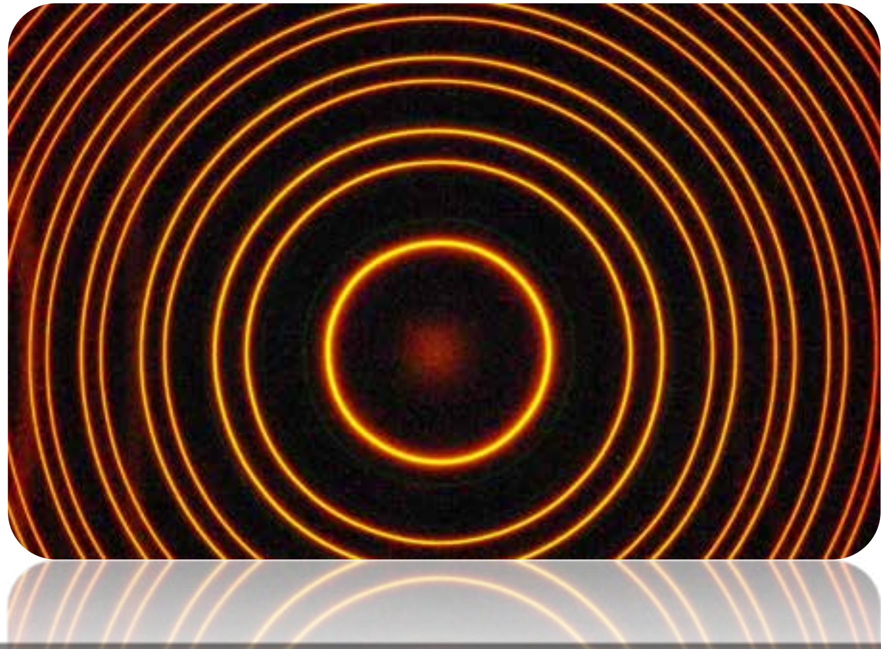
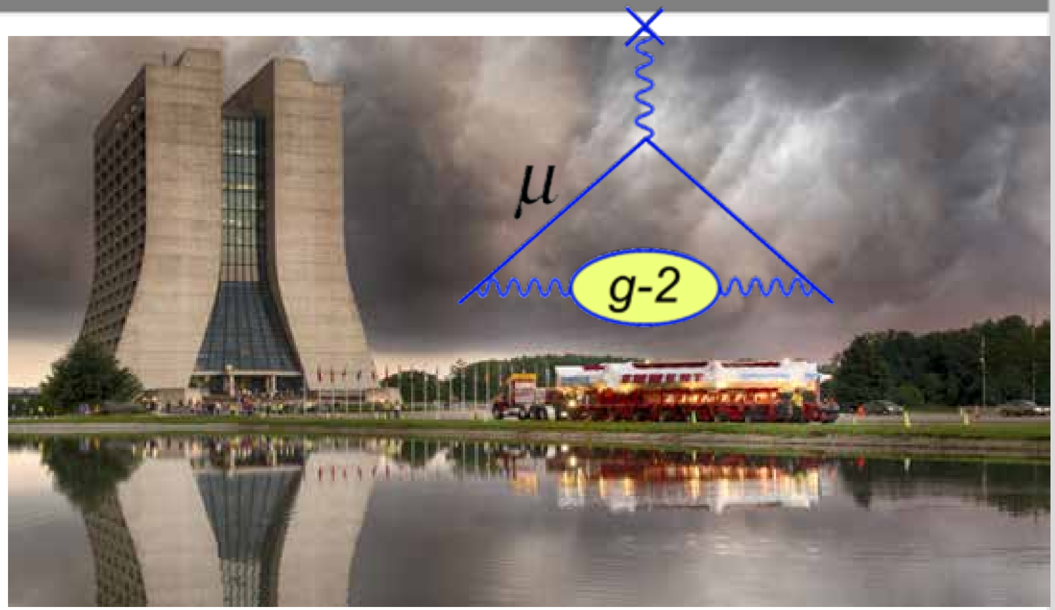
Atome, Moleküle & Kerne



Sommersemester 2024

Vorlesung # 10, 28.05.24

Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik



Wh: Elektronenorbitale im H-Atom

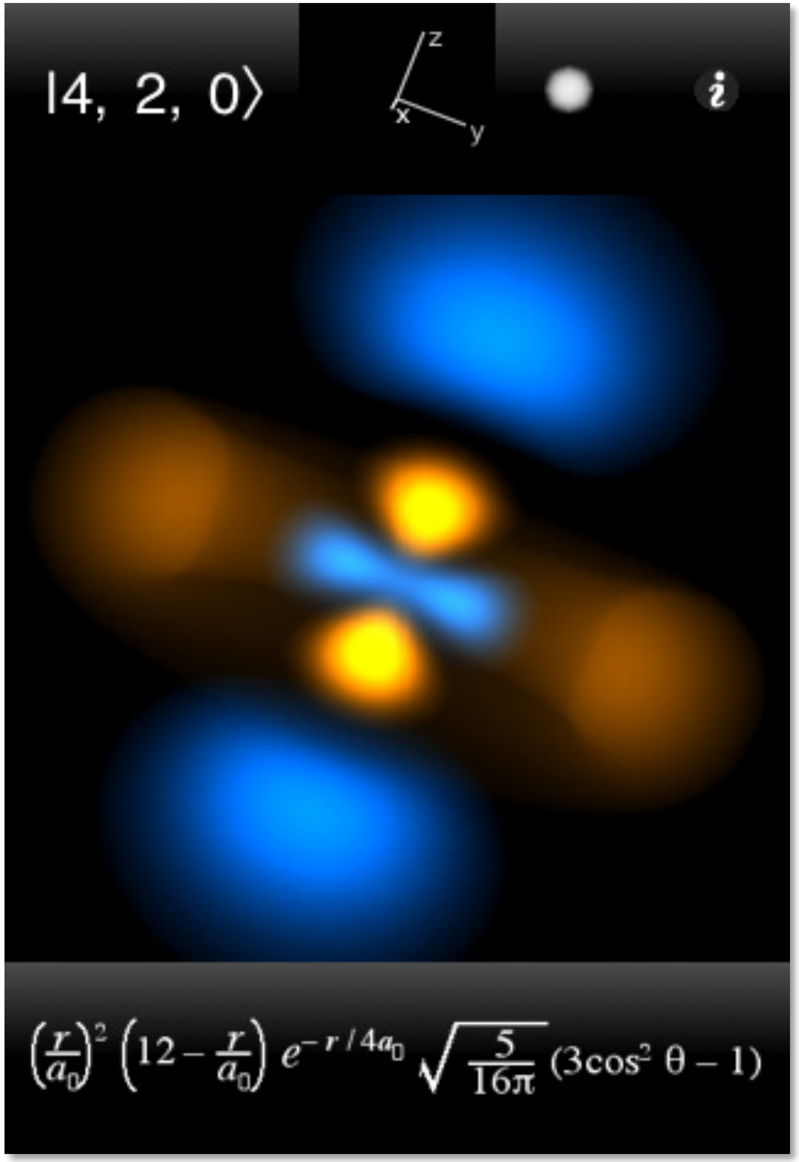
- Gesamtwellenfunktionen Ψ_{nlm}

$$\Psi(1s) = \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-r/a_0}$$

$$\Psi(2s) = \Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \cdot e^{-r/2a_0}$$

$$\Psi(2p) = \Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-r/2a_0} \cdot \cos\theta$$

