stationäre Schrödinger-Gleichung für Zentralpotentiale:
$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right)\Phi(\vec r)=E\cdot\Phi(\vec r)$

Laplace-Opeartor in Kugelkoordinaten: $\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{1}{r^2}\frac{\hat{\vec L}^2}{\hbar^2}$

$\Rightarrow\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{2m}{\hbar^2}\big(E\underbrace{-V(r)-\frac{\vec L^2}{2mr^2}}_{=-V_{\text{eff}}(r)}\big)\right]\Psi(\vec r)=0$

Sepearationsansatz: $\Psi(\vec r)=R_{n,l}(r)\cdot Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$; $\quad R(r)=\frac{u(r)}{r}$

$\Rightarrow$ Radialgleichung: $u''(r)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\big(E-V(r)\big)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=0$

(asymptotisches Verhalten: $u(r)=r^{l+1}\cdot e^{-\kappa r}\cdot f(r)$ mit $\kappa^2=\frac{2m(-E)}{\hbar^2}$)

für Coulomb-Potential $V(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$:

$E_n=\frac{-Z^2me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}=\frac{-(Z\alpha)^2\cdot mc^2}{2}\cdot\frac{1}{n^2}\approx\frac{-Z^2\cdot 13.605eV}{n^2}$.

$\langle r\rangle_{n,l}=\frac{3n^2-l(l+1)}{2}\cdot\frac{a_B}{Z}$, $\langle r^2\rangle_{n,l}=\frac{5n^4+n^2-3n^2\cdot l(l+1)}{2}\cdot\left(\frac{a_B}{Z}\right)^2$

$\langle\frac{1}{r}\rangle_n=\frac{1}{n^2}\frac{Z}{a_B}$, $\langle\frac{1}{r^2}\rangle_{n,l}=\frac{1}{n^3(l+1/2)}\cdot\left(\frac{Z}{a_B}\right)^2$, $\langle\frac{1}{r^3}\rangle_{n,l}=\frac{1}{n^3l(l+1/2)(l+1)}\cdot\left(\frac{Z}{a_B}\right)^3$

mit $\alpha=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\approx\frac{1}{137}$; $\quad a_B=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}=\frac{\hbar}{mc\cdot\alpha}\approx 0.529\cdot 10^{-10}m$

$\Rightarrow[\hat H,\hat{\vec L}^2]=[\hat H,\hat L_z]=0$

$\hat{\vec L}^2=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta})+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$

Eigenfunktionen:

$\hat{\vec L}^2Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)=l(l+1)\cdot\hbar^2\cdot Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)\Rightarrow|\vec L|=\sqrt{l(l+1)}\cdot\hbar \quad l\in\{0,1,...\}$

$\hat L_zY_{l,m}(\vartheta,\varphi)=m\cdot\hbar\cdot Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)\quad\Rightarrow L_z=m\cdot\hbar\quad m\in\{-l,...,l\}$

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

mit $P_{l,m}(z)=\frac{(-1)^m}{2^l l!}\cdot(1-z^2)^{m/2}\cdot\frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}}(z^2-1)^l$:

$Y_{0,0}(\vartheta,\varphi)\equiv\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$; $\quad Y_{1,0}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cdot\cos\vartheta$, $\quad Y_{1,\pm1}(\vartheta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\cdot\sin\vartheta\cdot e^{\pm i\varphi}$;

$Y_{2,0}(\vartheta,\varphi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\cdot(3\cos^2\vartheta-1)$, $\quad Y_{2,\pm1}(\vartheta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cdot\sin\vartheta\cos\vartheta\cdot e^{\pm i\varphi}$,

$Y_{2,\pm2}(\vartheta,\varphi)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot\sin^2\vartheta\cdot e^{\pm 2i\varphi}$;

$R_{n,l}(r)\sim\left[\text{Polynom } (n-1)\text{-ten Grades in } \frac{2Z\cdot r}{n\cdot a_B}\right]\cdot\exp(-\frac{Z\cdot r}{n\cdot a_B})$

