Teilchen im Zentralpotenzial: radiale Schrödingergleichung

zeitunabh. S.Gl. in sphärischen Koordinaten r, ϑ, φ:

$$E\,\psi(r,\vartheta,\varphi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\Delta_{\vartheta,\varphi} + u(r)\right)\psi(r,\vartheta,\varphi) \tag{1}$$

mit sphärischem Laplace-Operator

$$\Delta_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad ;$$

$-\Delta_{\vartheta\varphi}$ besitzt Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell,m}(\vartheta,\varphi)$

mit $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ und $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell$

als Eigenfunktionen zum EW $\ell(\ell+1)$; d.h.

$$-\Delta_{\vartheta,\varphi}Y_{\ell,m}(\vartheta,\varphi) = \ell(\ell+1)\,Y_{\ell,m}(\vartheta,\varphi)$$

Ansatz

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \frac{1}{r}f(r)\,Y_{\ell,m}(\vartheta,\varphi)$$

eingesetzt in (1) ergibt radiale Schröd.-Gl.:

$$(2) \quad \boxed{E\,f(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + u(r)}_{\hat{=}\; u_{eff}(r)}\right)f(r)}$$

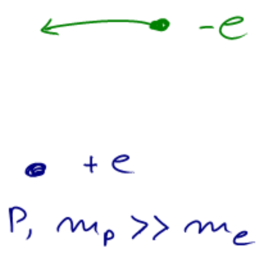
(vgl. Mechanik, $|\vec{L}|^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)$)

Wasserstoff-Atom:

Elektron bewegt sich im Coulombpotenzial

$$u(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (3)$$

des Atomkerns (= Proton)



$\rightarrow$ rad. S.-Gl. (2) mit Coulombpot. (3) führt auf normierbare Eigenfunktionen

$$\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi) = \frac{1}{r} f_{n,l}(r)\, Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$$

↳ magnetische Quantenzahl $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$

↳ Drehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, \ldots, n-1$

↳ Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \ldots$

zur Energie $E_n = -\frac{R}{n^2}$

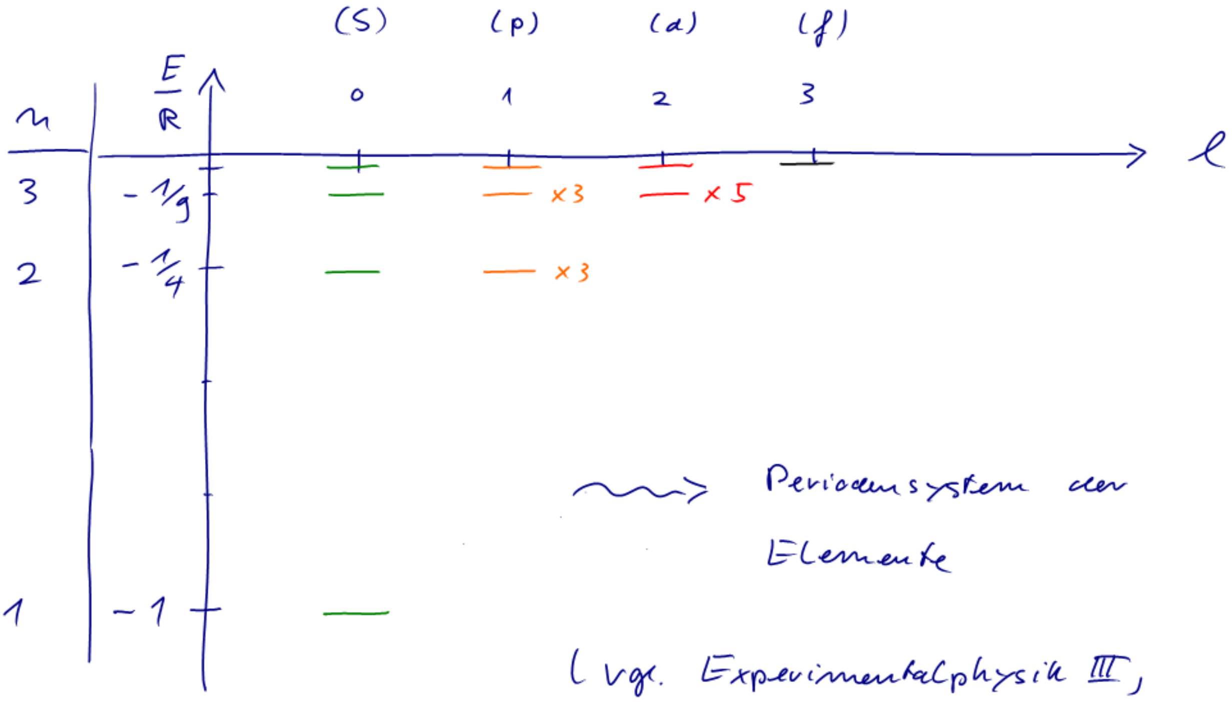
Drehimpulsbetrag $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

z-Drehimpulskomp. $L_z = \hbar m$

mit Rydberg-Konstante $R = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0} = \underline{\underline{13{,}6\ eV}}$

und Bohr-Radius $a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{m e^2} = \underline{\underline{0{,}53\ \mathring{A}}}$

→ <u>Energieniveauschema:</u>



⇝ Periodensystem der Elemente

(vgl. Experimentalphysik III, Chemie)