Zusammenfassung 2 - Dreidim. Potentialtopf, Wasserstoffatom

• Wichtiges Beispiel: Gebundenes Elektron im dreidimensionalen, würfelförmigen Potentialtopf.

→ Lösung für 1-dim. Fall ist bekannt: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

⇒ Lösung für 3-dim. Fall ist ganz analog: $\boxed{\psi_{nml}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{l\pi}{a}z\right)}$

→ Die erlaubten, diskreten Energiewerte sind durch die drei Quantenzahlen n, m, l gegeben:

$\boxed{E_{nml} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2}(n^2+m^2+l^2)}$

⇒ Für Quantenzahlen gilt: $n, m, l \geq 1$

⇒ Grundzustand (minimale Energie) für $n=m=l=1$.

⇒ Zustände mit den Kombinationen der Quantenzahlen, die zu gleichen Energiewerten führen, heißen <u>entartet</u>. (z.B. $n=1, m=1, l=2$ und $n=1, m=2, l=1$).

• Das Wasserstoffatom:

- Das Wasserstoffatom wird kugelförmig modelliert. Das Elektron ist im kugelsym. Coulombpotential des Atomkerns gebunden. Die Coulombkraft und sich dadurch ergebende potentielle Energie lauten:

$$F = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}, \quad V = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

- Die Schrödingergleichung wird in diesem Fall in Kugelkoordinaten gelöst (siehe Skript).

⇒ Erlaubte, diskrete Energiewerte werden folgendermaßen bestimmt: $\boxed{E_n = \frac{-m_0 e^4}{2(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2}}$

↔ Wichtig: Bei dem Wasserstoffatom und auch beim Periodensystem heißen die Quantenzahlen zwar n, m, l; aber können nicht alle Werte aufnehmen (im Gegensatz zu würfelförmigem Potentialtopf.)

- Hauptquantenzahl n: Definiert die Energie, besagt in welcher Schale das Elektron sich befindet. ($n=1 \Rightarrow$ K-Schale, $n=2 \Rightarrow$ L-Schale, $n=3 \Rightarrow$ M-Schale, $n=4 \Rightarrow$ N-Schale)

- Nebenquantenzahl l: l ist kleiner als n, also $l = 0, 1, \ldots, n-1$ sind möglich. l bestimmt Orbitale (s, p, d, f Zustände).

- magnetische Quantenzahl m: Es gilt $|m| \leq l$ [redacted], also $m = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$. m ergibt in welchem Zustand in einem Orbital das Elektron sich befindet.

- Spinquantenzahl s: $s = \pm\frac{1}{2}$ bezeichnet den Eigendrehimpuls des Elektrons. $s = \frac{+1}{2}$ wird [redacted] mit ↑ und $s = \frac{-1}{2}$ mit ↓ gezeigt.

⇒ Diskrete Energiewerte sind n^2-fach entartet.

⇒ Der Grundzustand ist in diesem Fall gegeben für $n=1, m=0, l=0$.