

Drehimpuls - Eigenfkt.

Kugelflächenfkt.; für ^{alle} zentral-symmetrische Potentialprobleme dieselben.

$$Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{l,m_l}(\vartheta) \Phi_{m_l}(\varphi)$$

assoziierte Legendre Polynome

$$Y_{l,m_l} = (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m_l)!}{2(l+m_l)!}} P_{l,m_l}(\cos \vartheta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi}$$

$$\hat{L}^2 Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$$

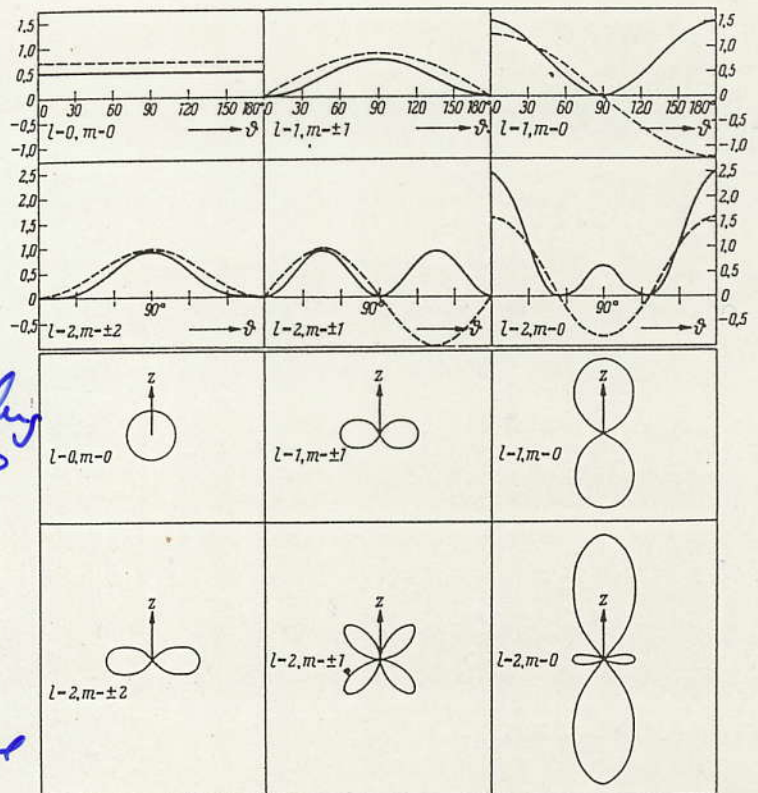
$$l = 0, 1, 2, \dots$$

$$L_z Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \hbar m_l Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi); \quad m_l = -l, -l+1, \dots, +l$$

TABELLE 3-4 Winkelfunktionen zu L^2 und L_z

l	m_l	Winkelfunktion
0	0	$Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$
1	0	$Y_{10} = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$
	± 1	$Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$Y_{20} = \frac{1}{2} \sqrt{5/4\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$Y_{2\pm 1} = \mp \sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
	± 2	$Y_{2\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{15/2\pi} \sin^2 \theta e^{\pm i2\varphi}$

--- $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$
 — $|\Theta_{l,m_l}(\vartheta)|^2$



Polardarstellung

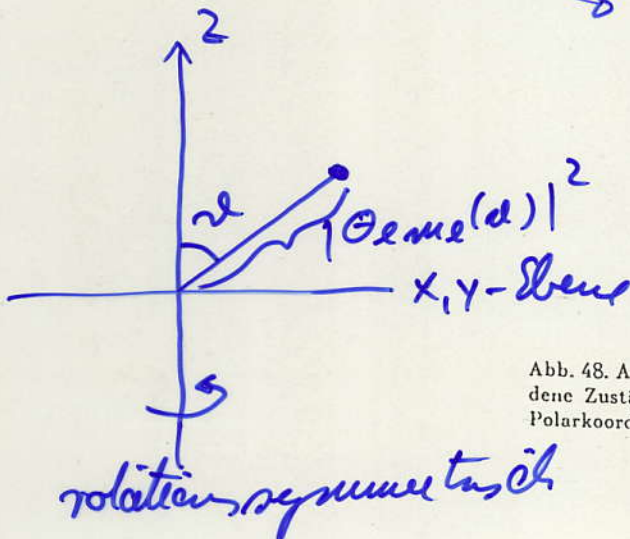


Abb. 48. Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten $\Theta_{l,m}^2$ (ausgezogene Kurven) für verschiedene Zustände des Elektrons im H-Atom (oben in kartesischen Koordinaten, unten Polarkoordinaten). Die gestrichelten Kurven im oberen Teil der Abbildung stellen Funktion $\Theta_{l,m}$ dar

Chemische Bindung und Winkelhft.

