# Experimentalphysik IV Atom-, Molekül- und Festkörperphysik

Vorlesung von Prof. Dr. Giuseppe Sansone im Sommersemester 2019

Markus Österle Damian Lanzenstiel

16. Mai 2019

# Inhaltsverzeichnis

0	Ein	ührung	2
	0.1	Wichtige Infos	 2
		0.1.1 Programm	 2
		0.1.2 Übungen	 2
		0.1.3 Literatur	 2
	0.2	Leistungen	2
1	Qua	ntenmechanik	3
	1.1	$ Grundlagen \dots \dots$	 3
	1.2	Drehimpulsoperator	 7
	1.3	Vektormodell	 10
	1.4	Experimente: Wasserstoffatom Spektrum	 11
		1.4.1 Spektrometer	 15
		1.4.2 Energie; Entartung	 15
		1.4.3 Zeeman Effekt	 16
		1.4.4 Stern-Gerlach Experiment	 17
		1.4.5 Spin	 17
	1.5	Feinstruktur des Wasserstoffatoms	20
		1.5.1 Restenergie des Elektrons	 20
		1.5.2 Darwin Term (Compton Wellenlänge)	 21
		1.5.3 Normaler Zeeman Effekt	 23
		1.5.4 Pasch-Bach Effekt	 24
		1.5.5 Hyperfeinstruktur	
		1.5.6 Lamb Shift	 26

# Kapitel 0

# Einführung

# 0.1 Wichtige Infos

#### 0.1.1 Programm

- Atomphysik
- Molekülphysik
- Festkörperphysik

#### 0.1.2 Übungen

- Anfang ab dem 06.05. 10.05.
- Übungsblatt 0 zum Einstieg wird nicht bewertet

#### 0.1.3 Literatur

- Demtröder, Ex 3
- Haken-Wolf, Atom und Quantenphysik
- Christopher J. Foot, Atomic Physics
- Messiah Dover, Quantum Mechanics
- B.H. Bransden, Physics of atoms and molecules

# 0.2 Leistungen

Studienleistung: 50 % der Punkte aller Übungsblätter (kein Kriterium für die Zulassung zur Prüfung)

Prüfungsleistung: 50 % der Punkte und schriftliche Prüfung.

#### Termine:

Klausur 25.07.19 12-14 Uhr

# Kapitel 1

# Quantenmechanik

## 1.1 Grundlagen

i) Wellenfunktion  $\Psi(r)$  mit r der Ortsdarstellung

$$P = \int_V |\Psi(\boldsymbol{r})|^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \quad \text{Wahrscheinlichkeit} \qquad \quad \int_V |\Psi(\boldsymbol{r})|^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 1 \quad \text{Normierungsbedingung}$$

ii) Operatoren  $\hat{O}$ 

$$\hat{O}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi'(\mathbf{r})$$

Korrespondenzprinzip

$$r = \hat{r}$$
  $\hat{r}\Psi(r) = \Psi'(r) = r\Psi(r)$  ;  $\hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x) = \Psi'(x)$ 

$$m{p} = \hat{m{p}}$$
  $\hat{m{p}}\Psi(m{r}) = \Psi'(m{r}) = -i\hbar m{\nabla}\Psi(m{r})$  ;  $\hat{p}_x\Psi(x) = -i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi(x) = \Psi'(x)$ 

 $\hat{\mathcal{H}}=$  Hamiltonian oder Hamilton-Operator.  $\hat{\mathcal{H}}=\hat{\mathcal{H}}(\hat{\pmb{r}},\hat{\pmb{p}})$ 

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})$$

iii) Zeitabhängige Schrödinger Gleichung

$$i\hbarrac{\partial}{\partial t}\Psi(m{r},t)=\hat{\mathcal{H}}\Psi(m{r},t)$$

Die klassische Energie sieht so aus:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

In der QM dann folgendermaßen:

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

Die Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung sieht wie folgt aus:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(m{r})=E\Psi(m{r})$$

Diese Gleichung ist eine Eingenwertgleichung. Der Hamilton Operator liefert also den Energie-Eingenwert E und die Eigenzustände  $\Psi(\mathbf{r})$ .

#### Stationäre Zustände

Jeder messbaren Physikalische Größe ist ein Operator  $\hat{O}$  zugeordnet. Bei einer physikalischen Messung wir der **Erwartungswert** gemessen:  $\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$ .

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi(\boldsymbol{r}) | \hat{O} | \Psi(\boldsymbol{r}) \rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r}) \ \underbrace{\hat{O} \ \Psi(\boldsymbol{r})}_{\Psi'(\boldsymbol{r})} \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \Psi(\boldsymbol{r},t) | \hat{O} | \Psi(\boldsymbol{r},t) \rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r},t) \hat{O} \Psi(\boldsymbol{r},t) d\boldsymbol{r}$$

Diese Gleichung können wir wie folgt umformen:

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \Psi(\boldsymbol{r},t=0) \underbrace{e^{-iEt/\hbar}}_{\text{Phasenfaktor}}$$

$$\begin{split} \langle \hat{O} \rangle &= \int \Psi^*(\boldsymbol{r}, t=0) e^{i E t / \hbar} \hat{O} \Psi(\boldsymbol{r}, t=0) e^{-i E t / \hbar} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \\ &= \int \Psi^*(\boldsymbol{r}, t=0) \hat{O} \Psi(\boldsymbol{r}, t=0) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \stackrel{*}{=} \langle \hat{O}(t=0) \rangle \end{split}$$

\*: wenn  $\hat{O}$  nicht Zeitabhängig ist.

#### Stationäre Zustände

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathcal{H}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{mit} \quad \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-iEt/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t = 0)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\Psi} = -i \frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar} \partial t$$

Lösung der DGL mittels Variablen-Trennung

$$\ln\left[\frac{\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\Psi(\boldsymbol{r},t=0)}\right] = -\frac{i\hat{\mathcal{H}}t}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \Psi(\boldsymbol{r},t) = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r},t=0)$$
$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(\boldsymbol{r},t=0) = E\Psi(\boldsymbol{r},t=0)$$

Taylor Entwicklung:

$$e^x = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} = a\left(\hat{\mathcal{H}}\right)^0 + b\left(\hat{\mathcal{H}}\right)^1 + c\left(\hat{\mathcal{H}}\right)^2 + \dots$$

$$\begin{split} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r},t=0) &= a\Psi(\boldsymbol{r},t=0) + b\hat{\mathcal{H}}\Psi(\boldsymbol{r},t=0) + c\hat{\mathcal{H}}\cdot\hat{\mathcal{H}}\Psi(\boldsymbol{r},t=0) + \dots \\ &= a\Psi(\boldsymbol{r},t=0) + bE\Psi(\boldsymbol{r},t=0) + cE^2\Psi(\boldsymbol{r},t=0) + \dots \\ &= (a+bE+cE^2+\dots)\cdot\Psi(\boldsymbol{r},t=0) \\ &= e^{-iEt/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r},t=0) \end{split}$$

Wir können einen Operator in der e-Funktion schreiben, da diese mit der Taylorentwicklung als Reihe entwickelt werden kann.

#### iv) Spin (Elektronen)

- ⇒ Wasserstoffatom (Stern-Gerlach)
- ⇒ Helium (Pauli Prinzip)

#### v) Quantensysteme

- Freies Teilchen, Potentialstufe (Tunneln)
- Harmonischer Oszillator ⇒ Molekülphysik
- Coulomb Potential  $\Rightarrow$  Wasserstoffatom

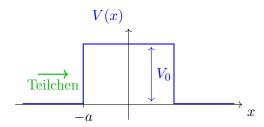


Abbildung 1.1: Darstellung einer Potentialbarriere. Beispiel für den Tunneleffekt eines hindurchfliegenden Teilchens, das eigentlich weniger Energie hat als klassisch nötig wäre um die Barriere zu überwinden. Dieses Bild wurde mit dem LATEXPaket Tikz erstellt.

