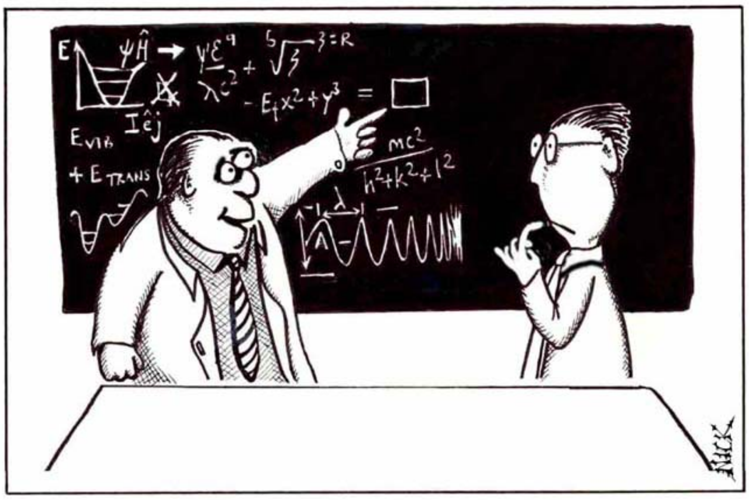
4-2 / 1 Quantenmechanisches Modell

Cartoon Physicists develop a grand unified theory:



"If my calculations are correct, not only must we always wear white lab coats, but the boundaries of our existence are defined solely by what is allowed to occur within the confines of a small two-dimensional box..!"

4-2 / 2 Quantenmechanisches Modell

Schrödingergleichung des Wasserstoff-Atoms:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_K}\Delta_K\Psi(\vec{r}_K,\vec{r}_e)+-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_e\Psi(\vec{r}_K,\vec{r}_e)-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\left|\vec{r}_K-\vec{r}_e\right|}\cdot\Psi(\vec{r}_K,\vec{r}_e)=E\,\Psi(\vec{r}_K,\vec{r}_e)$$

Vorgehensweise:

- Trennung von Schwerpunkts- und Relativbewegung
- Übergang auf Kugelkoordinaten
- Drehimpulserhaltung im Zentralkraftpotential
  $\rightarrow$ Separation der Wellenfunktion in Radial- und Winkelanteil
- Berechnung der Drehimpulseigenwerte und –eigenfunktionen
- Berechnung der radialen Eigenfunktionen

$\rightarrow$ Gesamtwellenfunktionen, Energieeigenwerte, Quantenzahlen

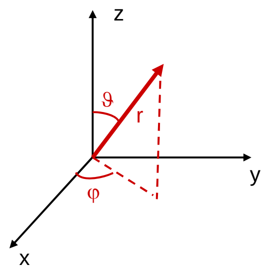
4-2 / 3 Kugelkoordinaten

Transformation kartesische Koordinaten - Kugelkoordinaten:

$$x = r\,\sin\vartheta\,\cos\varphi; \quad y = r\,\sin\vartheta\,\sin\varphi; \quad z = r\,\cos\vartheta$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2};$$

$$\vartheta = \cos^{-1}\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}; \quad \varphi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$



Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{(r\sin\vartheta)^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

4-2 / 4 Winkelanteil der Wellenfunktion

Eigenzustände:

- beschrieben durch:
  Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, ..$
  magnetische Quantenzahl $m = l, l - 1, \;..\;, l$
- Eigenwert der Rotationsenergie: $E = l(l+1)\dfrac{\hbar^2}{2\mu r^2}$
  mit reduzierter Masse μ
- Zugehöriger Drehimpuls:
  - Betrag: $\left|\vec{l}\right|^2 = l(l+1)\hbar^2$ bzw. $\left|\vec{l}\right| = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$
  - z-Komponente: $l_z = m\hbar$
- Winkelabhängigkeit beschrieben durch Kugelflächenfunktionen :

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = N\cdot e^{im\varphi}\cdot P_l^m(\cos\vartheta); \quad P_l^0 \equiv \text{Legendre Polynome}$$

$$Y_{l\,-l} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cdot\frac{\sqrt{(2l+1)!}}{l!2^l}\cdot e^{im\varphi}\cdot(\sin\vartheta)^l$$

$$Y_{l\,m+1} = \frac{1}{\sqrt{(l-m)(l+m+1)}}\,e^{im\varphi}\cdot\left[\frac{\partial}{\partial\vartheta} - m\,\cot\vartheta\right]Y_{lm}$$

4-2 / 5 Eigenwerte und -funktionen des Radialanteils

Eigenzustände für gebundene Teilchen im Coulombpotential:

- beschrieben durch:
  - Hauptquantenzahl $n = 1, 2, ..$
  - es gilt: $l \le n - 1$
- Energie-Eigenwerte entsprechen dem Bohrschen Ergebnis:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -R_y' \frac{Z^2}{n^2}$$

- Eigenfunktionen sind die radialen Wellenfunktionen (abhängig von n und l, r gemessen als Funktion des dimensionslosen Abstands ρ):

$$R_{nl} = \rho^l \cdot L_{nl}(\rho) \cdot e^{-\rho/2}$$

$$\rho \equiv 2 \cdot \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} \cdot r = \frac{\mu Z e_0^2}{\pi\varepsilon_0 \hbar^2 n} \cdot r = \frac{2Z}{n} \cdot \frac{\mu}{m_e} \cdot \frac{\mathrm{r}}{\mathrm{a}_0} \approx \frac{2Z}{n} \cdot \frac{\mathrm{r}}{\mathrm{a}_0}$$

$$\mathrm{a}_0 \equiv \text{Bohrscher Radius}$$

$$L_{nl} \equiv \text{Laguerre Polynome}$$

4-2 / 6 Radiale Wellenfunktionen

Eigenzustände für n = 1:

$$R_{10} = 2\left(Z/a_0\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\rho/2}$$

Eigenzustände für n = 2:

$$R_{20} = \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\left(Z/a_0\right)^{\frac{3}{2}} \cdot (2-\rho) \cdot e^{-\rho/2}$$

$$R_{21} = \tfrac{1}{2\sqrt{6}}\left(Z/a_0\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \rho \cdot e^{-\rho/2}$$

Eigenzustände für n = 3:

$$R_{30} = \tfrac{1}{9\sqrt{3}}\left(Z/a_0\right)^{\frac{3}{2}} \cdot (6-6\rho+\rho^2) \cdot e^{-\rho/2}$$

$$R_{31} = \tfrac{1}{9\sqrt{6}}\left(Z/a_0\right)^{\frac{3}{2}} \cdot (4-\rho)\rho \cdot e^{-\rho/2}$$

$$R_{32} = \tfrac{1}{9\sqrt{30}}\left(Z/a_0\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \rho^2 \cdot e^{-\rho/2}$$