

2.11 Das Wasserstoffatom

Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten

zunächst mit $V(r)$, einem beliebigen kugelsymmetrischen Potenzial (später wird das Coulomb-Potenzial verwendet)

$$\Delta\psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) = 0$$

Die Masse heißt hier μ in Anlehnung an die reduzierte Masse im Bohrschen Atommodell

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) \cdot \psi = 0$$

Produktansatz

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt und mit $r^2 \cdot \sin^2 \theta$ multipliziert, anschließend durch $R \cdot \Theta \cdot \Phi$ geteilt

$$\Theta \cdot \Phi \cdot \sin^2 \theta \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + R \cdot \Phi \cdot \sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + R \cdot \Theta \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V) \cdot r^2 \cdot \sin^2 \theta \cdot R \cdot \Theta \cdot \Phi = 0$$

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V) \cdot r^2 \cdot \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}$$

Da die linke Seite nur von r und θ abhängt, während die rechte Seite nur von φ abhängt, muss jede Seite von der anderen unabhängig, d.h. gleich einer Konstanten, sein. Es ergeben sich zwei getrennte Differentialgleichungen.

Rechte Seite:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + C_1 \cdot \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + m^2 \cdot \Phi = 0$$

Die Konstante wurde m^2 genannt, was später erklärt wird. **Hier ist m keine Masse**, sondern die sogenannte "magnetische Quantenzahl" die traditionell mit m bezeichnet wird

Lösung der Differenzialgleichung und Normierung:

$$\Phi = A \cdot e^{i \cdot m \cdot \phi} \quad \text{wobei} \quad \Phi(\phi) = \Phi(\phi + n \cdot 2\pi) \quad \text{und} \quad \int_0^{2\pi} \Phi^* \cdot \Phi \cdot d\phi = 1$$

$$e^{i \cdot m \cdot \phi} = e^{i \cdot m \cdot [\phi + 2\pi]} \quad \rightarrow \quad \Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i \cdot m \cdot \phi} \quad \text{mit} \quad m = \dots - 2, -1, 0, 1, 2, \dots$$

Nochmal die Schrödinger-Gleichung wie oben, diesmal anders angeordnet, durch $\sin^2\theta$ geteilt und Φ eingesetzt

$$\frac{1}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) \cdot r^2 = - \frac{1}{\sin \theta \cdot \Theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta}$$

Nun hängt die linke Seite nur von r ab, die rechte nur von θ sowie der oben gefundenen magnetischen Quantenzahl m . Wieder sind beide Seiten gleich einer Konstanten. Rechte Seite:

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

Der Buchstabe l steht für die sogenannte "Drehimpulsquantenzahl". Die Gründe für die seltsame Bezeichnung der Konstanten werden später klar.

Für $m = 0$ ergibt sich die Legendresche Differenzialgleichung mit den sog. Legendre-Polynomen als Lösung.

Für $m \neq 0$ erhält man die sog. zugeordneten Legendre-Polynome, die Funktionen von $\cos \theta$ sind:

$$\Theta_{lm}(\theta) = A \cdot P_l^m(\cos \theta) \quad \text{mit} \quad -l \leq m \leq l \quad P_l(x) = P_l^0(x) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

Beispiele: $P_0(x) = 1$

$P_1(x) = x$

$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad \dots$

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x)$$

$$P_l^m(x) = P_l^{-m}(x)$$

Die gesamte Winkelverteilung der Wellenfunktionen (und damit auch die der Aufenthaltswahrscheinlichkeit) ist von $V(r)$ unabhängig, gilt also für jedes kugelsymmetrische Potenzial

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \propto P_l^m(\cos \theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

Mit der Normierung $\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \cdot \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi = 1$