- Quantenzahlen **n, l, m**
  n ist mit Energieniveau im Potential verknüpft
  (Klassisch: Abstand vom Zentrum)
  l, m sind mit Bahndrehimpuls und dessen
  Orientierung bzgl. einer Achse verknüpft



Q: Dauger Research

Einschub: Drehimpulse in der QM

- **Drehimpulse** in der QM sind quantisiert und werden als Operatoren $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ behandelt

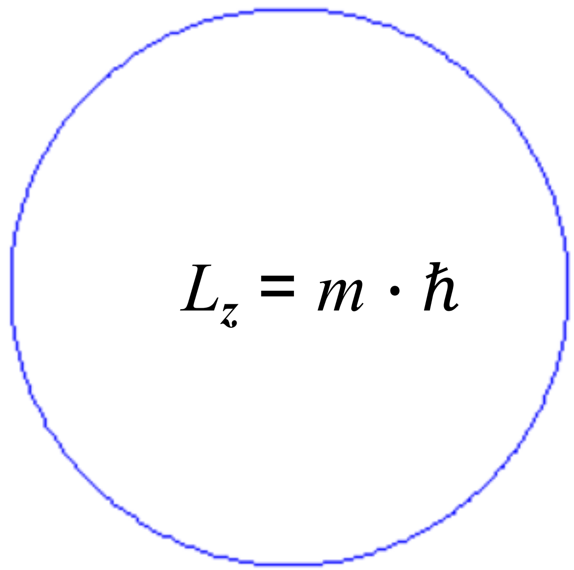
  - **Bahndrehimpuls L** eines Orbitals:

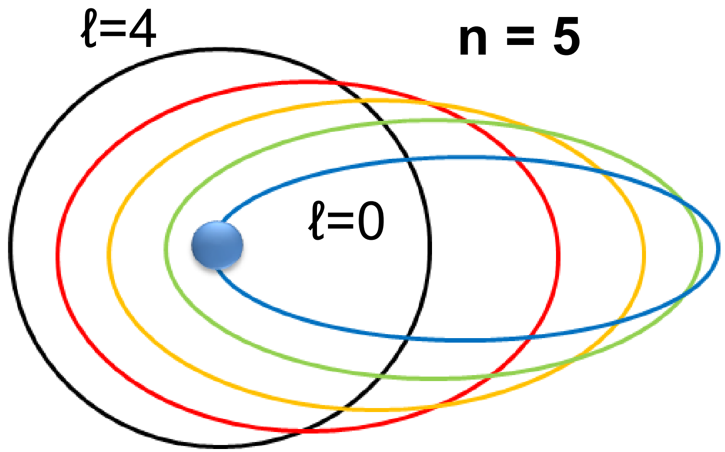
    L ist quantisiert da Elektronen Wellencharakter besitzen (de Broglie Materie-Welle)

  - mögliche **Drehimpulsquantenzahl *ℓ*** eines Orbitals mit n:

$$\boxed{l \leq n-1}$$

Drehimpulsquantenzahl ℓ &
Hauptquantenzahl *n*
(folgt aus Lösung der Radialgleichung)



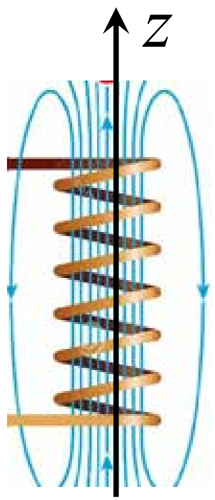


Drehimpulse visualisiert in Vektordarstellung

- „magnetische“ Quantenzahl m:

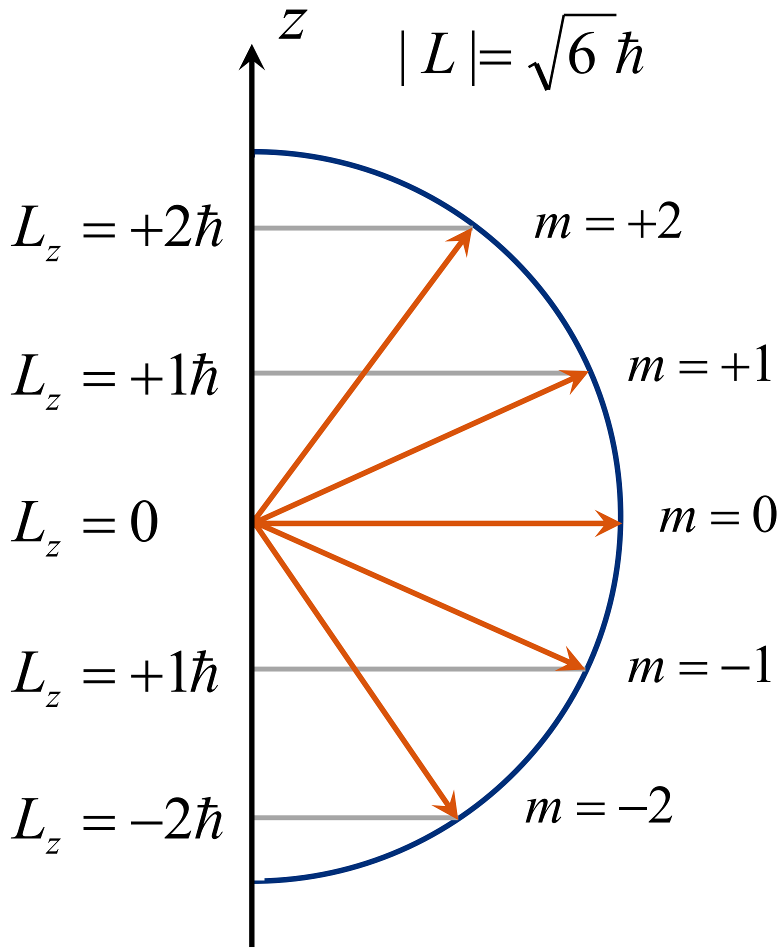
$$m = \frac{L_z}{\hbar}: \quad -l, -(l-1), \ldots, 0, \ldots, \ (l-1), l$$

