



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung, Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

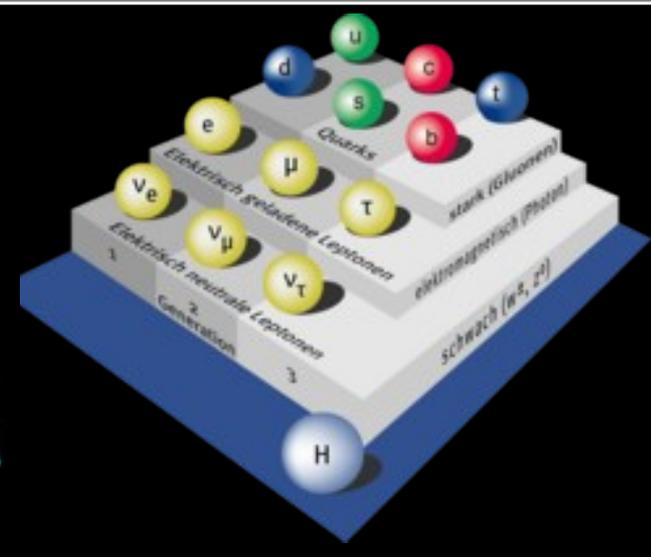
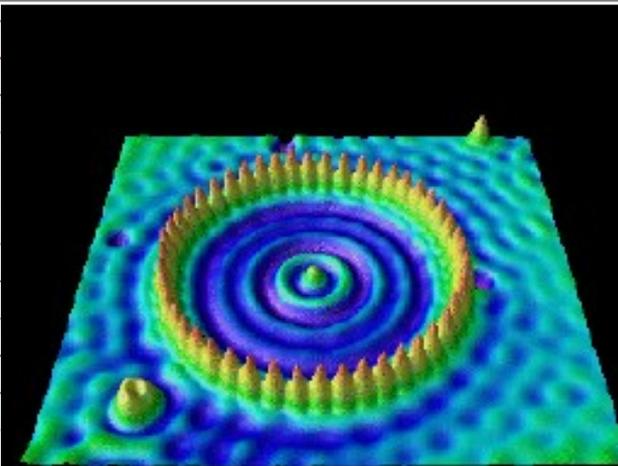
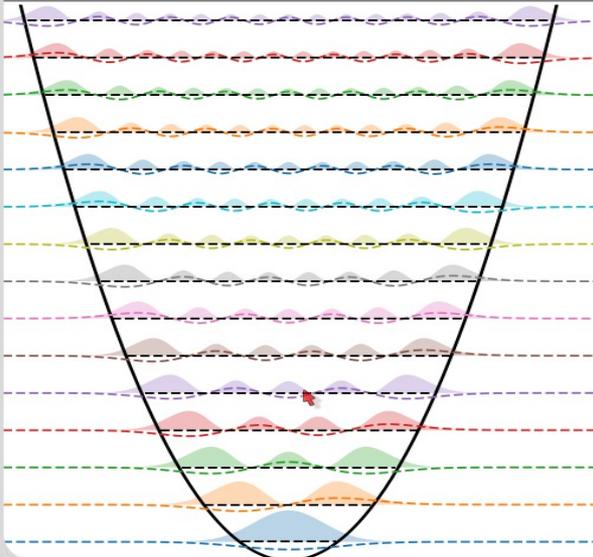
Vorlesung 11 **Moderne Physik (L)**

Das Wasserstoffatom (2)

Günter Quast

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



Organisatorisches

Die **Anmeldung zur Vorleistung** („Übungsschein“)

ist im Campus-System **freigeschaltet**

Prüfungsnummer 7800067

Bitte anmelden

(und Feedback geben, wenn es für Sie nicht funktioniert !)

In der Anmeldung per E-Mail zur Kurseinteilung

gab es zum Studiengang zwei mal die Angabe „sonstige“.

Bitte an die Betroffenen, per E-Mail

Frau Schäfer (daniela.schaefer@kit) und mir (guenter.quast@kit.edu)

Information zu Studiengang und Prüfungsmodalitäten zukommen lassen.

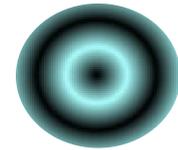
Das Wasserstoff-Atom:

- Coulomb-Potential $V = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$ in Schrödingergleichung einsetzen

– Z : Kernladungszahl, $Z = 1$ für Wasserstoffatom

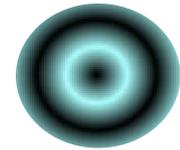
- Lösung faktorisiert in Kugelkoordinaten: $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_{l,m}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)$

- **Winkelteil**: gelöst durch Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \phi)$
- **Radialteil**: gelöst durch Laguerre-Polynome
- **Wellenfunktionen**, die stationäre Schrödingergleichung lösen, sind auch **Eigenfunktionen von L^2 und L_z** → zeitlich konstant
- Mit z-Achse als Quantisierungsachse: **L^2 und L_z messbar**
- **Quantenzahlen**:
 - Hauptquantenzahl n (natürliche Zahlen)
 - Drehimpulsquantenzahl l (natürliche Zahlen und 0)
 - Magnetische Quantenzahl m mit $-l \leq m \leq l$
 - (Radialquantenzahl $N = n - l - 1$ (natürliche Zahlen und 0))



- Der Bahndrehimpuls L des Elektrons ist gegeben durch $L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$

– Die z-Komponente ist $L_z = m \cdot \hbar$



- (vor allem) die Hauptquantenzahl n legt Energie fest: $E_{n,l,m} \approx E_n = -E_0 \cdot \frac{1}{n^2}$

– $E_0 = \frac{-m_e e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -13,6 eV \cdot Z^2$

– Zu jedem Wert von n gibt es n^2 Zustände gleicher Energie

- Magnetisches Moment eines Elektrons: $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{L}$

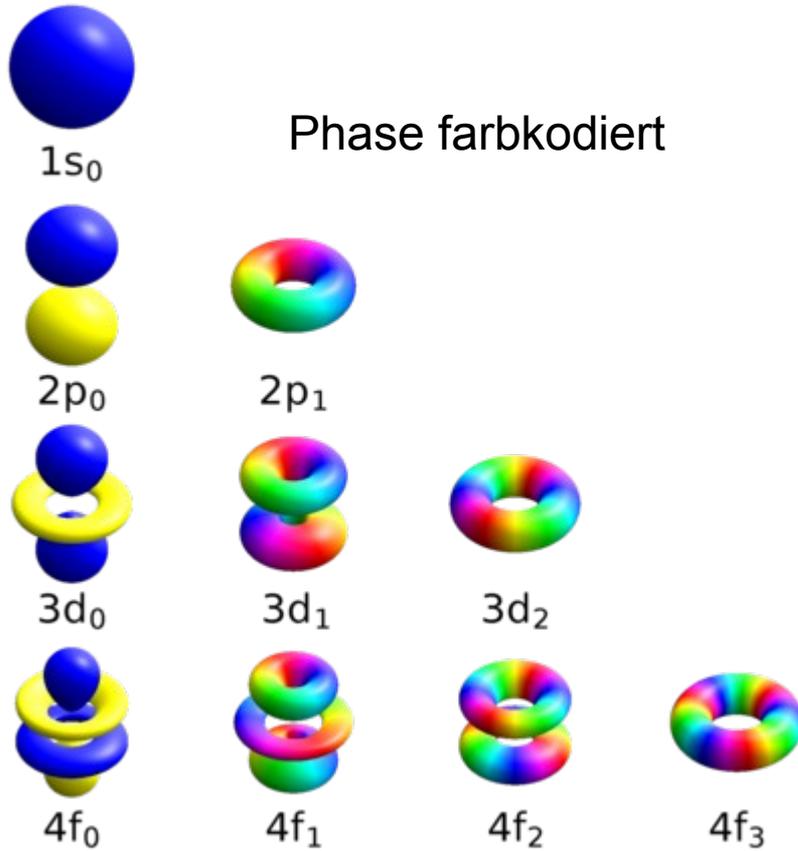
– Die z-Komponente ist $\vec{\mu}_z = -\frac{e}{2m_e} \cdot \hbar \cdot m = -\mu_B \cdot m$

* m : magnetische Quantenzahl

* μ_B : Bohr'sches Magneton

- Energieaufspaltung im Magnetfeld: $\Delta E = -\mu_B \cdot \Delta m \cdot B$

<https://www.wikiwand.com/de/Wasserstoffatom>



Die stationäre **Schrödingergleichung** für das **Wasserstoffatom**

in Kugelkoordinaten mit Separationsansatz $\psi(r, \Theta, \Phi) = R(r) \cdot T(\Theta) \cdot P(\Phi)$

$$\frac{1}{R} \sin^2 \Theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial T}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 \sin^2 \Theta = 0$$

$$\text{mit } m_e \rightarrow \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e$$

Lösungsskizze:

$$-\frac{1}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \Phi^2} = C_1 \quad \rightarrow \quad P(\Phi) = A \exp(im\Phi) \text{ mit } m = \sqrt{C_1} \in \mathbb{Z}$$

$$-\frac{1}{\sin \Theta} \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial T}{\partial \Theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \Theta} = C_2$$

$$\rightarrow T_{l,m} = P_l^m(\cos \Theta) \text{ mit } C_2 = l(l+1) \text{ und } -l \leq m \leq l$$

$$\text{Lösung Winkelteil: } P_l^m(\cos \Theta) \cdot P_m(\Phi) = Y_l^m(\Theta, \Phi)$$

Lösung Radialteil:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 = \ell(\ell + 1) \rightarrow R_{n,l}(r) = L_N(r) \exp\left(-\frac{2\mu E_N}{\hbar^2} r\right)$$

L_N : Laguerre-Polynome, $N = n + l + 1$, $n=1, 2, \dots$

Struktur der Lösung: $\psi_{n,l,m}(r, \Theta, \Phi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\Theta, \Phi)$

$$\hat{\mathbf{H}}\psi_{n,l,m} = E_n \psi_{n,l,m} \quad \text{mit} \quad E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$$

Zusammenhang mit dem Drehimpuls:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 + \hat{\mathbf{L}}_z^2 = \underbrace{-\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} \right)}_{= r^2 \cdot \text{Winkelteil des Laplace-Operators !}}$$

$$\rightarrow \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{nlm} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \psi_{nlm}$$

$$\hat{\mathbf{L}}_z \psi_{nlm} = \hbar m \psi_{nlm}$$

Inhaltsübersicht VL Moderne Physik

- 1) Einführung
- 2) Wiederholung wichtiger Konzepte der klassischen Physik
- 3) Spezielle Relativitätstheorie
- 4) Schlüsselexperimente und Grundlagen der Quantenphysik
- 5) Die Schrödingergleichung
- 6) Anwendungen der Schrödingergleichung
- 7) **Das Wasserstoff-Atom**
- 8) Atome mit mehreren Elektronen
- 9) Wechselwirkung von Licht und Materie
- 10) Grundlagen der Festkörperphysik
- 11) Kern- und Teilchenphysik
- 12) Ausblick

