Wellenfunktionen und Quantenzahlen des Wasserstoff-Atoms

- $$\hat{H}\, u_{n,l,m_l} = E_n\, u_{n,l,m_l}$$

mit

$$u_{n,l,m_l} = R_{n,l}\, \Theta_{l,m_l}\, \phi_{m_l}$$
$$= R_{n,l}\, Y_{l,m_l}$$

Folie Benennung der Bahndrehimpulszustände.

und

- Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$
- Bahndrehimpulsquantenzahl
  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
- magnetischer Quantenzahl
  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

Entartung ist n^2-fach, da $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ Quantenzahlen zum selben Energieeigenwert gehören.

- die Eigenfunktionen u_{n,l,m_l} von $\hat{H}$ bilden ein Orthogonalsystem

$$\int u^*_{n,l,m_l}\, u_{n',l',m_l'}\, dV = \delta_{n,n'}\, \delta_{l,l'}\, \delta_{m_l,m_l'}$$

$$= \begin{cases} 1 & \text{für identische Quantenzahlen} \\ 0 & \text{für mind. eine unterschiedliche Quantenzahl} \end{cases}$$

Der Zeemann - Effekt

- betrachte die Wechselwirkung des mit dem Bahndrehimpuls des Elektrons verknüpften magnetischen Moments $\vec{\mu}$ mit einem homogenen Magnetfeld $\vec{B}$

Potentielle Energie:

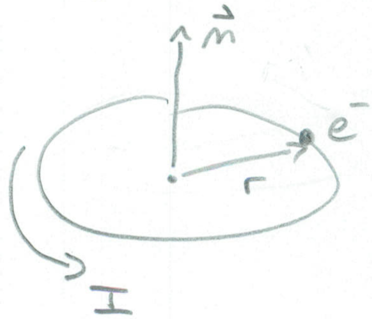
$$\boxed{U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}}$$

$$= -\mu B \cos \Theta$$

$$U_{min} = -\mu B \quad \text{für} \quad \Theta = 0$$

$$U_{max} = \mu B \quad \text{für} \quad \Theta = \pi$$

- magnetisches Moment $\vec{\mu}$ eines $\bar{e}$ auf Kreisbahn



$$\vec{\mu} = I A \vec{n}$$

$$= e f \pi r^2 \vec{n}$$

mit $f = \frac{1}{T}$ Bahnfrequenz

- Zusammenhang mit Bahndrehimpuls $\vec{l}$ des Elektrons

$$\vec{l} = m v r \vec{n} = 2\pi m f r^2 \vec{n}$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{l}}$$

- gyromagnetisches Verhältnis (g-Faktor)

$$g = \frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{l}|} = -\frac{e}{2m}$$

- potentielle Energie ausgedrückt im Drehimpuls $\vec{l}$

$$U = \frac{e}{2m}\,\vec{l}\cdot\vec{B} = \frac{e}{2m}|\vec{B}||\vec{l}|\cos\Theta$$

mit Θ, dem Winkel zw. $\vec{B}$ und $\vec{l}$

- quantenmechanisch gilt für die Erwartungswerte

$$|\vec{l}|\cos\Theta = l_z = m_l \hbar$$

eines Elektrons mit Bahndrehimpuls $|\vec{l}|$ und magnetischer Quantenzahl m_l

- es folgt für die potentielle Energie des bahnmagnetischen Moments im Wasserstoff-Atom

