Untersuchung des

Zeeman-Effekt

Übergang $2p \to 1s$, nur linearer Zeeman-Effekt: ohne $\vec{B}$-Feld

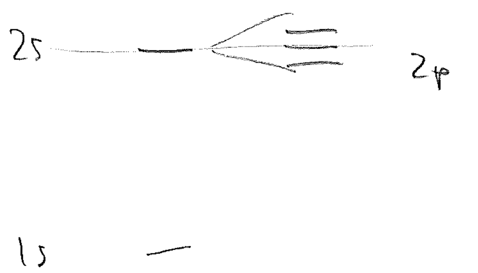
$$\cancel{E_{2p}} \equiv \Delta E = 13{,}6\,\mathrm{eV}\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{4}\,Ry\,.$$

Korrektur durch $\vec{B}$-Feld:

$$(H_0 + H_1)\,|\psi_{nlm}\rangle = \left(E_0 - \frac{\mu_B}{\hbar} B L_z\right)|\psi_{nlm}\rangle$$

$$= \left(E_0 - \underbrace{\mu_B B m}_{\delta E}\right)|\psi_{nlm}\rangle$$

$m = 0, \pm 1 \Rightarrow$ Aufspaltung des $2p$-Niveaus.



$\to$ & $E_0 = \hbar\Omega = \frac{3}{4}\,Ry$

$\delta E \approx \hbar\omega_L = \cancel{\hbar\frac{\mu_B B}{\hbar} = \mu_B B}$

$\hbar\omega_L = \cancel{\frac{1}{\hbar}}\,\mu_B B$, ($\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = 5{,}8\cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV/T}$)

$\Rightarrow$ kleiner Effekt.

WW mit Strahlungsfeld

→ Dipoloperator

$$\vec{D} = q\vec{r} \qquad P = -1$$

$\langle \vec{D} \rangle$? vgl $P\psi_{nlm} = (-1)^l \psi_{nlm}$.

⇒ Paritätswechsel. $= \langle \psi_{2s} | \vec{D} | \psi_{1s} \rangle$

$$\langle \psi_{1s} | \vec{D} | \psi_{1s} \rangle = \langle \psi_{2p} | \vec{D} | \psi_{2p} \rangle = 0$$

nur bei Übergang $2p \to 1s$

$$\langle \psi_{2p} | \vec{D} | \psi_{1s} \rangle \neq 0$$

Dazu $\vec{D} \sim \vec{r}$:

$$x = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\, r \left(Y_1^{-1}(\Omega) - Y_1^{1}(\Omega) \right)$$

$$y = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\, r \left(Y_1^{-1}(\Omega) + Y_1^{1}(\Omega) \right)$$

$$z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, r\, Y_1^{0}(\Omega)$$

~~X~~ Verwende Radialintegral

$$X \equiv \int_0^\infty R_{2,1}(r)\, R_{1,0}(r)\, r^{\cancel{2}} \cdot r^2 dr$$

kein Beweis.

(2)

$\psi_{1s} = R_{10} Y_0^0 \qquad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$\psi_{2p} = R_{21} Y_1^m$

$\Rightarrow \langle \psi_{2p} | D_x | \psi_{1s} \rangle = \chi \int d\Omega\, Y_1^{m*} \left(Y_1^{-1} - Y_1^{1} \right) Y_0^0\, d\Omega$

$\cdot \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\ \cancel{Y_0^0}\ q$

$\Rightarrow \langle \psi_{2p(\pm 1)} | D_x | \psi_{1s} \rangle = q\chi \frac{1}{\sqrt{6}} \quad (-m)$

$\langle \psi_{2p} | D_y | \psi_{1s} \rangle = iq\chi \frac{1}{\sqrt{6}}\ m$

$\langle \psi_{2p} | D_z | \psi_{1s} \rangle = \frac{q\chi}{\sqrt{3}} \delta_{m,0}$

Zeitentwicklung $\psi(t)$, Annahme

$|\psi(0)\rangle = \cos\alpha\, |\psi_{1s}\rangle + \sin\alpha\, |\psi_{2p}\rangle$

$\rightsquigarrow |\psi(t)\rangle = \cos\alpha\, e^{-i\Omega t} |\psi_{1s}\rangle + \sin\alpha\, e^{-i(\Omega + m\omega)t} |\psi_{2p}^m\rangle$