7.5 H-Atom: Quantenzahlen und Termschema

Übersicht über die Quantenzahlen

- **n** Hauptquantenzahl, $n = 1, 2, 3, \dots$

bestimmt Energieniveaus $E_n = \frac{E_1}{n^2} = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$

- **l** Bahndrehimpuls-Quantenzahl, $l \leq n - 1$

bestimmt Drehimpuls $|\vec{L}_\ell| = \hbar \cdot \sqrt{l(l+1)}$

- **m** magnetische Quantenzahl, $-l \leq m \leq l$

legt Richtung des Drehimpulses fest $L_z = \hbar \cdot m$
es gibt $2l+1$ verschiedene Werte für m

- ($N = n - l - 1$) Radial-Quantenzahl

bestimmt Zahl der Knoten der Radial-Funktion

7.5 H-Atom: Quantenzahlen und Termschema

Übersicht über die Quantenzahlen

- **n** Hauptquantenzahl, $n = 1, 2, 3, \dots$

bestimmt Energieniveaus $E_n = \frac{E_1}{n^2} = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$

- **l** Bahndrehimpuls-Quantenzahl, $l \leq n - 1$

bestimmt Drehimpuls $|\vec{L}_\ell| = \hbar \cdot \sqrt{\ell(\ell + 1)}$

- **m** magnetische Quantenzahl, $-l \leq m \leq l$

legt Richtung des Drehimpulses fest $L_z = \hbar \cdot m$
es gibt $2l+1$ verschiedene Werte für m

- ($N = n - l - 1$) Radial-Quantenzahl

bestimmt Zahl der Knoten der Radial-Funktion

Energieniveau hängt nur von n ab (entartet bzgl. der anderen Quantenzahlen)

- Zahl der Zustände mit gleicher Energie E_n : $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 1 + 3 + \dots + 2n - 1 = n^2$

Entartung wird durch weitere Effekte teilweise aufgehoben → später

Zahl der Energiezustände

Abzählen der Energieniveaus:

n	l	m	Σ
n=1	0	0	1
n=2	0 1	0 -1, 0, 1	4
n= 3	0 1 2	0 -1, 0, 1 -2, -1, 0, 1, 2	9

n^2 Zustände / Schale

Pro Energiezustand gibt es bei Mehrelektronensystemen
wegen des Pauliprinzips Platz für ein Elektron

(tatsächlich sind es zwei wegen Elektron-Spin, s. später)

→ Wichtig für Aufbau des Periodensystems der Elemente (s. später)

H-Atom: Quantenzahlen und Termschema (2)

Historisch hatte sich
in der Chemie und Atomphysik eine andere Nomenklatur durchgesetzt:

H-Atom: Quantenzahlen und Termschema (2)

Historisch hatte sich

in der Chemie und Atomphysik eine andere Nomenklatur durchgesetzt:

Hauptquantenzahl \rightarrow „Schalen“:

$n=1$ K-Schale

$n=2$ L- Schale

$n=3$ M- Schale

...

H-Atom: Quantenzahlen und Termschema (2)

Historisch hatte sich

in der Chemie und Atomphysik eine andere Nomenklatur durchgesetzt:

Hauptquantenzahl \rightarrow „Schalen“:

$n=1$ K-Schale

$n=2$ L- Schale

$n=3$ M- Schale

...

Bahndrehimpuls-Quantenzahl \rightarrow „Orbitale“:

$l=0$ s- Orbital

$l=1$ p- Orbital

$l=2$ d- Orbital

$l=3$ f- Orbital

$l=4$ g- Orbital

H-Atom: Quantenzahlen und Termschema (2)

Historisch hatte sich

in der Chemie und Atomphysik eine andere Nomenklatur durchgesetzt:

Hauptquantenzahl \rightarrow „Schalen“:

$n=1$ K-Schale

$n=2$ L- Schale

$n=3$ M- Schale

...

Bahndrehimpuls-Quantenzahl \rightarrow „Orbitale“:

$l=0$ s- Orbital

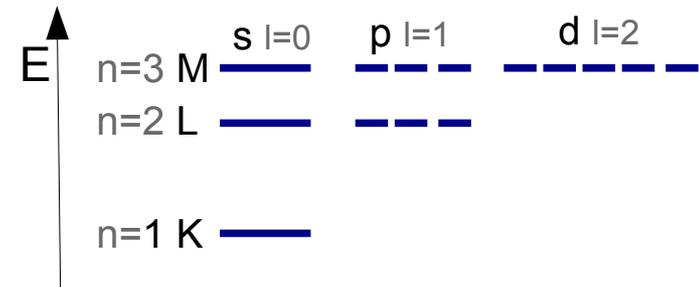
$l=1$ p- Orbital

$l=2$ d- Orbital

$l=3$ f- Orbital

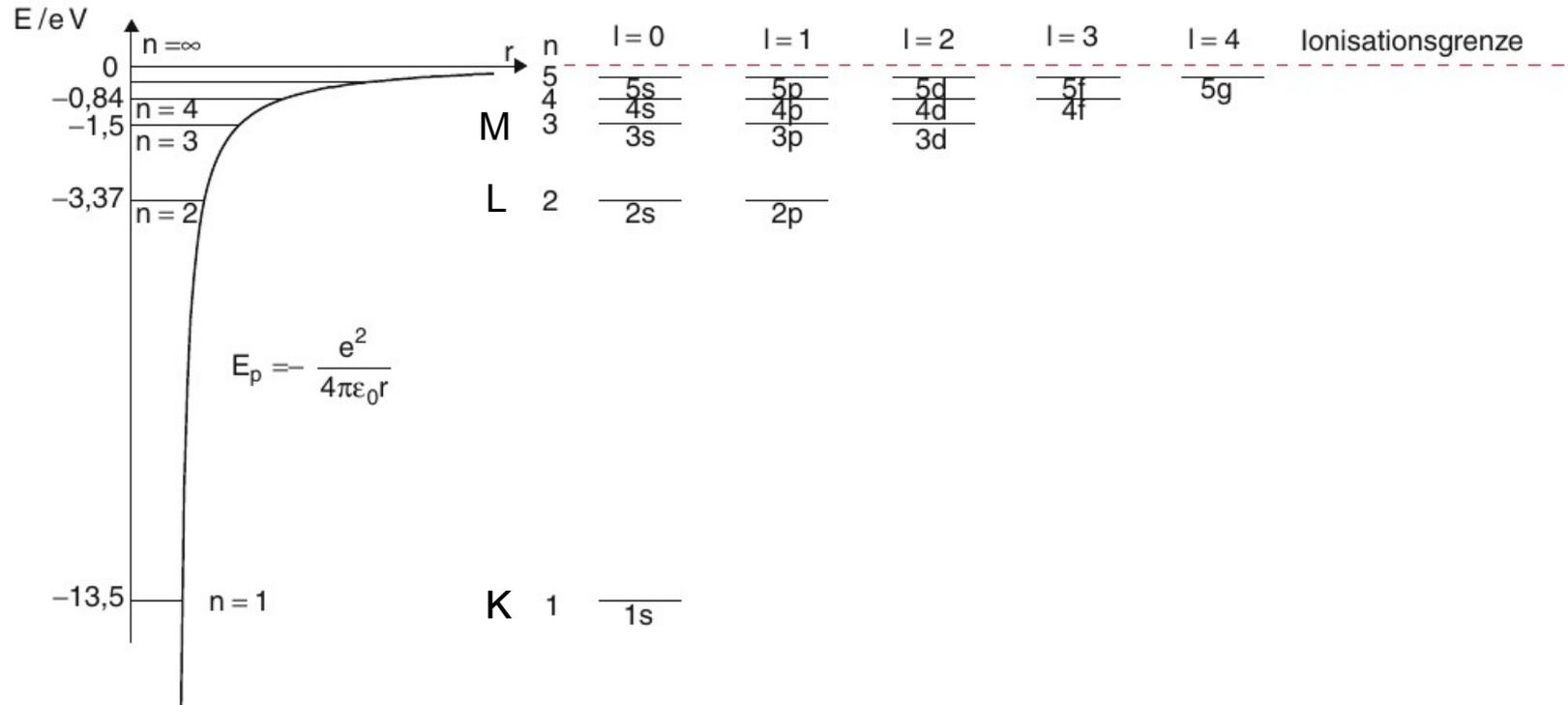
$l=4$ g- Orbital

\rightarrow „professionelle“
Bezeichnung der Zustände:



H-Atom: Quantenzahlen und Termschema (3)

Termschema: Energieniveaus aufgespalten nach Quantenzahlen



H-Atom: Korrekturen

Näherung bisher:

H-Atom=zwei punktförmige nicht-relativistische, geladene Teilchen

Es ist tatsächlich aber komplizierter

- neue Quanteneigenschaft: „Eigendrehimpuls“ oder **Spin**
von Elektronen, Protonen, Photonen, muss berücksichtigt werden
- **relativistische Korrekturen** und Berücksichtigung von Effekten, die sich aus der **relativistisch korrekten Formulierung der Quantenphysik, der Quantenelektrodynamik (QED)** ergeben
→ behandelt als kleine Korrekturen zu bisherigen Resultaten

7.6

Entdeckung des Spins

Experiment: Strahl aus Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld

Auf magnetisches Dipolmoment μ wirkt im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

7.6

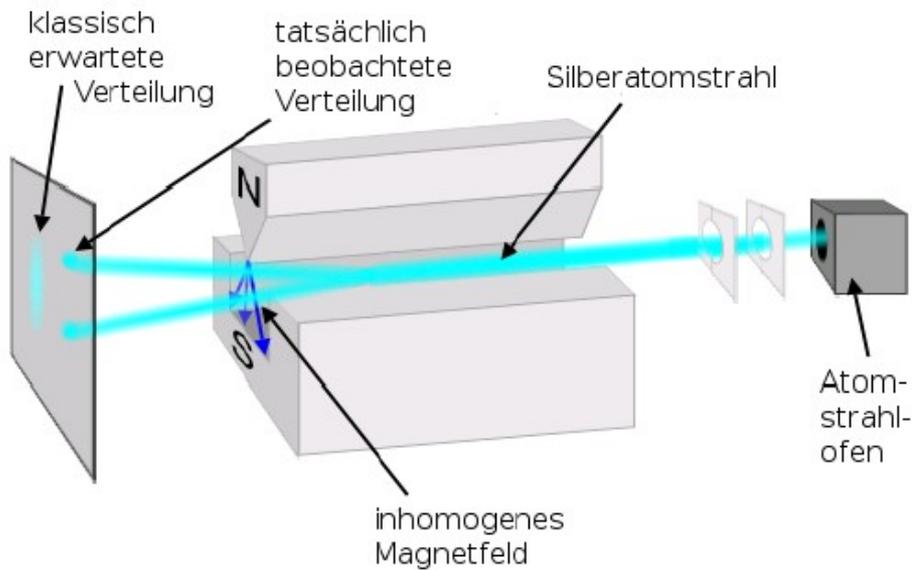
Entdeckung des Spins

Experiment: Strahl aus Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld

Auf magnetisches Dipolmoment μ wirkt im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Prinzip des **Stern-Gerlach-Experiments:**