#### vi) Kommutatoren

$$\hat{x}: \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_{x} \qquad [\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$$

$$\hat{A}; \hat{B}: \qquad [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$
Wellenfunktion  $\Psi(x)$  
$$[\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x) = \Psi'(x)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = x \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)x$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] \Psi(x) = \left\{x \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)x\right\}\Psi(x)$$

$$= x \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi(x)\right) - \left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)x\Psi(x)$$

$$= -i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x} + i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x\Psi(x))$$

$$= -i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x} + i\hbar x\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x} + i\hbar\Psi(x)\underbrace{\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}x}}_{=1}$$

$$= i\hbar\Psi(x) = \Psi'(x)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \qquad \Rightarrow \quad \text{die zwei Operatore vertauschen nicht !!!}$$

#### Eigenschaft Kommutator

$$\hat{A};\,\hat{B}$$
 
$$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}\left|\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\rangle\right|$$

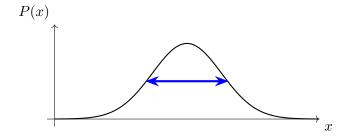


Abbildung 1.2: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Gaußkurve. Der Pfeil soll die Standartabweichung darstellen. Dieses Bild wurde mit dem LATEXPaket Tikz erstellt.

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]$$
 Operator  $\Rightarrow$ 

$$\begin{split} \langle \left[ \hat{A}, \hat{B} \right] \rangle &= \langle \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} | \Psi \rangle \\ &= \int \Psi^* \left( \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \right) \Psi \mathrm{d} \pmb{r} \end{split}$$

 $\Delta A$ ,  $\Delta B$  Standardabweichung

$$\sigma_x = P(x) \quad \sigma_x = \left[ \int (x - \mu)^2 P(x) dx \right]^{1/2} \qquad \mu = \int x P(x) dx$$

$$\hat{A} = \hat{x}, \ \hat{B} = \hat{p}. \ [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \ge \frac{1}{2} \left| \langle \left[ \hat{A}, \hat{B} \right] \rangle \right|$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \ge \frac{1}{2} \left| i\hbar \right| = \frac{\hbar}{2}$$

#### Morgen:

Operatoren die vertauschen: Drehimpulsoperator  $\boldsymbol{l}$  mit den Komponenten  $l_x, l_y, l_z$  und  $l^2$ . Es gilt  $\left[l^2, l_z\right] = 0$ 

$$\Delta l^2 \cdot \Delta l_z \ge 0$$

Man kann also Zustände finden, bei denen  $\Delta l^2 = 0$ ;  $\Delta l_z = 0$  sind. Diese Zustände können im Prinzip existieren und verletzen die Unschärferelation nicht! Diese Zustände sind dann gleichzeitig Eigenzustände von  $l^2$  und  $l_z$ .

#### Exkurs: Varianz und Standardabweichung in der Quantenmechanik

Wellenfunktion  $\Psi(x)$  mit Wahrscheinlichkeit  $P(x) = |\Psi(x)|^2$ 

$$\mu = \int x P(x) dx = \int x |\Psi(x)|^2 dx$$
$$\sigma = \int x^2 P(x) dx = \int x^2 |\Psi(x)|^2 dx$$

Die Varianz ist definiert als:

$$\sigma^2 = \int (x - \mu)^2 P(x) dx = \int (x^2 + \mu^2 - 2\mu x) P(x) dx$$

$$= \int x^2 P(x) dx + \mu^2 \int P(x) dx - 2\mu \int x P(x) dx$$

$$= \int x^2 P(x) dx + \mu^2 - 2\mu \mu = \int x^2 P(x) dx - \mu^2$$

$$= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

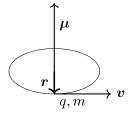
#### **Programm Heute**

- Drehimpulsoperator
- Kugelflächenfunktionen (Wasserstoffatom)
- Vektormodell (klassische Darstellung)
   Macht es leichter z.B. die Wechselwirkung zwischen Drehimpulsoperator und Magnetfeld zu verstehen. Dieses klassische Modell macht voraussagen über die QM.
- Experimente (Spektrum des Wasserstoffatoms)
- Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

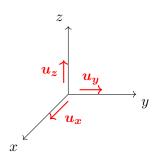
### 1.2 Drehimpulsoperator

$$egin{aligned} m{r} &\Rightarrow \hat{m{r}} = m{r} \ m{p} &\Rightarrow \hat{m{p}} = -i\hbarm{
abla} \ m{l} &\Rightarrow \hat{m{l}} = m{r} imes (-i\hbarm{
abla}) = -i\hbarm{r} imes m{
abla} \end{aligned}$$

 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v}$ 



$$\hat{m{l}} = -i\hbar egin{array}{ccc} m{u}_x & m{u}_y & m{u}_x \ x & y & z \ rac{\partial}{\partial x} & rac{\partial}{\partial y} & rac{\partial}{\partial z} \ \end{array} = -i\hbar$$



$$\begin{split} l_x &= -i\hbar \left\{ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right\} \\ l_y &= -i\hbar \left\{ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right\} \\ l_z &= -i\hbar \left\{ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\} \end{split}$$

$$[l_x, l_y] = l_x l_y - l_y l_x \neq 0$$

#### Vertauschungsregeln

$$\begin{split} [l_x,l_y] &= i\hbar l_z \\ [l_y,l_z] &= i\hbar l_x \\ [l_z,l_x] &= i\hbar l_y \end{split}$$

Das Betragsquadrat berechnet sich wie folgt:  $l^2=l_x^2+l_y^2l_z^2$ 

#### Vertauschungregeln

$$\lceil l^2, l_x \rceil = \lceil l^2, l_y \rceil = \lceil l^2, l_z \rceil = 0$$

Wir werden bevorzugt  $l_z$  verwenden.

Die Eigenzustände von  $l_z$ 

$$l_z = -i\hbar \left\{ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right\} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

 $l_z \Rightarrow$  Drehung um die z-Achse

Wir suchen die Operatoren  $\Phi(\varphi)$ . Hierzu stellen wir eine Eigenwertgleichung auf und lösen diese.

$$\begin{split} l_z\Phi(\varphi) &= m\hbar\Phi(\varphi) \quad \Rightarrow \quad -i\hbar\!\!\!/\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi(\varphi) = m\hbar\!\!\!/\Phi(\varphi) \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial\Phi}{\Phi} = im\partial\varphi \\ \int \frac{\partial\Phi}{\Phi} &= \int im\partial\varphi \quad \Rightarrow \quad \Phi(\varphi) = ae^{im\varphi} \end{split}$$

Aufgrund der Definition von  $\varphi$  erwarten wir, dass unsere Funktion bei den Winkeln  $\varphi_0$  und  $\varphi_0 + n \cdot 2\pi$   $(n \in \mathbb{Z})$  gleich sind.  $\Phi(\varphi_0) = \Phi(\varphi_0 + 2\pi)$ 

$$\Rightarrow \oint de^{im\varphi_0} = de^{im\varphi_0}e^{im2\pi} \Rightarrow e^{im2\pi} = 1$$

$$m = 0$$

$$m = 1 \Rightarrow e^{i2\pi} = 1!$$

$$m = 2 \Rightarrow e^{i4\pi} = 1!$$

$$m = -1 \Rightarrow e^{-i2\pi} = 1!$$

$$m = -2 \Rightarrow e^{-i4\pi} = 1!$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

m = Magnetische Quantenzahl

 $\Rightarrow$  Zeemann Effekt

$$l_x \Phi(\varphi) = m\hbar \Phi_m(\varphi) \qquad \Phi_m(\varphi) = ae^{im\varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \Phi_m^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) = 1 \quad \Rightarrow \quad a = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

#### Eigenzustände $l^2$

$$\begin{cases} l^2 \mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 \mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi) \\ l_z \mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi) = m\hbar \mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi) \end{cases}$$

 $\hat{l^2}=l^2,\,\hat{l_z}=l_z;$  beide Ausdrücke sind Operatoren, auch wenn sie ohne Dach geschrieben werden.