$\hbar\Omega = \frac{3}{4} R_y \ ; \quad E_{1s} = 1 R_y = \left(\frac{1}{4} + \frac{3}{4}\right) R_y$

$E_{2p} = \frac{1}{4} R_y = \cancel{\hbar\Omega}$

$= \left(1 - \frac{3}{4}\right) R_y$

$= \cos\alpha\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_{1s} t} |\psi_{1s}\rangle + \sin\alpha\, e^{-i\frac{E_{2p}}{\hbar} t} |\psi_{2p}\rangle$

$= e^{-\frac{i}{\hbar} E_{1s} t} \left(\cos\alpha\, |\psi_{1s}\rangle + \sin\alpha\, e^{-i(\underbrace{E_{2p} - E_{1s}}_{= \hbar\Omega + \hbar\omega}) t/\hbar} |\psi_{2p}\rangle \right)$

$$\Rightarrow \langle \psi_m(t) | \vec{D} | \psi_m(t) \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle D_x \rangle_{m=1} = -\frac{q\chi}{\sqrt{6}} \cos\alpha \sin\alpha \cos(\Omega+\omega)t$$

$$\langle D_y \rangle_{m=1} = -\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}\ \sin(\Omega+\omega)t$$

$$\langle D_z \rangle_{m=1} = 0$$

$$\langle D_x \rangle_{m=0} = \langle D_y \rangle_{m=0} = 0$$

$$\langle D_z \rangle_{m=0} = \frac{q\chi}{\sqrt{3}} \cos\alpha \sin\alpha \cos\Omega t$$

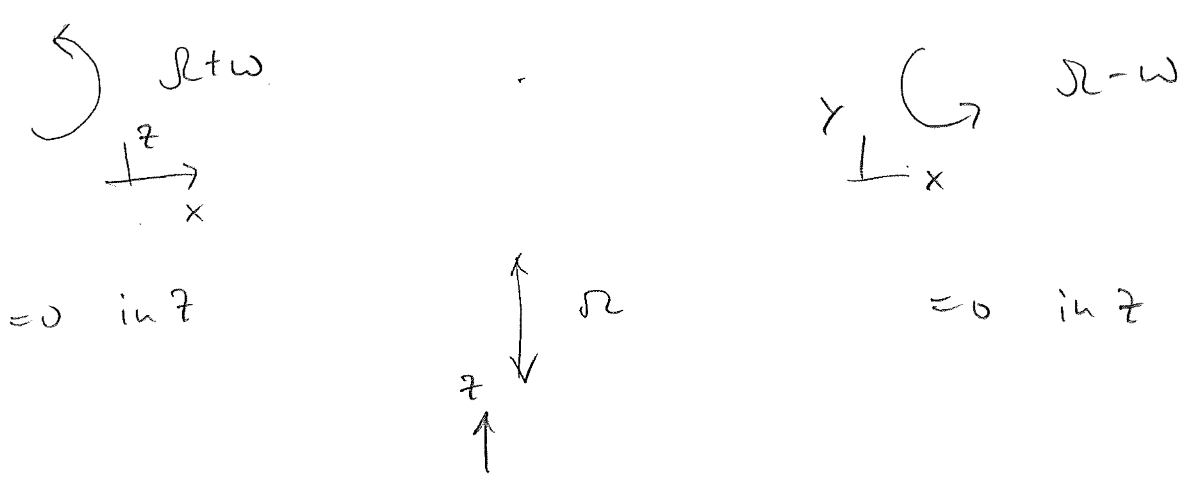
$$\langle D_x \rangle_{m=-1} = +\frac{q\chi}{\sqrt{6}} \cos\alpha \sin\alpha \cos(\Omega-\omega)t$$

$$\langle D_y \rangle_{m=-1} = -\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}\ \sin(\Omega-\omega)t$$

$$\langle D_z \rangle_{m=-1} = 0$$

$\Rightarrow$ Dipolmoment

$m=1$ $\qquad$ $m=0$ $\qquad$ $m=-1$



$\Rightarrow$ Beobachtung $\parallel \vec{B}$ aus z-Richtung?