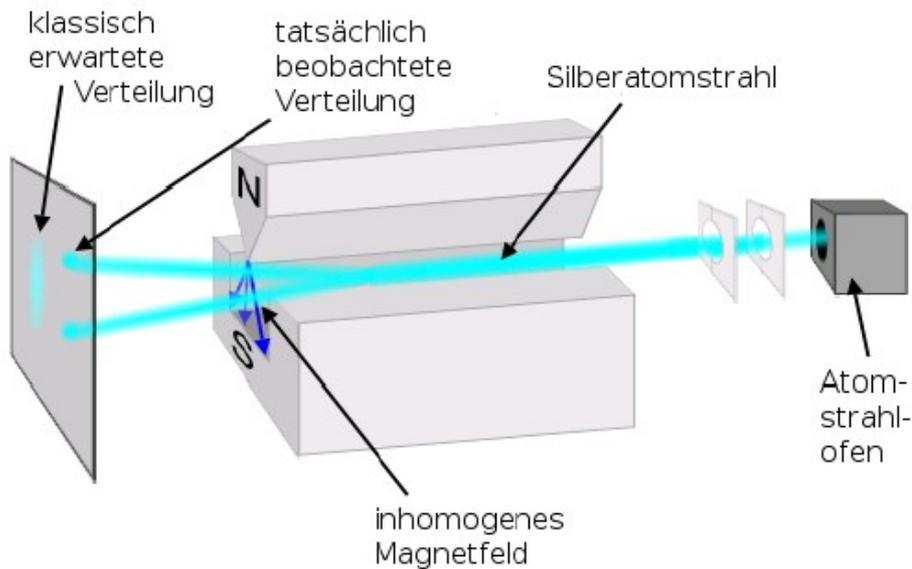


Experiment: Strahl aus Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld

Auf magnetisches Dipolmoment μ wirkt im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Prinzip des **Stern-Gerlach-Experiments:**



Elektronenkonfiguration von Ag (Silber):
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$

7.6

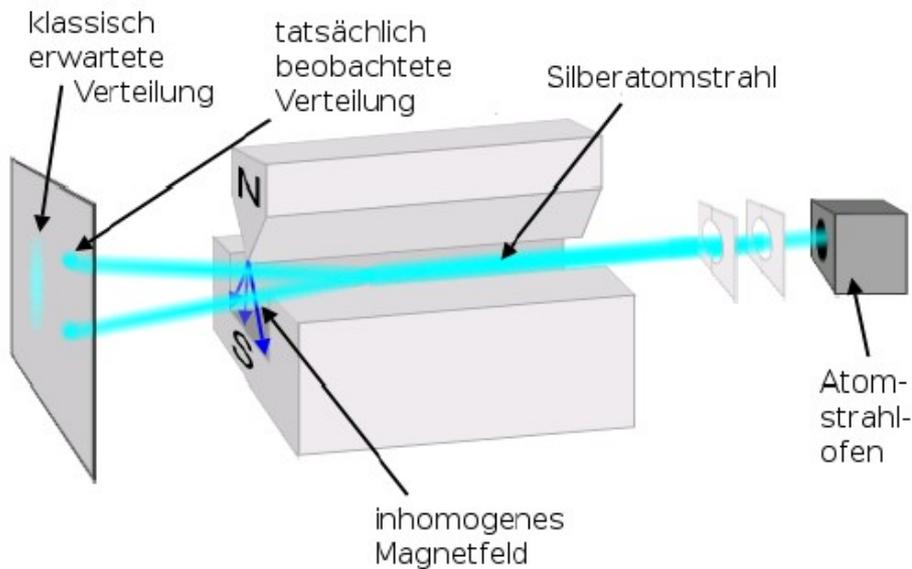
Entdeckung des Spins

Experiment: Strahl aus Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld

Auf magnetisches Dipolmoment μ wirkt im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Prinzip des **Stern-Gerlach-Experiments:**



Elektronenkonfiguration von Ag (Silber):
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$

abgeschlossene Schalen,
Gesamtdrehimpuls = 0

7.6

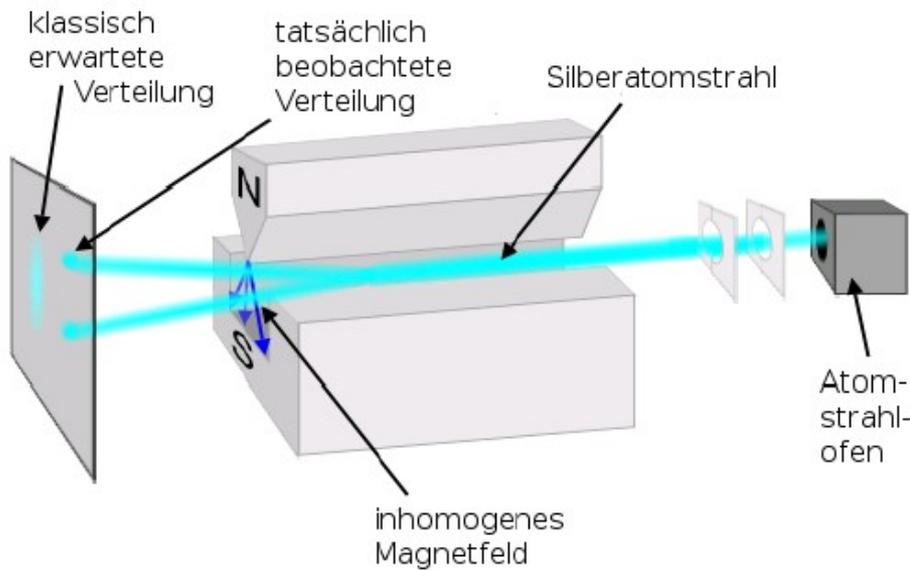
Entdeckung des Spins

Experiment: Strahl aus Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld

Auf magnetisches Dipolmoment μ wirkt im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Prinzip des **Stern-Gerlach-Experiments:**



Elektronenkonfiguration von Ag (Silber):
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$

abgeschlossene Schalen,
Gesamtdrehimpuls = 0

Nur 5s - Elektron trägt zum magnetischen Moment bei.
 $l=0 \rightarrow$ kein Bahndrehimpuls!

7.6

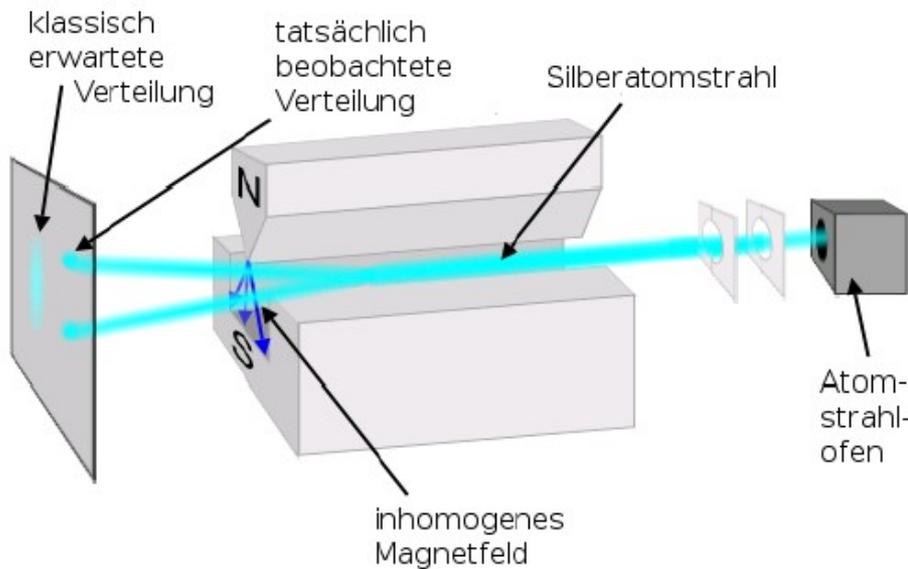
Entdeckung des Spins

Experiment: Strahl aus Silberatomen in einem inhomogenen Magnetfeld

Auf magnetisches Dipolmoment μ wirkt im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Prinzip des **Stern-Gerlach-Experiments:**



Elektronenkonfiguration von Ag (Silber):
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$

abgeschlossene Schalen,
Gesamtdrehimpuls = 0

Nur 5s - Elektron trägt zum magnetischen Moment bei.
 $l=0 \rightarrow$ kein Bahndrehimpuls!

Beobachtung: Zweifache Aufspaltung des Strahls !

Entdeckung des Spins (2)

Stern-Gerlach-Ergebnis wurde historisch erst 1927 korrekt interpretiert:

- 1924 Deutung der Emissionsspektren der „Leuchtelektronen“ bei Alkalimetallen (W. Pauli): Neuer Freiheitsgrad mit Elektronenzuständen

Anmerkung: g_e ist in der relativistischen QM erklärt und inklusive QED-Korrekturen mit ähnlich hoher Genauigkeit berechenbar und bestätigt den experimentellen Wert.

Entdeckung des Spins (2)

Stern-Gerlach-Ergebnis wurde historisch erst 1927 korrekt interpretiert:

- 1924 Deutung der Emissionsspektren der „Leuchtelektronen“ bei Alkalimetallen (W. Pauli): **Neuer Freiheitsgrad mit Elektronenzuständen**
- 1925 Uhlenbeck, Goudsmit :
neuer Freiheitsgrad ist **Eigendrehimpuls (Spin) \vec{s} mit Werten $\pm 1/2$**

Anmerkung: g_e ist in der relativistischen QM erklärt und inklusive QED-Korrekturen mit ähnlich hoher Genauigkeit berechenbar und bestätigt den experimentellen Wert.

Entdeckung des Spins (2)

Stern-Gerlach-Ergebnis wurde historisch erst 1927 korrekt interpretiert:

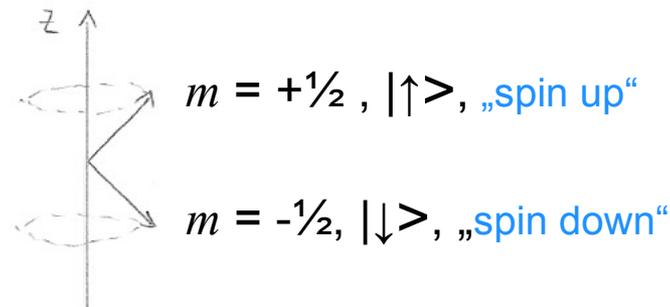
- 1924 Deutung der Emissionsspektren der „Leuchtelektronen“ bei Alkalimetallen (W. Pauli): **Neuer Freiheitsgrad mit Elektronenzuständen**
- 1925 Uhlenbeck, Goudsmit :
neuer Freiheitsgrad ist **Eigendrehimpuls (Spin) \vec{s} mit Werten $\pm 1/2$**

quantenmechanisch formal äquivalent zum Drehimpuls

(klassisch nicht verstehbar – wie kann sich ein punktförmiges Objekt drehen ?)

$$- \langle |\vec{s}|^2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$- s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$



Anmerkung: g_e ist in der relativistischen QM erklärt und inklusive QED-Korrekturen mit ähnlich hoher Genauigkeit berechenbar und bestätigt den experimentellen Wert.