Reell sind nur die Winkelhft mit $m_l = 0$, zur Beschreibung chemischer Bindungen ist es zweckmäßig auch für die übrigen Zustände reelle Funktionen zu bilden.

=> Linear Kombination der Funktionen, die jeweils oben zu den Quantenzahlen $l, (m_l)$ und $l, -(m_l)$ gehören

$$\begin{aligned} Y_{l,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{l,m_l} + Y_{l,m_l}^*) \\ Y_{l,\sin} &= \frac{-i}{\sqrt{2}} (Y_{l,m_l} - Y_{l,m_l}^*) \end{aligned} \left. \vphantom{\begin{aligned} Y_{l,0} \\ Y_{l,\sin} \end{aligned}} \right\} \begin{array}{l} \text{Ergibt von} \\ \vec{L}^1 \text{ und } L_2 \end{array}$$

TABELLE 3-5 Winkelfunktionen zu L^2 und L_z^2

l	$ m_l $	Winkelfunktion
0	0	$s = 1/\sqrt{4\pi}$
1	0	$p_z = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$
	1	$p_x = \sqrt{3/4\pi} \sin \theta \cos \phi$ $p_y = \sqrt{3/4\pi} \sin \theta \sin \phi$
2	0	$d_{3z^2-r^2} = \sqrt{5/16\pi} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	1	$d_{xz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$ $d_{yz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$
	2	$d_{x^2-y^2} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \theta \cos 2\phi$ $d_{xy} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \theta \sin 2\phi$

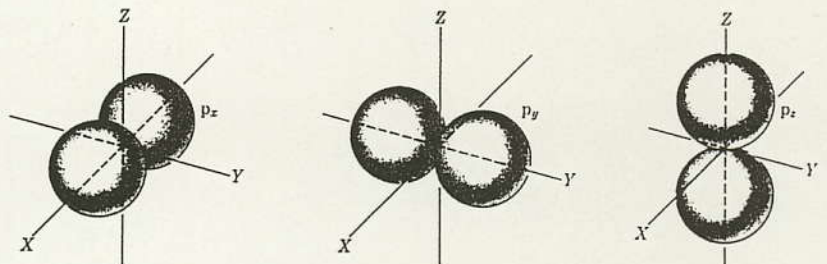


Abb. 3-10. Winkelwellenfunktionen für p-Zustände ($l = 1$).

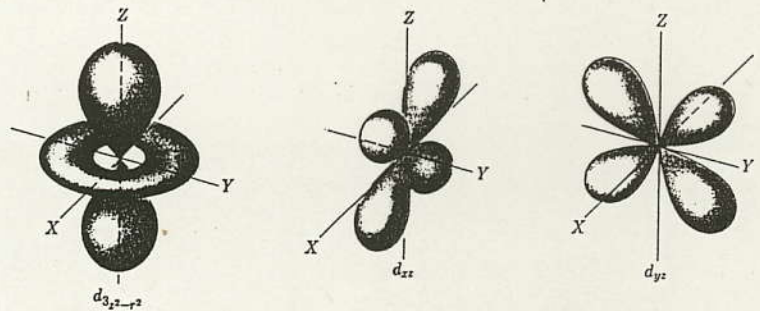


Abb. 3-11. Winkelwellenfunktionen für d-Zustände ($l = 2$).

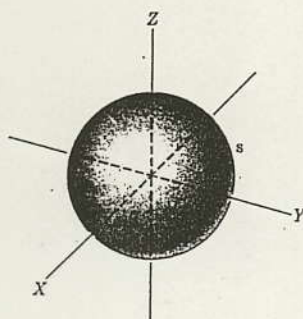
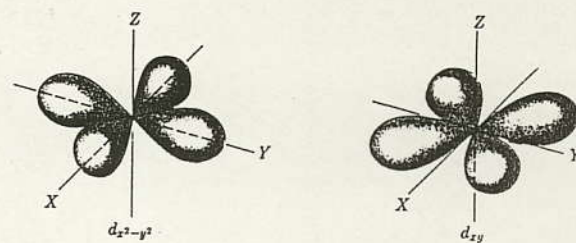


Abb. 3-9. Winkelwellenfunktion für s-Zustände ($l = 0$).



