

Kurze Wiederholung

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 die Laguerre-Polynome, eine Funktion $(r/n)^l$ sowie eine 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

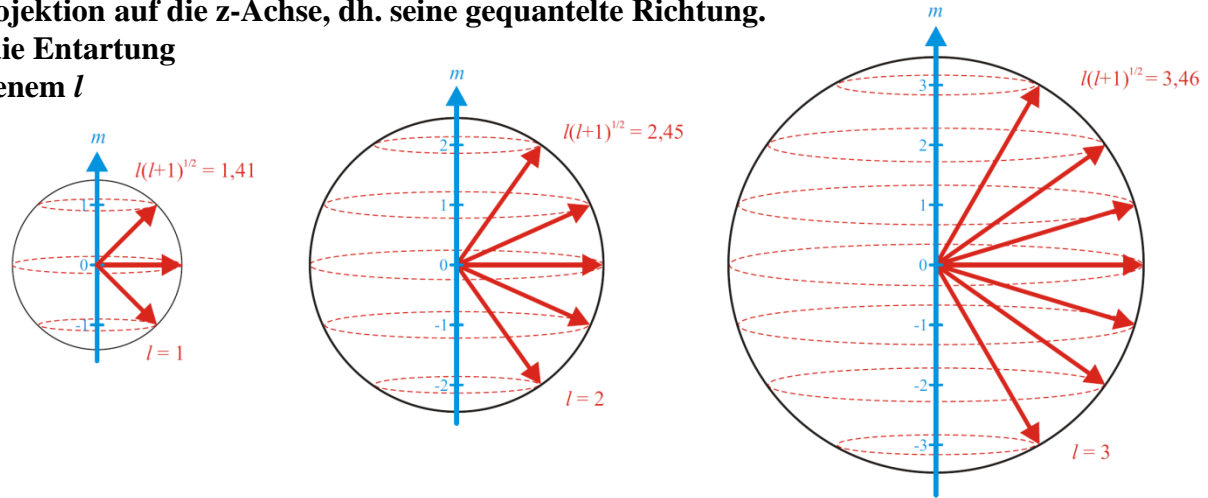
Winkelabhängigkeit

Bahndrehimpuls

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

Traditionelle Bezeichnung:

- $l = 0$ "s"
- $l = 1$ "p"
- $l = 2$ "d"
- $l = 3$ "f"
- $l = 4$ "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 mal Umlauffrequenz (e_n ist hier der Einheitsnormalvektor 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

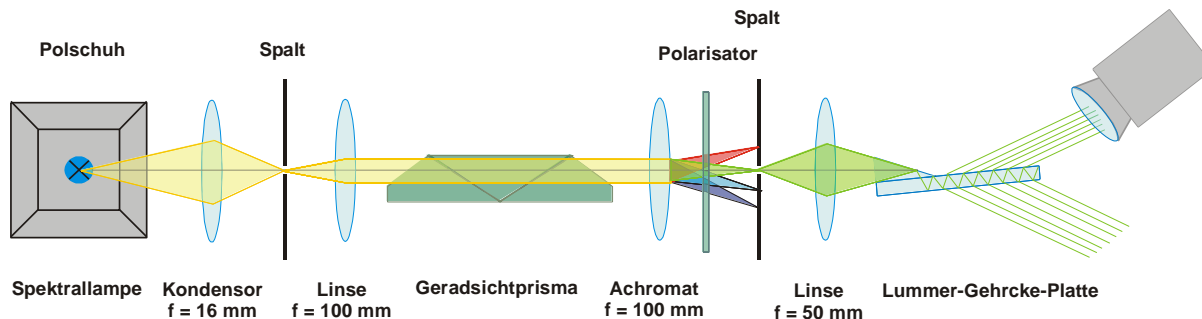
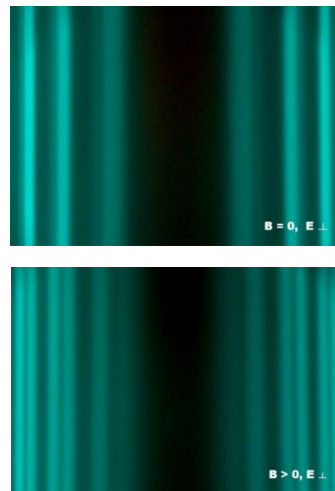
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \cdot r \cdot v \cdot \vec{e}_n \xrightarrow{|\vec{L}| = \hbar} v \cdot r = \frac{\hbar}{m_e} \rightarrow |\vec{p}_m| = -\frac{e \cdot \hbar}{2m_e} \equiv \mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T}$$

"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:

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

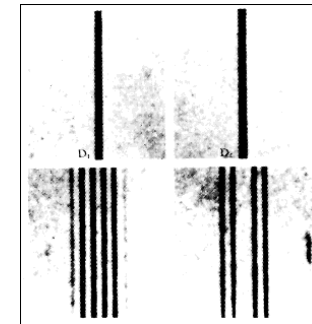
Versuch in der Vorlesung: In einem Magnetfeld spaltet sich die Linie bei 509 nm (grün) einer Cadmium-Spektrallampe auf. Beobachtet wird die Verdopplung der Interferenzlinien einer sog. Lummer-Gehrcke-Platte, das durch Mehrfach-reflexion an den beiden Oberflächen der Platte entsteht.



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.