$$\boxed{-l \le m \le +l}$$



Quantisierungsachse
z.B. durch B-Feld

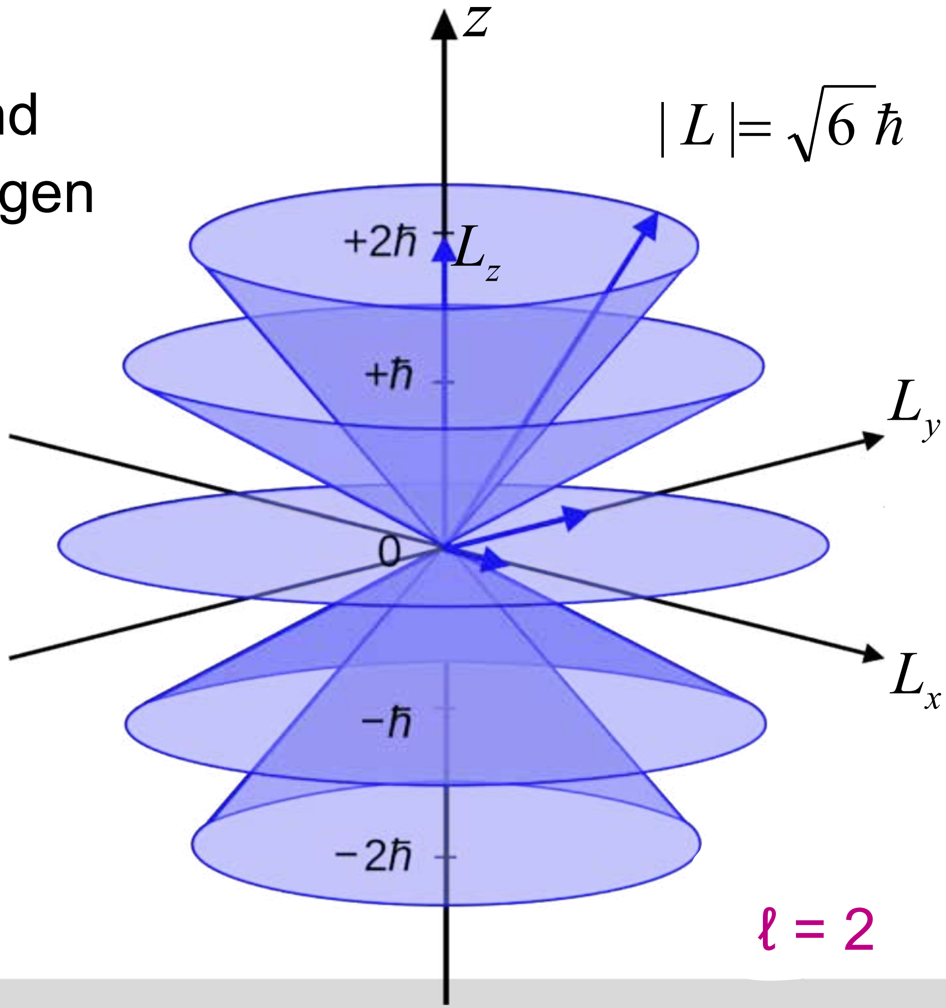
Quantenzahl $\ell = 2$



Einstellmöglichkeiten für einen Drehimpuls L

- nach Festlegung von |L| und L_z sind L_x und L_y nicht bestimmbar. Sie liegen auf Kegelmänteln

- die Observablen L_z und L_x sowie L_z und L_y sind komplementär (d.h. Operatoren kommutieren nicht)



