

10.4.2 Bahndrehimpuls des Elektrons:

$$|\vec{l}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad \text{mit } l = 0, 1, \dots, n-1$$

Einheit des Drehimpuls:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

- Der Bahndrehimpuls des Elektrons ist quantisiert.
- Der Gesamtbahndrehimpuls ist eine Erhaltungsgrösse (genau wie in der klassischen Mechanik).
- Die Bahndrehimpuls-Quantenzahl l bestimmt den Betrag des Bahndrehimpulsvektors l des Elektrons.
- Die Richtung des Bahndrehimpulsvektors l wird durch die magnetische Quantenzahl m_l bestimmt.
- Bahnanteil der kinetischen Energie:

$$E_{\text{kin } \phi, \theta} = \frac{1}{2} m v^2 \quad \text{mit } |\vec{q}| = m v r$$

$$\approx \frac{|\vec{l}|^2}{2 m r^2}$$

$$\frac{|\vec{l}|^2}{2 m r^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2 m r^2}$$

10.4.3 Benennung der Zustände mit verschiedenem Bahndrehimpuls

$l =$	0	1	2	3	4	5	6	...
	s	p	d	f	g	h	i	...

sharp principal diffuse fundamental ...

historische Benennung der verschiedenen Spektralserien

- Auflistung elektronischer Zustände mit ihrer Hauptquantenzahl n und der Bahndrehimpulsquantenzahl l

	$l=0$	1	2	3	4
$n=1$	1s				
2	2s	2p			
3	3s	3p	3d		
4	4s	4p	4d	4f	
5	5s	5p	5d	5f	5g

- Diese Konvention für die Benennung von elektronischen Zuständen in Atomen ist in der Chemie und der Physik weit verbreitet.

10.4.4 Richtungs-Quantisierung:

Durch Quantenzahlen l und m_l vorgegebener Zusammenhang zwischen dem Betrag des Drehimpuls l und seiner z-Komponente l_z führt zur Quantisierung der erlaubten Richtungen des Drehimpulsvektors.

- l_z ist die Komponente des Drehimpulses l in Richtung der z-Achse

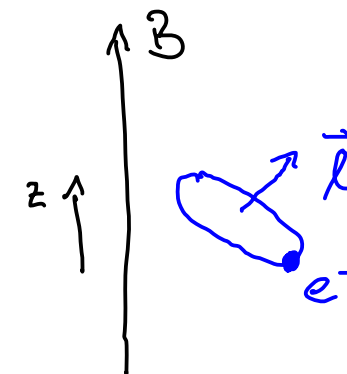
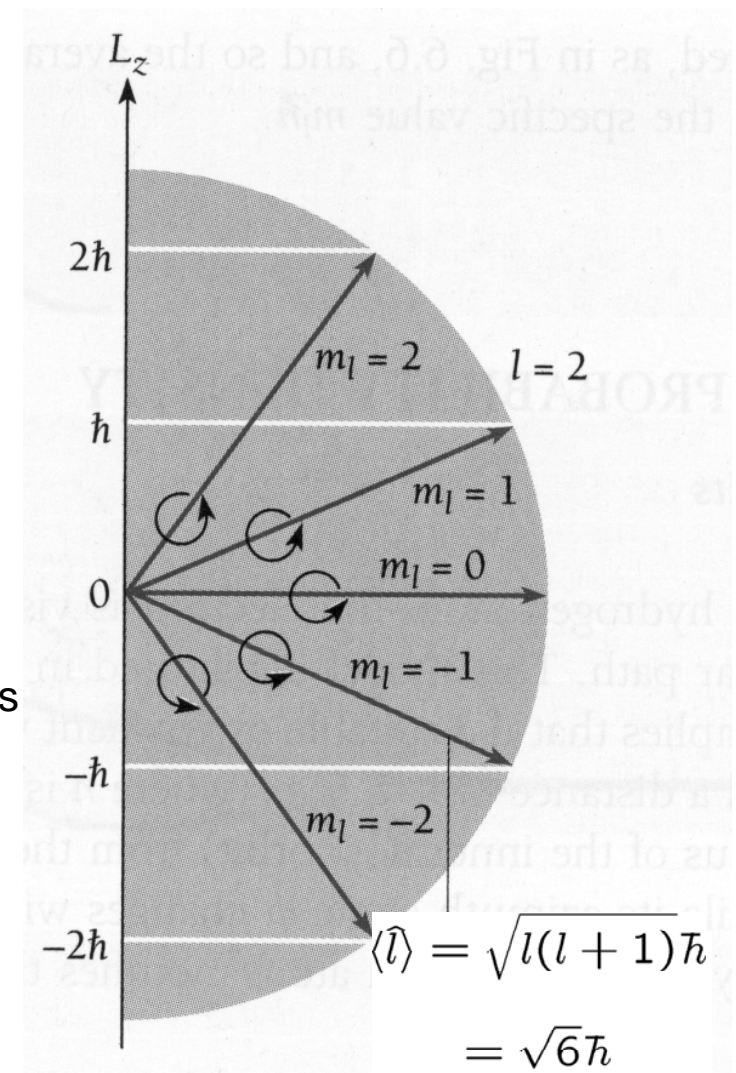
$$l_z = m_l \hbar$$