Kugelflächenfunktionen

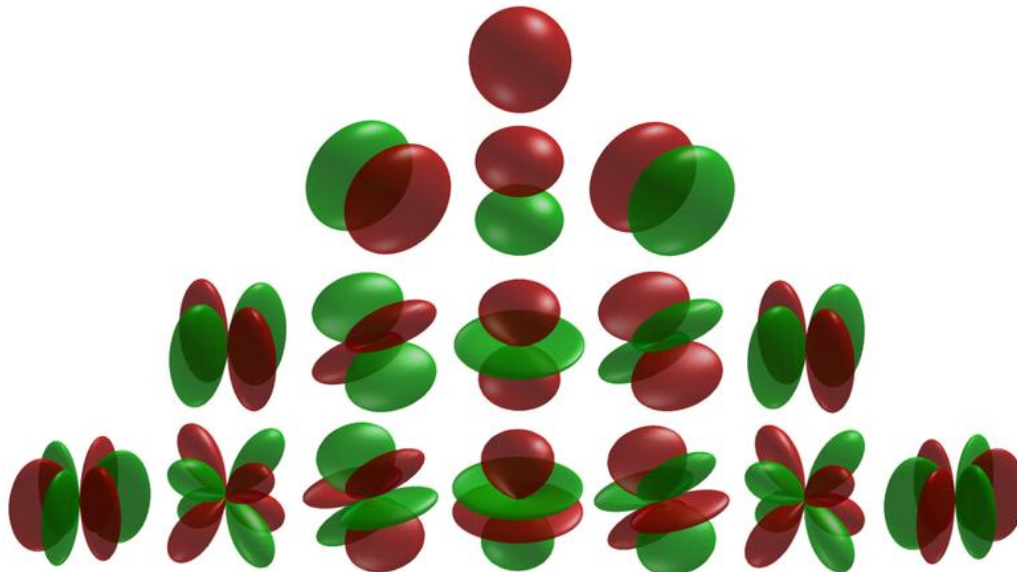
sind die einfachsten Kugelflächenfunktionen

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i \cdot \varphi}$$

$$Y_2^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \theta \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm 2i \cdot \varphi} \quad Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i \cdot \varphi}$$

Die Kugelflächenfunktionen sind orthogonal $\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_l^m(\theta, \varphi) \cdot Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \cdot \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi = \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'}$



Kugelflächenfunktionen,
Vorzeichen: rot +, grün -
(Wikipedia, CC, Author: I. Sarxos)

Der Drehimpuls

Der Drehimpulsoperator entsteht durch Einsetzen des Impulsoperators

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \rightarrow \quad \hat{L} = -i \cdot \hbar \cdot (\vec{r} \times \nabla) = -i \cdot \hbar \cdot \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

Das ist in Kugelkoordinaten wieder wesentlich komplizierter und wird hier nicht weiter ausgeführt. Nur die z-Komponente ist einfach, weil sie nicht von θ abhängt:

$$\hat{L}_z = -i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Benötigt wird ferner der Operator des Quadrats des Drehimpulses:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \cdot \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Das sieht kompliziert aus, ist aber (bis auf den Faktor \hbar^2) derselbe Ausdruck wie beim Winkelanteil des Laplace-Operators. Die Eigenwertgleichung ergibt

$$\hat{L}^2 \psi = R \cdot \hat{L}^2 Y_l^m = R \cdot l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2 \cdot Y_l^m = l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2 \cdot \psi \quad \text{oder} \quad \hat{L}^2 Y_l^m = l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2 \cdot Y_l^m$$

l: Drehimpuls-Quantenzahl

d.h. es zeigt sich, dass die Kugelflächenfunktionen Eigenfunktionen dieses Operators sind und die Eigenwerte ergeben sich zu $l(l+1)$ - dies wird hier nicht bewiesen -, was die Wahl der Konstante im obigen Separationsansatz nachträglich motiviert. Die Erwartungswerte für das Drehimpulsquadrat und den Drehimpulsbetrag sind