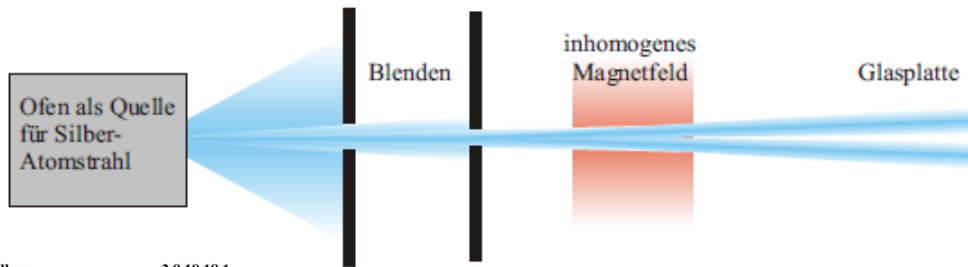
Korrekturen zu den Energiewerten des Wasserstoff-Spektrums

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)	$\alpha^4 \cdot m \cdot c^2 \cdot (m_e / m_p)$

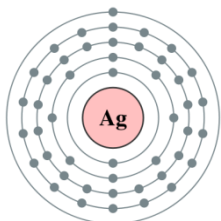
2.13 Der Elektronenspin

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)

Kraft auf ein magnetisches Moment (hier: **magnetisches Spinnmoment**) im inhomogenen Magnetfeld

$$\vec{F} = -\text{grad}(\vec{p}_m \cdot \vec{B}) \quad \vec{p}_m \equiv \vec{\mu}_s = \gamma_s \cdot \vec{s}$$

Der Proportionalitätsfaktor γ zwischen magnetischem Moment und einem Drehimpuls- oder Spin-Vektor heißt **gyromagnetisches Verhältnis**. Wenn die üblichen Regeln für Drehimpulse in der Quantenmechanik gelten, muss der Spin $1/2$ sein, weil es nur zwei Orientierungen des Spin-Vektors gibt

$$|\vec{s}| = \sqrt{s \cdot (s+1)} \cdot \hbar \quad m_s = -s \dots s \quad \rightarrow \quad s = \frac{1}{2} \quad |\vec{s}| = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} \cdot \hbar = \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot \hbar$$

Experimentell findet man für das gyromagnetische Verhältnis von Bahndrehimpuls und Spin

$$\gamma_l = \frac{|\vec{\mu}_l|}{|\vec{l}|} = \frac{e}{2m_e} = \frac{\mu_B}{\hbar} \quad \text{aber} \quad \gamma_s = \frac{|\vec{\mu}_s|}{|\vec{s}|} = \frac{e}{m_e} = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} = 2\gamma_l \quad [\gamma_{l/s}] = \frac{\text{J}}{\text{T} \cdot \text{J} \cdot \text{s}} = \frac{\text{C}}{\text{kg}}$$

$$\vec{\mu}_l = \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{l} \quad \text{analog} \quad \vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \vec{s} \quad \text{mit} \quad g_s = 2,0023 \approx 2$$

Der **gyromagnetische Faktor** oder **Landé-Faktor** g_s ist nicht genau 2. Die Abweichung wird im Rahmen der Quantenelektrodynamik erklärt und ist Gegenstand sogenannter ($g - 2$)-Experimente als Präzisionstests des Standardmodells der Elementarteilchen.

Wie wird das Verhältnis von magnetischem Moment und Drehimpuls/Spin gemessen? Historisches Experiment: der Einstein-de-Haas-Effekt (1915), siehe nächste Seite.

Eine Umkehrung des Einstein-de-Haas-Experiments ist der Barnett-Effekt (1914). Beide können zur Bestimmung des gyromagnetischen Verhältnisses herangezogen werden.



Alfred Landé
(1888 – 1976)

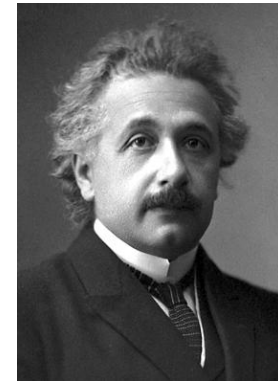
Einstein-de-Haas-Effekt

Ein Eisenzylinder wird in einem Magnetfeld magnetisiert. Wenn die Richtung des Magnetfelds umgedreht wird, klappen alle atomaren magnetischen Momente um. Die Drehimpulsänderung bewirkt eine Rotation des Zylinders.

$$\gamma_s = \frac{|\vec{\mu}_s|}{|\vec{s}|} = \frac{2 \cdot |\vec{\mu}_s|}{2 \cdot |\vec{s}|} \frac{N}{N} = \frac{\Delta M}{\Delta S}$$



Wander de Haas
(1878 – 1960)



Albert-Einstein
(1879 – 1955)

Die Änderung der Magnetisierung ΔM des gesamten Eisenzylinders wird mit magnetischen Methoden bestimmt, das Umklappen der Spins (hauptsächlich der Leitungselektronen) wird über den entstandenen mechanischen Drehimpuls gemessen. Dieser verdreht den Faden, an dem der Eisenzylinder hängt, wobei die Rotationsenergie sich in potenziellen Energie aufgrund der Torsion des Fadens umwandelt.

$$\Delta S = -L \quad E_{rot} = \frac{L^2}{2 \cdot I} = \frac{N^2 \cdot \hbar^2}{M \cdot R^2} \quad \text{weil} \quad I = \frac{1}{2} M \cdot R^2$$

D_r ist das Torsionsrichtmoment und der Winkel φ wird über einen Drehspiegel gemessen, der einen Lichtzeiger reflektiert.

$$E_{pot} = \frac{1}{2} D_r \cdot \varphi^2$$

Experimenteller Nachtrag zum (anormalen) Zeeman-Effekt:

Eine Flamme mit Natriumatomen wirft im Licht einer Na-Lampe einen Schatten. Dies ist nicht mehr der Fall, wenn die Energieniveaus des Na in der Flamme durch ein Magnetfeld verschoben werden.