Operatoren  $\hat{A}\rho(\mathbf{r}) = a\rho(\mathbf{r})$   $\Rightarrow$  Eigenzustände und Eigenwerte.

m = magnetische Quantenzahll = Drehimpuls Quantenzahl

$$\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi) \propto e^{im\varphi} P_l^m(\cos(\theta)) \cdot a$$

 $P_l^m$  sind die **Legendre Polynome**.

Wir haben bereits gesehen, dass  $m=0,\pm 1,\pm 2,\dots \in \mathbb{Z}$  und  $l=0,1,2,\dots \in \mathbb{N}$  sein müssen. Es gilt  $-l\leq m\leq l$ .

Also 
$$m = -l, m = -l + 1, m = -l + 2, \dots, m = 0, \dots, m = l - 2, m = l - 1, m = l$$

$$\int d\Omega \mathcal{Y}_{l,m}^*(\theta, \varphi) \mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \qquad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

$$\begin{aligned} l' &= l \\ m' &= m \end{aligned} \Rightarrow \int d\Omega |\mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 = 1$$

$$l' &= l \Rightarrow \delta_{ll'} = 0 \Rightarrow \int d\Omega \mathcal{Y}_{0,m}^*(\theta, \varphi) \mathcal{Y}_{0,m}(\theta, \varphi) = 0$$

#### Kugelflächenfunktionen

$$l=0, m=0 \Rightarrow$$

$$\mathcal{Y}_{0,0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$l = 1, m = -1$$

$$\mathcal{Y}_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \underbrace{\sin \theta}_{P_I^m(\cos \theta)} e^{-i\varphi}$$

$$l = 1, m = 0$$

$$\mathcal{Y}_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$l = 1, m = 1$$

$$\mathcal{Y}_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\cos\theta e^{i\varphi}$$

[Folie: Betragsquarat der Kugelflächenfunktionen] (Darstellung der Elektronen-Orbitale)

 $\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi)$ 

$$l = 0 \Rightarrow b - \text{Obrital}$$
  
 $l = 1 \Rightarrow p - \text{Obrital}$ 

$$l=2 \Rightarrow d-\text{Obrital}$$

$$l = 3 \implies f - \text{Obrital}$$

## 1.3 Vektormodell

Die Kugelflächenfunktionen sind die Eigenzustände von  $l^2$  und  $l_z$  und liefern die Eigenwerte  $l(l+1)\hbar^2$  und  $m\hbar$ .

Die Länge von  $\boldsymbol{l}$  ist  $\sqrt{l(l+1)\hbar^2},$  die von der z-Komponente  $l_z$  ist  $m\hbar.$ 

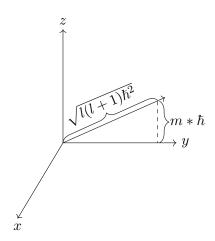


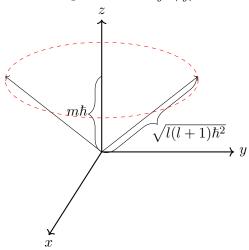
Abbildung 1.3: Grafische Darstellung des Vektormodels

Klassisch wissen wir z-Komponente Länge  $|\boldsymbol{l}|$  und müssen für die anderen beiden Komponenten zurück zur QM.

$$\langle l_x \rangle = \langle \mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) | l_x | \mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) \rangle = \int \mathcal{Y}_{l,m}^*(\theta, \varphi) l_x \mathcal{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) \stackrel{*}{=} 0$$

(\*) kann mathematisch gezeigt werden, ist aber nicht Teil der Vorlesung.

Das selbe gilt auch für  $l_y$ :  $\langle l_y \rangle = 0$ 



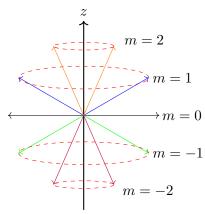
$$\begin{aligned} |\boldsymbol{l}| &= \sqrt{l(l+1)\hbar^2} \\ l_z &= m\hbar \\ \langle l_x \rangle &= 0 \\ \langle l_y \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Abbildung 1.4: Intuitives Model wobei die rote Kreisbahn den Abstand  $\sqrt{l(l+1)\hbar^2}$  zum Mittelpunkt hat und parallel zur x,y-Achse liegt

#### Beispiel:

$$l=2,\,m=-2,-1,0,1,2$$

$$\Rightarrow |\boldsymbol{l}| = \sqrt{6}\hbar$$



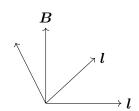


Abbildung 1.6: Zeeman Effekt

Abbildung 1.5: Präzession um die z-Achse hängt von der Quantenzahl m ab.

## 1.4 Experimente: Wasserstoffatom Spektrum

Präsentation auf Folien: Wasserstoffatom

[Folie: Balmer Series: Wasserstoffatom]

Es gibt verschiedene Zustände im Atom. Man misst das Licht, dass von diesem Atom emittiert wird mit einem Spektrometer. Man erhält Spektrallinien (zunächst einmal die **Balmer Serie**). Beispielsweise die schwarzen Absorptionslinien im Sonnenspektrum oder diskrete Emissionslinien im Wasserstoffspektrum. Die Linien befinden sich im sichtbaren Spektrum und im nahen UV Die Position der Linien führte auf die **Balmer Gleichung**:

$$\lambda = B\left(\frac{m^2}{m^2 - 4}\right)$$

[Folie: Lyman Series: Wasserstoffatom]Später wurde dann die **Lyman Serie**. Diese Linien sind eher im UV Bereich zu finden. Auch für ihre Positionen konnte eine Gleichung aufgestellt werden.

$$\lambda = \frac{1}{R_H} \left( \frac{m^2}{m^2 - 1} \right)$$

[Folie: Bohrsches Atommodell]

Im Bohrschen Atommodell geht man von festen Umlaufbahnen der Elektronen um den Atomkern aus. Bohr hat eine Quantisierung des Drehimpulses eingeführt als die Stationären Zustände der De-Broglie Wellenlänge der Elektronen.

Mit der Quantisierung der Umlaufbahnen kommt man zu Schlussfolgerung, dass die Energie der Elektronen nicht beliebig sondern diskret ist. Durch die Energie der emittierten Photonen konnte die **Rydberg-Formel** aufgestellt werden, die die Wellenlängen der Balmer- und der Lyman-Serie beschreibt.

$$\lambda = \frac{hc}{R_y} \left( \frac{m^2 n^2}{m^2 - n^2} \right)$$

[Folie: Rydberg Saal in Lund]

Bild der Originalen Gleichung von Rydman an einer Wand verewigt.

Wie man an der allgemeineren Rydberg-Formel kann man erkennen, dass die Balmer Serie ein

Spezialfall für n=2 und die Lyman-Serie ein Spezialfall für n=1 ist.

[Folie: Übergänge zwischen stationären Zuständen]

Alle weiteren bekannten Serien wie: Balmer, Lyman, Paschen, Brackett, und Pfund.