- mit magnetischer Quantenzahl: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

- Die Richtung dieser Quantisierungs-Achse kann durch die Richtung eines angelegten Magnetfelds B , z.B. in z-Richtung, festgelegt werden.

- die magnetische Quantenzahl m_l kann $2l + 1$ verschiedene Werte von $-l, \dots, 0, \dots, l$ annehmen

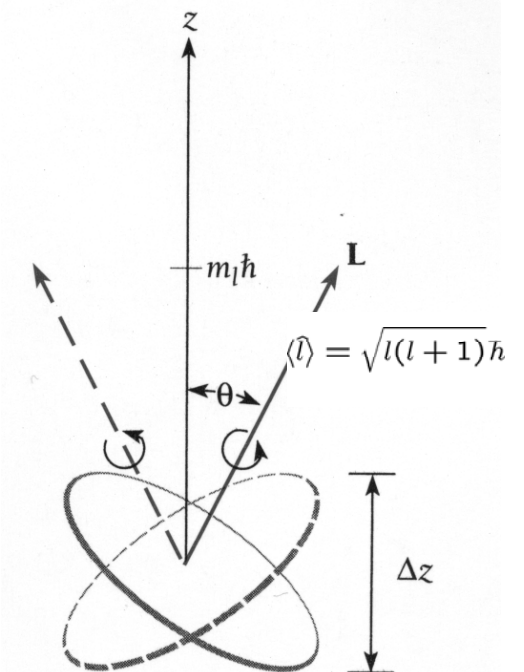
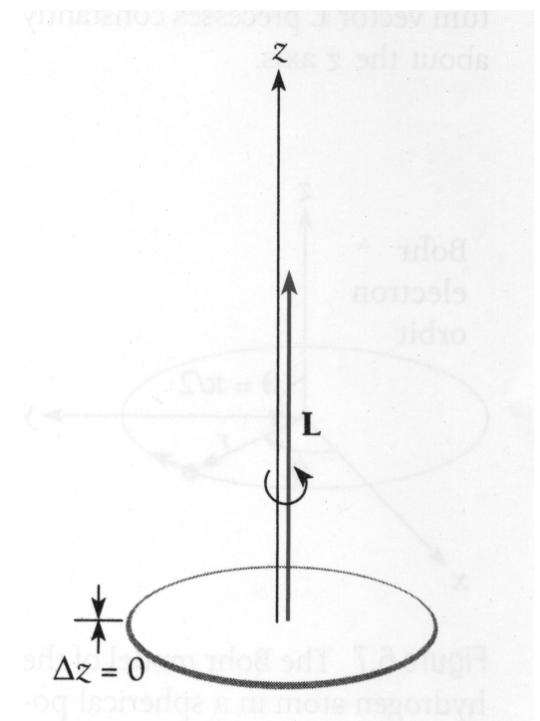
- l_z ist nie identisch zu l . Daher kann l nie in Richtung der Quantisierungs-Achse zeigen.



