1.6 QM - Bahndrehimpuls und normaler Zeeman-Effekt

1.6.1 Bahndrehimpuls - Operator

klassisch:
$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} y p_z - z p_y \\ z p_x - x p_z \\ x p_y - y p_x \end{pmatrix}$$

def. Vektor op.:
$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix}$$

Ortsdarstellung

$$\longrightarrow \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \\ z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \\ x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$ in karth. Koord. $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

$$= \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos\vartheta\cos\varphi}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta\sin\varphi}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix} \quad (*)$$

in Kugelkoord.

Quadrat des Drehimpulsoperators:

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

$$\xrightarrow[\text{Kugelkoord.}]{\text{Ortsdarst.}} \quad -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

dies ist gerade der Winkelanteil des Laplace-Op. Δ

und den haben wir schon gelöst:

Ortsdarstellung: $\hat{\vec{L}}^2 \, Y_{l,m_l}(\vartheta,\phi) = \hbar^2 \, l(l+1) \, Y_{l,m_l}(\vartheta,\phi)$

darstellungsfrei: $\hat{\vec{L}}^2 \, |l,m_l\rangle = \hbar^2 \, l(l+1) \, |l,m_l\rangle$

Weiterhin (durch Anwenden von (Δ)):

- $\hat{L}_z \, Y_{l,m_l} = \hbar \, m_l \, Y_{l,m_l}$

  $\hat{L}_z \, |l,m_l\rangle = \hbar \, m_l \, |l,m_l\rangle$

- Die Kugelflächenfkt. sind KEINE Eigenfunktionen von $\hat{L}_x$ und $\hat{L}_y$.

BSP: Wasserstoff:

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

Die Observablen (1) Energie E_n

(2) Drehimpulsquadrat $\hbar^2 l(l+1)$

(3) z-Projektion des Drehimpuls $\hbar m_l$

sind gleichzeitig scharf meßbar

$\Leftrightarrow$ $|n, l, m_l\rangle$ ist Eigenzustand dieser 3 Operatoren

$\Leftrightarrow$ Messungen dieser Observablen, egal in welcher Reihenfolge, ändern den Zustand nicht

Aber (allg.):

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad , [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \qquad \Rightarrow \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar \hat{\vec{L}}$$

Die 3 Komponenten des Bahndrehimpuls können nicht gleichzeitig scharf gemessen werden!

$\Leftrightarrow$ Die Messung einer Komponente verändert die anderen

• WICHTIG: Nichts ist speziell an der z-Achse!!

Alle L-Orbitale ($m = -l, \ldots, l$) sind sphärisch symmetrisch!

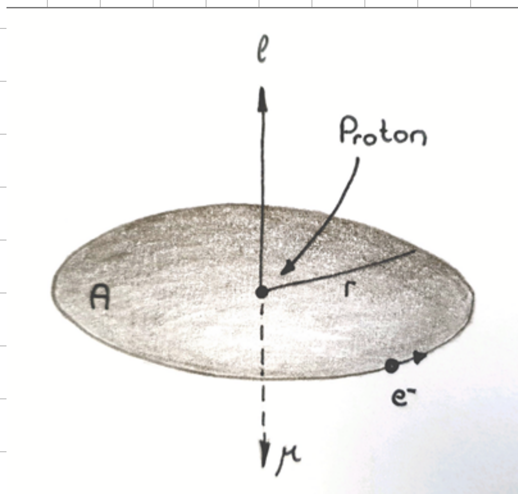
1.6.2 Normaler Zeeman - Effekt

Wasserstoff - Atom in homogenem magn. Feld

$\vec{B} = B\vec{e}_z$

Was passiert mit den Zuständen $|n, l, m_l\rangle$ und Energien E_n?

Semiklassisches Modell



1) Bohr: Elektron auf Kreisbahn

2) Biot - Savart: Kreisstrom erzeugt magnetisches Moment

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

I: Strom

A: Kreisfläche

$\vec{n}$: Flächennormale

Beides zusammen:

$I = -e\nu$ $\qquad$ ν: Umlauffrequenz

$A = \pi r^2$ $\qquad$ r: Bahnradius

$$\vec{\mu} = -e\nu\pi r^2 \vec{n}$$

Vergleiche mit Drehimpuls

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

$$\Rightarrow \quad \vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

$$\gamma = \frac{|\vec{\mu}|}{|\vec{L}|} = \frac{e}{2m}$$ "gyromagnetische Verhältnis"

Pot. Energie im externem Feld

$$E_M = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -|\vec{\mu}| \cdot |\vec{B}| \cdot \cos\vartheta$$

$$= \frac{e}{2m} |\vec{L}| \cdot |\vec{B}| \cdot \cos\vartheta$$

$$= \frac{e}{2m} L_z \cdot B$$

QM: $L_z = \hbar m_l$ Eigenwert der Observable $\hat{L}_z$ für Zustand $|n, l, m_l\rangle$

$\Rightarrow$ Vermutung:

Gesamt-Hamiltonian:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_M = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}}) + \frac{e}{2m} B \hat{L}_z$$

Schrödinger-QM Modell

- finde klass. Hamilton-Funktion H
- $H \to \hat{H}$ (durch $\vec{r} \to \hat{\vec{r}}$, $\vec{p} \to \hat{\vec{p}}$)