#### Morgen

- Energie des Wasserstoffatoms
- Korrespondenzprinzip:  $({m r} o {m r},\, {m p} o -i\hbar {m \nabla})$  Zeitunabhängige Schrödingergleichung
- Energiezustände und Eigenwerte
- Drehimpulsoperator  $\boldsymbol{l}$  und Kugelflächenfunktionen  $\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\varphi)$

#### Lach und Sachgeschichten, heute mit:

- Wasserstoffatom mit Schrödingergleichung
  - Wellenfunktion (Quantenzahlen)
  - Energieniveaus (Entartung)
- Spektroskopie
  - Wasserstoffatom
  - Spektrometer
  - Balmar-Serie
- Zeeman Effekt
- und natürlich mit der Maus

#### \*hier fehlt eine Grafik∗

Energie des Wasserstoffatoms:

$$E = \frac{p_k^2}{2M} + \frac{p_e}{2m_e} + V(r) = \underbrace{\frac{p_k^2}{2M}}_{\text{Kern}} + \underbrace{\frac{p_e^2}{2m_e}}_{\text{Elektron}} - \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}}_{\text{Coulomb}}$$

$$R_k = R_{cM} + r_k$$

$$R_1 = R_{cM} + r_1$$

Energie des Wasserstoffatoms im Schwerpunktsystem:

$$E = \frac{p_{cM}^2}{2M_{tot}} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$

12

- $M_{tot} = M + m$
- $m_{cM} = (m_e + M)v_{cM}$  Impuls des Schwerpunktes
- $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} = \frac{m_e}{\frac{m_e}{M} + 1} \approx m_e$  Reduzierte Masse mit  $m_e \ll M$
- $p = \frac{1}{M+m_e}[m_e p_k M p_1]$  relatives Moment

Hamiltonoperator lässt sich in ähnlicher Weise auseinander ziehen.

$$E_{cM} = \frac{p_{cm}^2}{2M_{tot}} \qquad E_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$E \Rightarrow \hat{H} \equiv H$$

$$H = H_{cM} + H_0$$

$$H_{cm} = \frac{p_{cM}^2}{2M_{tot}} \stackrel{*}{=} -\frac{\hbar^2}{2M_{tot}} \nabla_{cM}^2$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$

(\*)  $p_{cM}$  als Operator da H ein Operator ist:  $p_{cM} = -i\hbar\nabla_{cM}$  Eigenzustände für  $H_{cM}$  und  $H_0$ :

 $H_{cm}$  ist der Hamilton für ein freies Teilchen

Schrödinger GL 
$$H_{cM} * \Psi_{cM} = E_{cM} \Psi_{cM} \Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2M_{tot}} \nabla^2 \Psi_{cM} = E_{cM} \Psi_{cM}$$

Für die Wellengleichung eines freien Teilchens gilt:

$$\begin{split} \Psi_{cM}(\boldsymbol{R_{cM}}) &= Ce^{i(\boldsymbol{p_{cM}R_{cM}})} \frac{1}{\hbar} \\ \Rightarrow &- \frac{\hbar^2}{2M_{tot}} \nabla^2 \Psi_{cM} = - \frac{\cancel{\mathbb{Z}^2}}{2M_{tot}} \frac{-\boldsymbol{p_{cM}^2}}{\cancel{\mathbb{Z}^2}} \cancel{\Psi_{cM}} = E_{cM} \cancel{\Psi_{cM}} \\ \Rightarrow &\frac{\boldsymbol{p_{cM}^2}}{2M_{tot}} = E_{cM} \end{split}$$

Schwerpunkt:

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \stackrel{\mu=m_e}{\approx} \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

Relative Bewegung des Wasserstoffs:

$$\Rightarrow \boxed{ -\frac{\hbar}{2m_e} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \Psi(\mathbf{r}) = E_0 \Psi(\mathbf{r}) }$$

Lösen der Gleichung mit Kugelkoordinaten:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l^2}{\hbar^2 r^2}$$

 $l^2$  = Drehimpulsoperator deshalb verwenden wir Kugelflächenfunktionen da wir dort diesen auch vorfinden.

Aufspalten der Wellenfunktion in einen Radial und einen Winkelanteil:

$$\begin{split} \Psi(r) &= \underbrace{R_{E_0,l}(r)}_{\text{Radialteil}} \underbrace{\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\phi)}_{\text{Winkelanteil}} \\ \Rightarrow &-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\hbar^2 r^2} \right] R_{E_0,l}(r) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} R_{E_0,l}(r) = E_0 R_{E_0,l}(r) \\ & l^2 \mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2 \mathcal{Y}_{l,m}(\theta\phi) \end{split}$$

$$U_{E_0,l}(r) = rRE_0, l(r)$$

$$\frac{d^2U_{E_0,l}(r)}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar} \left[ E_0 - V_{eff}(r) \right] U_{E_0,l}(r) = 0$$

$$V_{eff}(r) = \underbrace{-\frac{l^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}}_{\text{Coulomb Potential}} + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}}_{\text{Coulomb Potential}} \text{Zentrifugal} potential$$
(1.1)

[Folie: Zentrifugalpotential]

Durch lösen von (1.1) erhält man die Hauptquantenzahlen n

$$\Psi_{l,n,m}(r) = R_{n,l}(r)\mathcal{Y}_{l,m}(\theta,\phi)$$

Dies sind die drei Quantenzahlen die die Wellenfunktion eines Wasserstoffatoms beschreiben.

- $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
- $0 \le l \le (n-1)$
- -l < m < l

#### Beispiel

$$n = 2 \Rightarrow l = 0 \rightarrow m = 0$$
  
$$\Rightarrow l = 1 \rightarrow m = 1, m = 0, m = -1$$

Energie hängt im Wasserstoffatom nur von der Hauptquantenzahl ab, im Gegensatz zur Wellenfunktion die von drei abhängig ist.

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{m_e}{\hbar^2}$$

Radialer Anteil der Wellenfunktion mit  $n = 1 \Rightarrow l = 0$ 

$$R_{10} = 2(\frac{1}{a_0})^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a_0}}$$
 
$$\underline{a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e l^2}}$$
 Bohrradius (erste Umlaufbahn)

[Folie: Radialer Anteil der Wellenfunktion:  $R_{n,l}(r)$ ]

$$|\psi_{nkm}(m{r})|^2 \quad \Rightarrow \quad r^2 \mathrm{d}r \sin heta \mathrm{d} heta \mathrm{d}arphi$$

$$\int |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int_{r_0}^{r_1} dr \int_{\Omega} \sin\theta d\theta d\varphi |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2$$

$$= \int_{r_0}^{r_1} r^2 dr \int_{\Omega} \sin\theta d\theta d\varphi |R_{nl}(\mathbf{r})|^2 \cdot |\mathcal{Y}_{lm}(\theta,\varphi)|^2$$

$$= \int_{r_0}^{r_1} r^2 |R_{nl}(\mathbf{r})|^2 dr \underbrace{\int_{\Omega} \sin\theta |\mathcal{Y}_{lm}(\theta,\varphi)|^2 d\theta d\varphi}_{\Omega = 4\pi}$$

$$= \int_{r_0}^{r_1} r^2 |R_{nl}(\mathbf{r})|^2 dr$$

#### 1.4.1 Spektrometer

\*hier fehlt eine Grafik\* [Folie: Spektrometer]

NIST Database für Spektrallinien von Atomen und Molekülen. https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database und https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines\_form.html.

Balmer Linie

$$n=3$$
  $\Rightarrow$   $n=2!$   
 $n=4$   $\Rightarrow$   $n=2!$   
 $n=5$   $\Rightarrow$   $n=2!$ ?  
 $n=6$   $\Rightarrow$   $n=2!$ ?