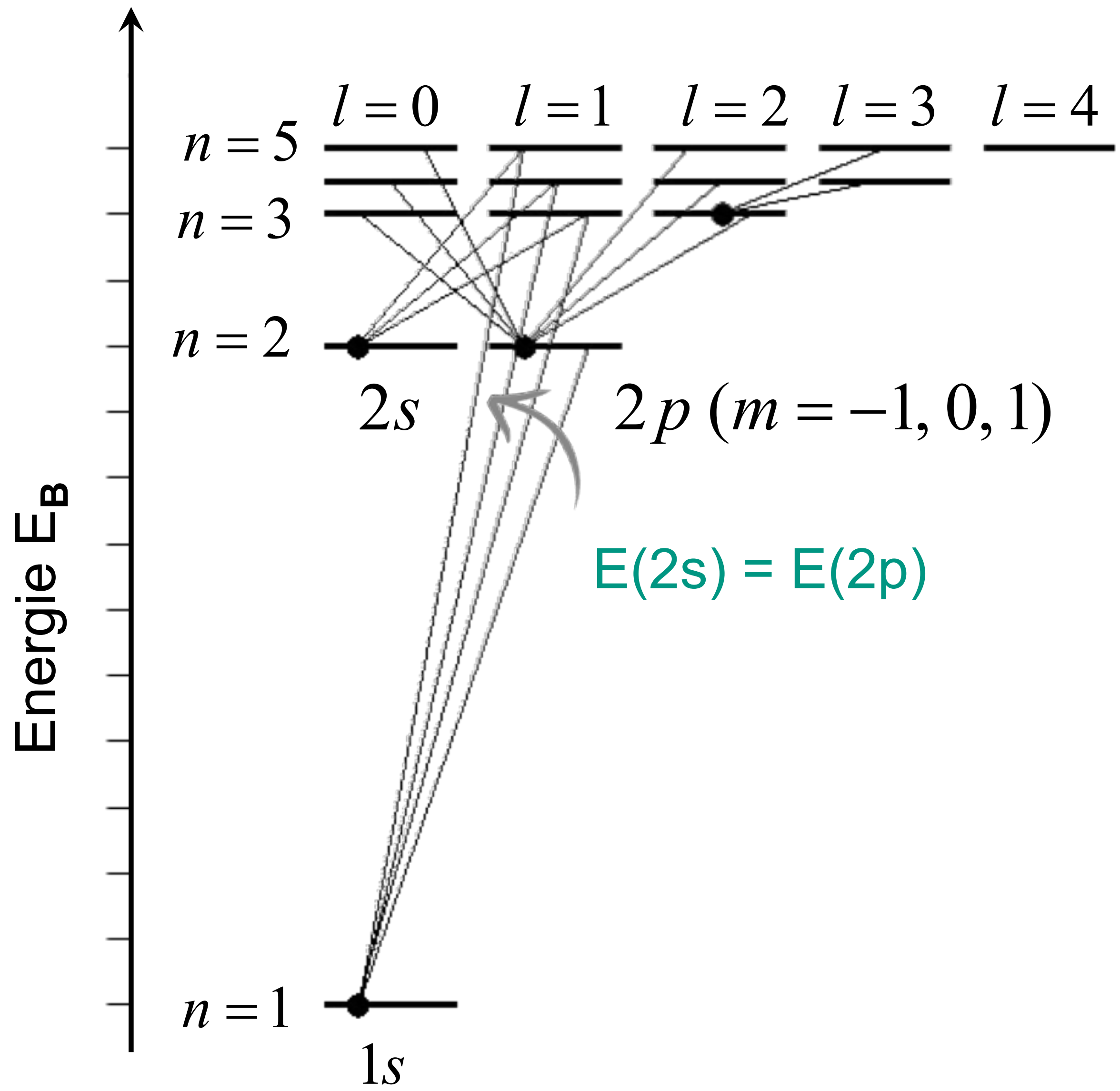
6.2 Schalenstruktur & Termschema

- **Energiezustände im H-Atom**

  - Energetisch entartet, da Bindungsenergien nur abhängig von der

    - Hauptquantenzahl n

    - nicht von der Bahndrehimpuls-Quantenzahl ℓ



Energiezustände im H-Atom

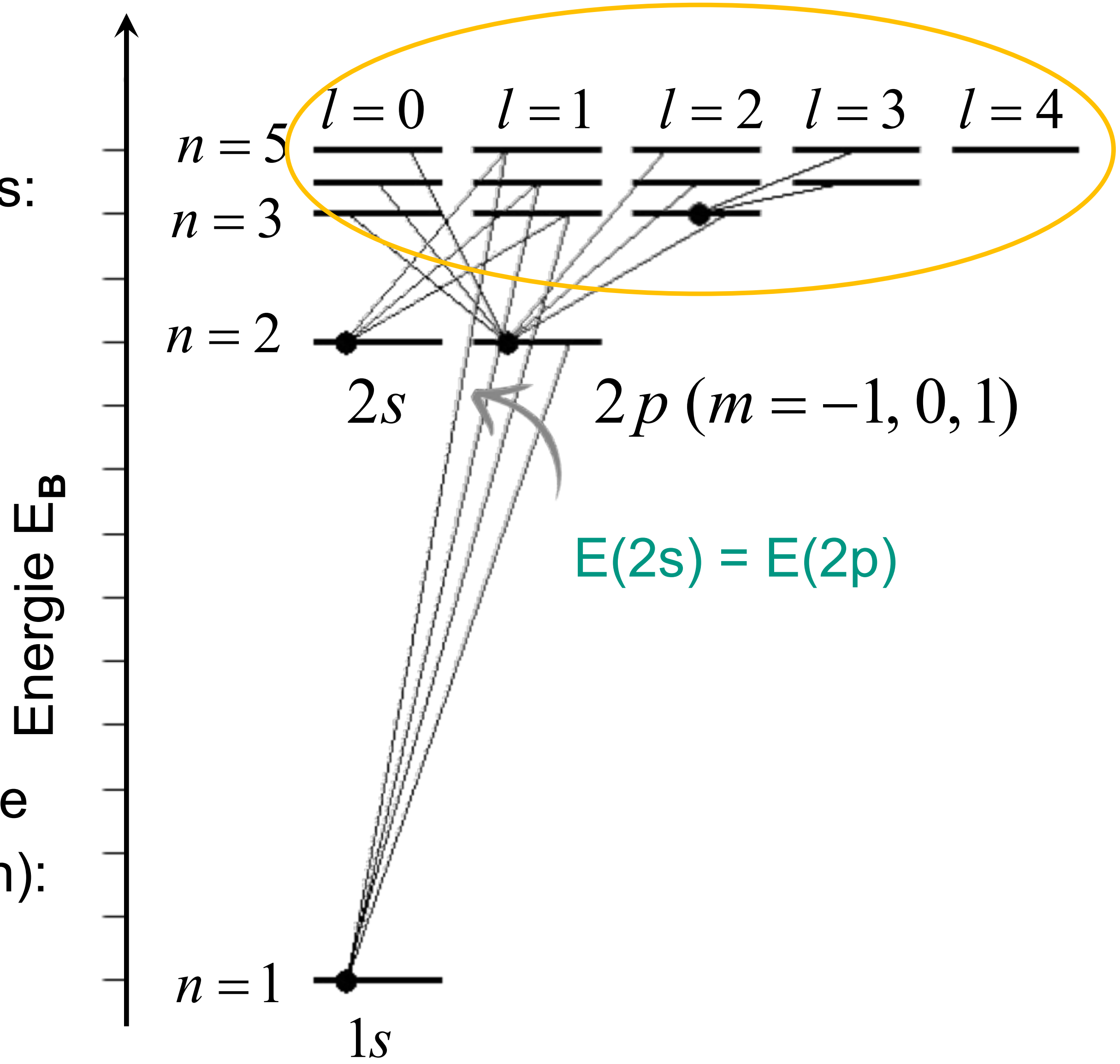
- Charakteristikum des H-Atoms: zu jeder Hauptquantenzahl n gibt es

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

Wellenfunktionen mit der gleichen Energie

Auswahlregeln für Übergänge (Photon- Emission / Absorption):

$\Delta l = \pm 1$ $\Delta m = 0, \pm 1$



Aufhebung der Energieentartung

- **Energiezustands-Entartung** in Wasserstoff-Atomen wird aufgehoben durch

  - Vakuumfluktuationen
  - Relativistische Effekte
  - Spin-Bahn-Kopplung

  Es entstehen feine Aufspaltungen in den Spektrallinien -> Feinstruktur

  - Externe Felder

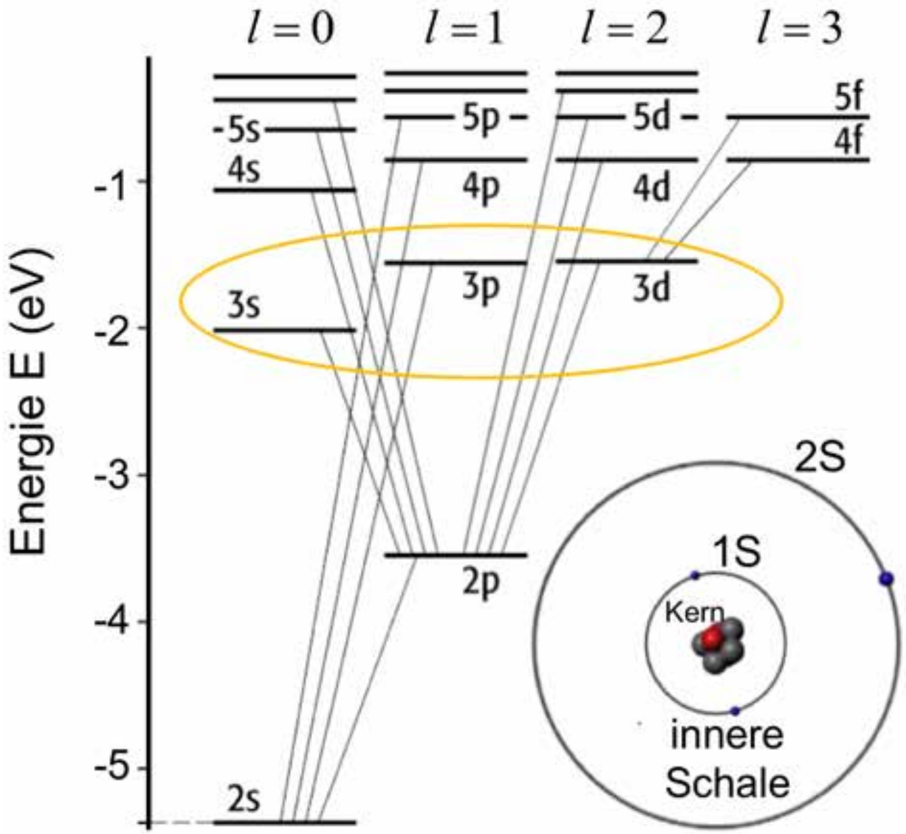
Nicht zu verwechseln mit ....