- Das magnetische Moment μ erzeugt durch die Bahnbewegung des Elektrons wechselwirkt mit extern angelegten Magnetfeldern B . Dieser Effekt wird der **Zeeman-Effekt** genannt.

10.4.5 Der Drehimpuls und die zugehörige Unschärfe-Relation

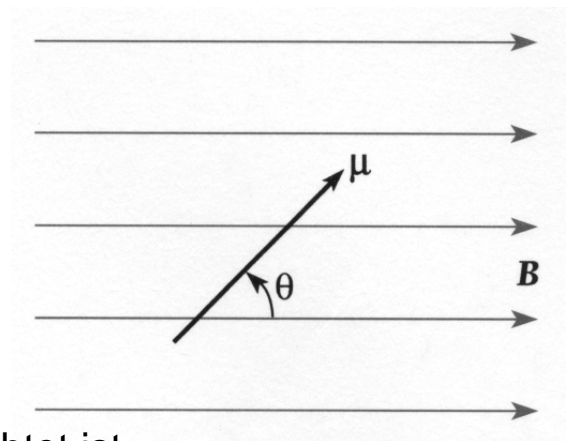
- der Drehimpuls ist nur in einer Raumrichtung quantisiert
- Wenn l perfekt entlang der Quantisierungs-Richtung ausgerichtet wäre, so würde sich das Elektron mit Sicherheit in der x - y Ebene bewegen. Die Unschärfe-Relation würde verlangen, dass die Impuls-Unschärfe Δp_z unendlich sei. Daher könnte das Elektron nicht an den Kern gebunden sein.
- Die Unschärfe-Relation verlangt, dass nicht alle Komponenten des Drehimpuls gleichzeitig mit Gewissheit bestimmt sind.
- Nur die Projektion l_z von l entlang der Quantisierungsachse z ist bestimmt. Die x - und y -Komponenten l_x und l_y des Drehimpulses bleiben ungewiss, so dass der Drehimpulsvektor l nur durch seinen Betrag $||l||$ und seine z -Komponente l_z bestimmt ist, und somit auf einem Konus liegen muss.
- Daher sind die Erwartungswerte (Mittelwerte) von l_x und l_y identisch 0, wohingegen der Erwartungswert von l_z durch die Quantenzahl m_l bestimmt ist.



10.5 Der Zeeman-Effekt

- betrachte die potentielle Energie U eines magnetischen Dipols μ in einem homogenen externen Magnetfeld \mathbf{B}

$$U = - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \theta$$



- Die minimale potentielle Energie $U = -\mu B$ tritt auf wenn μ parallel zu \mathbf{B} ausgerichtet ist.
- Die maximale Energie $U = +\mu B$ tritt auf wenn μ antiparallel zu \mathbf{B} ausgerichtet ist.

klassisches Modell

- in einen Ring mit der Querschnittsfläche A ruft der von einem einzelnen Elektron erzeugte Kreisstrom I ein magnetisches Moment μ parallel zu der Flächennormalen \mathbf{n} hervor