[Folie: Transmission von  $SiO_2$  bei verschiedenen Wellenlängen] [Folie: Extreme ultraviolet (XUV) Spektrometer]

### Programm Heute

• Wasserstoffatom: Energie Entartung

ullet Normaler Zeeman Effekt Magnetfeld  $oldsymbol{B}$ 

ullet Stern-Gerlach Experiment  $\Rightarrow$  Spin s

• Spin s

• Zusammenfassung zweier Drehimpulsen  $l, s \Rightarrow l + s$ 

• Feinstruktur der Energie des Wasserstoffatoms

#### 1.4.2 Energie; Entartung

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{m_e}{\hbar^2}$$

$$n = 1 \qquad l = 0 \qquad m = 0 \quad \Rightarrow \quad 1 \qquad 1s$$

\*hier fehlt was\*

Entartungsgrad

$$K = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

Radialanteil der Wellenfunktionen

$$n = 1 l = 0 R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$n = 2 l = 0 R_{20}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$n = 2 l = 1 R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

#### 1.4.3 Zeeman Effekt

#### Klassisches Modell:

\*hier fehlt eine Grafik∗

Drehimpuls  $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ 

Strom  $I = \frac{-e}{T} = -e \frac{v}{2\pi R}$ 

Magnetisches Moment $p_m$ 

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p}_{m} &= \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{u}_{n} = \boldsymbol{I} \pi \boldsymbol{R}^{2} \cdot \boldsymbol{u}_{n} = -\frac{ev}{2\pi \mathcal{K}} \pi \boldsymbol{R}^{2} \boldsymbol{u}_{n} = -\frac{ev R \boldsymbol{u}_{n}}{2} \\ \begin{cases} \boldsymbol{p}_{m} &= -\frac{ev R \boldsymbol{u}_{n}}{2} \\ \boldsymbol{l} &= \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = m_{2} v R \boldsymbol{u}_{n} \end{cases} \\ \boldsymbol{p}_{m} &= -\frac{e}{2m_{e}} m_{e} v R \boldsymbol{u}_{n} = -\frac{e}{2m_{e}} \cdot \boldsymbol{l} = -\frac{e\hbar}{2m_{e}\hbar} \boldsymbol{l} = -\mu_{B} \frac{\boldsymbol{l}}{\hbar} \\ \mu_{B} &= \frac{e\hbar}{2m_{e}} = 9.27 \cdot 10^{-24} \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{T}} \quad \text{Bohrsches Magneton} \end{aligned}$$

Elektrisches Feld

$$E = -\boldsymbol{p}_{el} \cdot \boldsymbol{E}$$

Magnetisches Feld

$$E = -\boldsymbol{p}_m \cdot \boldsymbol{B} \quad \Rightarrow \quad E = \mu_B \frac{\boldsymbol{l}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{B} = \mu_B \frac{l_z}{\hbar} \cdot \boldsymbol{B}$$

$$\boldsymbol{B} = B \boldsymbol{u}_z$$

Damit erhalten wir:

$$E = \mu_B \frac{1}{\hbar} \cdot Bl_z$$

mit  $l_z = m\hbar$  führt dieser Zusammenhang zu:

$$Em = \mu_B \frac{1}{\hbar} Bm \hbar = m\mu_B \cdot B$$

\*hier fehlt eine Grafik\*

Die Differenz der Entarteten Energieniveaus ist  $\mu_B B$ .

#### **Hamilton Operator**

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \mathcal{H}_0$$
 Wasserstoffatom  
 $\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_B = \mathcal{H}_0 + \mu_B \frac{1}{\hbar} B l_z$ 

Das  $\mathcal{H}_B$  stammt aus der Wechselwirkung zwischen Wasserstoffatom und  $\boldsymbol{B}$ -Feld. Wir haben gesehen, dass die Operatoren  $l^2$  und  $l_z$  vertauschen.

Wasserstoffatom 
$$\begin{bmatrix} l^2, l_z \end{bmatrix} = 0$$
  $\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$   
 $\left\{ \mathcal{H}_0; l^2, l_z \right\} \Rightarrow \psi_{nlm}(\mathbf{r})$   
 $\mathcal{H}_0 \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = E_n \quad \psi_{nlm}(\mathbf{r})$   
 $l^2 \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = l(l+1)\hbar^2 \quad \psi_{nlm}(\mathbf{r})$   
 $l_z \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = m\hbar \quad \psi_{nlm}(\mathbf{r})$ 

$$[\mathcal{H}_0\mathcal{H}_B]=0$$

$$\mathcal{H}_{B} = \frac{\mu_{B}}{\hbar}Bl_{z} \qquad \mathcal{H}_{B}|\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle = \frac{\mu_{B}B}{\hbar}l_{z}|\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle = \frac{\mu_{B}B}{\hbar}\cdot m\hbar|\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle$$

$$\langle \psi_{nlm}(\boldsymbol{r})|\mathcal{H}_B|\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle = \langle \psi_{nlm}(\boldsymbol{r})|\mu_B Bm|\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle = \mu_B Bm\langle \psi_{nlm}(\boldsymbol{r})|\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle = \mu_B Bm$$

#### 1.4.4 Stern-Gerlach Experiment

$$Ag = \underbrace{[Kr]\,4d^{10}}_{\text{volle Schale}}\,5s^1$$

\*hier fehlt eine Grafik\*

 $\Rightarrow$  Wasserstoffähnlich!

s Zustand  $l = 0 \Rightarrow m = 0$ 

$$F = -\nabla E_m = p_m \cdot \nabla B$$

Dieses Modell beschreibt die experimentelle Beobachtungen nicht ausreichend. Daher wurde die Hypothese aufgestellt, dass das Elektron einen weiteren Freiheitsgrad besitzt: den **Spin**.

#### 1.4.5 Spin

$$\mu_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} s$$
 Spinimpuls

$$m{p}_m = m{\mu} e = -rac{\mu_B}{\hbar} m{l}$$
 Bahndrehimpuls

Hierbei ist  $g_s$  der Landé Faktor.

Da wir festgestellt haben, dass bei bekanntem l, m nur die ganzzahligen Werte zwischen -l und l annehmen kann  $(-l \le m \le l)$ .

Da wir für den Spin nur 2 Möglichkeiten haben werden diese  $s=+\frac{1}{2}$  sodass:

$$\Rightarrow \quad m_s = -\frac{1}{2}; +\frac{1}{2}$$

Da wir fordern  $-s \le m_s \le s$ 

 $\boldsymbol{s}$  Spin-Operator:  $\boldsymbol{s}$ :  $s_x; s_y; s_z$ 

$$[s_x, s_y] = i\hbar s_z$$
  $[s_x, s_z] \neq 0$   $[s_y, s_z] \neq 0$   $[l_x, l_y] = i\hbar l_z$   $[l_x, l_z] \neq 0$   $[l_y, l_z] \neq 0$ 

$$[s^2, s_z] = [s^2, s_x] = [s^2, s_y] = 0$$
  
 $[l^2, l_z] = [l^2, l_x] = [l^2, l_y] = 0$ 

l Drehimpuls Quantenzahl 
$$-l \le m \le +l$$

$$s$$
 Spinquantenzahl  $-s \le m_s \le +s \stackrel{\text{Elektronen}}{\Rightarrow} s = \frac{1}{2}$ 

$$l^2; l_z \Rightarrow \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \qquad l^2 \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$$
  
$$l_z \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$s^{2}; s_{z} \quad \Rightarrow \quad \chi_{1/2, m_{s}} \qquad s^{2} \chi_{1/2, m_{s}} = s(s+1) \hbar^{2} \chi_{1/2, m_{s}} = \frac{1}{2} \left( \frac{3}{2} \right) \hbar^{2} \chi_{1/2, m_{s}} = \frac{3}{4} \hbar^{2} \chi_{1/2, m_{s}}$$
$$b_{2} \chi_{1/2, m_{s}} = m_{s} \hbar \chi_{1/2, m_{s}}$$

\*hier fehlt was∗

$$\begin{array}{l} \star \text{hier fehlt eine Grafik}\star \\ |\alpha\rangle\colon s^2|\alpha\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\alpha\rangle \Rightarrow |\boldsymbol{s}| = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \\ s_z|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle \\ \chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \\ \text{spin-up} \\ |\beta\rangle\colon s^2|\beta\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\beta\rangle \Rightarrow |\boldsymbol{s}| = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \\ s_z|\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle \\ \chi_{\frac{1}{2},--\frac{1}{2}} \\ \text{spin-down} \end{array}$$

#### Wasserstoffatom

 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 

Spin:  $\chi_{\frac{1}{2},m_s}$ 

Die gesamte Wellenfunktion des Wasserstoffatoms

$$\psi(q) = \underbrace{\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})}_{\substack{\text{Räumlicher} \\ \text{Anteil}}} \chi_{\frac{1}{2},m_s} \qquad \text{mit} \quad q \equiv (\boldsymbol{r},s)$$

$$egin{array}{ll} m{l} & \Rightarrow & m{p}_m = m{\mu}_l = -rac{\mu_B}{\hbar} m{l} \ m{s} & \Rightarrow & m{\mu}_s = -g_s rac{\mu_B}{\hbar} m{s} \end{array}$$

