Wasserstoffatom: (Fortsetzung)

Normierte Eigenfunktionen der gebundenen Zustände:

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!\,(2\kappa)^3}{2n\,((n+l)!)^3}}\,(2\kappa r)^l\, e^{-\kappa r}\, L_{n+l}^{2l+1}(2\kappa r) \times Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$= R_{nl}(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Eigenschaften:

(i) $R_{nl}(r)$ hat $n-1-l$ Nullstellen („Knoten") für $r>0$

(ii) Speziell Grundzustandsfunktion:

$n=1,\ l=0 \Rightarrow R_{10}(r)$ hat keine Knoten

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$\Rightarrow \psi_{100}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$$

mit $a_0 = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ „Bohr'scher Radius"

(iii) Speziell $l=0$ („S-Zustände")

$$\psi_{n00}(\vec{r}) \sim e^{-\frac{r}{a_0 n}}\, L_n^1(2\kappa r)$$

Alle diese Zustände sind ungleich null für $r\to 0$

$\Rightarrow$ S-Zustände haben eine endliche Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit im Kern!

(iv) Speziell $l=n-1$ (Zustände mit maximalem Drehimpuls)

$$\psi_{n,n-1,m}(\vec{r}) \sim r^{n-1}\, e^{-\frac{r}{a_0 n}}$$

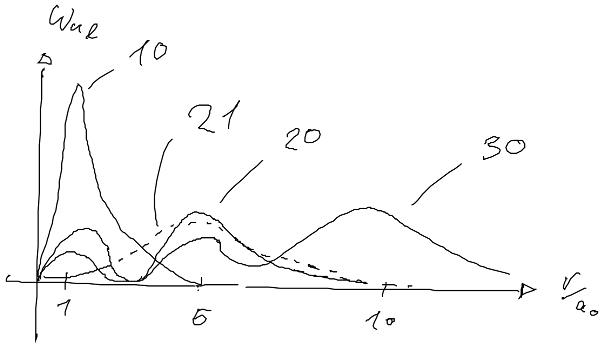
Keine Knoten!

Häufig betrachtet man die sogenannte „radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit":

$$w_{nl}(r)dr = r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \, |\psi_{n,l,m}(\vec{r})|^2$$

$$= r^2 |R_{nl}(r)|^2 dr \qquad (\text{da } Y_{lm}\text{'s normiert})$$

$$= |u_{nl}(r)|^2 dr$$



Magnetisches Moment und Drehimpuls: Zeeman-Effekt

Zunächst klassisch, aus E-Dynamik, Magnetostatik:

Kraft auf Ladung im EM-Feld

Lorentzkraft: $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

Hier gilt nun $\vec{E}=0$. Damit Kraft auf Stromverteilung:

$$\vec{F} = \int d^3x \left[\vec{j}(\vec{x}) \times \vec{B}(\vec{x}) \right]$$

Taylorentwicklung des B-Felds um Zentrum von $\vec{j}(\vec{x})$, abbrechen bei 1. Ordnung:

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{m}\cdot\vec{B}) \longrightarrow B(\vec{0})$$

wobei $\vec{m} = \frac{1}{2}\int \vec{x}\times\vec{j}(\vec{x})\,d^3x$

$= \frac{1}{2}\int \frac{\rho}{m}\underbrace{(\vec{x}\times\vec{p})}_{\text{Drehimpuls}}\,d^3x$

$\vec{j} = \rho\cdot\vec{v}$ ~ Geschw.

ρ ~ Ladungs-Dichte

Mit $\vec{F}$ folgt außerdem:

$$V = -\vec{m}\cdot\vec{B}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{m} = -\vec{\nabla}_{\vec{B}} V$$

Wir stellen fest:

- Keine Kraft für B = konstant.
- Bahndrehimpuls ist mit magnetischem Moment verknüpft.

Zugehörige Observable:

$$\hat{H}|\psi\rangle = V|\psi\rangle \qquad \Big|\ \vec{\nabla}_{\vec{B}}\cdot$$

$$\Rightarrow (\vec{\nabla}_{\vec{B}}\hat{H} - \vec{\nabla}_{\vec{B}}V)|\psi\rangle + (\hat{H}-V)|\vec{\nabla}_{\vec{B}}\psi\rangle = 0 \qquad \Big|\cdot\langle\psi|$$

$$\Rightarrow \langle\psi|\vec{\nabla}_{\vec{B}}\hat{H}|\psi\rangle = \vec{\nabla}_{\vec{B}}V$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\mu} = \vec{\nabla}_{\vec{B}}\hat{H}$$

Operator des magn. Moments

Konstruiere Hamilton-Funktion:

Lorentzkraft $\vec{F}$ nicht konservativ, aber Lagrange-Formalismus anwendbar, wenn $\vec{F} = \frac{d}{dt}\vec{\nabla}_{\vec{v}}V - \vec{\nabla}_{\vec{x}}V$ mit verallgemeinertem Potential V!

$$\Rightarrow \quad V = q(\phi - \vec{v}\cdot\vec{A})$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$
$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \partial_t\vec{A}$$
$\vec{A}$: Vektorpotential