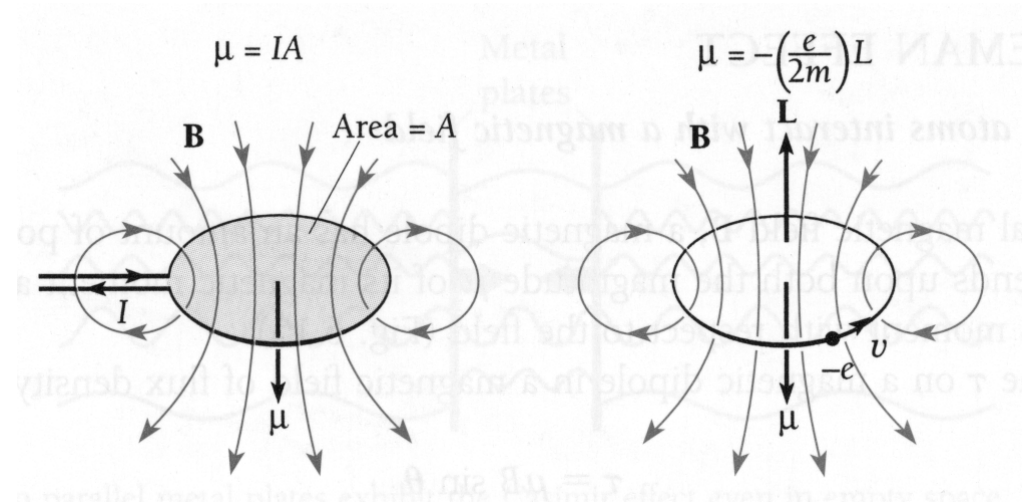
$$\vec{\mu} = I A \vec{n} = -e f \pi r^2 \vec{n}$$

- dabei ist f die Umlauffrequenz des Elektrons
- μ lässt sich durch den Drehimpuls L des Elektrons ausdrücken

$$\vec{L} = m v r \vec{n} = 2\pi m f r^2 \vec{n}$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

- daher folgt



- dabei wird das Verhältnis von magnetischem Moment μ zu Drehimpuls l das **gyromagnetische Verhältnis** oder auch der **g-Faktor** genannt:

$$\frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{l}|} = - \frac{e}{2m}$$

- daher ist die resultierende potentielle Energie U eines Elektrons mit Drehmoment l in einem externen Feld B durch den folgenden Ausdruck gegeben

$$U_m = \frac{e}{2m} l B \cos \theta$$

- dabei ist θ der Winkel zwischen l und B
- quantenmechanisch ist die z-Komponente l_z von l gegeben durch