 $g_s = g$ -Faktor = 2  $\Rightarrow$  Q.E.D

- ullet Zusammensetzung 1 s
- Feinstruktur des Wasserstoffatoms

j = l + s Gesamtdrehimpuls

 $j_x; j_y; j_z$ 

$$[j_x,j_y] = [l_x + s_x; l_y + s_y] = \underbrace{[l_x,l_y]}_{i\hbar l_z} + [l_x,s_y] + \underbrace{[s_x,l_y]}_{i\hbar s_z} + \underbrace{[s_x,s_y]}_{i\hbar s_z} = i\hbar \left\{l_z + s_z\right\} = i\hbar j_z$$

j Drehimpulsoperator

$$\underbrace{\frac{j^2; j_z}{l^2; l_z}}_{\underline{s^2; s_z}} \Rightarrow \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) 
\Rightarrow \chi_{1/2}; m_s$$

$$j^2 \to j(j+1)\hbar^2$$
 Eigenwerte  $j$  Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $j_z \to m_j \hbar$  Eigenwerte  $-j \le m_j \le j$ 

Quantenzahlen l und s angegeben  $\Rightarrow j = ?$ 

 $\begin{array}{ccc}
l &= 1 &\Rightarrow m_l = \pm 1; 0 \\
s &= \frac{1}{2} &\Rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2}
\end{array}$ Wasserstoffatom in einem p-Zustand

$$egin{aligned} egin{aligned} j_z = l_z + s_z \ egin{aligned} egin{aligned} j = oldsymbol{l} + oldsymbol{s} \ m_j = m_l + m_s \end{aligned}$$

$$\begin{split} m_j &= -\frac{3}{2} \Rightarrow j = \frac{3}{2} \quad \Rightarrow m_j = -\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}; +\frac{1}{2}; +\frac{3}{2} \\ m_j &= -\frac{1}{2} \Rightarrow j = \frac{1}{2} \quad \Rightarrow m_j = \quad -\frac{1}{2}; +\frac{1}{2} \end{split}$$

#### Zusammensetzung zweier Bahndrehimpulse

Helium 
$$\boldsymbol{l}_1$$
  $\boldsymbol{l}_2$   $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{l}_1 + \boldsymbol{l}_2$   $L^2 \Rightarrow L(L+1)\hbar^2$   $L_z \Rightarrow m_L\hbar$ 

$$\begin{array}{ll} l_1 = 1 & \Rightarrow m_{l_1} = \pm 1; 0 \\ l_2 = 2 & \Rightarrow m_{l_2} = \pm 2; \pm 1; 0 \end{array}$$

$$[j_x,j_y] = [l_{1x} + l_{2x};l_{1y} + l_{2y}] = \underbrace{[l_{1x},l_{1y}]}_{i\hbar l_{1z}} + [l_{1x},l_{2y}] + [l_{2x},l_{1y}] + \underbrace{[l_{2x},l_{2y}]}_{i\hbar l_{2z}} = i\hbar \left\{ l_{1z} + l_{2z} \right\} = i\hbar L_z$$

\*hier fehlt eine Grafik∗

$$(-1;0) = (m_{l_1} = -1; m_{l_2} = 0)$$
  
 $(0;-1) = (m_{l_1} = 0; m_{l_2} = -1)$ 

$$m_L = 3 \Rightarrow L_3 \quad \Rightarrow m_L = \pm 3; \pm 2; \pm 1; 0$$
  
 $m_L = 2 \Rightarrow L_2 \quad \Rightarrow m_L = \pm 2; \pm 1; 0$   
 $m_L = 1 \Rightarrow L_1 \quad \Rightarrow m_L = \pm 1; 0$ 

$$\begin{array}{ccc} l_1=1 \\ l_2=2 \end{array} \quad \Rightarrow \quad L=1,2,3$$

$$\begin{array}{ccc}
l = 1 \\
s = \frac{1}{2}
\end{array} \Rightarrow j = \frac{1}{2}; \frac{3}{2}$$

$$|l_2 - l_1| \le L \le l_1 + l_2$$

$$-L \le m_L \le L$$

$$|l - s| \le j \le l + s$$

$$-j \le m_j \le j$$

$$|l-s| \le j \le l+s$$

$$-L \le m_L \le L$$

$$-j \le m_j \le j$$

#### Vektormodell

 $\boldsymbol{l}; l_z$ 

\*hier fehlt eine Grafik\*

$$\langle j_x \rangle = 0$$

$$\langle j_x \rangle = 0$$

j = l + s

$$l^2; l_z; s^2; s_z$$
 
$$\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \quad \chi_{1/2, m_s}$$

\*hier fehlt eine Grafik\*

$$j^{2}; j_{z}; l^{2}; s^{2}$$

$$j_{z} \Rightarrow m_{j} = \frac{1}{2} \xrightarrow{m_{l} = 0; m_{s} = \frac{1}{2}} m_{l} = 1; m_{s} = -\frac{1}{2}$$

\*hier fehlt eine Grafik\*

1s: 
$$m=1$$
  $s \Rightarrow l=0$   $l=0$  und  $b=\frac{1}{2} \Rightarrow j=\frac{1}{2}$   $qs_{1/2}$   $\star$ hier fehlt was  $\star$ 

#### 1.5 Feinstruktur des Wasserstoffatoms

$$\left. \begin{array}{l} E_{1s} \approx -13.6 \, \mathrm{eV} \\ E_{2s} \approx -3.4 \, \mathrm{eV} \end{array} \right\} \approx 10 \, \mathrm{eV} \\ E_{3s} \approx -1.5 \, \mathrm{eV} \right\} \approx 2 \, \mathrm{eV}$$

Feinstruktur  $\approx 10^{-4} \div 10^{-5} \, \text{eV}$ 

- (Rest-) Ruheenergie des Elektrons
- Darwin Term (Compton Wellenlänge)
- Spin-Bahn Kopplung

#### 1.5.1 Restenergie des Elektrons

 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 

$$\Delta E_1 = \langle \psi_{nlm}(\boldsymbol{r})| - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_e^3 c^2} |\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\rangle = \int d\boldsymbol{r} \psi_{nlm}^* \left[ -\frac{p^4}{m_e^3 c^2} \right] \psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$$

 $\boldsymbol{p} \Rightarrow -i\hbar \boldsymbol{\nabla}$  einsetzen liefert:

#### Korrekturterm

$$\Delta E_1 = -E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left[ \frac{3}{4} - \frac{n}{e + \frac{1}{2}} \right]$$

$$n=$$
 Hauptquantenzahl  $\alpha=$  Feinstrukturkonstante $\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\approx\frac{1}{137}$ 

n=1, l=0 1s Zustand

$$\Delta E_1 = -E_{100} \frac{\alpha^2}{1} \left[ \frac{3}{4} - \frac{1}{\frac{1}{2}} \right] = -E_{100} \alpha^2 \left( -\frac{5}{4} \right) = \frac{5}{4} \alpha^2 E_{100} \simeq 9 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$E_{100} = E_{nlm} = -13.5 \text{ eV}$$

#### 1.5.2 Darwin Term (Compton Wellenlänge)

\*hier fehlt eine Grafik\*

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$

 $\lambda \nu = c \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$ 

$$E = m_e c^2$$

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$
  $\Rightarrow m_e c^2 = h\frac{\cancel{e}}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{m_e c}$ 

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$\Rightarrow V_{\text{eff}}(r) = \int d\mathbf{r}' \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

Im folgenden soll  $\lambda_C$  die reduzierte Compton-Wellenlänge also  $\frac{\lambda_C}{2\pi}$  bezeichnen.