Aufhebung der Energieentartung

- **Energiezustands-Entartung** in Wasserstoff-ähnlichen Atomen wird aufgehoben durch

  - Einfluss von weiteren Elektronen in der Atomhülle => Deformation des 1/r - Potentials

Beispiel: Lithium-Atom (Z=3):
innere Elektronen schirmen Kernfeld teilweise ab:
$V(r) \rightarrow V_{\mathbf{eff}}(r)$

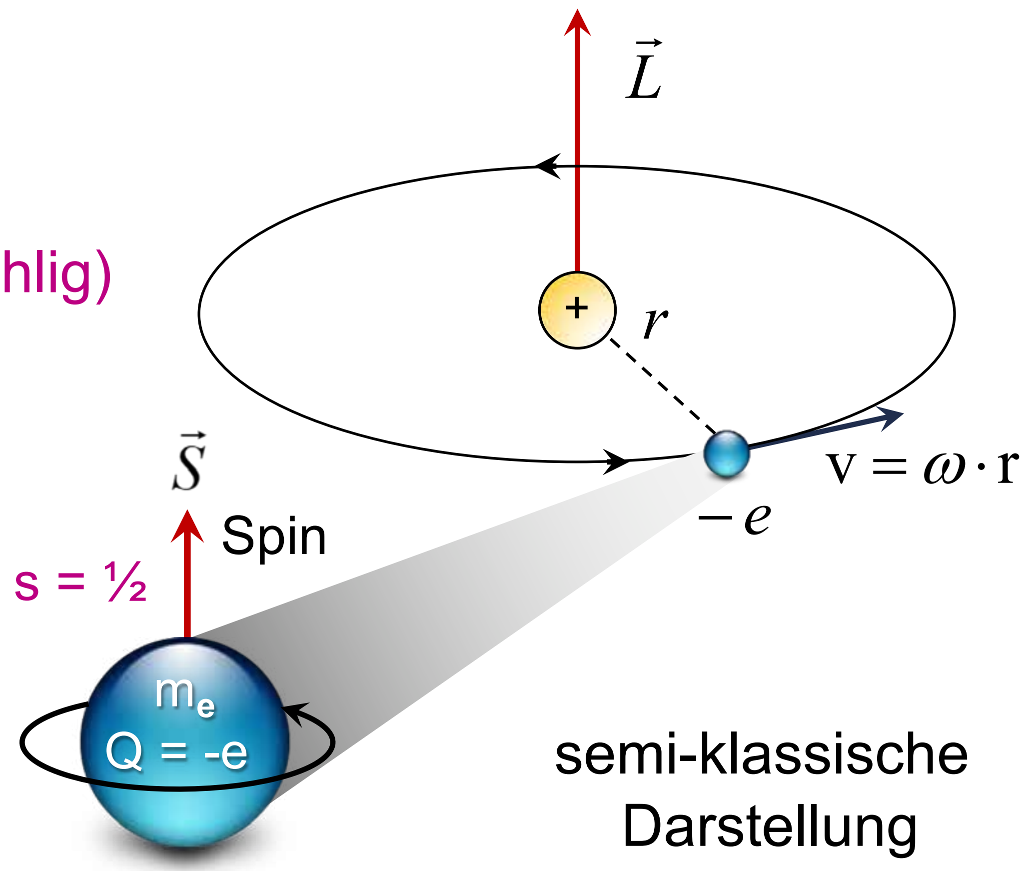


6.3 Bahndrehimpuls und Spin

- Elektron mit Geschwindigkeit v = 2π·r / T (klassisch) besitzt
  Bahndrehimpuls L

- Elektron besitzt zusätzlich
  Eigendrehimpuls (Spin) S
  mit Spinquantenzahl s = ½ (halbzahlig)

$$|\vec{S}| = \sqrt{s \cdot (s+1)} \cdot \hbar$$

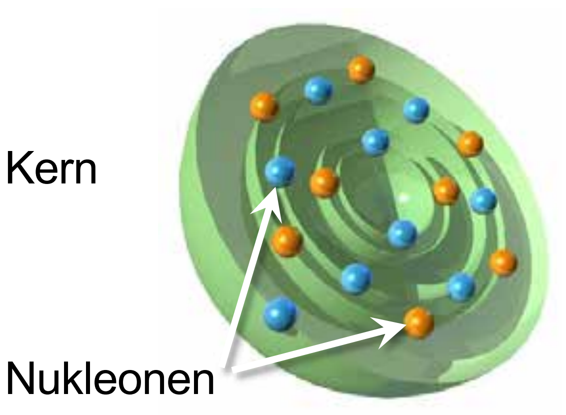


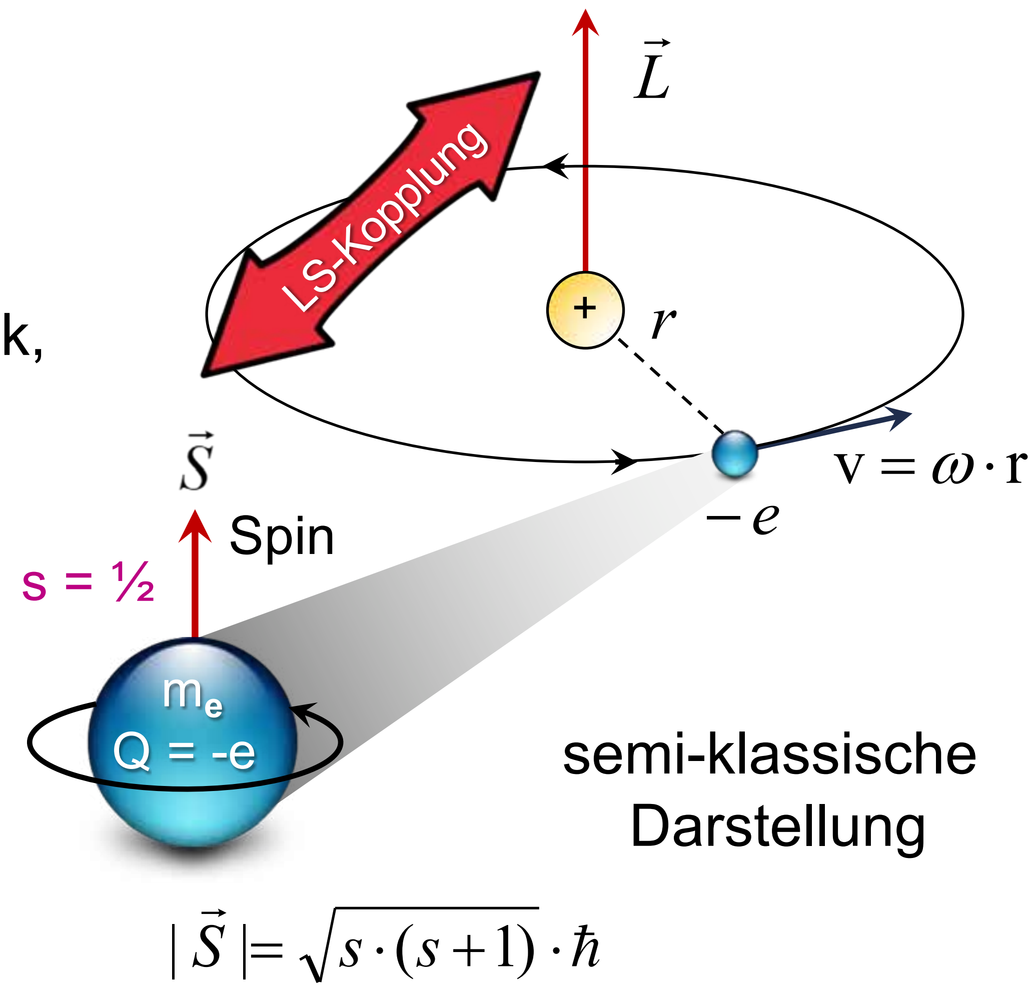
G. Uhlenbeck   S. Goudsmit (1925)