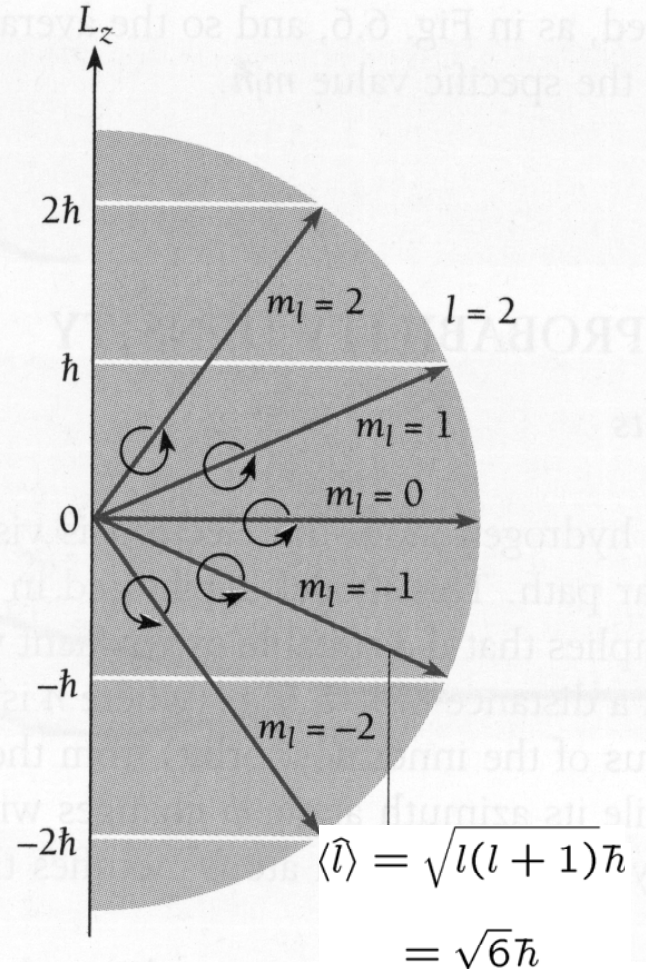
$$l_z = \cos \theta l = m_l \hbar$$

- daher gilt für das Wasserstoff-Atom

$$U_m = m_l \frac{e\hbar}{2m} B$$

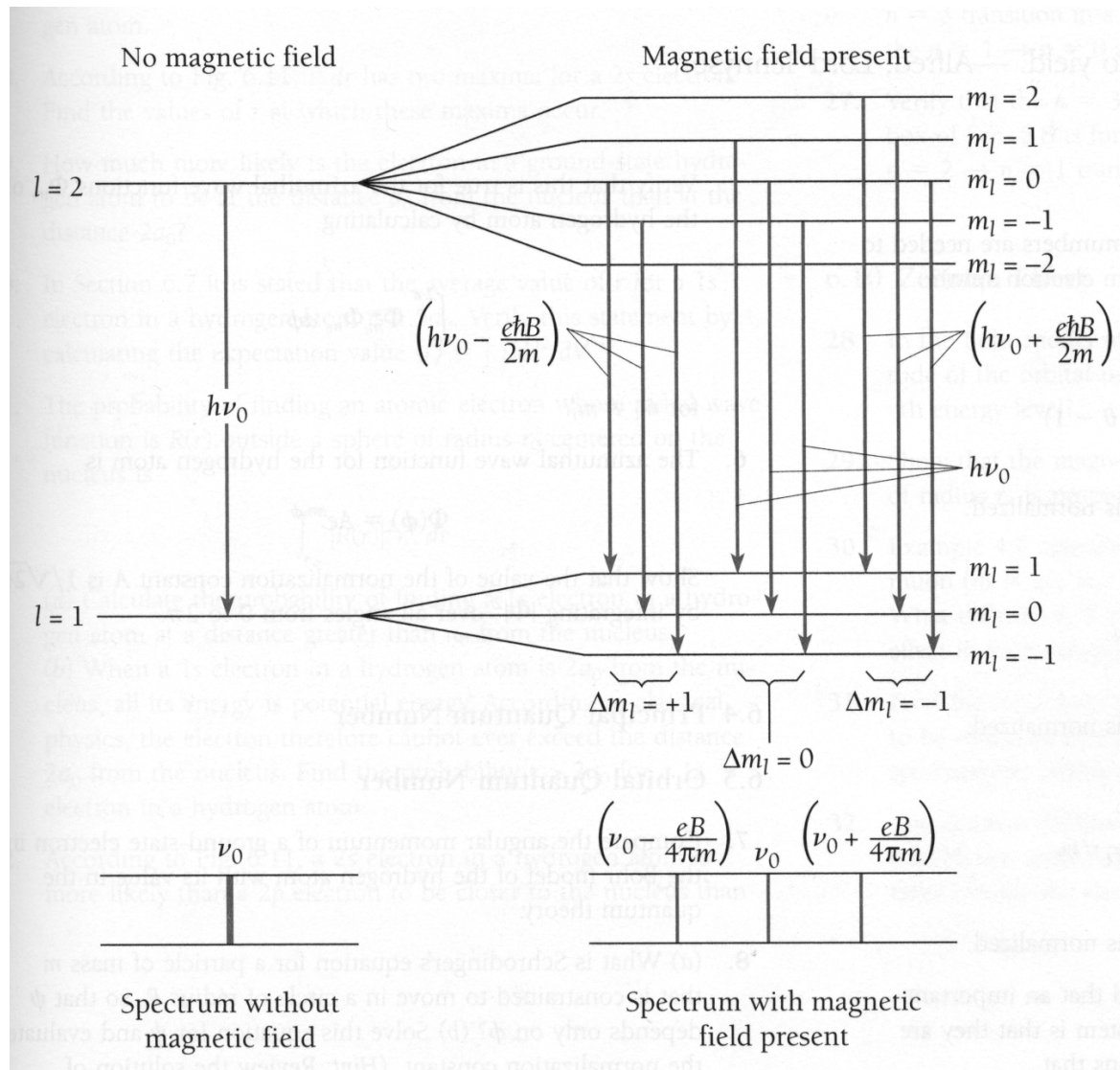
- wobei das **Bohr-Magneton** definiert wird als

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T}$$



10.5.1 Das Spektrum des Wasserstoff-Atoms im Magnetfeld

- Der Zeemann-Effekt (1896 von Pieter Zeeman entdeckt) beschreibt die Aufspaltung der energetisch entarteten Spektrallinien des Wasserstoff-Atoms in einem äusseren Magnetfeld in einzeln aufgelöste Linien.