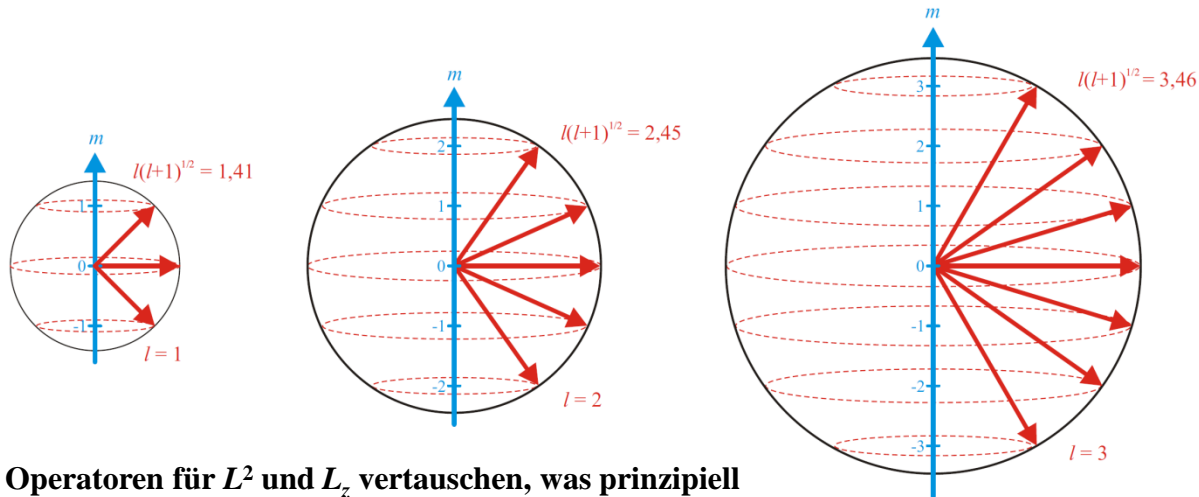
$$\langle L^2 \rangle = \langle Y_l^m | \hat{L}^2 | Y_l^m \rangle = l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2 \quad \rightarrow \quad \langle |L| \rangle = \sqrt{l \cdot (l+1)} \cdot \hbar$$

Die Kugelflächenfunktionen sind auch Eigenfunktionen des Operators für die z-Komponente des Drehimpulses:

$$\hat{L}_z Y_l^m = m \cdot \hbar \cdot Y_l^m \quad \text{für} \quad -l \leq m \leq l \quad \text{m: magnetische Quantenzahl}$$

Richtungsquantelung des Drehimpulses

Da die Kugelflächenfunktionen sowohl Eigenfunktionen des Drehimpulsquadrat-Operators als auch des z -Komponenten-Operators sind, kann der Drehimpulsvektor nur bestimmte Orientierungen relativ zur z -Achse einnehmen, während die x - und y -Richtung unbestimmt ist. Die z -Achse entspricht in der Atomphysik oft der Richtung eines äußeren magnetischen Felds (daher die Bezeichnung "magnetische Quantenzahl" für m)



Das heißt auch, dass die Operatoren für L^2 und L_z vertauschen, was prinzipiell auch für die anderen Komponenten gilt (auch wenn die z -Komponente traditionell eine Sonderrolle spielt)

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}^2 \right] = 0 \quad \left[\hat{L}_y, \hat{L}^2 \right] = 0 \quad \left[\hat{L}_z, \hat{L}^2 \right] = 0$$

während die Operatoren für L_i und L_j mit $i \neq j$ nicht vertauschbar sind (ohne Beweis)

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \right] = i \cdot \hbar \cdot \hat{L}_z \quad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z \right] = i \cdot \hbar \cdot \hat{L}_x \quad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x \right] = i \cdot \hbar \cdot \hat{L}_y$$

Die Funktion der Operatoren der Drehimpulskomponenten kann man als Winkeländerung um die jeweilige Achse auffassen. Daraus ergibt sich die Nichtvertauschbarkeit auch anschaulich daraus, dass räumliche Drehungen um orthogonale Achsen nicht kommutativ sind.

Die Drehimpulsalgebra wird weiter vertieft, wenn der "Spin" eingeführt wurde (siehe später).