Bahndrehimpuls und Spin koppeln

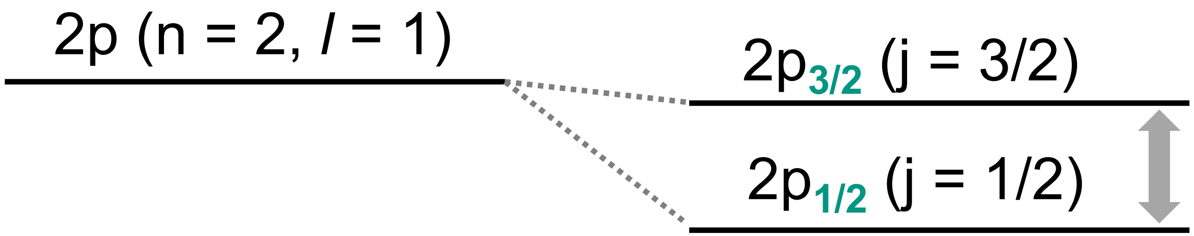
- Spin-Bahn-Wechselwirkung (**L-S-Kopplung**):
  verantwortlich für die Feinstruktur-Aufspaltung

- **L-S Kopplung** ist ein universeller Prozess in Vielteilchensystemen
  - auch beobachtet in der Kernphysik, dort aber viel stärker



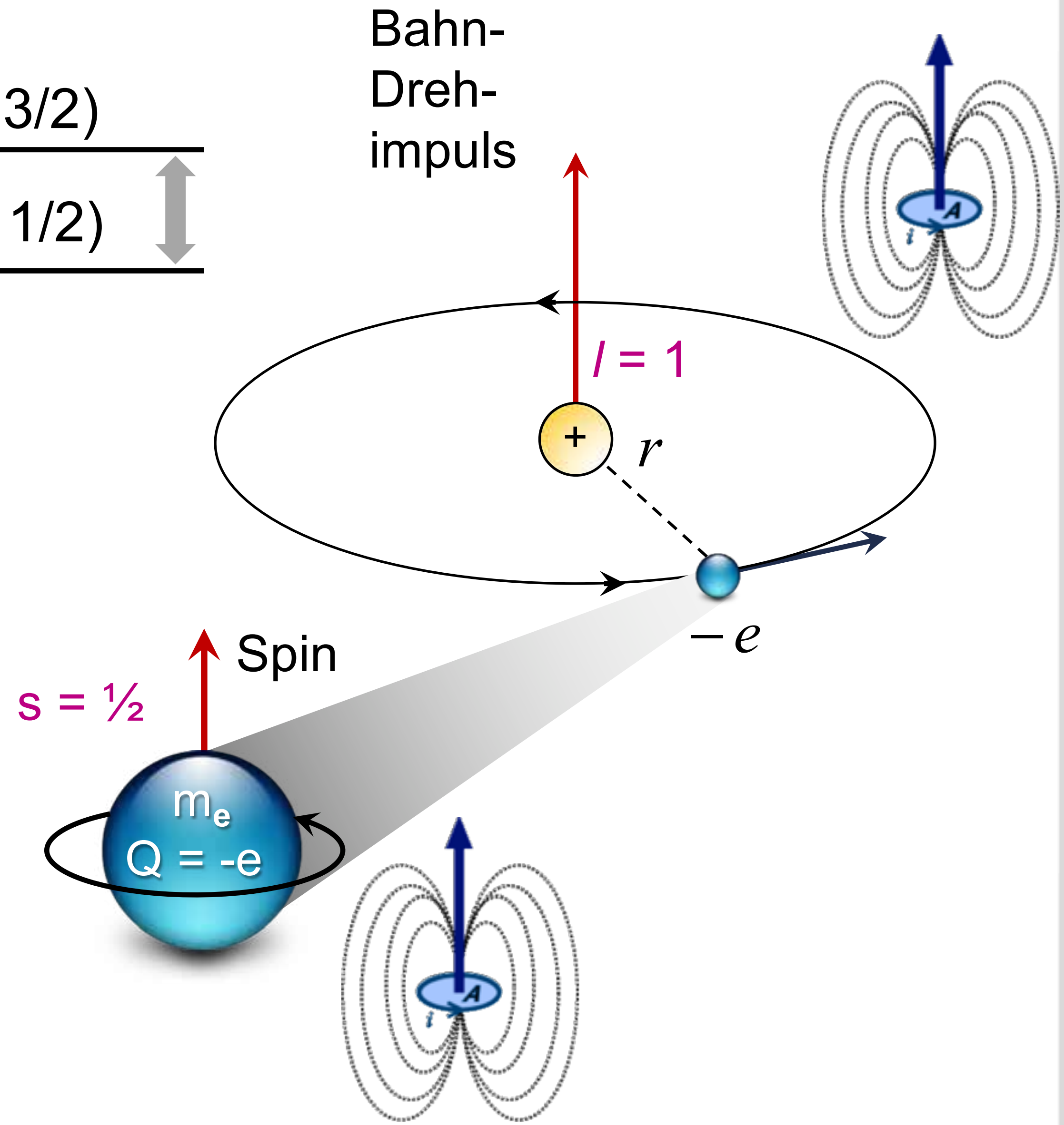


Energie-Aufspaltung von Orbitalen



- Neue Quantenzahl:
  - **Gesamtdrehimpuls j**
- Feinstruktur-Aufspaltung:
  - **Spin-Bahn-Kopplung**
  - relativistische Effekte
  - Quantenfluktuationen