Damit Lagrange-Funktion:

$$L(\vec{x},\vec{v},t) = \frac{m}{2}\vec{v}^2 + q\vec{v}\cdot\vec{A} \underbrace{- q\phi}_{V(r)}$$

generalisierte Impulse:

$$\vec{p} = \vec{\nabla}_{\vec{v}} L = m\vec{v} + q\vec{A}$$

Übergang zur Hamilton-Funktion:

$$H(\vec{x},\vec{p}) = \sum_{i=0}^{3} p_i v_i(\vec{x},\vec{p}) - L(\vec{x},\vec{v}(\vec{x},\vec{p}),t)$$
$$= m\vec{v}^2 + q\vec{A}\cdot\vec{v} - \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - q(\vec{v}\cdot\vec{A}) + V(\vec{x})$$
$$= \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + V(\vec{x})$$
$$= \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + V(\vec{x})$$

Verwende nun das Korrespondenz-Prinzip:

$$\left.\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{x}} \\ \vec{A} &\rightarrow \hat{\vec{A}}(\hat{\vec{x}}) = \vec{A}(\vec{x}) \end{aligned}\right\} \text{Ortsdarstellung}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}})^2 + V(\hat{\vec{x}})$$

Konstantes Magnetfeld B:

$$\Rightarrow \quad \vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{x}\times\vec{B})$$

konstant ⇒ kommutiert

Damit:

$$(\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}})^2 = \hat{\vec{p}}^2 + \frac{q}{2}\left(\hat{\vec{p}}\cdot(\hat{\vec{x}}\times\vec{B}) + (\hat{\vec{x}}\times\vec{B})\cdot\hat{\vec{p}}\right) + \frac{q^2}{4}(\hat{\vec{x}}\times\vec{B})^2$$

vertauschbar

$$= \hat{\vec{p}}^2 + \frac{q}{2}\left(\vec{B}\cdot(\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{x}}) - \underbrace{(\hat{\vec{x}}\times\hat{\vec{p}})}_{=\hat{\vec{L}}}\vec{B}\right) + \frac{q^2}{4}(\hat{\vec{x}}\times\vec{B})^2$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{x}})$$

$$\hat{H}_1 = \frac{-\mu_B}{\hbar}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B}$$

$$\hat{H}_2 = \frac{e^2\vec{B}^2}{8m_e}\hat{\vec{x}}_\perp^2$$

Hier:

$$\mu_B = \frac{e_0\hbar}{2m_e} \quad \text{Bohr'sches Magneton}$$

$$\hat{\vec{x}}_\perp^2 = \hat{\vec{x}}^2 - \frac{(\hat{\vec{x}}\cdot\vec{B})^2}{B^2}$$

Mit $\hat{H}$ und $\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$ nun Def. des magnet. Moments in der QM:

$$\hat{\vec{\mu}} = \vec{\nabla}_{\vec{B}}\hat{H}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{\vec{\mu}} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\hat{\vec{L}} - \frac{e_0^2}{4m_e}\vec{B}\hat{\vec{x}}_\perp^2} \quad (*)$$

$\Rightarrow$ Drehimpuls $\hat{\vec{L}}$ des Elektrons führt zu einem permanenten magn. Moment!

$$\hat{\vec{\mu}} \sim -\hat{\vec{L}} \quad (\text{antiparallel})$$

Darüber hinaus gibt es offensichtlich noch ein induziertes magnetisches Moment $\sim B$

„Diamagnetismus" (2. Term in (*))

Man findet:

Energien zu den $\hat{H}_i$

$$\Delta E_0 \gg \Delta E_1 \gg \Delta E_2$$

$\Rightarrow$ 2. Term ist für Atome meist vernachlässigbar!

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{-\hbar^2\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} - \hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B} + V(\vec{r}) \quad \text{Hamiltonian im äußeren B-Feld}$$

Energie - Eigenwerte?

nehme an: $\vec{B} = B\vec{e}_z$

$\Rightarrow -\hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B} = -B\hat{\mu}_z = B\frac{\mu_B}{\hbar}\hat{L}_z$

nehme außerdem an, dass $V(\vec{r}) = V(r)$ Zentralpotential

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

Wie früher! $\Rightarrow$ Eigenzustände bleiben unverändert!

Folgerung: $\hat{H}_0|n,l,m\rangle = E_{nl}|n,l,m\rangle$

$\hat{L}_z|n,l,m\rangle = m\hbar|n,l,m\rangle$ $m = -l,\dots,l$

$$\Rightarrow \hat{H}|n,l,m\rangle = (H_0 + \underbrace{\frac{\mu_B}{\hbar}L_z B}_{-\hat{\mu}_3})|n,l,m\rangle$$

$$= (E_{nl} + B\mu_B\cdot m)|n,l,m\rangle$$

$\Rightarrow$ Energieniveaus im äußeren B-Feld:

$$E = E_{nl} + \mu_B B m$$

$\Rightarrow$ äußeres B-Feld hebt die Entartung bezgl. der Quantenzahl m auf!
Aufspaltung in $2l+1$ Niveaus, energetisch äquidistant!

$\Rightarrow$ „Zeeman-Effekt"