Radialteil der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

Hier sei ohne Beweis angemerkt, dass das Konzept einer "reduzierten Masse" auch in der Quantenmechanik sinnvoll ist und für die Behandlung des Wasserstoffatoms verwendet wird. Wenn also der Atomkern (das Proton) als ortsfest betrachtet wird, verwendet man statt der Elektronenmasse m_e die reduzierte Masse μ

$$\mu = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} \quad \text{mit} \quad m_p \approx 1836 \cdot m_e$$

Wiederholung:
$$\frac{1}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) \cdot r^2 = - \frac{1}{\sin \theta \cdot \Theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = l \cdot (l + 1)$$

Produktansatz:
$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi) \quad \text{mit} \quad \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) \cdot R = \frac{l \cdot (l + 1)}{r^2} R$$

mit Coulomb-Potenzial und $\partial/\partial r$ ausgeführt (Produktregel):

$$\underbrace{\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial R}{\partial r}}_{\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right)} + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \right) - \frac{l \cdot (l + 1)}{r^2} \right\} \cdot R = 0$$

(mit $Z > 1$ gilt dies auch für wasserstoffähnliche Atome)

(Anmerkung: Da R nur vom Radius abhängt, müsste man dies eigentlich nicht als partielle Ableitung schreiben)

Zunächst: Betrachtung für sehr große Abstände

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot E \cdot R = 0 \quad \text{wenn} \quad \begin{matrix} r \rightarrow \infty \\ V \rightarrow 0 \end{matrix}$$

für $E < 0$ (gebundene Zustände): asymptotische Lösung ist eine Kombination von Exponentialfunktionen

$$E < 0 : R(r \rightarrow \infty) = A \cdot e^{-\alpha \cdot r} + B \cdot e^{\alpha \cdot r}$$

$$\text{mit} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2\mu \cdot E}$$

für $E > 0$ (ungebundene Zustände): auslaufende und einlaufende Welle (eigentlich Kugelwelle)

$$E > 0 : R(r \rightarrow \infty) = A \cdot e^{i \cdot k \cdot r} + B \cdot e^{-i \cdot k \cdot r}$$

$$\text{mit} \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu \cdot E}$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu \cdot r^2}{\hbar^2} (E - V) \cdot R - l \cdot (l+1) \cdot R = 0$$

Der Term $\sim l(l+1)$ entspricht einer "Zentrifugalbarriere", siehe z.B. effektives Potenzial bei der Planetenbewegung.
 Weitere Vereinfachung der Gleichung durch Hilfsvariablen:

$$u(r) = r \cdot R(r) \quad \alpha = \frac{\sqrt{2\mu \cdot E}}{\hbar} \quad \rho = \alpha \cdot r \quad \rho_0 = \frac{\mu \cdot Z \cdot e^2}{2\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar^2 \cdot \alpha}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - \left\{ 1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l \cdot (l+1)}{\rho^2} \right\} \cdot u = 0$$

Dies führt nach einiger Rechnung zu Lösungen der Form $R_{nl}(r) \propto e^{-\frac{r}{n \cdot a_0}} \cdot \left(\frac{2r}{n \cdot a_0} \right)^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n \cdot a_0} \right)$

mit dem Bohrschen Radius $a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\epsilon_0\hbar^2}{\pi\mu e^2}$

und den zugeordneten Laguerre-Polynomen, die sich nach folgender Formel berechnen lassen:

$$L_{q-p}^p(x) = (-1)^p \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x) \quad \text{mit} \quad L_q(x) = e^x \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} \cdot x^q)$$

Der in R_{nl} auftretende ganzzahlige Parameter n ist die sog. Hauptquantenzahl. Die Energieeigenwerte hängen nur von n ab und sind identisch mit denen des Bohrschen Wasserstoffatoms (!)

$$E_n = -\frac{e^4 \mu}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = -R \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

(R ist hier nicht der radiale Anteil der Wellenfunktion, sondern die Rydberg-Konstante = 13,6 eV)

Zusammengefasst:

Die Schrödinger-Gleichung wurde für das Wasserstoffatom explizit mit einem Separationsansatz in Kugelkoordinaten gelöst

$$\Delta\psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) \cdot \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad \psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

Die azimutale Abhängigkeit der Wellenfunktion ist mit der **magnetischen Quantenzahl m** gegeben durch

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i \cdot m \cdot \varphi} \quad \text{mit} \quad m = \dots - 2, -1, 0, 1, 2 \dots$$