$$U = m_l \frac{e\hbar}{2m} B = m_l \mu_B B$$

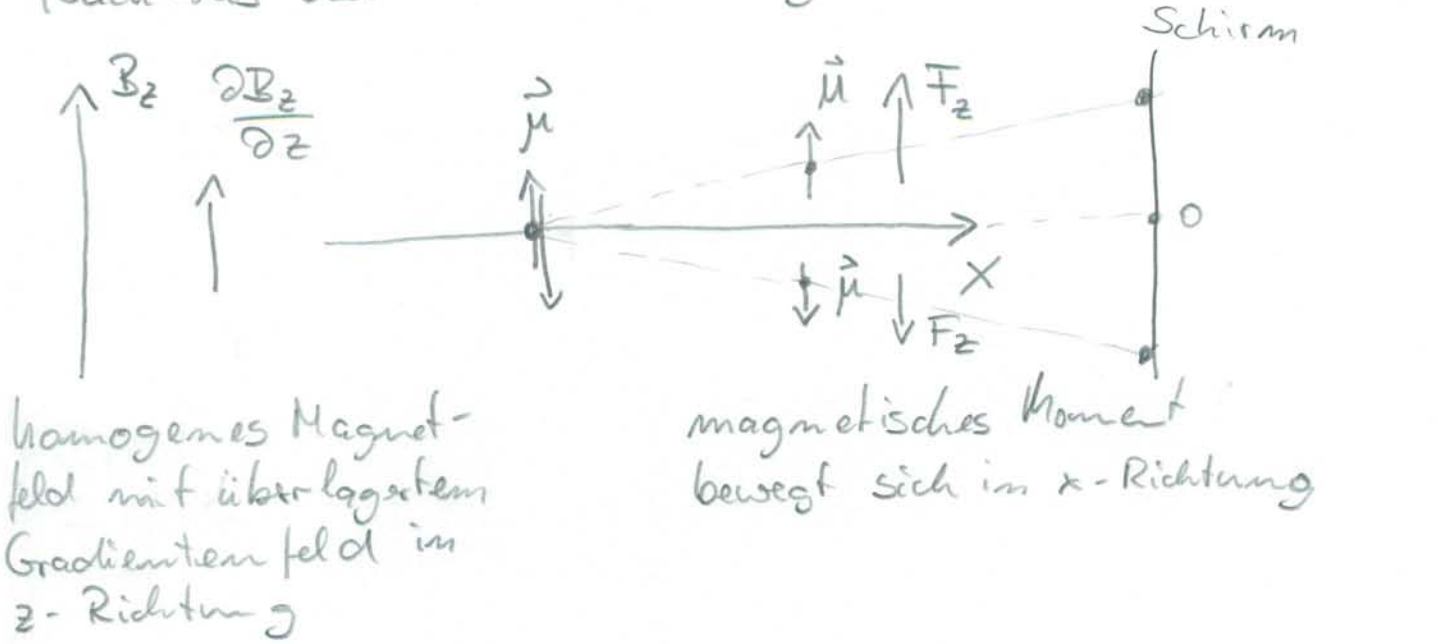
mit $\boxed{\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27\ 10^{-24}\ \frac{J}{T}}$

Bohr-Magneton

Zeige Folie zum Zeemann-Effekt.

Stern - Gerlach Experiment

Nachweis der Quantisierung des Elektron-Spins



- betrachte Atom in dem ein einziges e^- zum magnetischen Moment beiträgt, d.h. kein Bahn-magnetisches Moment ($l = 0$).

$\Rightarrow$ Beispiel: Ag (Silber)

- Kraft auf Ag-Atom

$$F_z = -\frac{\partial U_m}{\partial z}$$

mit U_m potentielle Energie des magnetischen Moments im Magnetfeld

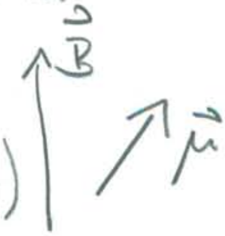
$$U_m = -\mu_z B_z$$

$$= \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

$$= -g_s \frac{e}{2m} \underbrace{m_s}_{\pm\frac{1}{2}} \hbar \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Die Schrödinger-Gleichung für den Elektron-Spin

(1) Hamiltonian eines magnetischen Moments in einem externen Magnetfeld



$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -(\mu_x B_x + \mu_y B_y + \mu_z B_z)$$

$$= -\mu_z B_z \qquad \text{für } \vec{B} = (0,0,B_z)$$

(2) für das magnetische Moment eines Elektrons

$$\vec{H} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \qquad \vec{\mu} = -g_s \frac{e}{2m}\vec{S}$$

$$= g_s \frac{e}{2m}\vec{S}\cdot\vec{B} = g_s \frac{e}{2m}(S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z)$$

$$= g_s \frac{e}{2m} S_z B_z \qquad \text{für } \vec{B} = (0,0,B_z)$$

(3) der quantenmechanische Hamilton Operator

$$\hat{H} = g_s \frac{e}{2m} B_z \hat{S}_z \qquad \text{mit } \langle \hat{S}_z \rangle = m_s \hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