- die einzelnen Energieniveaus spalten in $2l + 1$ unterschiedliche durch m_l charakterisierte Niveaus auf
- die erlaubten Übergänge im Energieniveau-Schema sind durch sogenannte Auswahlregeln festgelegt (Bem.: Drehimpuls des Photons, Erhaltung des Gesamtdrehimpuls)
- hier:
 - $\Delta l = \pm 1$
 - $\Delta m_l = 0, \pm 1$
- beim **normalen Zeeman-Effekt** führen diese Auswahlregeln dazu, dass genau die folgenden 3 Spektrallinien beobachtet werden

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h} & \sigma_+ \\ \nu_0 & & \pi \\ \nu_{-1} &= \nu_0 - \frac{\mu_B B}{h} & \sigma_- \end{aligned}$$

Polarisation

10.6 Lösung der Schrödinger-Gleichung in Polarkoordinaten

- allgemein:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0$$

- mit dem elektrostatischen Potential U für das Wasserstoff-Atom

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

- multipliziere mit

$$r^2 \sin^2 \theta$$

$$\sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi + \frac{2m \sin^2 \theta r^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \psi = 0$$

- die Lösungen ψ der Schrödinger-Gleichung enthalten alle Information über das Verhalten des Elektrons im Potential des Kerns
- ψ muss die üblichen Stetigkeits- und Normierungsbedingungen erfüllen

10.6.1 Separation der Variablen

Ansatz:

- zerlege die Wellenfunktion in ein Produkt aus drei Komponenten, die je nur von einer Variablen r , θ oder ϕ abhängen

$$\begin{aligned}\Psi(r, \theta, \phi) &= R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) = R \Theta \Phi \\ &= R(r) Y(\theta, \phi) = R Y\end{aligned}$$

- mit den Ableitungen

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = \Theta \Phi \frac{\partial R}{\partial r}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} = R \Phi \frac{\partial \Theta}{\partial \theta}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \phi} = R \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \quad ; \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} = R \Theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

- mit diesem Ansatz folgt:

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

$$+ \frac{2 m r^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} + E \right) = 0$$

Bemerkung:

- alle Terme in der Schrödinger-Gleichung hängen entweder nur von den Funktionen R , Θ oder Φ ab
- umordnen der Gleichung, so dass alle Terme mit Φ rechts stehen

$$\frac{\sin^2 \Theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{\sin \Theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) \Theta + \frac{2m r^2 \sin^2 \Theta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} + E \right) = - \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

- diese Gleichung kann nur dann gelten, wenn die linke und die rechte Seite gleichzeitig identisch derselben Konstanten, die wir als m_l^2 wählen, sind
- Gleichung für Φ

$$- \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = m_l^2$$

- benutze Ergebnis und separiere wiederum

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R - \frac{2m r^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} + E \right) = \frac{1}{\sin^2 \Theta} m_l^2 - \frac{1}{\Theta \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) \Theta$$

- beide Gleichungen können nur gelten wenn sie identisch einer Konstanten sind, die wir hier im Zusammenhang mit der Drehimpuls-Quantenzahl l als $l(l+1)$ wählen

- Gleichung für Θ :

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\sin^2 \Theta} - \frac{l}{\Theta \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) \Theta = l(l+1) \quad \cdot \sin^2 \Theta$$

- Gleichung für R :

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = l(l+1) \quad \cdot \frac{1}{r^2} R$$

- bestimme die Lösungen für R , Θ und Φ
- nur R hängt explizit vom Potential ab