Entdeckung des Spins (2)

Stern-Gerlach-Ergebnis wurde historisch erst 1927 korrekt interpretiert:

- 1924 Deutung der Emissionsspektren der „Leuchtelektronen“ bei Alkalimetallen (W. Pauli): **Neuer Freiheitsgrad mit Elektronenzuständen**

- 1925 Uhlenbeck, Goudsmit :

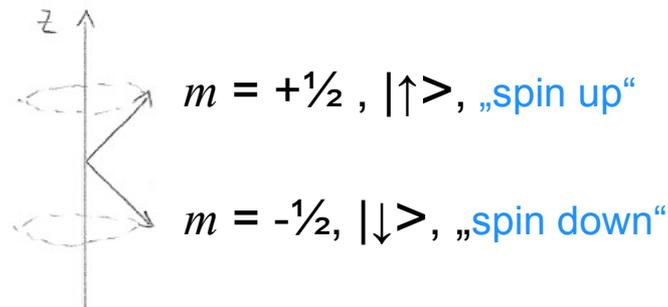
neuer Freiheitsgrad ist **Eigendrehimpuls (Spin)** \vec{s} mit Werten $\pm 1/2$

quantenmechanisch formal äquivalent zum Drehimpuls

(klassisch nicht verstehbar – wie kann sich ein punktförmiges Objekt drehen ?)

$$- \langle |\vec{s}|^2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$- s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$



- Elektronen-Spin → **magnetisches Moment des Elektrons**

$$\mu_e = -g_e \mu_B S$$

der **Faktor g_e** , das „**gyromagnetische Verhältnis**“ ist ein Maß für die Auswirkung des Spins auf μ_e im Vergleich zum Bahndrehimpuls und hat heute den experimentellen Wert 2.00231930436256(35)

Anmerkung: g_e ist in der relativistischen QM erklärt und inklusive QED-Korrekturen mit ähnlich hoher Genauigkeit berechenbar und bestätigt den experimentellen Wert.

Entdeckung des Spins (2)

Stern-Gerlach-Ergebnis wurde historisch erst 1927 korrekt interpretiert:

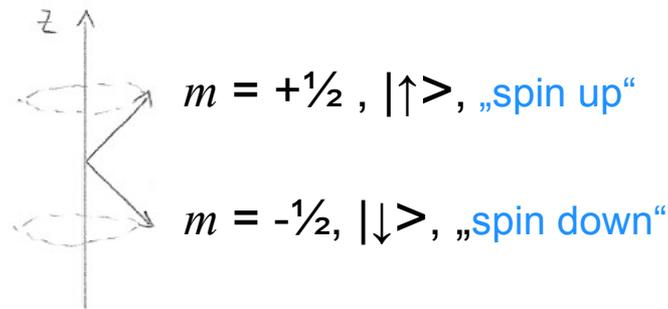
- 1924 Deutung der Emissionsspektren der „Leuchtelektronen“ bei Alkalimetallen (W. Pauli): **Neuer Freiheitsgrad mit Elektronenzuständen**
- 1925 Uhlenbeck, Goudsmit :
neuer Freiheitsgrad ist **Eigendrehimpuls (Spin) \vec{s} mit Werten $\pm 1/2$**

quantenmechanisch formal äquivalent zum Drehimpuls

(klassisch nicht verstehbar – wie kann sich ein punktförmiges Objekt drehen ?)

$$- \langle |\vec{s}|^2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$- s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$



- Elektronen-Spin → **magnetisches Moment des Elektrons**

$$\mu_e = -g_e \mu_B S$$

der **Faktor g_e** , das „gyromagnetische Verhältnis“ ist ein Maß für die Auswirkung des Spins auf μ_e im Vergleich zum Bahndrehimpuls und hat heute den experimentellen Wert 2.00231930436256(35)

Anmerkung: g_e ist in der relativistischen QM erklärt und inklusive QED-Korrekturen mit ähnlich hoher Genauigkeit berechenbar und bestätigt den experimentellen Wert.

Entdeckung des Spins (3)

Das mit dem Elektron-Spin assoziierte magnetische Moment führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung von atomaren Energieniveaus im Magnetfeld → **anomaler Zeeman-Effekt:**

Aufspaltung der Spektrallinien in mehr als drei Linien (bei $l = 1$)

(ist sogar häufiger als der normale Zeeman-Effekt)

Entdeckung des Spins (3)

Das mit dem Elektron-Spin assoziierte magnetische Moment führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung von atomaren Energieniveaus im Magnetfeld → **anomaler Zeeman-Effekt:**

Aufspaltung der Spektrallinien in mehr als drei Linien (bei $l=1$)

(ist sogar häufiger als der normale Zeeman-Effekt)

Drehimpuls \vec{L} und Spin \vec{s} addieren sich zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$

Entdeckung des Spins (3)

Das mit dem Elektron-Spin assoziierte magnetische Moment führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung von atomaren Energieniveaus im Magnetfeld → **anomaler Zeeman-Effekt:**

Aufspaltung der Spektrallinien in mehr als drei Linien (bei $l=1$)

(ist sogar häufiger als der normale Zeeman-Effekt)

Drehimpuls \vec{L} und Spin \vec{s} addieren sich zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$

Zum Gesamtdrehimpuls gehören die Quantenzahlen

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_j, \quad -j \leq m_j \leq j$$

mit $(2j+1)$ – facher Niveaufspaltung im (schwachen) Magnetfeld.

Entdeckung des Spins (3)

Das mit dem Elektron-Spin assoziierte magnetische Moment führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung von atomaren Energieniveaus im Magnetfeld → **anomaler Zeeman-Effekt:**

Aufspaltung der Spektrallinien in mehr als drei Linien (bei $l=1$)

(ist sogar häufiger als der normale Zeeman-Effekt)

Drehimpuls \vec{L} und Spin \vec{s} addieren sich zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$

Zum Gesamtdrehimpuls gehören die Quantenzahlen

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_j, \quad -j \leq m_j \leq j$$

mit $(2j+1)$ – facher Niveaufspaltung im (schwachen) Magnetfeld.

zur Vollständigen Charakterisierung der Elektronenzustände werden **vier Quantenzahlen** benötigt: $|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s\rangle$ bzw. $|n, l, m_j, j\rangle$

Entdeckung des Spins (3)

Das mit dem Elektron-Spin assoziierte magnetische Moment führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung von atomaren Energieniveaus im Magnetfeld → **anomaler Zeeman-Effekt:**

Aufspaltung der Spektrallinien in mehr als drei Linien (bei $l=1$)

(ist sogar häufiger als der normale Zeeman-Effekt)

Drehimpuls \vec{L} und Spin \vec{s} addieren sich zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$

Zum Gesamtdrehimpuls gehören die Quantenzahlen

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_j, \quad -j \leq m_j \leq j$$

mit $(2j+1)$ – facher Niveaufspaltung im (schwachen) Magnetfeld.

zur Vollständigen Charakterisierung der Elektronenzustände werden **vier Quantenzahlen** benötigt: $|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s\rangle$ bzw. $|n, l, m_j, j\rangle$

j-Quantenzahl wird bei Benennung der Zustände als Index angegeben:

$$\begin{aligned} \text{z. B. } n = 2, l = 1, j = \frac{1}{2} &\rightarrow 2p_{1/2} \\ n = 2, l = 1, j = \frac{3}{2} &\rightarrow 2p_{3/2} \end{aligned}$$

Entdeckung des Spins (3)

Das mit dem Elektron-Spin assoziierte magnetische Moment führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung von atomaren Energieniveaus im Magnetfeld → **anomaler Zeeman-Effekt:**

Aufspaltung der Spektrallinien in mehr als drei Linien (bei $l=1$)

(ist sogar häufiger als der normale Zeeman-Effekt)

Drehimpuls \vec{L} und Spin \vec{s} addieren sich zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{L} + \vec{s}$

Zum Gesamtdrehimpuls gehören die Quantenzahlen

$$j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_j, \quad -j \leq m_j \leq j$$

mit $(2j+1)$ – facher Niveaufspaltung im (schwachen) Magnetfeld.

zur Vollständigen Charakterisierung der Elektronenzustände werden **vier Quantenzahlen** benötigt: $|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s\rangle$ bzw. $|n, l, m_j, j\rangle$

j-Quantenzahl wird bei Benennung der Zustände als Index angegeben:

$$\begin{aligned} \text{z. B. } n = 2, l = 1, j = \frac{1}{2} &\rightarrow 2p_{1/2} \\ n = 2, l = 1, j = \frac{3}{2} &\rightarrow 2p_{3/2} \end{aligned}$$

Anmerkung: bei sehr starken Magnetfeldern wird die Ls-Kopplung überwunden; Drehimpuls L und Spin s koppeln dann unabhängig an des B-Feld

(Paschen-Back-Effekt)

Pause

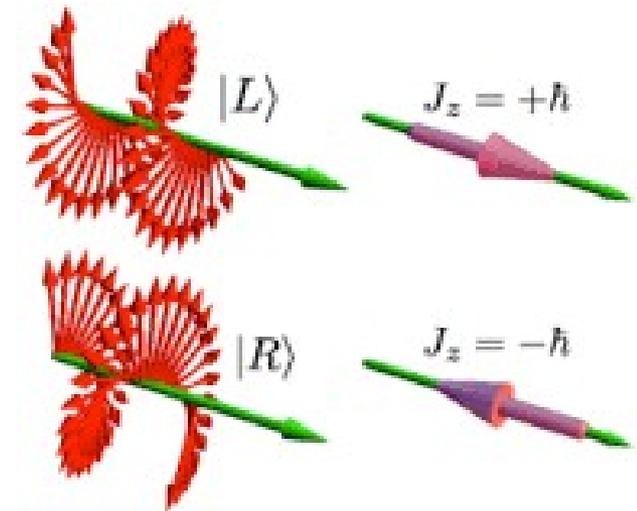
und Zeit für Fragen ?

- In der Elektrodynamik haben zirkular polarisierte EM-Wellen einen Drehimpuls der Größe E/ω , pro Photon mit Energie $E = \hbar\omega$ also den Wert \hbar .
- Da sich Licht mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet, gibt es keine Schwingungen in Ausbreitungsrichtung.

- In der Elektrodynamik haben zirkular polarisierte EM-Wellen einen Drehimpuls der Größe E/ω , pro Photon mit Energie $E = \hbar\omega$ also den Wert \hbar .
- Da sich Licht mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet, gibt es keine Schwingungen in Ausbreitungsrichtung.