- $\hat{H}\Psi = E\Psi$ mit $\hat{H}$ wie zuvor
- finde Operator $\hat{S}_z$ für Eigendrehimpuls

Die Spin-Operatoren

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{Z}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{X}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}}_{\text{Pauli-Matrizen}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{Y}$$

- Eigenvektoren und Eigenwerte von $\hat{S}_z$

$$\hat{S}_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \underbrace{-\frac{\hbar}{2}}_{\text{Eigenwert}}\underbrace{\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}}_{\text{Eigenvektor}}$$

$$m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

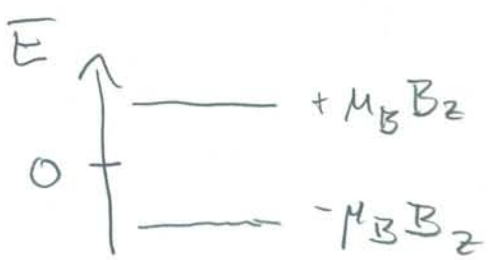
- zugehörige Energien im Magnetfeld

$$\hat{H}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = g_s\frac{e}{2m}B_z\hat{S}_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = g_s\frac{e}{2m}B_z\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\simeq \frac{e\hbar}{2m}B_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = |1\rangle$$

$$\hat{H}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = g_s\frac{e}{2m}B_z\hat{S}_z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = -g_s\frac{e}{2m}B_z\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\simeq -\frac{e\hbar}{2m}B_z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$



$\uparrow B_z$

$\downarrow$; $|\downarrow\rangle$; $|1\rangle$; $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ " $|\uparrow\rangle - |0\rangle$

$\uparrow$; $|\uparrow\rangle$; $|0\rangle$; $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

Notation für Eigenvektoren: von $\hat{\sigma}_z$

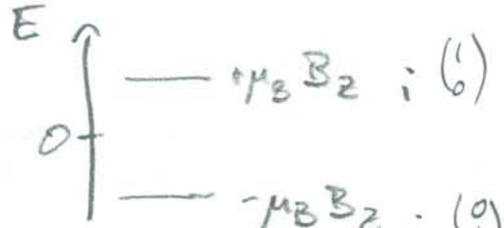
$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = |\downarrow\rangle = |1\rangle = |+1\rangle$$

$$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = |\uparrow\rangle = |0\rangle = |-1\rangle$$

Die Leiteroperatoren

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\,\hat{S}_y = \hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}$$

Erzeuger



$$\hat{S}_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0$$

$$S_+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\,\hat{S}_y = \hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_-\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0$$

Orthogonalität der Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten

$$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = (0,1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0 = \langle\downarrow|\uparrow\rangle$$

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = (1,0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 1 = \langle\downarrow|\downarrow\rangle$$

$$\langle\uparrow| = |\downarrow\rangle^{\dagger} = \left(|\downarrow\rangle^{tr}\right)^{*}$$

Weitere Eigenschaften der Eigendrehimpulsoperatoren

- $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ Betragsquadrat des Eigendrehimpuls

$= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ mit $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

- Eigenvektoren und Eigenwerte

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \left(\frac{\hbar\sqrt{3}}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\left(\frac{\hbar\sqrt{3}}{2}\right)^2}_{\hbar^2 s(s+1) \text{ mit } s=\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Kommutationsrelationen des Eigendrehimpuls

$$\underbrace{[\hat{S}_x, \hat{S}_y]}_{} = -i\hbar \hat{S}_z \quad \text{und zyklisch}$$

keine gleichzeitigen Eigenvektoren
↳ nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmbar

$$\underbrace{[\hat{S}^2, \hat{S}_z]}_{\text{gleichzeitige Eigenvektoren}} = 0$$

- Erwartungswerte

$$\langle \uparrow | \hat{S}_z | \uparrow \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}^{tr} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (0, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} = -\frac{\hbar}{2}$$