Die Abhängigkeit vom Polarwinkel hängt von der **Drehimpulsquantenzahl l** und von der magnetischen Quantenzahl m ab, was die erlaubten Werte von m einschränkt. Der polare Anteil wird durch zugeordnete Legendre-Polynome P beschrieben. Diese mit dem azimutalen Anteil multipliziert ergeben die Kugelflächen-Funktionen, mit denen die gesamte Winkelverteilung unabhängig von der expliziten Form der Zentralpotenzials $V(r)$ beschrieben wird. Die Kugelflächenfunktionen werden auf 1 normiert und sind orthogonal, d.h. das Produkt von zwei verschiedenen Funktionen ist null.

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \propto P_l^m(\cos \theta) \cdot \Phi_m(\varphi) \quad \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_l^m(\theta, \varphi) \cdot Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \cdot \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\varphi = \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'}$$

Die Lösung der radialen Gleichung für das Coulomb-Potenzial ist durch das Produkt aus einem Laguerre-Polynom, einer Funktion $(r/n)^l$ sowie einer Exponentialfunktion gegeben und hängt von der **Hauptquantenzahl n** und von l ab, welche die erlaubten Werte von l einschränkt. Der Erwartungswert des Radius sowie die Energieerwartungswert nimmt wie beim Bohrschen Atommodell mit n zu. Die Gesamtwellenfunktion ist

$$\psi_{nlm} = \underbrace{\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+1)!\}^3}}}_{\text{Normierung}} \cdot \underbrace{e^{-\frac{r}{n \cdot a_0}} \cdot \left(\frac{2r}{n \cdot a_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na_0)}_{\text{radiale Abhängigkeit}} \cdot \underbrace{Y_l^m(\theta, \varphi)}_{\text{Winkelabhängigkeit}} \quad \begin{matrix} -l \leq m \leq l \\ l < n \end{matrix}$$

Normierung

radiale Abhängigkeit

Winkelabhängigkeit

Die Quantenzahl l beschreibt die Länge des Bahndrehimpulsvektors $\sqrt{l \cdot (l+1)}$
 die Quantenzahl m seine Projektion auf die z-Achse, d.h. seine gequantelte Richtung.
 In einem Magnetfeld wird die Entartung der Zustände mit verschiedenem m aufgehoben.

Traditionelle Bezeichnung der Elektronen "orbitale" mit verschiedenem Bahndrehimpuls

$$l = 0 \quad \text{"s"}$$

$$l = 1 \quad \text{"p"}$$

$$l = 2 \quad \text{"d"}$$

$$l = 3 \quad \text{"f"}$$

$$l = 4 \quad \text{"g"}$$

Zahl der m -Zustände pro Drehimpulsquantenzahl: $2l + 1$ (von $-l$ bis l)

Zahl der l -Zustände pro Hauptquantenzahl: n (von 0 bis $n - 1$)

Zahl aller Zustände pro Hauptquantenzahl:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2 \cdot l + 1) = n^2$$

Der Bahndrehimpuls bewirkt ein magnetisches Moment p_m . Halbklassische Betrachtung mit dem Drehimpuls aus dem Bohrschen Atommodell $L = \hbar$:

Ein magnetisches Moment ist in der Elektrodynamik durch einen Kreisstrom mal Normalvektor der Fläche gegeben, der Strom eines kreisenden Elektrons ist Ladung durch Umlaufzeit (oder mal Umlauffrequenz).

Der Einheitsvektor e_n steht senkrecht auf der Fläche

$$\vec{p}_m = I \cdot \vec{A} = -e \cdot \frac{v}{2\pi \cdot r} \cdot \pi \cdot r^2 \cdot \vec{e}_n = -e \cdot \frac{v \cdot r}{2} \cdot \vec{e}_n$$