→

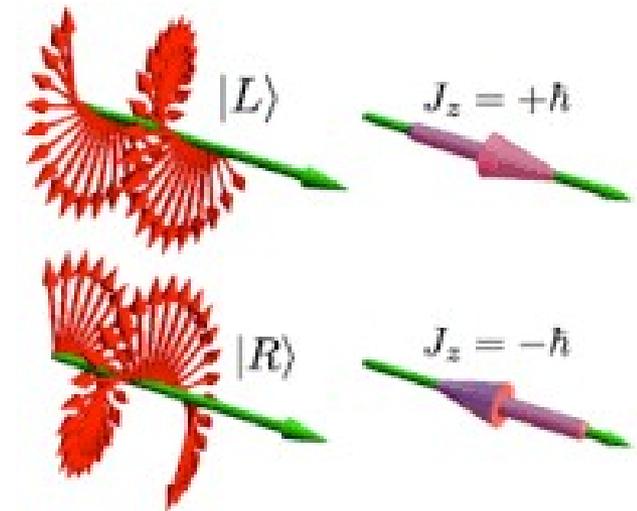
Das Photon hat zwei Polarisationsfreiheitsgrade, die quantenphysikalisch einem **Drehimpuls von $\pm 1\hbar$** entsprechen.



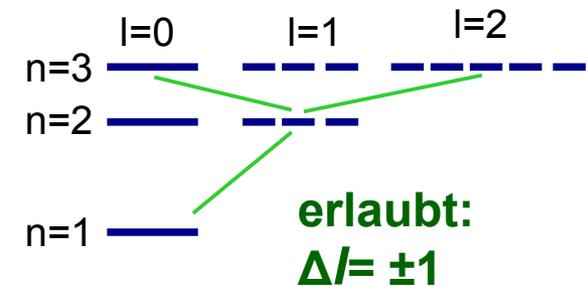
- In der Elektrodynamik haben zirkular polarisierte EM-Wellen einen Drehimpuls der Größe E/ω , pro Photon mit Energie $E = \hbar\omega$ also den Wert \hbar .
- Da sich Licht mit Lichtgeschwindigkeit ausbreitet, gibt es keine Schwingungen in Ausbreitungsrichtung.

→

Das Photon hat zwei Polarisationsfreiheitsgrade, die quantenphysikalisch einem **Drehimpuls von $\pm 1\hbar$** entsprechen.



- Weiterer Hinweis auf Photon-Spin:
Optische Übergänge in Atomen, also Emission und Absorption von Photonen, sind immer mit einer **Drehimpulsänderung von $\pm 1\hbar$** verbunden



Der **Elektron-Spin** führt (auch ohne äußeres Magnetfeld)
zu **Korrekturen der Energieniveaus**:

Im Ruhesystem des Elektrons erzeugt die Bewegung des Protons ein
Magnetfeld, das mit dem magnetischen Moment des Elektrons wechselwirkt

„Spin-Bahn-Kopplung“ oder „LS-Kopplung“ $\Delta E_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L$

Der **Elektron-Spin** führt (auch ohne äußeres Magnetfeld)
zu **Korrekturen der Energieniveaus**:

Im Ruhesystem des Elektrons erzeugt die Bewegung des Protons ein
Magnetfeld, das mit dem magnetischen Moment des Elektrons wechselwirkt

Effekt entspricht Zeeman-Aufspaltung im B-Feld des Protons

„Spin-Bahn-Kopplung“ oder „LS-Kopplung“ $\Delta E_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L$

Der **Elektron-Spin** führt (auch ohne äußeres Magnetfeld)
zu **Korrekturen der Energieniveaus**:

Im Ruhesystem des Elektrons erzeugt die Bewegung des Protons ein
Magnetfeld, das mit dem magnetischen Moment des Elektrons wechselwirkt

Effekt entspricht Zeeman-Aufspaltung im B-Feld des Protons

→ Ausrichtung des Spins relativ zum Drehimpuls ändert die Energie !

„Spin-Bahn-Kopplung“ oder „LS-Kopplung“ $\Delta E_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L$

7.8

H-Atom: 1. Spin - Korrekturen

Der **Elektron-Spin** führt (auch ohne äußeres Magnetfeld)
zu **Korrekturen der Energieniveaus**:

Im Ruhesystem des Elektrons erzeugt die Bewegung des Protons ein
Magnetfeld, das mit dem magnetischen Moment des Elektrons wechselwirkt

Effekt entspricht Zeeman-Aufspaltung im B-Feld des Protons

→ Ausrichtung des Spins relativ zum Drehimpuls ändert die Energie !

„Spin-Bahn-Kopplung“ oder „LS-Kopplung“ $\Delta E_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L$

B_L , das durch Protonisdung und Bahndrehimpuls entstehende Magnetfeld,
ist mit Hilfe des Biot-Savart'schen Gesetzes berechenbar.

Für die relativistisch korrekte Transformation in Ruhesystem des Elektrons
und zurück muss die beschleunigte Bewegung des Elektrons berücksichtigt
werden → Faktor 0.5 („Thomas-Faktor“)

$$\rightarrow \Delta E_{LS} = -g_s \mu_B \frac{\mu_0 e^2}{8\pi \hbar m_e r^3} \vec{s} \cdot \vec{L}$$

7.8

H-Atom: 1. Spin - Korrekturen

Der **Elektron-Spin** führt (auch ohne äußeres Magnetfeld)
zu **Korrekturen der Energieniveaus**:

Im Ruhesystem des Elektrons erzeugt die Bewegung des Protons ein
Magnetfeld, das mit dem magnetischen Moment des Elektrons wechselwirkt

Effekt entspricht Zeeman-Aufspaltung im B-Feld des Protons

→ Ausrichtung des Spins relativ zum Drehimpuls ändert die Energie !

„Spin-Bahn-Kopplung“ oder „LS-Kopplung“ $\Delta E_{LS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_L$

B_L , das durch Protonisdung und Bahndrehimpuls entstehende Magnetfeld,
ist mit Hilfe des Biot-Savart'schen Gesetzes berechenbar.

Für die relativistisch korrekte Transformation in Ruhesystem des Elektrons
und zurück muss die beschleunigte Bewegung des Elektrons berücksichtigt
werden → Faktor 0.5 („Thomas-Faktor“)

$$\rightarrow \Delta E_{LS} = -g_s \mu_B \frac{\mu_0 e^2}{8\pi \hbar m_e r^3} \vec{s} \cdot \vec{L}$$

Zur Berechnung der Korrektur werden noch die
quantenmechanischen Erwartungswerte $\langle 1/r^3 \rangle$ und $\langle \vec{s} \cdot \vec{L} \rangle$ benötigt.

H-Atom: 1. Spin – Korrekturen (2)

Mit dem Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ lässt sich $\langle \vec{s} \cdot \vec{L} \rangle$ berechnen:

$$\vec{j}^2 = \vec{L}^2 + \vec{s}^2 + 2 \vec{L} \cdot \vec{s}$$

$$\rightarrow \vec{L} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} (\vec{j}^2 - \vec{L}^2 - \vec{s}^2)$$

$$\rightarrow \langle \vec{L} \cdot \vec{s} \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))$$

Die Berechnung von $\langle 1/r^3 \rangle$ ist etwas Schreibaufwand (s. z.B. Demtröder)

H-Atom: 1. Spin – Korrekturen (2)

Mit dem Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ lässt sich $\langle \vec{s} \cdot \vec{L} \rangle$ berechnen:

$$\vec{j}^2 = \vec{L}^2 + \vec{s}^2 + 2 \vec{L} \cdot \vec{s}$$

$$\rightarrow \vec{L} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} (\vec{j}^2 - \vec{L}^2 - \vec{s}^2)$$

$$\rightarrow \langle \vec{L} \cdot \vec{s} \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))$$

Die Berechnung von $\langle 1/r^3 \rangle$ ist etwas Schreibaufwand (s. z.B. Demtröder)

Insgesamt ergibt sich für die

Aufspaltung der Energieniveaus:

$$\Delta E_{LS} = E_n \frac{\alpha^2}{n(j+1/2)} \simeq 5.3 \cdot 10^{-5} \frac{E_n}{n(j+1/2)}$$

mit der „Feinstrukturkonstanten“ $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$

H-Atom: 1. Spin – Korrekturen (2)

Mit dem Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ lässt sich $\langle \vec{s} \cdot \vec{L} \rangle$ berechnen:

$$\vec{j}^2 = \vec{L}^2 + \vec{s}^2 + 2 \vec{L} \cdot \vec{s}$$

$$\rightarrow \vec{L} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} (\vec{j}^2 - \vec{L}^2 - \vec{s}^2)$$

$$\rightarrow \langle \vec{L} \cdot \vec{s} \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))$$

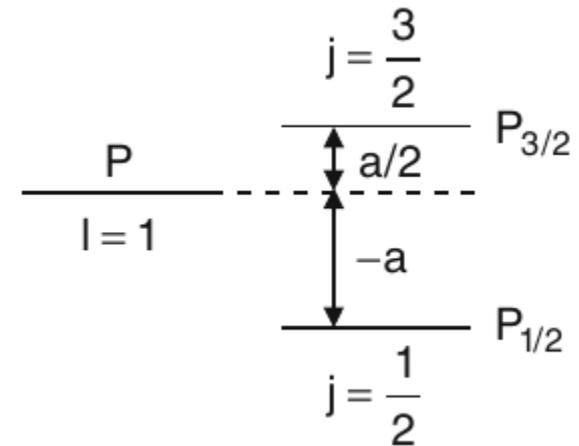
Die Berechnung von $\langle 1/r^3 \rangle$ ist etwas Schreibaufwand (s. z.B. Demtröder)

Insgesamt ergibt sich für die

Aufspaltung der Energieniveaus:

$$\Delta E_{LS} = E_n \frac{\alpha^2}{n(j+1/2)} \simeq 5.3 \cdot 10^{-5} \frac{E_n}{n(j+1/2)}$$