nur 2 Linien, $\circlearrowleft$, $\circlearrowright$ polarisiert

Beobachtung $\perp B$

3 Linien linear polarisiert

$m = 0$ $\parallel B$ polarisiert

$m = \pm 1$ $\perp B$ polarisiert

Radiale Wellefunktione

$$R_{nl} = \frac{2}{n^{\cancel{4}2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{\left((n+l)!\right)^3}}\, a_0^{-3/2}$$

$$\rho = \frac{2r}{n a_0}$$

$$\cdot\ \rho^{l} e^{-\rho/2} L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)$$

$$L_p^k(\rho) = \frac{(p+k)!}{p!} \frac{e^{\rho}}{\rho^k} \frac{d^p}{d\rho^p}\left(\rho^{p+k} e^{-\rho}\right)$$

Orthogonalität

$$\frac{p!}{\left((p+k)!\right)^3} \int_0^\infty d\rho\, \rho^k e^{-\rho} L_p^k(\rho) L_{p'}^k(\rho) = \delta_{pp'}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \ ?$$

$$= \underbrace{\int d\Omega\, dr\, r^2\, Y_l^{m*}(\Omega)\, Y_l^m(\Omega)}_{=1} R_{nl}(r) \frac{1}{r} R_{nl}(r)$$

$$= \int dr\, r\, R_{nl}^2(r)$$

$$= \frac{4}{n^4} \left(\frac{(n-l-1)!}{\left((n+l)!\right)^3}\right) a_0^{-3} \int \left(\frac{n a_0}{2}\right)^2 d\rho\, \rho\, \rho^{2l} e^{-\rho} \left(L^{2l+1}_{n-l-1}(\rho)\right)^2$$

$$= \frac{4}{n^4} a_0^{-3} \left(\frac{n a_0}{2}\right)^2 \underbrace{\qquad\qquad}_{\text{Orth.}\ = 1 \cdot (\ )^{-1}}$$

$$= \frac{1}{a_0 n^2}\ //$$

$\Rightarrow$ Virialsatz. $\qquad \frac{e^2}{2a_0} = Ry$

$$\langle V \rangle = -e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{e^2}{a_0 n^2} = -\frac{2Ry}{n^2}$$

Gesamtenergie $= -\frac{Ry}{n^2}$

$$\Rightarrow \quad \langle T \rangle + \langle V \rangle = \langle E \rangle \overset{!}{=} -\frac{Ry}{n^2}$$

$$\Rightarrow \quad \langle T \rangle = -\frac{Ry}{n^2} - \langle V \rangle \overset{?}{=} -\frac{Ry}{n^2} + \frac{2Ry}{n^2} \quad \checkmark$$

$2\langle T \rangle = -\langle V \rangle$ Virialsatz

$$\langle T \rangle = -\frac{Ry}{n^2} - \langle V \rangle \qquad \langle T \rangle + \langle V \rangle = \langle E \rangle$$

$$= -\frac{Ry}{n^2} + \frac{2Ry}{n^2} = \frac{Ry}{n^2}$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{2\langle T \rangle = \frac{2Ry}{n^2}}_{\text{Gesamtenergie + Rech}} = \underbrace{-\langle V \rangle = \frac{2Ry}{n^2}}_{\text{Rech}} \quad \checkmark$$

Virialsatz

Atome mit mehreren Elektronen

falls keine $e^- - e^-$ WW, hätte ~~…~~

→ Pauli-Prinzip, Auffüllen der Zustände

E_n, l-entartet, (auch m)

weitere WW kugelsymmetrisch,

⇒ E_{nl}, aber m-entartet!

Aufenthaltswsk. für n, l, fest

$$P_{nl} = \frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} P_{nlm}$$

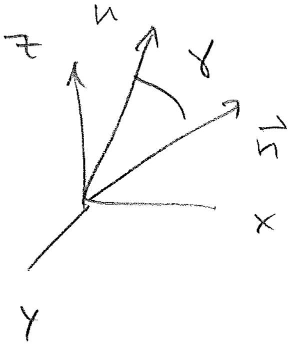
wenn alle m zufällig (= gleich) sind

$$\Rightarrow \quad |\psi_{nl}|^2 = \frac{1}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} |\psi_{nlm}|^2$$

$$\sum_{m=-l}^{l} |Y_l^m(\Omega)|^2 = \frac{\cancel{4\pi}}{\cancel{2l+1}} P_l(1)\,\frac{2l+1}{4\pi}$$

