Handout zum Übungsblatt Nr.7

Aufgabe 1

a)

Die in der Aufgabe angegeben Gleichung

$$\sum_{i,j} \varepsilon_{ijk} L_i L_j = (\mathbf{L} \times \mathbf{L})_k = \mathrm{i}\hbar L_k \,, \tag{1}$$

ist eine andere Form des Kommutators

$$[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \,, \tag{2}$$

den wir verwenden wollen. (Die Tatsache, dass das Kreuzprodukt von $\mathbf{L}$ mit sich selbst nicht verschwindet, weist auf den Operatorcharakter des Drehimpulses hin.) Wir bezeichnen im Folgenden $L_x := L_1$, $L_y := L_2$ und $L_z := L_3$. Damit folgt dann

$$\begin{aligned}[L_3, L^2] &= \left[L_3, \sum_{i=1}^{3} L_i^2\right] = \sum_{i=1}^{3} [L_3, L_i^2] = \sum_{i=1}^{3} \left(L_i [L_3, L_i] + [L_3, L_i] L_i\right) = \sum_{i=1}^{3} \left(L_i \varepsilon_{3ik} L_k + \varepsilon_{3ik} L_k L_i\right) = \\ &= \sum_{i=1}^{3} \varepsilon_{3ik} (L_i L_k + L_k L_i) = 0 \,. \end{aligned} \tag{3}$$

Da ε_{3ik} antisymmetrisch gegenüber einer Vertauschung von i und k und der Ausdruck $L_i L_k + L_k L_i$ symmetrisch ist, verschwindet das Produkt aus beiden, was zu zeigen war.

b)

Es sei $F(\vartheta, \varphi) \equiv F_{l,m}$ eine Eigenfunktion zu L^2. Auf diese wenden wir den Aufsteigeoperator $L_+ = L_x + \mathrm{i}L_y$ und danach den Absteigeoperator $L_- = L_x - \mathrm{i}L_y$ an:

$$\begin{aligned} L_- L_+ F_{l,m} &= (L_x - \mathrm{i}L_y)(L_x + \mathrm{i}L_y) F_{l,m} = (L_x^2 + L_y^2 + \mathrm{i}[L_x, L_y]) F_{l,m} = (L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z) F_{l,m} = \\ &= (L^2 - L_z(L_z + \hbar)) F_{l,m} \,. \end{aligned} \tag{4}$$

Verwenden wir nun den Ansatz $L^2 F_{l,m} = \hbar^2 \omega^2 F_{l,m}$ und außerdem $L_z F_{l,m} = \hbar m F_{l,m}$ so führt dies auf

$$(L^2 - L_z(L_z + \hbar)) F_{l,m} = \hbar^2 (\omega^2 - m(m+1)) F_{l,m} \,. \tag{5}$$

Setzen wir $m = m_{\max} = l$, so verschwindet die linke Seite der Gleichung, denn $L_+ F_{l,m_{\max}} = L_+ F_{l,l} = 0$. Dann muss auch die rechte Seite verschwinden:

$$\omega^2 - m_{\max}(m_{\max} + 1) = \omega^2 - l(l+1) \stackrel{!}{=} 0 \,, \tag{6}$$

was also auf

$$\boxed{\omega = \sqrt{l(l+1)}\,,} \tag{7}$$

führt.

Aufgabe 2

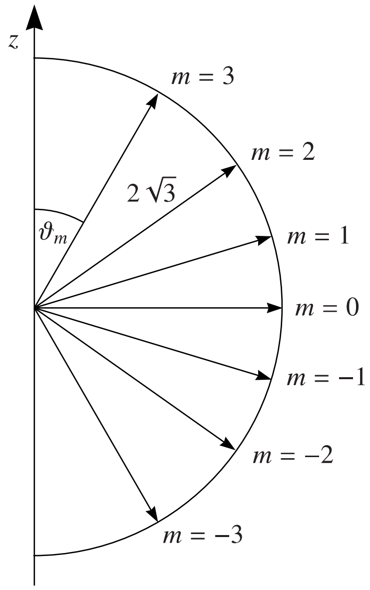
Der Betrag des Drehimpulses ergibt sich zu

$$|\langle \widehat{L} \rangle| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \stackrel{l=3}{=} 2\sqrt{3}\hbar \,. \tag{8}$$