Bohrsches Magneton

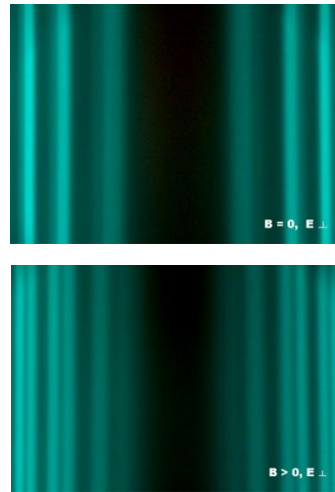
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \cdot r \cdot v \cdot \vec{e}_n \quad \xrightarrow{|\vec{L}|=\hbar} \quad v \cdot r = \frac{\hbar}{m_e} \quad \rightarrow \quad |\vec{p}_m| = -\frac{e \cdot \hbar}{2m_e} \equiv \mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}}$$

"Normaler" Zeeman-Effekt

Für einen festen Wert der Hauptquantenzahl n sind alle Zustände mit verschiedenem l und m "entartet". Durch ein äußeres Magnetfeld B wird diese Entartung aufgehoben, weil der Drehimpuls ein magnetisches Moment μ_e bewirkt und die potenzielle Energie von der Stellung des Drehimpulses relativ zum Magnetfeld abhängt:

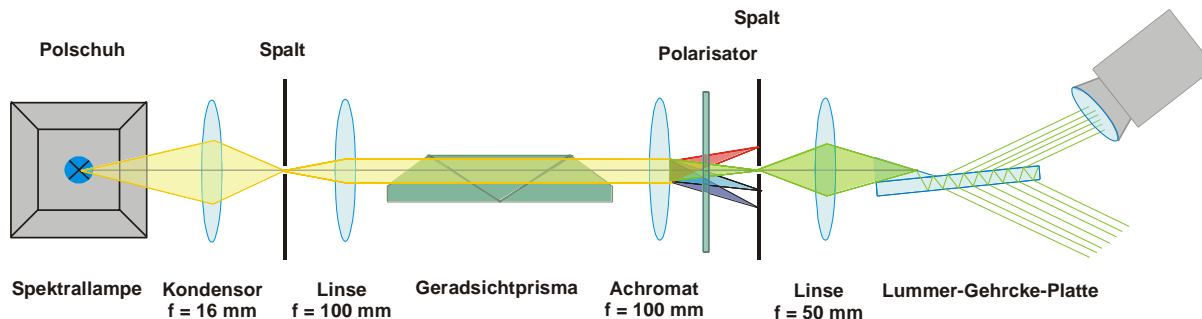
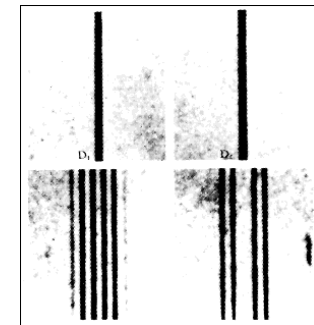
$$E_{pot} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = m \cdot \mu_B \cdot B \quad \text{mit} \quad \mu_B = -\frac{e \cdot \hbar}{2m_e}$$

Experiment: In einem Magnetfeld spaltet sich die Linie bei 509 nm (grün) einer Cadmium-Spektrallampe auf. Beobachtet wird die Verdopplung der Interferenzlinien einer sog. Lummer-Gehrcke-Platte, das durch Mehrfach-reflexion an den beiden Oberflächen der Platte entsteht.



Pieter Zeeman (1865 - 1943) mit Albert Einstein (m.) und Paul Ehrenfest (r.)

Unten: Beobachtung der Aufspaltung von Spektrallinien (Energieabstände zwischen ursprünglich "entarteten" Zuständen) durch ein äußeres Magnetfeld (Pieter Zeeman 1896)



2.12 Modifikationen des Wasserstoff-Spektrums

Feinstruktur-Konstante

Es gibt neben der Zeeman-Aufspaltung der Drehimpulse im Magnetfeld weitere experimentell beobachtete Modifikationen des Spektrums des Wasserstoffatoms. Zur Beschreibung der Feinstruktur von Atomspektren wurde die **Feinstruktur-Konstante** eingeführt (A. Sommerfeld 1916):

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar \cdot c} = 0,007297 \dots \approx \frac{1}{137}$$



Arnold Sommerfeld
(1868 – 1951)

