsymm. Problem $\rightarrow$ Polarkoord.

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

~~Sp~~ Separation in drei Gleichungen

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = m^2 \qquad (1)$$

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

To hear and view this Pencast PDF on your computer,
click here to get the latest version of Adobe® Reader®.

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

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

l = Drehimpulsquantenzahl
m = magnetische Quantenzahl
(→ siehe Starrer Rotator) statt „J" jetzt „l")

Winkelabhängiger Anteil der WF

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

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

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

l = Drehimpuls q.z.

↳ räumliche Verteilung von e^-

$l=0$ s-Zustand (Orbital)
$l=1$ p-Zustand
$l=2$ d-Zustand
$l=3$ f-Zustand
⋮ ⋮

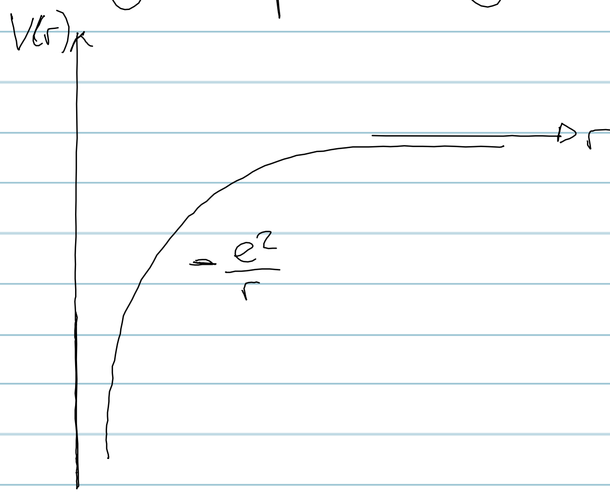
To hear and view this Pencast PDF on your computer,
click here to get the latest version of Adobe® Reader®

Radialer Anteil der WF

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{R(r)}\,\Theta(\vartheta)\,\phi(\varphi)$$

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

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^-

Gl. (3) umformen → zugeordnete Laguerre-Gleichung

Randbed.: eindeutig, stetig, integrierbar

↳ diskrete Energieniveaus (Bindungszustände)