Die Werte von m sind gegeben durch $\{-l, -l{+}1, \ldots, l\}$, also für diesen speziellen Fall ist $m \in \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$. Die Winkel zur z-Achse sind

$$\vartheta_m = \arccos\left(\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}\right) . \tag{9}$$

Einsetzen führt auf $\vartheta_1 = -\vartheta_{-1} \approx 73,2°$, $\vartheta_2 = -\vartheta_{-2} \approx 54,7°$ und $\vartheta_3 = -\vartheta_{-3} = 30°$. Das Schaubild sieht dann wie folgt aus:



Aufgabe 3

Für allgemeines n sind die Werte $\{0, 1, \ldots, n-1\}$ für l möglich und für jeden Wert von l wiederum die Werte $\{-l, -l+1, \ldots, l\}$ wiederum für m. Das sind $(2l + 1)$ Werte von m für ein bestimmtes l. Die Summe aller möglichen Zustände ist dann

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\sum_{l=0}^{n-1} + n = 2 \cdot \frac{1}{2}(n-1)n + n = n^2 - n + n = n^2 . \tag{10}$$

Berücksichtigt man dann zusätzlich noch den Spin, so führt dies insgesamt zu $2n^2$ möglichen Zuständen. Nun zu den Spezialfällen:

- $n = 3$: $l \in \{0, 1, 2\}$; $l = 0$: $m = 0$, $l = 1$: $m \in \{-1, 0, 1\}$, $l = 2$: $m \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$; 18 mögliche Zustände
- $n = 4$: $l \in \{0, 1, 2, 3\}$; zusätzlich $l = 3$: $m \in \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$, 32 mögliche Zustände

Aufgabe 4

Der Drehimpuls ist gegeben durch

$$L = \Theta\omega = 10^{-3}\,\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}^2 \cdot 2\pi \cdot 33,3\,\frac{1}{60\,\mathrm{s}} \approx 3,49 \cdot 10^{-3}\,\frac{\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}^2}{\mathrm{s}} . \tag{11}$$

Da es sich dabei um einen makroskopischen Drehimpuls handelt, ist diesem eine sehr große Quantenzahl l nach $\langle L \rangle = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ zugeordnet. Dann gilt $\langle L \rangle \approx \sqrt{l^2}\hbar = l\hbar$ und somit

$$l \approx \frac{3,49 \cdot 10^{-3}\,\frac{\mathrm{kg \cdot m^2}}{\mathrm{s}}}{\frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{2\pi}\,\mathrm{Js}} \approx 3,31 \cdot 10^{31} . \tag{12}$$

Aufgabe 5

a)

Die Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]\Psi(r)=E\Psi(r)\,,\quad \Psi(r)=R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)\,,\tag{13}$$

mit dem Radialanteil $R_{nl}(r)$ und dem Winkelanteil (Kugelflächenfunktion) $Y_l^m(\vartheta,\varphi)$. Die Radialeigenfunktion stimmt für den 1s-Zustand (Zustand mit $l=0$) bis auf eine Konstante ($Y_0^0=1/\sqrt{4\pi}$) mit der gesamten Wellenfunktion überein. Für die angegebene Wellenfunktion

$$\Psi(r)=R_{00}(r)=a\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)\,,\tag{14}$$

lautet die Schrödingergleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\Psi(r)=E\Psi(r)\,.\tag{15}$$

Nun müssen wir noch die Ableitungen berechnen:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r)\right)=-\frac{1}{r_1}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\Psi(r)\right)=-\frac{1}{r_1}\left\{2r\Psi(r)+r^2\frac{\partial}{\partial r}\Psi(r)\right\}=-\frac{1}{r_1}\left\{2r-\frac{r^2}{r_1}\right\}\Psi(r)\,.\tag{16}$$

Dann gilt weiter

$$\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{r_1}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{1}{r}\Psi(r)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r_1^2}-E\right)\Psi(r)=0\,.\tag{17}$$