$R_{1,0}(r)=2\cdot\left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2}\cdot\exp(-\frac{Z\cdot r}{a_B})$;

$R_{2,0}(r)=\left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2}\cdot\frac{1-\frac{Z\cdot r}{2a_B}}{\sqrt2}\exp(-\frac{Z\cdot r}{2a_B})$, $R_{2,1}(r)=\left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2}\cdot\frac{Z\cdot r}{2\sqrt6\cdot a_B}\exp(-\frac{Z\cdot r}{2a_B})$

Feinstruktur:

• Spin-Bahn-Kopplung: $\vec B_l=\frac{1}{2}\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{Ze}{m_e}\frac{1}{r^3}\vec l$, $\quad\vec\mu_s=-\overbrace{g_s}^{=2,002319304}\underbrace{\mu_B}_{=\frac{e\hbar}{2m}\approx 9.274\cdot10^{-24}\frac{J}{T}}\frac{\vec s}{\hbar}$ $\qquad\vec l\cdot\vec s=\frac{(\vec l+\vec s)^2-\vec l^2-\vec s^2}{2}=\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{2}\hbar^2$

$\Rightarrow\Delta E_{ls}=-\vec\mu_s\cdot\vec B_l=a(n,l)\cdot\frac{\vec l\cdot\vec s}{\hbar^2}$ $\qquad a(n,l)=\frac{g_s}{2}\frac{\mu_0}{8\pi}\frac{Ze^2\hbar^2}{m^2}\langle\frac{1}{r^3}\rangle_{n,l}$

• Die gesamte Feinstruktur-Korrektur $\Delta E_{FS}=-\frac{E_n\cdot(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)<0$ hebt die j-Entartung, die Lamb-Shift die l-Entartung auf.

• Das magnetische Moment $\vec\mu_l+\vec\mu_s$ präzediert um $\vec j$. $\Rightarrow$ Im Mittel resultiert nur $\vec\mu_j=-g_j\ \mu_B\ \frac{\vec j}{\hbar}$.

$|\vec\mu_j|=|\vec\mu_l|\cdot\cos\angle(\vec j,\vec l)+|\vec\mu_s|\cdot\cos\angle(\vec j,\vec s)=1\mu_B\cdot\frac{|\vec l|}{\hbar}\cdot\frac{\vec j^2+\vec l^2-(\vec j-\vec l)^2}{2\cdot|\vec j|\cdot|\vec l|}+2\mu_B\cdot\frac{|\vec s|}{\hbar}\cdot\frac{\vec j^2+\vec s^2-(\vec j-\vec s)^2}{2\cdot|\vec j|\cdot|\vec s|}=\underbrace{\left(\frac{[j(j+1)+l(l+1)-s(s+1)]+2\cdot[j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)]}{2\ j\ (j+1)}\right)}_{=g_j=\frac{3}{2}+\frac{s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}}\cdot\mu_B\cdot\frac{|\vec j|}{\hbar}$

$\Psi_{n,j=l\pm1/2,m}(\vec r)=R_{n,l}(r)\cdot\begin{pmatrix}\alpha_\pm\cdot Y_{l,m-1/2}(\vartheta,\varphi)\\ \beta_\pm\cdot Y_{l,m+1/2}(\vartheta,\varphi)\end{pmatrix}$ mit $\alpha_\pm=\pm\beta_\mp=\sqrt{\frac{l\pm m+1/2}{2l+1}}$.

Zeeman-Effekt:

Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern: minimale Kopplung $\vec p\mapsto\vec p-e\vec A$.

$\hat H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{i\hbar e}{m}\vec A\cdot\vec\nabla+\frac{e^2}{2m}A^2+e\varphi$ in Coulomb-Eichung mit $\vec\nabla\cdot\vec A=0$

für konstantes Magnetfeld $\vec A=-\frac{1}{2}\vec r\times\vec B;\varphi=0$: $\quad\hat H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e}{2m}\vec L\cdot\vec B+\frac{e^2}{8m}B^2\cdot r^2\sin^2\vartheta$