Elektron im B-Feld: Lorentz-Kraft

$$\vec{F} = -e\,\vec{v} \times \vec{B} = -e\left[\frac{d\vec{A}}{dt} - \nabla(\vec{v}\cdot\vec{A})\right]$$

Vektorpotential $\vec{A}$

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

$\Rightarrow$ klass. Hamilton-Mechanik

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} + e\vec{A}\right)^2$$

QM: $H \to \hat{H}$

$$\hat{H}|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A}\right)^2 |\psi\rangle$$

Ortsdarstellung $\longrightarrow$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\hbar e}{2mi}\underbrace{\left(\vec{\nabla}\vec{A} + \vec{A}\vec{\nabla}\right)} + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2\right]\psi$$

$$\left[\begin{aligned}
&\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + A\cdot\vec{\nabla}\right)\psi \\
&= \vec{\nabla}(\vec{A}\cdot\psi) + \vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\psi) \\
&= (\vec{\nabla}\cdot\vec{A})\cdot\psi + \vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\psi) + \vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\psi) \\
&\qquad \text{Coulomb-Eichung } \vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0 \\
&= 2\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\psi)
\end{aligned}\right]$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\hbar e}{2mi}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2 \right]\psi$$

Für $\vec{B} = B e_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{r}\times\vec{B}) = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} yB \\ -xB \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{\hbar e}{2mi}\begin{pmatrix} y\cdot B \\ -x\cdot B \\ 0 \end{pmatrix}\vec{\nabla} + \frac{e^2}{8m}\begin{pmatrix} y\cdot B \\ -x\cdot B \\ 0 \end{pmatrix}^2 \right]\psi$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{e\cdot B}{2m}\frac{\hbar}{i}\underbrace{\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\sim L_z} + \frac{e^2 B^2}{8m}(x^2+y^2) \right]\psi$$

darstellungsfrei $\longrightarrow$

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \underbrace{\frac{e}{2m}B\cdot\hat{L}_z}_{(*)} + \underbrace{\frac{e^2B^2}{8m}(\hat{x}^2+\hat{y}^2)}_{(**)}$$

(*) Linearer Zeeman-Effekt (wie semikl. Modell)

(**) diamagnetischer Term $\sim B^2$ (neu)

Größenabschätzung : $B \sim 1T$, $L_z \sim \hbar$, $x = y \sim 10^{-9}m$

$$(*) \sim 10^3 (**)$$

für $B << 1T$ wird (**) üblicherweise ignoriert $\Rightarrow \hat{H}_M = \frac{e\cdot B}{2m}\hat{L}_z$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \approx 9{,}27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T} \qquad \text{Bohr-Magneton}$$

Wasserstoff-Atom im homogenen B-Feld:

$$\hat{H}_{tot} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\hat{\vec{r}}) + \frac{\mu_B B}{\hbar} \hat{L}_z$$

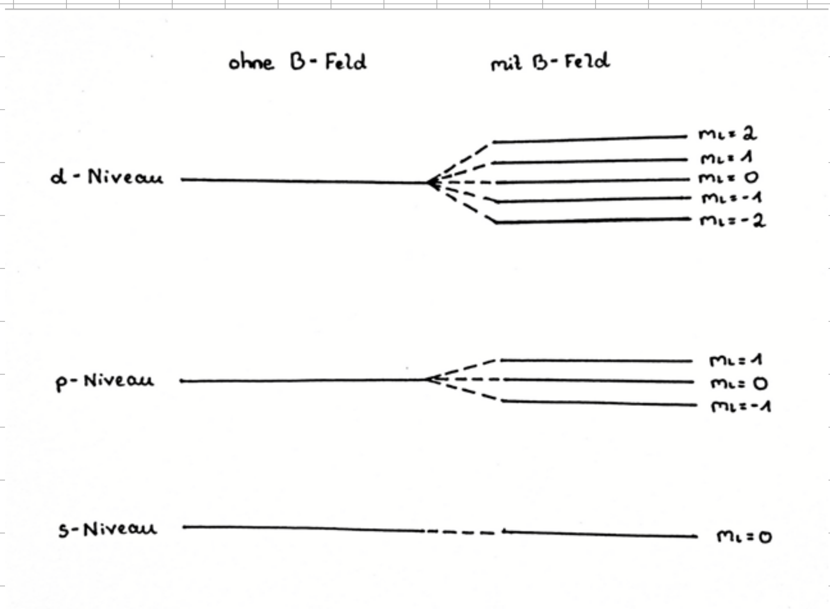
Lösung kennen wir schon!

$$\hat{H}_{tot} \, |n, l, m_l\rangle = \left[-\frac{E_{Ryd}}{n^2} + \mu_B m_l B \right] |n, l, m_l\rangle$$

Die Zustände $|n, l, m_l\rangle$ sind weiterhin Eigenzustände, aber die Entartung der Energien E_n ist aufgehoben.

Insbesondere hängt $E_{Mag} = \mu_B m_l B$

von der Magnetquantenzahl m_l ab.



Vergleiche Energie/Frequenz Skalen

- $\frac{\Delta E_n}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h} \simeq 2{,}5 \cdot 10^{15}\,Hz$ optisch

- $\frac{\Delta E_{m_\ell}}{h} = \frac{E_{m_\ell=1} - E_{m_\ell=0}}{h} = \underbrace{\frac{\mu_B}{h}} \cdot B$ Radio-Frequenz

$\simeq 1{,}44\,MHz/Gauss$

$= 14{,}4\,GHz/T$