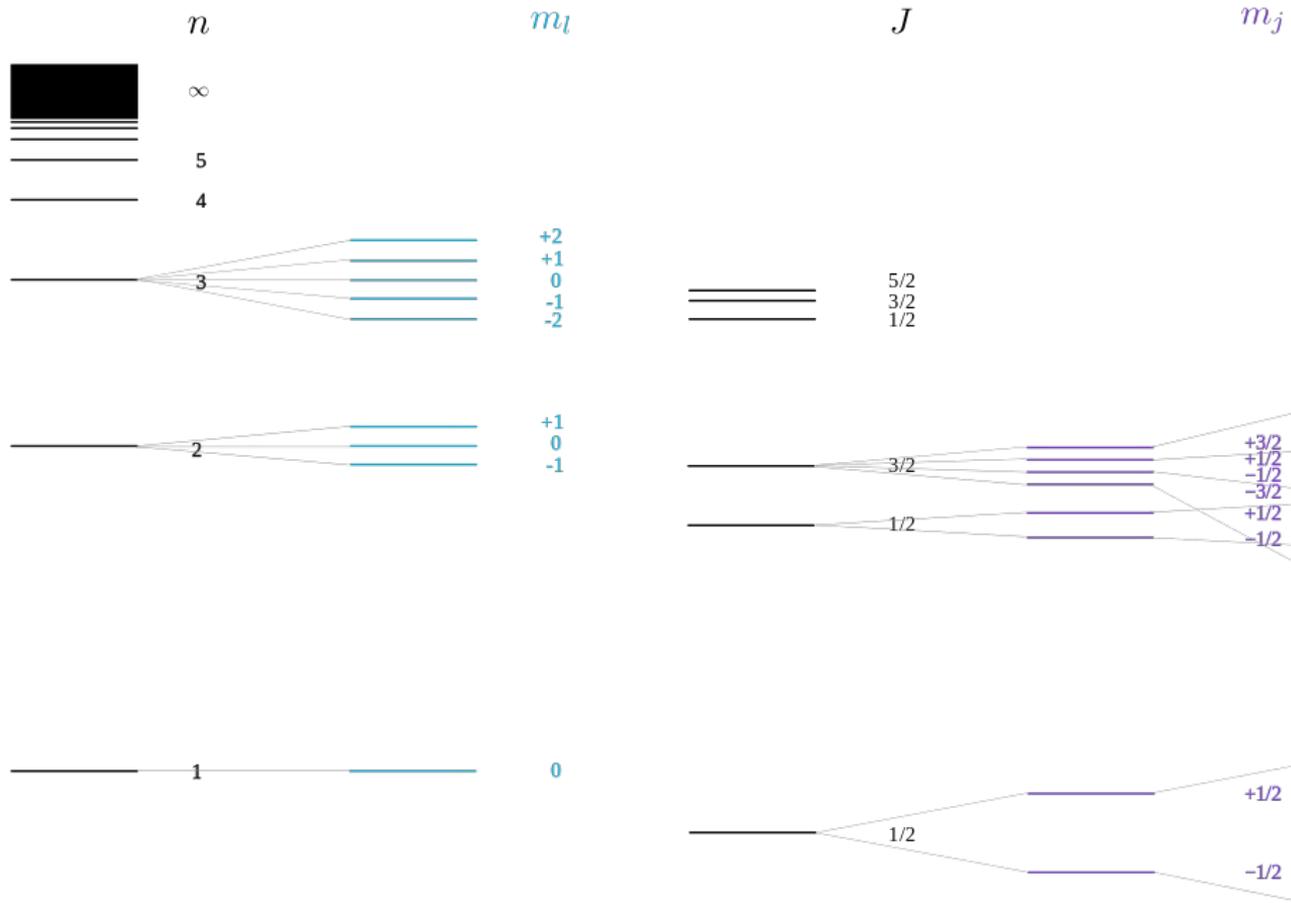
mit der „Feinstrukturkonstanten“ $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$



Feinstruktur-Aufspaltung des p-Niveaus durch LS-Kopplung

Zeeman-Effekt und Feinstruktur

<https://de.wikipedia.org/wiki/Zeeman-Effekt>



Bohr

Lösungen der Schrödinger-Gleichung ohne Spin.

Normaler Zeeman-Effekt

Magnetfeld ohne Berücksichtigung des Spins.

Feinstruktur

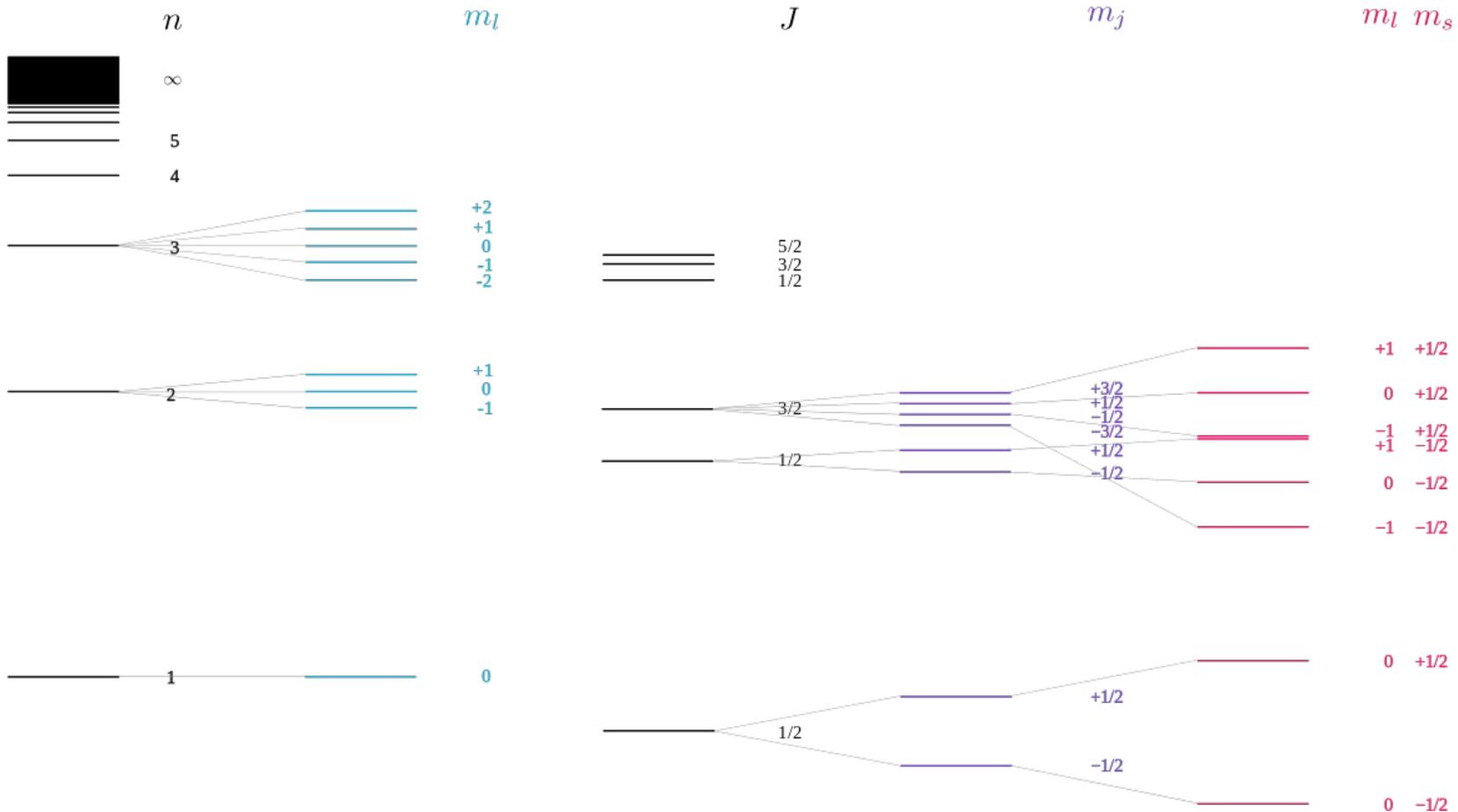
Spin-Bahn-Kopplung und relativistische Korrektur.

Anomaler Zeeman-Effekt

Magnetfeld mit Berücksichtigung des Spins.
 $B < l_s$ -Kopplung

Zeeman-Effekt und Feinstruktur (2)

https://de.wikipedia.org/wiki/Zeeman-Effekt



Bohr	Normaler Zeeman-Effekt	Feinstruktur	Anomaler Zeeman-Effekt	Paschen-Back-Effekt
Lösungen der Schrödinger-Gleichung ohne Spin.	Magnetfeld ohne Berücksichtigung des Spins.	Spin-Bahn-Kopplung und relativistische Korrektur.	Magnetfeld mit Berücksichtigung des Spins. $B < ls$ -Kopplung	Magnetfeld mit Berücksichtigung des Spins. $B > ls$ -Kopplung

Bisher haben wir rein klassisch gerechnet – allerdings spielen relativistische Effekte eine (kleine) Rolle und werden als Korrekturen berechnet.

Bisher haben wir rein klassisch gerechnet – allerdings spielen relativistische Effekte eine (kleine) Rolle und werden als Korrekturen berechnet.

kinetische Energie $T_k = \frac{p^2}{2m} \leftrightarrow T_r = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2$

Bisher haben wir rein klassisch gerechnet – allerdings spielen relativistische Effekte eine (kleine) Rolle und werden als Korrekturen berechnet.

kinetische Energie $T_k = \frac{p^2}{2m} \leftrightarrow T_r = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2$

Taylor-Entwicklung der Wurzel bis zur Ordnung p^4 : $T = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$

7.8.

2. Relativistische Korrektur

Bisher haben wir rein klassisch gerechnet – allerdings spielen relativistische Effekte eine (kleine) Rolle und werden als Korrekturen berechnet.

kinetische Energie $T_k = \frac{p^2}{2m} \leftrightarrow T_r = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2$

Taylor-Entwicklung der Wurzel bis zur Ordnung p^4 : $T = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$

Berechnung: $\Delta E_n = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle \psi_{n,l,m}^* | \hat{\mathbf{p}}^4 | \psi_{nlm} \rangle$

Bisher haben wir rein klassisch gerechnet – allerdings spielen relativistische Effekte eine (kleine) Rolle und werden als Korrekturen berechnet.

kinetische Energie $T_k = \frac{p^2}{2m} \leftrightarrow T_r = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2$

Taylor-Entwicklung der Wurzel bis zur Ordnung p^4 : $T = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$

Berechnung: $\Delta E_n = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle \psi_{n,l,m}^* | \hat{\mathbf{p}}^4 | \psi_{nlm} \rangle$

$$\Rightarrow \Delta E_r = -\frac{E_n \alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + 1/2} \right)$$

mit der „Feinstrukturkonstanten“ $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$

7.8.