Beide Klammern müssen unabhängig voneinander verschwinden. Aus der ersten Klammer folgt

$$\boxed{r_1=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2m}\,,}\tag{18}$$

und aus der zweiten

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r_1^2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{e^4m}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^4}=\boxed{-\frac{e^4m}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\,.}\tag{19}$$

b)

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bestimmt man über

$$P=\int\limits_{\mathbb{R}^{\nvDash}}|\Psi(r)|^2=\int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int\limits_0^{\pi}\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta\int\limits_0^{\infty}r^2|\Psi(r)|^2\,\mathrm{d}r=4\pi\int\limits_0^{\infty}r^2|\Psi(r)|^2\,\mathrm{d}r\,,\tag{20}$$

also ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte gegeben durch

$$W(r)=4\pi r^2|\Psi(r)|^2=\boxed{4\pi r^2a^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)\,.}\tag{21}$$

c)

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte wird dann maximal, wenn die erste (aber nicht die zweite) Ableitung verschwindet:

$$\frac{\mathrm{d}W(r)}{\mathrm{d}r}=8\pi ra^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)-8\pi\frac{r^2}{r_1}a^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)\overset{!}{=}0\,.\tag{22}$$

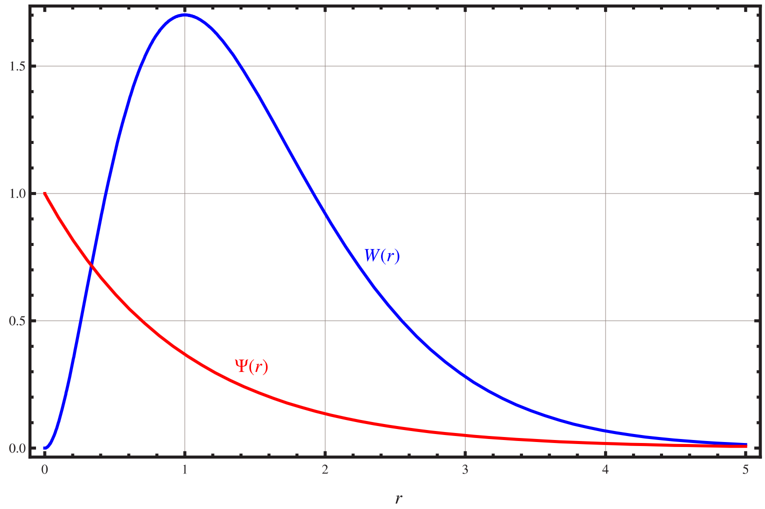
Daraus folgt die Gleichung

$$r\left(1-\frac{r}{r_1}\right)\,,\tag{23}$$

und somit $r=0$ oder $r=r_1$. Nachrechnen mit der zweiten Ableitung (oder durch Betrachtung des Schaubilds) ergibt, dass $r=0$ ein Minimum und $r=r_1$ ein Maximum ist. Damit ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte bei $r=r_1$ am größten.

d)

Sowohl $\Psi(r)$ und $W(r)$ werden für $a = 1$ und $r = 1$ skizziert:



Aufgabe 6

Prinzipiell muss man nur die oberen Zahlen addieren, da diese die Elektronen in den jeweiligen Orbitalen angeben. Dies führt dann auf:

- 14 Elektronen: Silizium
- 20 Elektronen: Kalzium

Aufgabe 7

a)

Das magnetische Moment $\boldsymbol{m}$ des Elektrons wird durch den Kreisstrom desselbigen verursacht:

$$I = \frac{-e}{T} = -\frac{e\omega}{2\pi}\,. \tag{24}$$

Also gilt mit $\mathbf{A} = \pi r^2 \mathbf{e}_z$:

$$\mathbf{m} = I\mathbf{A} = -\frac{e\omega}{2\pi} \cdot \pi r^2 \mathbf{e}_z = -\frac{e}{2m}(m\omega r^2 \mathbf{e}_z) = \boxed{-\frac{e}{2m}\mathbf{L}\,,} \tag{25}$$

wenn wir den Drehimpuls $\mathbf{L} = m\omega r^2 \mathbf{e}_z$ einführen.