Die Größenordnung der Energien im H-Atom ist gegeben durch (vgl. Rydberg-Konstante)

$$\alpha^2 \cdot m_e \cdot c^2 \approx 27,2 \text{ eV} \quad R_\infty = \frac{e^4 \cdot m_e}{8\varepsilon_0^2 \cdot h^2} = \frac{e^4 \cdot m_e}{8\varepsilon_0^2 \cdot \hbar^2 \cdot 4\pi^2} = \left(\frac{e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar \cdot c} \right)^2 \cdot \frac{m_e \cdot c^2}{2} \approx 13,6 \text{ eV}$$

Die Feinstruktur-Konstante ist eine grundlegende Zahl, die Naturkonstanten aus Elektrodynamik, Relativität und Quantenmechanik verknüpft. Man kann sie auch als "Kopplungskonstante", also als ein Maß für die Stärke der elektromagnetischen Wechselwirkung verstehen. Hier im Vergleich zu den anderen Wechselwirkungen (gerundet):

starke Wechselwirkung	$\alpha_s \approx 1$
elektromagnetische Wechselwirkung	$\alpha_{em} = 1/137 \approx 10^{-2}$
schwache Wechselwirkung	$\alpha_w \approx 10^{-6}$
Gravitation	$\alpha_G \approx 10^{-38}$

Nach heutiger Auffassung sind Kopplungskonstanten energieabhängig. Auch eine eventuelle Zeitabhängigkeit wird diskutiert.

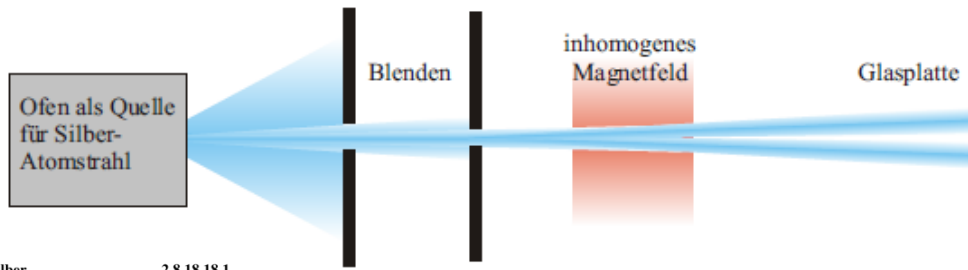
Korrekturen zu den Energiewerten des Wasserstoff-Spektrums

Energieniveaus gemäß dem Bohrschen Atommodell in der Größenordnung von	$\alpha^2 \cdot m \cdot c^2$
a) Feinstruktur (relativistischer Effekt und Spin-Bahn-Kopplung)	$\alpha^4 \cdot m \cdot c^2$
b) Lamb-Verschiebung (Quantenelektrodynamik, Vakuumfluktuationen)	$\alpha^5 \cdot m \cdot c^2$
c) Hyperfeinstruktur (Effekte des Kerns: el./mag. Moment, Masse, Volumen)	$\alpha^4 \cdot m \cdot c^2 \cdot (m_e / m_p)$

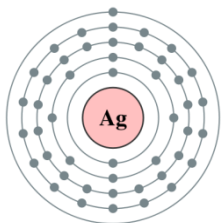
2.13 Der Elektronenspin

Feinstruktur-Konstante

Elektronen besitzen ein magnetisches Moment wie eine rotierende geladene Kugel, obwohl sie "punktförmig" sind (bislang wurden keine angeregten Zustände des Elektrons beobachtet). Ein experimenteller Hinweis ist das Stern-Gerlach-Experiment (1922). Dieser "Eigendrehimpuls" von Teilchen wird "Spin" genannt.



47: Silber 2,8,18,18,1



Silber hat in der äußersten besetzten Schale ein Elektron mit Bahndrehimpuls 0. Die Aufspaltung des Strahls im inhomogenen Magnetfeld weist auf ein magnetisches Moment des Elektrons hin, das zwei diskrete Orientierungen besitzt.



Walther Gerlach (1889 – 1979)



Otto Stern (1888 – 1961)