\*hier fehlt eine Grafik∗

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} \frac{1}{2\pi}$$

$$\rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \begin{cases} -\frac{e}{\left(\frac{4}{3}\pi\lambda^3 c\right)} & |\mathbf{r}'| < \lambda_C \\ 0 & |\mathbf{r}'| > \lambda_C \end{cases}$$

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V(r) + \frac{\pi}{2}\lambda^2 c \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \delta(\mathbf{r})$$
Dirac Delta

$$\Delta E_2 = \frac{\pi}{2} \lambda^2 c \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \quad \langle \psi_{nlm}(\boldsymbol{r}) | \delta(\boldsymbol{r}) | \psi_{nlm}(\boldsymbol{r}) \rangle$$

l = 0 s-Zustände

$$\Delta E_2 = -E_n \frac{\alpha^2}{n}$$

mit n der Hauptquantenzahl

$$\frac{\Delta E_2}{E_{100}} = -\alpha^2 = -5.3 \cdot 10^{-5}$$

#### Programm Heute

- Spin-Bahn Kopplung
- Feinstruktur des Wasserstoffs
  - $\rightarrow$  Anomaler Zeeman Effekt
- ullet Zeeman Effekt o Normaler Zeeman Effekt
  - $\rightarrow$  Paschen-Back Effekt
- Spin Bahn Kopplung

$$L=1:2$$
  $2p ounderline{2p_{3/2}}{2p_{3/2}}$   $table{L} \Rightarrow \mu_C = -\frac{\mu_B}{\hbar} L$   $s \Rightarrow \mu_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} s$   $table{L} \Rightarrow \mu_s = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} s$ 

Bio Savart Gesetz:

Bezugssystem des Elektrons: \*hier fehlt eine Grafik\*

$$\begin{split} \mathrm{d}\bar{B} &= \frac{\mu_0}{4\pi} I \frac{\mathrm{d}I \times \Delta \boldsymbol{r}}{|\Delta r|^3} \quad \Rightarrow B = \frac{\mu_0 I}{2r} \\ I &= \frac{e}{T} \frac{e v_K}{2\pi r_K} \qquad \to B = \frac{\mu_0}{2r} \frac{e v_K}{2\pi r_K} = \frac{\mu_0 e v_K r_K}{4\pi r_K^3} \end{split}$$

$$B = \frac{\mu_0 e v_K r_K}{4\pi r_K^3} \Rightarrow B = \frac{\mu_0 e}{4\pi r_K^3} = \frac{\mu_0 e}{4\pi r_K^3 m_e} r_K \times m_e v_K$$

$$B = \frac{\mu_0 e}{4\pi r^3 m_e} (r \times m_e v) \underbrace{\frac{1}{2}}_{\text{Lorenz Transformation}}$$

$$B = \frac{\mu_0 e}{8\pi r^3 m_e} \mathbf{L}$$

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \mathbf{m}_e \boldsymbol{v} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

$$E = -\underbrace{\mu_s}_{\substack{\text{Magnetisches} \\ \text{Dipolmoment}}} \cdot \underbrace{B_r}_{\substack{\text{\"aukeres} \\ \text{Magnetfeld}}} = -\underbrace{\left(-g_s \frac{\mu_B}{\hbar} s\right)}_{\mu_s} \cdot \underbrace{\frac{\mu_0 e}{8\pi r^3 m_e} L}_{\substack{\text{B}}} = \underbrace{g_s \mu_B \frac{\mu_0 e}{8\pi r^3 m_e} \frac{1}{\hbar} s L}_{\substack{\text{nur abhängig von } r, \ s, \ L}}$$

Suchen 
$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}$$
:  $\mathbf{j} = \mathbf{L} + \mathbf{s} \Rightarrow \mathbf{j}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{s} \Leftrightarrow \mathbf{L} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2}(j^2 - L^2 - s^2)$ 

Eigenzustände:  $j^1$ ;  $L^2$ ;  $s^2$ 

Basen: 
$$\{L^2; L_2; s^2; s_2$$
  $\{j^2; L_2; s^2; j_2 \}$ 

Fokus auf die 2. da dort 
$$j$$
 dabei ist. 
$$E = \frac{\mu e^2}{8\pi r^3 m_2^2} \cdot s \cdot L = \frac{\mu_0 e^2}{8\pi r^3 m_e^2} \frac{1}{2} [j^2 - L^2 - s^2] \Rightarrow H_{SO} = \text{Spin-Bahn Kopplung}$$

$$E = \langle H_{SO} \rangle = \frac{\mu_0 e^2}{8\pi m_e^2} \frac{1}{2} \left\langle njLsj_z \middle| \frac{1}{r^3} Lj^2 - L^2 - s^2 \middle| njLsj_2 \right\rangle$$

$$E = \langle H_{SO} \rangle = \underbrace{\frac{\mu_0 e^2}{8\pi m_e^2} \frac{1}{2} \frac{1}{r^3 nL}}_{\text{radial Anteil}} \underbrace{\langle jLsj_z | Lj^2 - L^2 - s^2 | jLsj_z \rangle}_{\text{Winkelanteil}}$$

$$\langle 1/r^3 \rangle = \langle nL | 1/r^3 | nL \rangle = \frac{1}{r^3 m_e}$$

$$E = \langle H_{SO} \rangle = \frac{\mu_0 e^2}{8\pi m_e^2} \frac{1}{2} \frac{1}{r^3 m_e} \{ j(j+1)\hbar^2 - L(L+1)\hbar^2 - s(s+1)\hbar^2 \}$$

$$E = \langle H_{SO} \rangle = \frac{a}{2} [j(j+1) - L(L+1) - s(s+1)] \qquad a = \frac{\mu_0 e^2}{8\pi m_e^2} \frac{1}{rm_e} \hbar^2$$

• 
$$j = L - \frac{1}{2}$$

$$E = \langle H_{SO} \rangle = \frac{a}{2} [(L - 1/2)(L + 1/2) - L(L + 1) - 3/4]$$
$$= -\frac{a}{2}(L + 1)$$

$$\bullet \ j = L + \frac{1}{2}$$

$$E = \langle H_{SO} \rangle = \frac{a}{2} [(+ - 1/2)(L + 1/2) - L(L + 1) - 3/4]$$
$$= \frac{aL}{2}$$

Aufspaltung der Energie einmal größer einmal kleiner. \*hier fehlt eine Grafik\*

$$\frac{\Delta e_3}{E_{210}} = -\frac{\alpha^2}{12} = -4 \cdot 44 \cdot 10^{-6}$$

$$210 \Rightarrow n = 2, \ L = 1 \Rightarrow 2p \text{ Zustand} \Rightarrow j = \frac{3}{2}$$

 $\Delta E_1$ ,  $\Delta E_2$ ,  $\Delta E_3$  alle Beschrieben

#### Feinstruktur der Energieniveaus

$$\Delta E_{\mathrm{FStruktur}} = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3 = E_m \left[ \frac{\alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

nur von n und j abhängig.