Bemerkung:

In der Theorie definiert man das magnetische Moment durch

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3r\,[\mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})]\,, \tag{26}$$

mit der Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. Legen wir das Koordinatensystem so, dass der Stromdichtevektor $\mathbf{j}$ in der x-y-Ebene liegt, so folgt $\mathrm{d}^3r\,\mathbf{j}(\mathbf{r}) = I\,\mathrm{d}r$ und somit für einen geschlossenen Stromverlauf:

$$\mathbf{m} = \frac{I}{2}\oint_C \mathrm{d}r\,(\mathbf{r} \times \mathrm{d}\mathbf{r}) = IA\,. \tag{27}$$

Noch schneller kommt man von Gl. (26) auf Gl. (25):

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3r\,[\mathbf{r} \times (-e)\mathbf{v}(t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t))] = -\frac{e}{2}\mathbf{r}(t) \times \mathbf{v}(t) = -\frac{e}{2m}\mathbf{r}(t) \times \mathbf{p}(t) = -\frac{e}{2m}\mathbf{L}(t)\,. \tag{28}$$

b)

Die Kraft eines Magnetfelds $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ auf eine Stromdichte $\mathbf{j}(r)$ (mit dem oben definierten magnetischen Moment) kann näherungsweise wie folgt berechnet werden:

$$\mathbf{F} = \int \mathrm{d}^3r\,[\mathbf{j}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})] \approx (\mathbf{m} \times \boldsymbol{\nabla}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r} = \mathbf{0})\,. \tag{29}$$

Setzen wir $\mathbf{B}(\mathbf{r} = 0) \equiv \mathbf{B}$, so ergibt sich (nachrechnen!):

$$\mathbf{F} = -m(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B}) + \boldsymbol{\nabla}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) \overset{\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{B}=0}{=} \boldsymbol{\nabla}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B})\,. \tag{30}$$

Die Kraft ist also der Gradient eines Potentials und damit kann man ihr die potentielle Energie $E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$ zuordnen. Magnetische Momente stellen sich in Magnetfeldern so ein, dass die potentielle Energie minimal wird, also parallel zu $\mathbf{B}$.
Eine Magnetisierung bis zur Sättigung bedeutet nichts anderes als dass alle atomaren magnetischen Momente in dieselbe Richtung (parallel zum äußeren Magnetfeld) ausgerichtet sind. Durch Umpolen dreht man die Ausrichtung und damit ändert sich auch das magnetische Moment jedes einzelnen Atoms. Die Änderung entspricht dann dem doppelten des magnetischen Moments vor dem Umpolen:

$$\Delta m = \frac{e}{m} L_{\text{Atom}}\,, \tag{31}$$

wobei L_{Atom} der Drehimpuls eines Atoms ist. Eine Änderung des magnetischen Moments geht mit einer Änderung des Drehimpulses einher; analog gilt auch hier $\Delta L = 2L_{\text{Atom}}$ pro Atom. Aufgrund der Drehimpulserhaltung muss das durch einen entgegengesetzten (mechanischen) Drehimpuls $L_{\text{mech}} = \Theta_{\text{Fe}}\omega$ des zylindrischen Stabes ausgeglichen werden. Damit muss also $2L_{\text{Atom}}N_{\text{Atom}} = L_{\text{mech}}$ (mit der Anzahl der Atome N_{Atom}) sein und so kommen wir auf ω:

$$\omega = \frac{2L_{\text{Atom}}N_{\text{Atom}}}{\Theta_{\text{Fe}}} = \frac{2L_{\text{Atom}} \cdot \frac{M_{\text{Fe}}}{m_{\text{Fe}}} N_A}{\Theta_{\text{Fe}}} = \boxed{\frac{2N_A M_{\text{Fe}} L_{\text{Atom}}}{\Theta_{\text{Fe}} m_{\text{Fe}}}\,,} \tag{32}$$

mit der molaren Masse m_{Fe} von Eisen.

c)

