

Wasserstoffatom: (Fortsetzung)

Normierte Eigenfunktionen der gebundenen Zustände:

$$\begin{aligned}\Psi_{n,l,m}(\vec{r}) &= \sqrt{\frac{(n-l-1)! (2k)^3}{24 (l+1)!}} (2kr)^l e^{-kr} L_{n-l}^{2l}(2kr) \\ &= R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)\end{aligned}$$

Eigenschaften:

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

(ii) Speziell Grundzustandsfunktion:

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

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

$$\Rightarrow \Psi_{100}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\text{mit } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

„Bohr'scher Radius“

(iii) Speziell $l=0$ („s-Zustände“)

$$\Psi_{n00}(\vec{r}) \sim e^{-\frac{r}{a_0 n}} L_n^0(2kr)$$

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

\Rightarrow s-Zustände haben eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern!

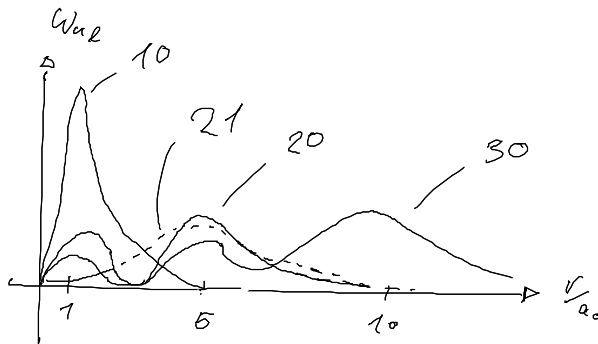
(iv) Speziell $l=n-1$ (Zustände mit maximalem Drehimpuls)

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

Keine Knoten!

Häufig betrachtet man die sogenannte
 "radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit":

$$\begin{aligned}
 w_{nl}(r) dr &= r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |\psi_{nlm}(\vec{r})|^2 \\
 &= r^2 |R_{nl}(r)|^2 dr && \text{(da } Y_{lm} \text{ 's) } \\
 &= |w_{nl}(r)|^2 dr && \text{normiert}
 \end{aligned}$$



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:

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

Teil Lorentzwicklung des \vec{B} -Felds um Zerstreuung von $\vec{j}(\vec{x})$,
 ableiten bei 1. Ordnung:

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

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

Mit \vec{F} folgt außerdem:

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

$$\Rightarrow \vec{m} = - \vec{\nabla}_B V$$

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

$$\vec{J} = \rho \cdot \vec{v} \text{ Geschw.}$$

↖ Ladungs-
Dichte

Wir stellen fest:

- keine Kraft für $B = \text{konstant}$.
- Bahndrehimpuls ist mit magnetischem Moment verknüpft.

Zugehörige Observable:

$$\hat{H}|\psi\rangle = V|\psi\rangle \quad | \vec{\nabla}_B$$

$$\Rightarrow (\vec{\nabla}_B \hat{H} - \vec{\nabla}_B V)|\psi\rangle + (\hat{H} - V)|\vec{\nabla}_B \psi\rangle = 0 \quad | \cdot \langle \psi|$$

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

$$\Rightarrow \vec{\mu} = \vec{\nabla}_B \hat{H} \quad \text{operator des magh. Moments}$$

Konstruiere Hamilton-Funktion:

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

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

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \partial_t \vec{A}$$

Damit Lagrange-Funktion:

\vec{A} : Vektorpotential

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

$\underbrace{\hspace{10em}}_{V(\vec{r})}$

generalisierte Impulse:

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

Übergang zur Hamilton-Funktion:

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

Verwende nun das Korrespondenz-Prinzip:

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

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

Konstantes Magnetfeld \vec{B} :

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

Damit:

\nearrow konstant \Rightarrow kommutiert

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

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Vertauscher}}$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{q}{2} (\vec{B} \cdot (\vec{p} \times \vec{r}) - (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot \vec{B}) + \frac{q^2}{4} (\vec{r} \times \vec{B})^2$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{= \vec{L}}$

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

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

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

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

Hier:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad \text{Bohr'sches magneton}$$

$$r_{\perp}^2 = r^2 - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{B})^2}{B^2}$$

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

$$\vec{\mu} = \nabla_{\vec{B}} \hat{H}$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} - \frac{e^2}{4m_e} \vec{B} r_{\perp}^2 \quad (*)$$

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

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

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

„Diamagnetismus“ (2. Term in $(*)$)

Man findet:

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

Energien zu dem \hat{H}_1 .

\Rightarrow 2. Term ist für Atome meist vernachlässigbar!

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} + V(\vec{r})$$

Hamiltonian im äußeren B-Feld

Energie - Eigenwerte?

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

$$\Rightarrow -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -B \mu_z = B \frac{\mu_B}{\hbar} L_z$$

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

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

Wie früher! \Rightarrow Eigenzustände bleiben
unverändert!

Folgerung:

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{H} |n, l, m\rangle &= \left(\hat{H}_0 + \underbrace{\frac{\mu_B}{\hbar} L_z B}_{-\mu_z} \right) |n, l, m\rangle \\ &= (E_{nl} + B \mu_B m) |n, l, m\rangle \end{aligned}$$

\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“