- \*hier fehlt eine Grafik\*
- \*hier fehlt was\*

#### **Programm Heute:**

- $\bullet$  Anormaler Zeeman Effekt j
- Normaler Zeeman Effekt
- Paschen-Back Effekt
- Hyperfeinstruktur (Wasserstoffatom): Atomuhr
- Lamb Shift

#### 1.5.3 Normaler Zeeman Effekt

S=0 Helium  $S=s_1+s_2$  Beim Heliumatom gibt es zwei Spins für die beiden Elektronen. Es gibt hier zwei Möglichkeiten: entweder up-up und down-down **oder** up-down und down-up. Deher gibt es zwei Möglichkeiten für den Gesamtspin.

$$S$$
 /  $S=0$   $\Rightarrow$  Normaler Zeeman Effekt  
  $S$  /  $S=1$   $\Rightarrow$  Anormaler Zeeman Effekt

$$H = H_0 + rac{\mu_B}{\hbar_0} m{L} \cdot m{B} \qquad m{L} = m{l}_1 + m{l}_2$$

Energie Verschiebung

$$E_B = \frac{\mu_B}{\hbar_0} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} = \frac{\mu_B}{\hbar_0} L_z \cdot B$$

 $mit L_z = m_z \hbar$ 

$$E_B = \frac{\mu_B}{\hbar \sqrt{2}} m_z \hbar \sqrt{B} = \mu_B m_z B$$

#### 1.5.4 Pasch-Bach Effekt

 $E_{so} \ll E_B$ 

$$H = H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} (\boldsymbol{l} + 2\boldsymbol{s}) \cdot \boldsymbol{B} = H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} (l_z + 2s_z) \cdot \boldsymbol{B}$$

Operatoren  $l^2; l_z; s^2, s_z$ 

$$E_B = \frac{\mu_B}{\hbar} \left( m_l \hbar + 2m_s \hbar \right) \cdot B = \mu_B \left( m_l + 2m_s \right) \cdot B$$

Betrachten wir hierzu ein Beispiel:

Was passiert mit dem p-Zustand wenn wir ein starkes äußeres Magnetfeld anlegen, sodass die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigbar klein wird: p-Zustand l=1  $s=\frac{1}{2}$ 

$$\begin{array}{c|c|c|c} m_l & m_s & m_l + 2m_s \\ \hline -1 & -1/2 & -2 \\ -1 & +1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & -1 & B \neq 0 \\ 0 & +1/2 & +1 \\ 1 & -1/2 & 0 \\ 1 & +1/2 & +2 \\ \end{array}$$

\*hier fehlt eine Grafik\*

$$p \dots \text{ mit } l = 1 \quad s = \frac{1}{2} \quad m_l = 0; \pm 1 \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$

 $p\dots$  mit l=1  $s=\frac{1}{2}$   $m_l=0;\pm 1$   $m_s=\pm \frac{1}{2}$  [Folie: Anormaler Zeeman- und Paschen-Bach-Effekt Kombination beider Effekte]

[Folie: Natrium Energieniveaus] [Na] = [NA] $3s^1 n^{2s+1} L_j$ 

$$n^{2s+1}L_j \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

$$s = \frac{1}{2} = S \quad 2S + 1 = 2$$

$$l = 0 = L$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{J} = L + S = \frac{1}{2}$$

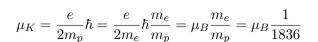
### 1.5.5 Hyperfeinstruktur

 $10^{-6} \div 10^{-8} \, \text{eV}$ 

Drehimpuls des Kerns I (des Protons) Wasserstoff

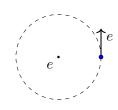
$$E_{HFS} = -\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{B}_{j} \qquad \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{I}} = g_{I} \frac{\mu_{K}}{\hbar} \boldsymbol{I}$$

 $g_I = \text{Kern } \rho \text{ Faktor}$  $\mu_K = \text{Kernmagneton}$ 



 $oldsymbol{B}_i \propto -oldsymbol{i}$ 

$$E_{HFS} = -\boldsymbol{\mu}_I \cdot \boldsymbol{B}_j = -|\boldsymbol{\mu}_j| \cdot B_j \cos(\boldsymbol{\mu}_I, \boldsymbol{B}_j) = \begin{bmatrix} |\boldsymbol{\mu}_I| B_j \cos(\boldsymbol{I}, \boldsymbol{j}) \end{bmatrix}$$



$$\cos(oldsymbol{j},oldsymbol{I}) = rac{oldsymbol{j}oldsymbol{I}}{|oldsymbol{j}||oldsymbol{I}|} \quad \Rightarrow \quad oldsymbol{j}\cdotoldsymbol{I}$$

$$m{F} = m{I} + m{j} = ext{ Gesamtdrehimpuls des Atoms} \hspace{0.5cm} m{I} \Rightarrow ext{Kern (proton)} \\ m{j} \Rightarrow ext{Elektron}$$

$$|\mathbf{F}| = \sqrt{F(F+1)}\hbar \qquad -f \le m_F \le f$$

$$\cos(\mathbf{I}, \mathbf{j}) = \frac{1}{2} \frac{\left(F^2 - I^2 - j^2\right)}{|\mathbf{j}||\mathbf{I}|} = \frac{1}{2} \frac{\left[F(F+1)\hbar^2 - I(I+1)\hbar^2 - j(j+1)\hbar^2\right]}{\sqrt{j(j+1)}\hbar\sqrt{I(I+1)}\hbar}$$

Ähnliches wurde Vorhin in der Vorlesung bei der Spin-Bahn Kopplung festgestellt.

$$E_{HFS} = |\boldsymbol{\mu}_{I}|B_{j}\cos(\boldsymbol{I},j) = |\boldsymbol{\mu}_{I}|B_{j}\frac{1}{2}\frac{[F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)]}{\sqrt{j(j+1)}\sqrt{I(I+1)}}$$

$$= \frac{A}{2}\left[F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)\right]$$

$$A = \frac{g_{I}\mu_{K}B_{j}}{\sqrt{j(j+1)}}$$

#### Wasserstoff Grundzustand

$$\begin{array}{cccc} l=0 & s=\frac{1}{2} & \text{Elektron} & j=\frac{1}{2} \\ I=\frac{1}{2} & \text{Proton} & I=\frac{1}{2} \end{array} \Rightarrow \textbf{\textit{F}} = \textbf{\textit{I}} + \textbf{\textit{j}} |I-\textbf{\textit{j}}| \leq F \leq I+\textbf{\textit{j}} \end{array} \nearrow \begin{array}{c} F=1 \\ \searrow & F=0 \end{array}$$

$$E_{HFS}(F=0) = \frac{A}{2} \left[ F(F+1) - I(I+1) - j(j+1) \right] = \frac{A}{2} \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{2} \right) \right]$$
$$= \frac{A}{2} \left( -\frac{3}{2} \right) = \frac{-3A}{2}$$
$$E_{HFS}(F=1) = \frac{A}{2} \left[ 1 \cdot 2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = \frac{A}{4}$$

\*hier fehlt eine Grafik\*

 $\Delta E = 5.9 \cdot 10^{-6} \, \text{eV}$ 

 $\nu = 1420\,\mathrm{MHz}$ 

 $\lambda = 21 \, \text{cm} \, (\text{Radioastronomie})$ 

#### Wasserstoff erster angeregter Zustand

[Folie: Atomuhr]

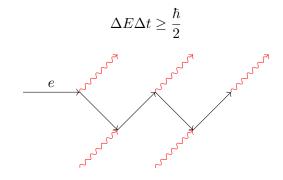
Die Zeit wird hierbei mit einem Bestimmten Energieübergang definiert. Hierfür ist die Hyperfeinstruktur sehr wichtig.

[Folie: Cäsium energy levels]

#### 1.5.6 Lamb Shift

 $2s_{1/2}; 2p_{1/2} \implies \text{Lamb Shift}$ Feinstrukturen n; j

In der Quantenelektrodynamik (QED) gilt:



Zitterbewegung: \*hier fehlt eine Grafik\* 
$$E_{\rm pot} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \quad \Rightarrow \quad \langle E_{\rm pot}\rangle = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left\langle\frac{1}{r+\delta r}\right\rangle$$
 
$$\begin{array}{c} 2s_{1/2} & 2p_{1/2} \\ l=0 & l=1 \\ \left\langle\frac{1}{r+\delta r}\right\rangle_{2s} & \left\langle\frac{1}{r+\delta r}\right\rangle_{2p} \\ 2s_{1/2} & 2p_{1/2} \end{array}$$
 
$$\Delta E = 4,3\cdot 10^{-6}\,{\rm eV} \quad \Delta E = -5,95\cdot 10^{-8}\,{\rm eV}$$

[Folie: Lamb-Verschiebung: Lamb-Rutherford Experiment]