Aus der Gleichung

$$\omega = \frac{2L_{\text{Atom}}N_{\text{Atom}}}{\Theta_{\text{Fe}}}\,, \tag{33}$$

von Aufgabenteil (b) ergibt sich das sogenannte gyromagnetische Verhältnis:

$$\gamma = \frac{|\mathbf{m}|}{L_{\text{Atom}}} = \frac{|\mathbf{M}|}{N_{\text{Atom}} \cdot L_{\text{Atom}}} = \boxed{\frac{2|\mathbf{M}|}{\omega\Theta_{\text{Fe}}}\,,} \tag{34}$$

mit dem Betrag $|\mathbf{M}|$ des magnetischen Moments des Eisenstabs. Wie oben schon festgestellt, erfährt ein magnetisches Moment im Magnetfeld eine Kraft, also gilt hier für die Kraft, welche der gesamte Eisenstab erfährt: $\mathbf{F}_{\text{Fe}} = \boldsymbol{\nabla}(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B})$. Diese kann prinzipiell mittels der Verdrillung (Torsion) eines Fadens gemessen werden. Der Magnetismus kann sowohl durch den atomaren Drehimpuls als auch durch den atomaren Spin (den der Elektronen) ausgelöst werden. Dann gilt allgemein

$$\gamma = g\frac{e}{2m}\,, \tag{35}$$

mit dem Landé-Faktor g. Für den Bahnmagnetismus ist $g_l = 1$ und für den Spinmagnetismus $g_s \approx 2,002$. (Die Tatsache, dass $g_s = 2$ nicht exakt gilt rührt von Korrekturen her, da jedes Elektron mit seinem eigenen Strahlungsfeld wechselwirkt (Korrekturen der Quantenelektrodynamik).) Auf jeden Fall kann mittels des Einstein-de-Haas-Versuchs das gyromagnetische Verhältnis gemessen und damit bestimmt werden, ob der Magnetismus auf Spin oder Bahndrehimpuls (oder beide) zurückzuführen ist.

d)

Unter Verwendung der Ergebnisse des Bohrschen Atommodells aus dem vorherigen Übungsblatt (für r und ω) ergibt sich der Drehimpuls:

$$L_z = \frac{m}{2}\omega r^2 = \frac{m}{2} \cdot \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}\frac{1}{n^3} \cdot \frac{64\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^4}{e^4 m}n^4 = \hbar n\,. \tag{36}$$

Laut Aufgabenstellung sei $L_{\mathrm{Atom}} = \hbar$ (mit $n = 1$, also der ersten Bohrschen Bahn). Weiter gilt

$$M_{\mathrm{Fe}} = \varrho_{\mathrm{Fe}} V = \varrho_{\mathrm{Fe}} \pi r^2 l\,, \quad r^2 = \frac{M_{\mathrm{Fe}}}{\pi \varrho_{\mathrm{Fe}} l}\,, \tag{37}$$

und somit für das Trägheitsmoment des Stabs:

$$\Theta_{\mathrm{Fe}} = \frac{1}{2} M_{\mathrm{Fe}} r^2 = \frac{M_{\mathrm{Fe}}^2}{2\pi \varrho_{\mathrm{Fe}} l}\,. \tag{38}$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2N_A M_{\mathrm{Fe}} L_{\mathrm{Atom}}}{\Theta_{\mathrm{Fe}} m_{\mathrm{Fe}}} = \frac{4\pi\hbar N_A \varrho_{\mathrm{Fe}} l}{M_{\mathrm{Fe}} \cdot m_{\mathrm{Fe}}} = \\ &= \frac{4\pi \cdot \left(\frac{6{,}626\cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{2\pi}\right) \cdot 6,022 \cdot 10^{23}\,\frac{1}{\mathrm{mol}} \cdot 7,87 \cdot 10^3\,\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m}^3} \cdot 10^{-2}\,\mathrm{m}}{10^{-3}\,\mathrm{kg} \cdot 55,8 \cdot 10^{-3}\,\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{mol}}} \approx 1,13 \cdot 10^{-3}\,\frac{1}{\mathrm{s}}\,. \end{aligned} \tag{39}$$