  - Kopplung über
    a) **Bahnmagnetismus**
    b) **Spinmagnetismus**

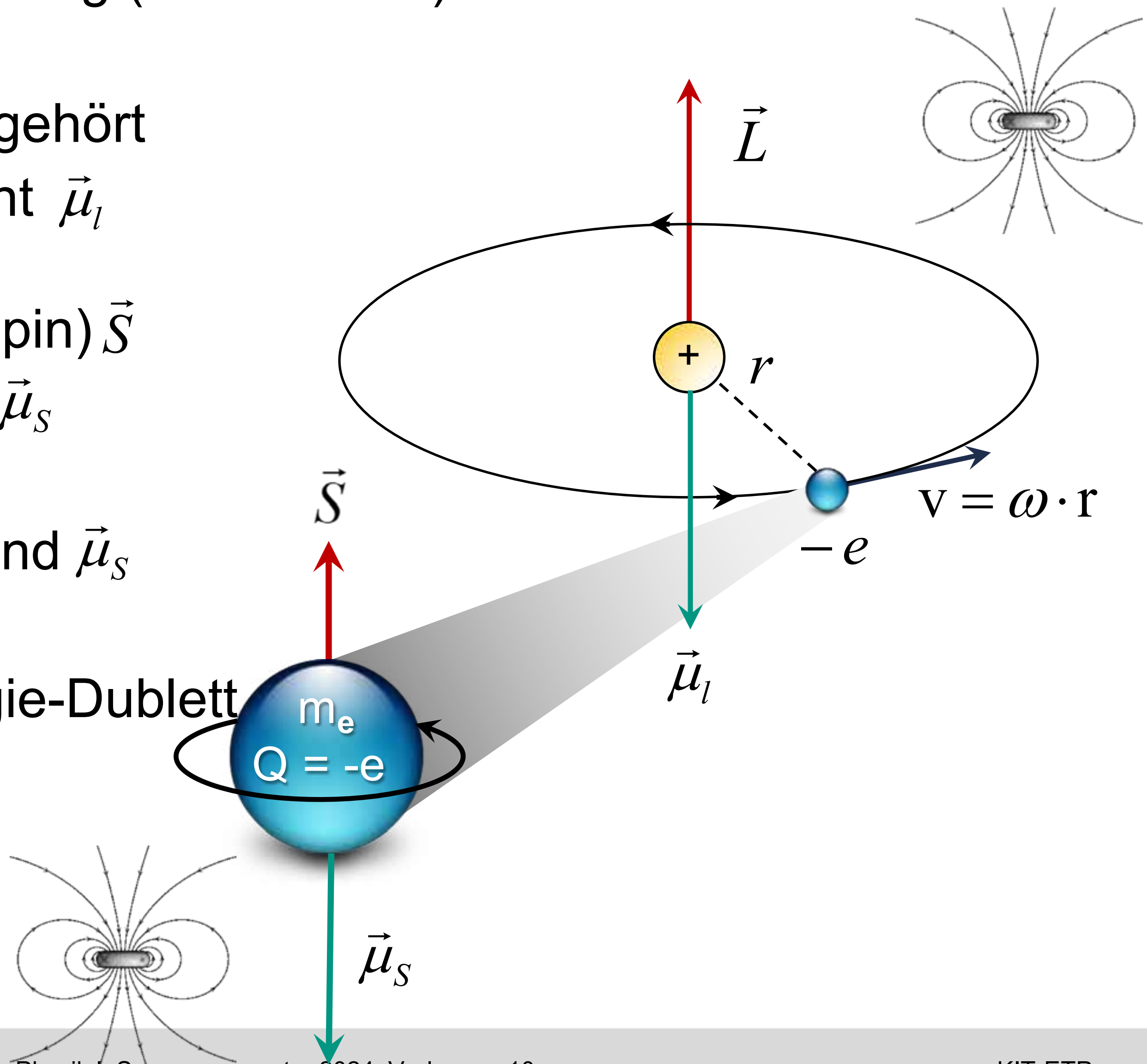


- Erklärung der Linienaufspaltung (Feinstruktur)

1. Zum Bahndrehimpuls $\vec{L}$ gehört ein magnetisches Moment $\vec{\mu}_l$

2. Zum Eigendrehimpuls (Spin) $\vec{S}$ gehört magnet. Moment $\vec{\mu}_S$

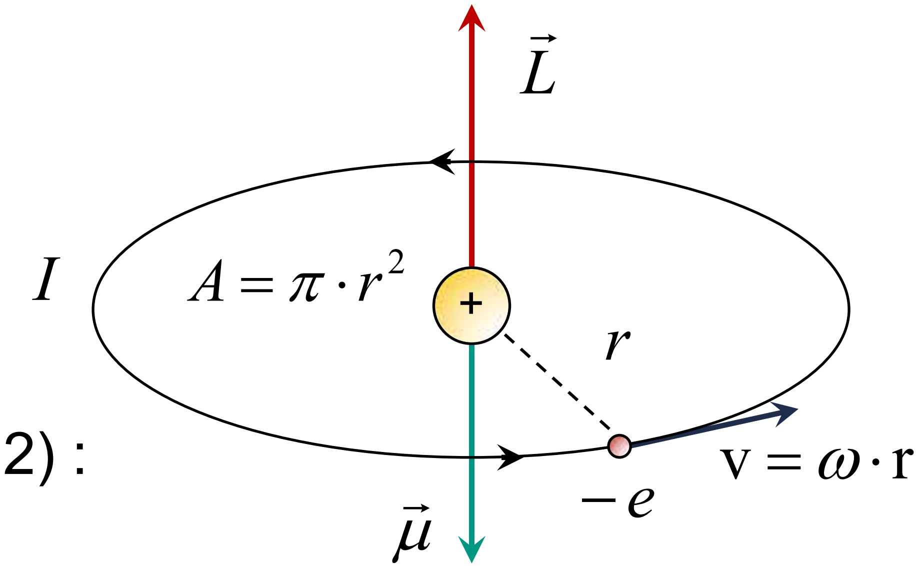
3. Wechselwirkung von $\vec{\mu}_l$ und $\vec{\mu}_S$ erzeugt wg. 2 möglicher Orientierungen ein Energie-Dublett



Bahnmagnetismus

- Um Proton kreisendes Elektron (Geschwindigkeit v = 2π·r / T) mit Q = -e und Bahndrehimpuls L (z.B. p-Orbital) erzeugt einen Kreisstrom *I*

$$I = \frac{Q}{T} = -\frac{e \cdot \omega}{2\pi}$$



semi-klassische Darstellung

- **Magnetisches Moment μ** (vgl. Leiterschleife in klass. ExPhys. 2) :

$$\mu = I \cdot A = -\frac{1}{2} \cdot e \cdot \omega \cdot r^2$$

- mit $|\vec{L}| = m_e \cdot \mathrm{v} \cdot r = m_e \cdot \omega \cdot r^2$

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{L}}$$

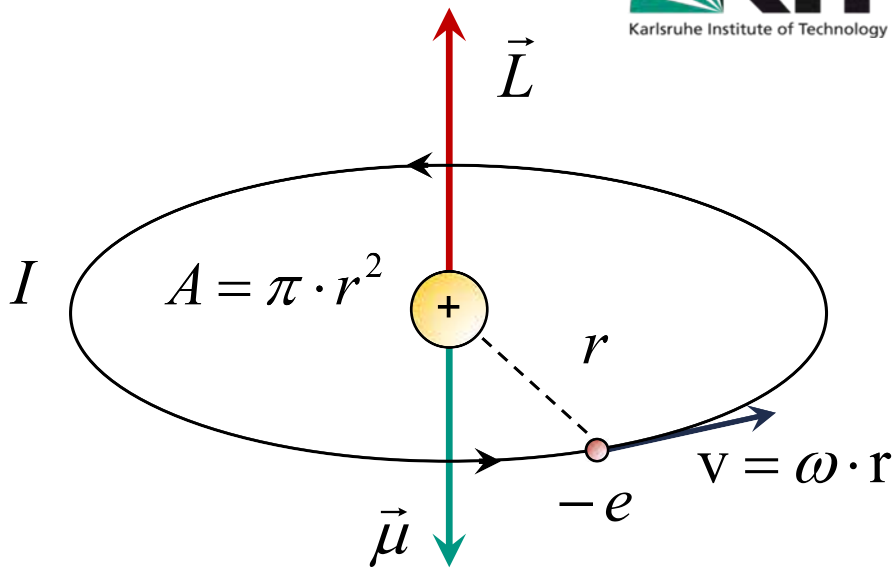
antiparallele Vektoren für Elektronen mit q = -e