(Spezialfall $\gamma = 0$) des „Additionstheorems"

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\Omega')\,Y_l^m(\Omega)$$

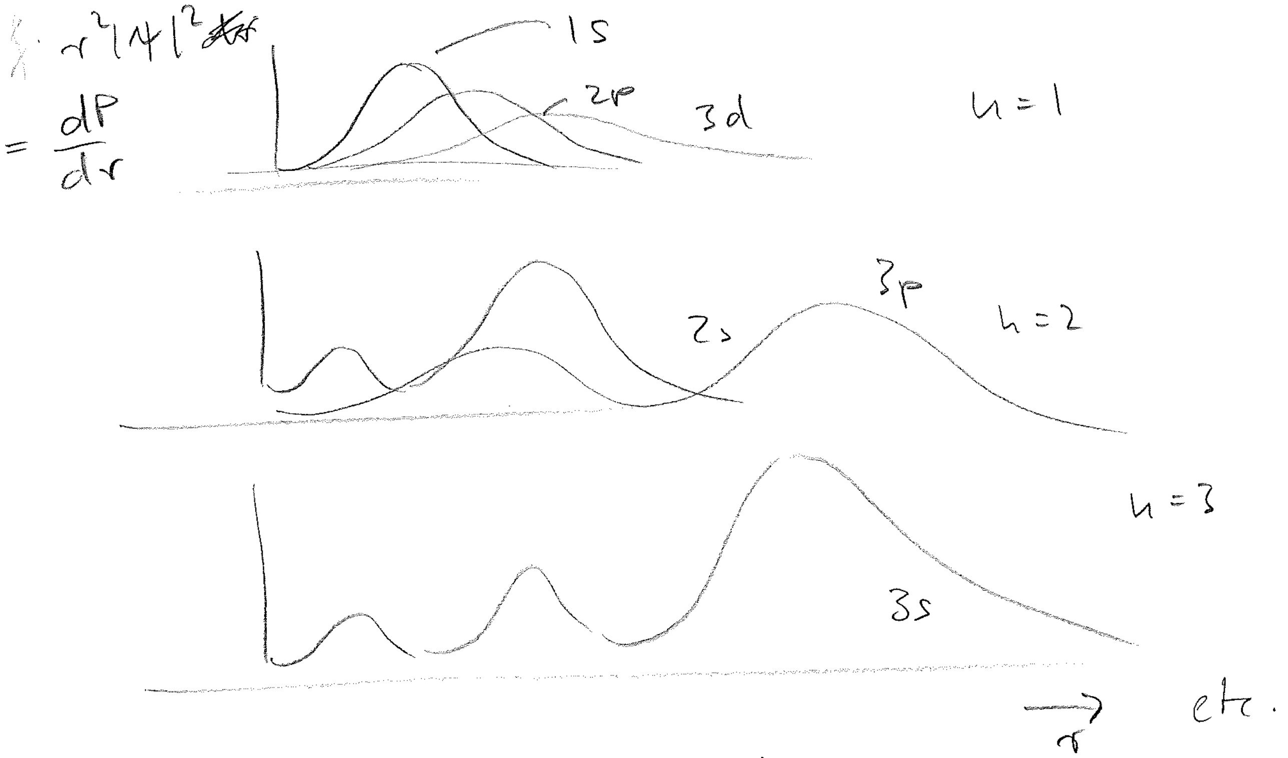


$\vec n, \vec n' \;\hat{=}\; \Omega, \Omega'$

$\cos\gamma = \vec n \cdot \vec n' \;\to\; \gamma = 0$, s.o.)

d.h. $|\psi_{nl}|^2$ unabh. von Ω !

$$\sum_{m=-l}^{l} \int d\Omega\, r^2 dr\, |\psi_{nlm}|^2 = \int r^2 dr\, R_{nl}^2$$



„$(n-l)$ Knoten"

aber „Schalen"

alle m besetzt für ein l

$\Rightarrow$ <u>volle</u> Unterschale,

kugelsymmetrisch.

„Schalenmodell".

s. auch Kernphysik, magische Zahlen,