Die Eigenfkt. des Wasserstoff-Atoms

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\vartheta) \Phi_{lm}(\varphi)$$

Table 3.1 The complete normalised hydrogenic wave functions corresponding to the first three shells, for an 'infinitely heavy' nucleus. The quantity $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ is the first Bohr radius. In order to take into account the reduced mass effect one should replace a_0 by $a_\mu = a_0(m/\mu)$

Shell	Quantum numbers $n \quad l \quad m$	Spectroscopic notation	Wave function $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$
K	1 0 0	1s	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$
L	2 0 0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (1 - Zr/2a_0) \exp(-Zr/2a_0)$
	2 1 0	2p ₀	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0) \cos \theta$
	2 1 ± 1	2p _{± 1}	$\mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$
M	3 0 0	3s	$\frac{1}{3\sqrt{3\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (1 - 2Zr/3a_0 + 2Z^2r^2/27a_0^2) \exp(-Zr/3a_0)$
	3 1 0	3p ₀	$\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (1 - Zr/6a_0)(Zr/a_0) \exp(-Zr/3a_0) \cos \theta$
	3 1 ± 1	3p _{± 1}	$\mp \frac{2}{27\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (1 - Zr/6a_0)(Zr/a_0) \exp(-Zr/3a_0) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$
	3 2 0	3d ₀	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Z^2r^2/a_0^2) \exp(-Zr/3a_0) (3 \cos^2 \theta - 1)$
	3 2 ± 1	3d _{± 1}	$\mp \frac{1}{81\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Z^2r^2/a_0^2) \exp(-Zr/3a_0) \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\phi)$
	3 2 ± 2	3d _{± 2}	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{3/2} (Z^2r^2/a_0^2) \exp(-Zr/3a_0) \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\phi)$

Jeder Eigenzustand wird durch die 3 Quantenzahlen n, l, m_l bestimmt und stellt einen Eigenzustand dreier gleichzeitig meßbarer Größen dar.

1. Energie: $E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{32\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$ Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$

2. Quadrat des Drehimpulses $\vec{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ Drehimpuls-Qz. $l = 0, 1, \dots, n-1$

3. z-Komponente des Drehimpulses $L_z = m_l \cdot \hbar$ magnetische Qz. $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

Entartung des Zustands n : $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$

definiert Schale: 1, 4, 9, 16, ...

Experimentelle Bestimmung des Spins

Stern-Gerlach-Versuch:

$$E_{\text{pot}} = - \vec{M} \cdot \vec{B}$$

$$F_z = - \frac{dE_{\text{pot}}}{dz}$$

$$= M_z \cdot \frac{dB}{dz} = M_{\text{ext}} \frac{dB}{dz}$$

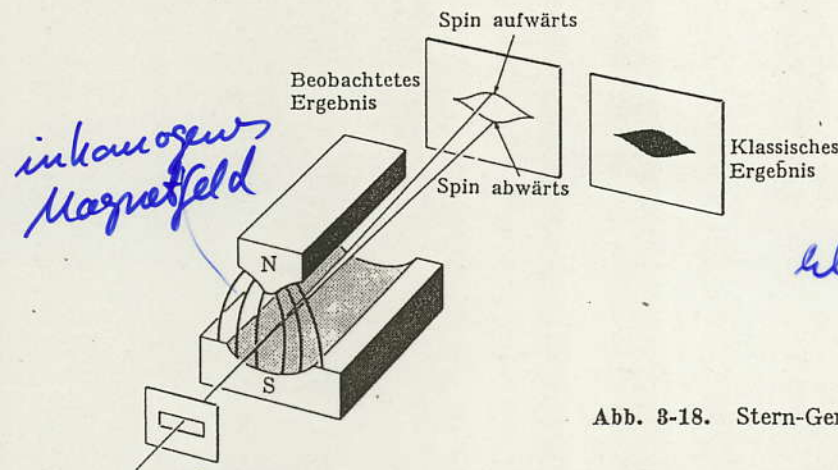


Abb. 8-18. Stern-Gerlach-Versuch.

kl. Erwartung: alle Richtungen von $\vec{M}$ zugelassen $\Rightarrow$ breiter Fleck auf Schirm