2. Relativistische Korrektur

Bisher haben wir rein klassisch gerechnet – allerdings spielen relativistische Effekte eine (kleine) Rolle und werden als Korrekturen berechnet.

kinetische Energie $T_k = \frac{p^2}{2m} \leftrightarrow T_r = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2$

Taylor-Entwicklung der Wurzel bis zur Ordnung p^4 : $T = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$

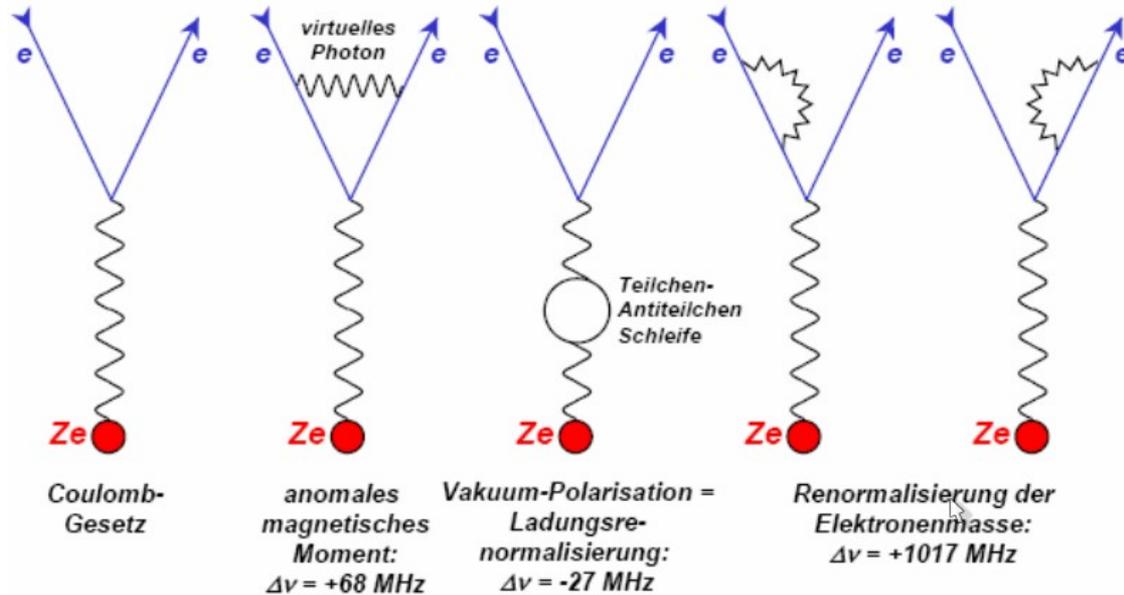
Berechnung: $\Delta E_n = -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle \psi_{n,l,m}^* | \hat{\mathbf{p}}^4 | \psi_{nlm} \rangle$

$$\Rightarrow \Delta E_r = -\frac{E_n \alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + 1/2} \right)$$

mit der „Feinstrukturkonstanten“ $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$

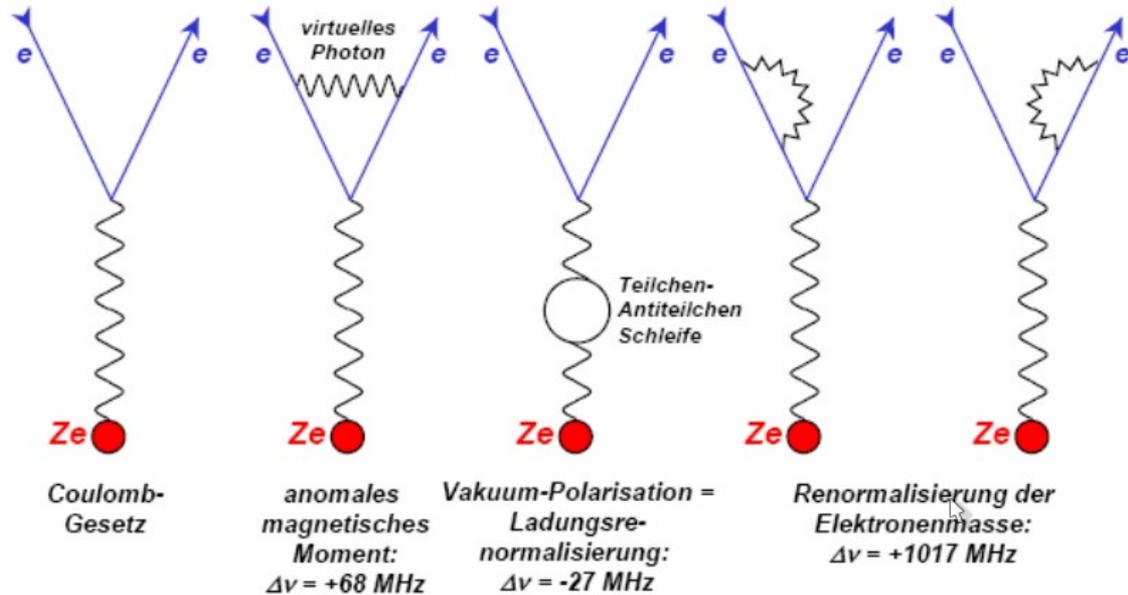
Die Korrektur ist am größten für den Grundzustand: $\Delta E_r = 6.6 \cdot 10^{-5} 13.6 \text{ eV}$

Diese Korrektur hängt mit der **Emission/Absorption** sogenannter „virtueller“ Teilchen zusammen, die die Quantenfeldtheorie erklärt.



s. später, Teilchenphysik

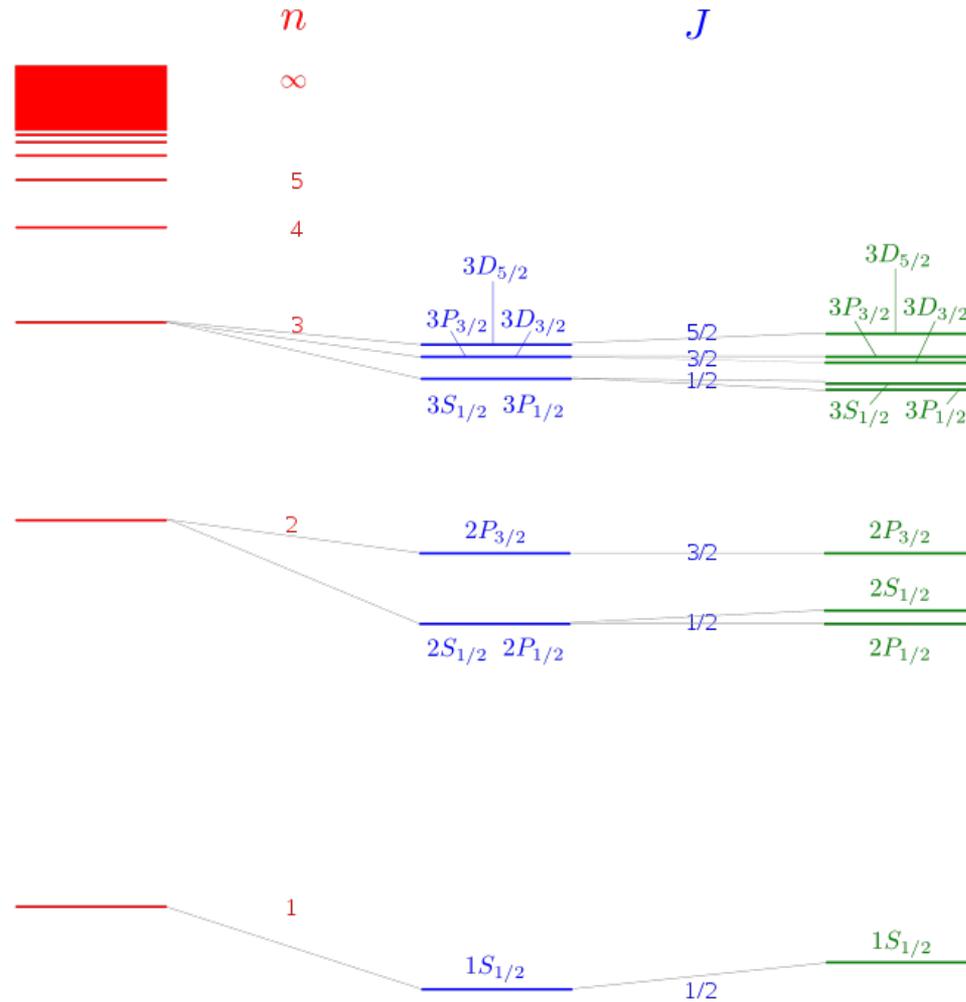
Diese Korrektur hängt mit der **Emission/Absorption** sogenannter „virtueller“ Teilchen zusammen, die die Quantenfeldtheorie erklärt.



s. später, Teilchenphysik

Führt zu Verschiebungen $\Delta E_{\text{Lamb}} \propto \alpha^5$

Termschema des Wasserstoffs mit allen Korrekturen



Bohr

Lösungen der Schrödingergleichung ohne Spin.
Entartung: n^2

Feinstruktur

Spin-Bahn-Kopplung und relativistische Korrektur.

Lamb-Verschiebung

Strahlungskorrektur (QED)

7.8.

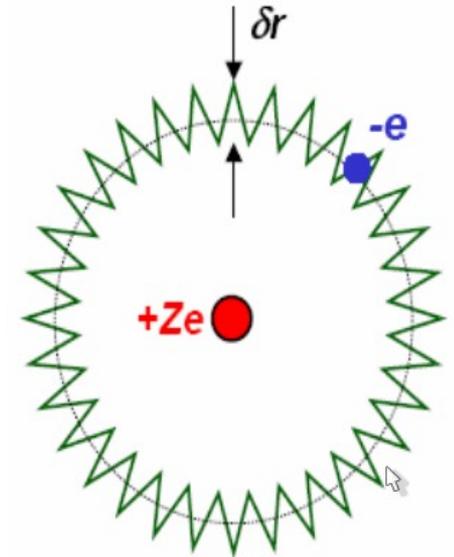
4. Darwin-Term

Elektron-Zustände mit einer hohen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kern-Nähe sind von einer weiteren Korrektur betroffen:
Hier ist das Potential so groß, dass sich die Ortsunschärfe auswirkt:

$$V(r) \rightarrow V(r + \delta)$$

anschaulich: „Zitterbewegung“ des Elektrons
durch Emission/Absorption virtueller Teilchen

Effekt ist größer für negative Werte von δ als für positive.)



7.8.

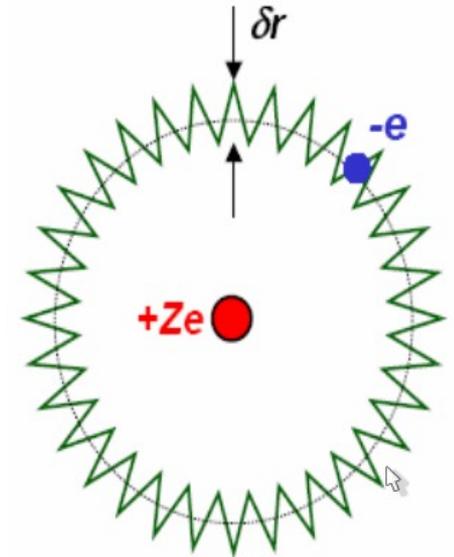
4. Darwin-Term

Elektron-Zustände mit einer hohen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kern-Nähe sind von einer weiteren Korrektur betroffen:
Hier ist das Potential so groß, dass sich die Ortsunschärfe auswirkt:

$$V(r) \rightarrow V(r + \delta)$$

anschaulich: „Zitterbewegung“ des Elektrons
durch Emission/Absorption virtueller Teilchen

Effekt ist größer für negative Werte von δ als für positive.)



Die entsprechende Korrektur ist exakt nur relativistisch berechenbar.