Bohrsches Magneton

- Quantenmechanisches Analogon:

$$\vec{\mu} = \mu \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

Magneton des Teilchens



semi-klassische Darstellung

- **Bohrsches Magneton**

  - für Elektron mit Masse m_e :

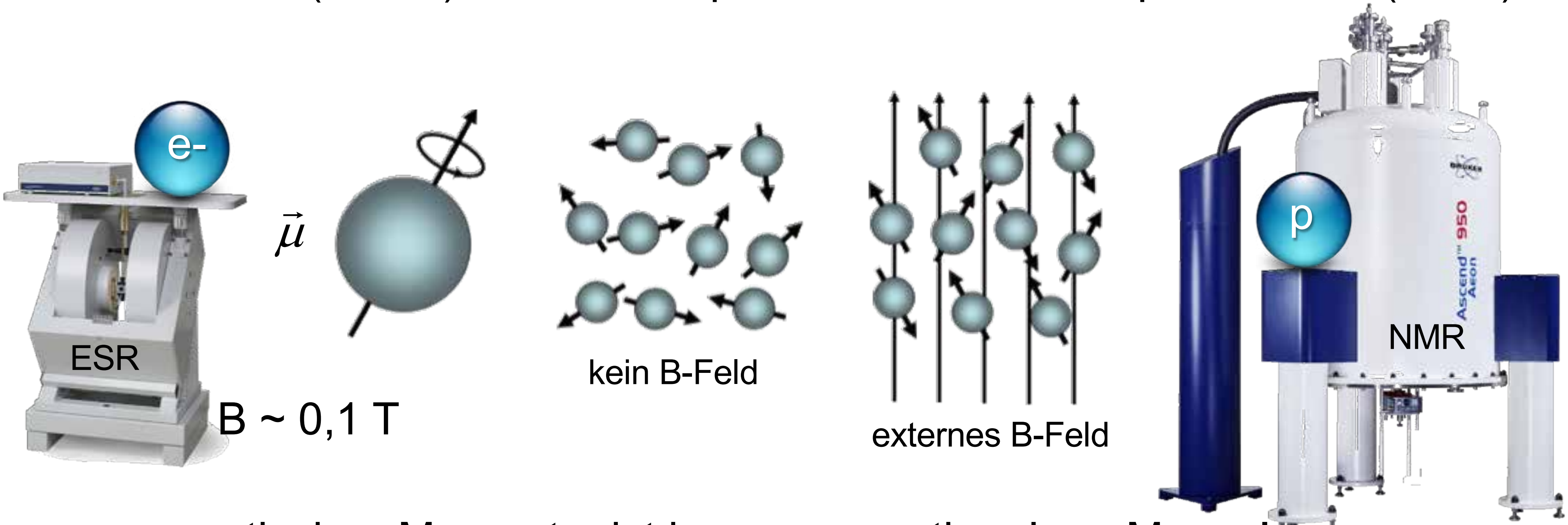
$$\vec{\mu} \sim -\mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

$$\boxed{\mu_B = \frac{e}{2m_e} \cdot \hbar} \qquad \mu_B = 5{,}7883818012(26) \cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV/T}$$

- magnetisches Moment μ ist invers proportional zur Masse!
  damit gilt: **μ(Elektron) » μ(Proton)**

Magnet. Moment von Elektron & Proton

- Teilchen mit magnetischem Moment μ in externem B-Feld:
  - **Präzessionsbewegung** um Achse des B-Feld (⇨ **Polarisation**)
  - Elektronen mit großem μ lassen sich leicht polarisieren (ESR)
  - Protonen (Kerne) mit kleinem μ lassen sich schwer polarisieren (NMR)



- magnetisches Moment μ ist invers proportional zur Masse!
  damit gilt: **μ(Elektron) » μ(Proton)**

B > 20 T

Bohrsches Magneton & g-Faktor

- Elektronen mit Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ

$$\vec{\mu}_l = \mu_l \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

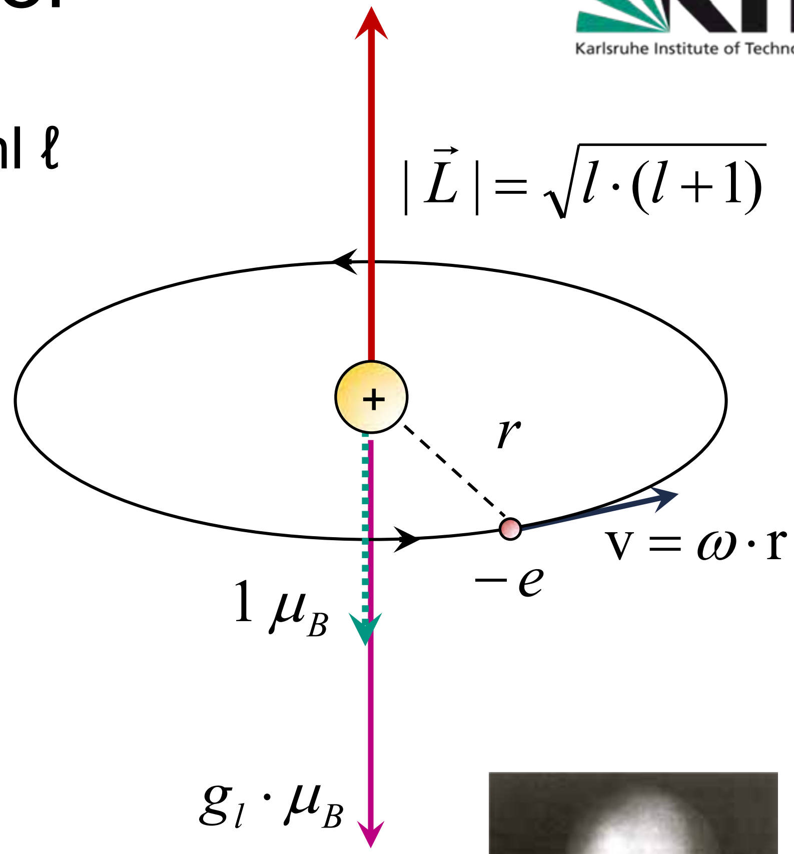
$$\mu_l = \mu_B \cdot \sqrt{l \cdot (l+1)} = \frac{e}{2m_e} \cdot \hbar \cdot \sqrt{l \cdot (l+1)}$$

- **mit Landéschem g-Faktor (Elektron)**:

$$\boxed{\vec{\mu}_l = -g_l \cdot \mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}}$$

$g_l = 1$

- Dimensionsloser **g-Faktor**:
  Verhältnis von magnetischem Moment μ
  relativ zu Drehimpuls L in Einheiten von ħ
  (wichtig bei Spin, später auch Nukleonen p und n)



Alfred Landé