Strahlstrahl
z.B. H-Atome
im Grundzustand
 $l=0$

Ergebnis: 2 Linien $\Rightarrow$ 2 Zust.
Einstellmöglichkeit für Spin

mit $2s+1=2 \Rightarrow s=\frac{1}{2}$ halbbar

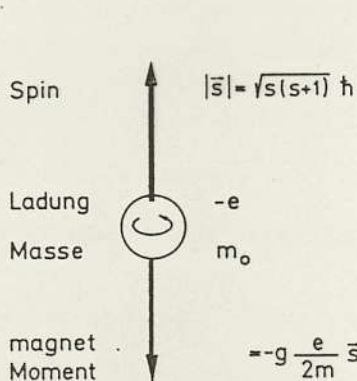


Abb. 12.7. Spin und magnetisches Moment des Elektrons, schematisch

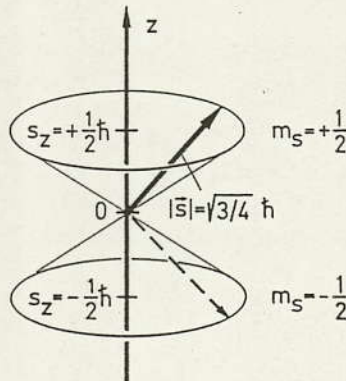


Abb. 12.8. Der Elektronenspin hat zwei Einstell-Möglichkeiten in einem Magnetfeld der Richtung z. Sie sind durch die Quantenzahl $m_s = \pm 1/2$ charakterisiert

$$\vec{S}^2 \chi_{s,m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{s,m_s}$$

$$S_z \chi_{s,m_s} = m_s \hbar \chi_{s,m_s}$$

$$\vec{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

magnetomechanische Konstante $\vec{M}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \vec{S}$

$$= -g_s \cdot \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{S}$$

g-Faktor $g_s = \begin{cases} 2,00 & \text{nach Dirac} \\ 2,0023 & \text{Quantenelektrodynamik} \end{cases}$

ww des Elektrons mit eigenem Feld

Addition von Drehimpulsen

H-Atom: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

allg. Betrachtung für 2 Drehimpulse J_1 und J_2

$\vec{J}_1^2 = j_1(j_1+1)\hbar^2$; $j_1 = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

$J_{1z} = m_1 \hbar$; $m_1 = 0, \pm 1, \dots, \pm j_1 \quad (2j_1+1)$

$\vec{J}_2^2 = j_2(j_2+1)\hbar^2$; $j_2 = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

$J_{2z} = m_2 \hbar$; $m_2 = 0, \pm 1, \dots, \pm j_2 \quad (2j_2+1)$

bilde $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$

Forderung: $\vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2$

$J_z = m_j \hbar$; $m_j = 0, \pm 1, \dots, \pm j \quad (2j+1)$

$\Rightarrow j = \underbrace{j_1 + j_2}_{\text{parallel}} ; j_1 + j_2 - 1 ; \dots ; \underbrace{|j_1 - j_2|}_{\text{antiparallel}}$

$m_j = m_1 + m_2 = 0, \pm 1, \dots, \pm j$

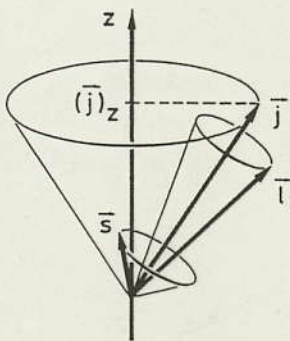


Abb. 12.12. Kopplung der Vektoren von Spin s und Bahndrehimpuls l zum Gesamtdrehimpuls j im Vektormodell. Die Vektoren s und l präzedieren um den von ihnen aufgespannten Vektor j . In einem äußeren Magnetfeld der Richtung z präzediert j um die Richtung z . Dabei wird die Öffnung des Präzessionskegels durch die magnetische Quantenzahl m_j bestimmt. Die Abbildung gilt für $s = 1/2, l = 2, j = 5/2$

Tabelle 16
Die möglichen Kombinationen der Quantenzahlen l, j und m_j

Zustand	s	p		d		f	
l	0	1		2		3	
j	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$
m_j	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}$	$\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \pm \frac{7}{2}$
$2j+1$	2	2	4	4	6	6	8
$2(2l+1)$	2	6		10		14	

Der Elektronenspin kann relativ zum Bahndrehimpuls nur 2 mögliche Orientierungen haben

$j = l \pm \frac{1}{2}$ für $l \neq 0$

$j = \frac{1}{2}$ für $l = 0$

ohne Spin: Eigenzustandsangabe n, l, m_l

mit Spin:

-11-

n, l, j