Man nennt sie den „Darwin-Term“:

$$\Delta E_D = \frac{e^2 \hbar^2}{\epsilon_0 m^2 c^2} |\psi(0)|^2 = 4m_e c^2 \alpha^4 \quad \text{für den Grundzustand}$$

7.8. 5. Korrekturen durch Proton-Spin

Auch das **Proton** hat einen **Spin** $I = \frac{1}{2}$ und ein damit assoziiertes **magnetisches Moment** $\mu_I = g_I \cdot \mu_B$ mit $g_I \approx 5.6$

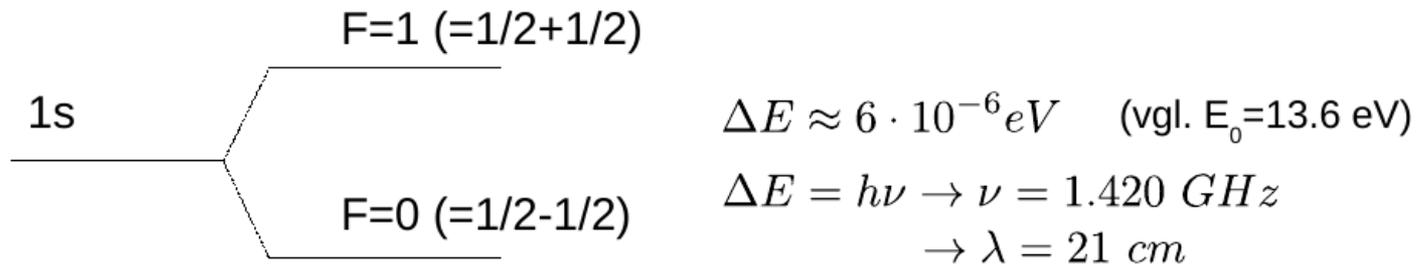
Energieänderung ca. 2000 mal kleiner als Feinstruktur ($m_e / m_p = 1836$)

7.8. 5. Korrekturen durch Proton-Spin

Auch das **Proton** hat einen **Spin** $I = \frac{1}{2}$ und ein damit assoziiertes **magnetisches Moment** $\mu_I = g_I \cdot \mu_B$ mit $g_I \approx 5.6$

Energieänderung ca. 2000 mal kleiner als Feinstruktur ($m_e / m_p = 1836$)

Beispiel: 1s Orbital ($l=0$) des Wasserstoffs

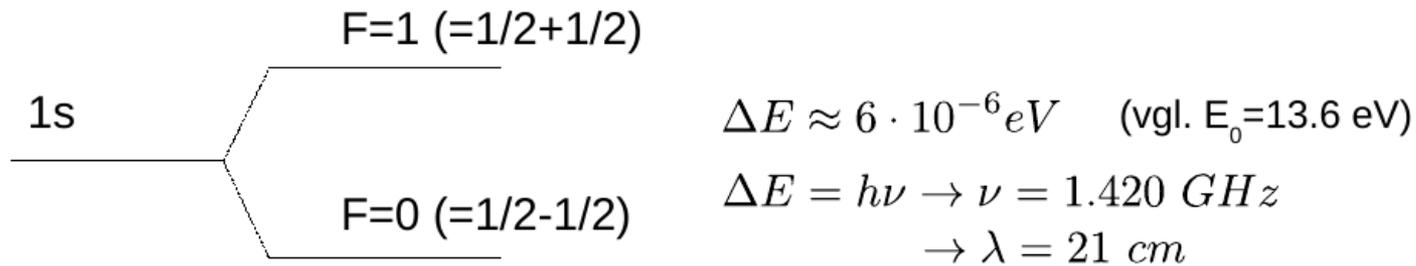


7.8. 5. Korrekturen durch Proton-Spin

Auch das **Proton** hat einen **Spin** $I = 1/2$ und ein damit assoziiertes **magnetisches Moment** $\mu_I = g_I \cdot \mu_B$ mit $g_I \approx 5.6$

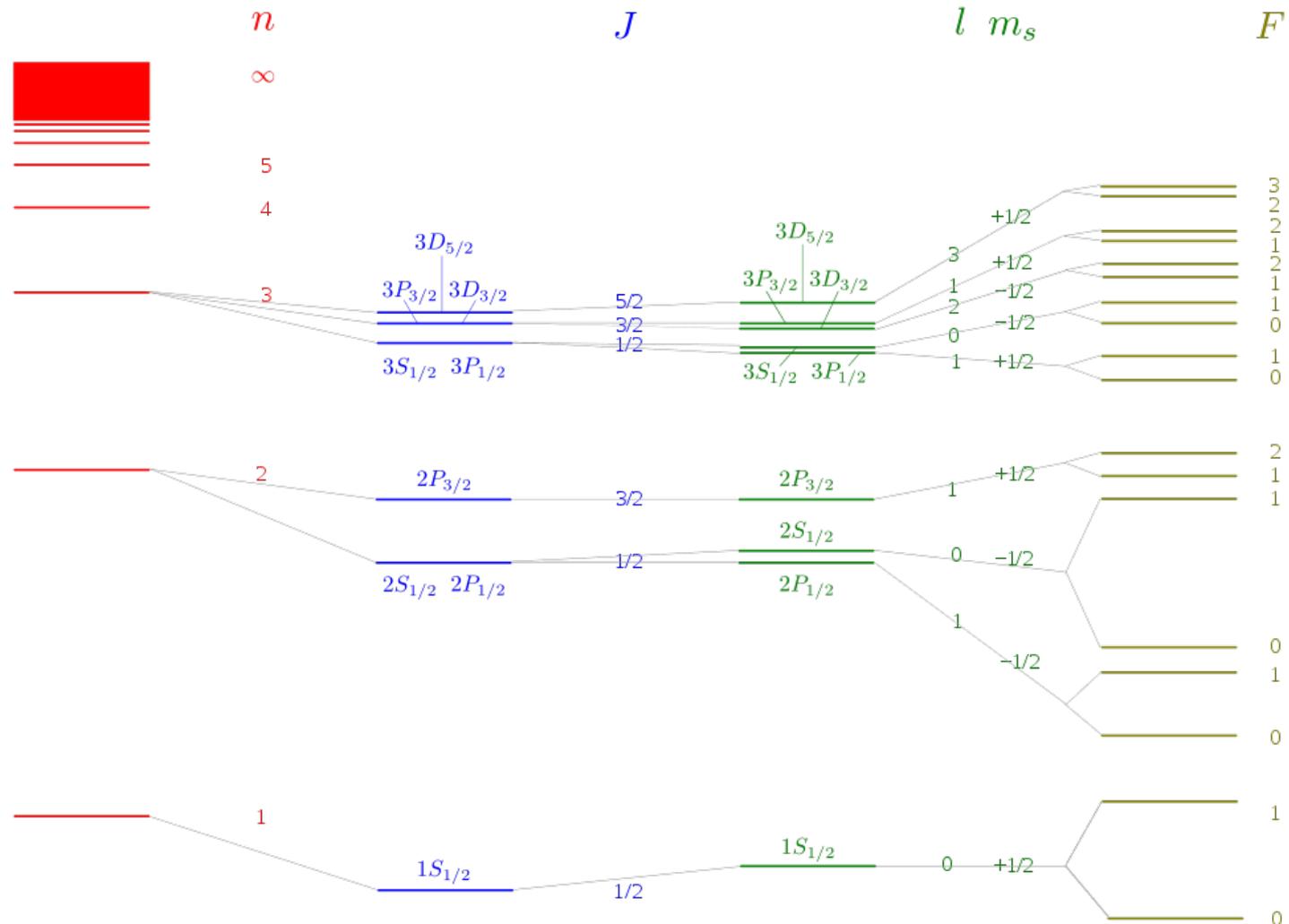
Energieänderung ca. 2000 mal kleiner als Feinstruktur ($m_e / m_p = 1836$)

Beispiel: 1s Orbital ($l=0$) des Wasserstoffs



„Hyperfeinstruktur“

Termschema des Wasserstoffs mit allen Korrekturen



Bohr

Lösungen der Schrödingergleichung ohne Spin.
Entartung: n^2

Feinstruktur

Spin-Bahn-Kopplung und relativistische Korrektur.

Lamb-Verschiebung

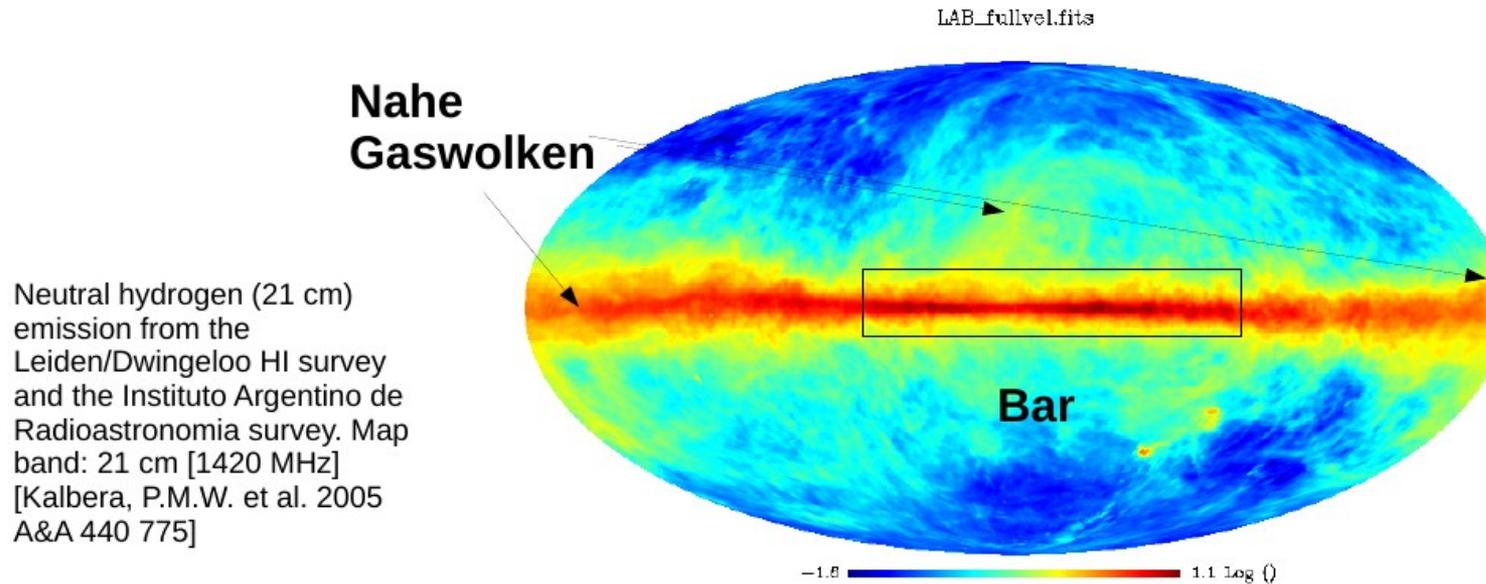
Strahlungskorrektur (QED)

Hyperfeinstruktur

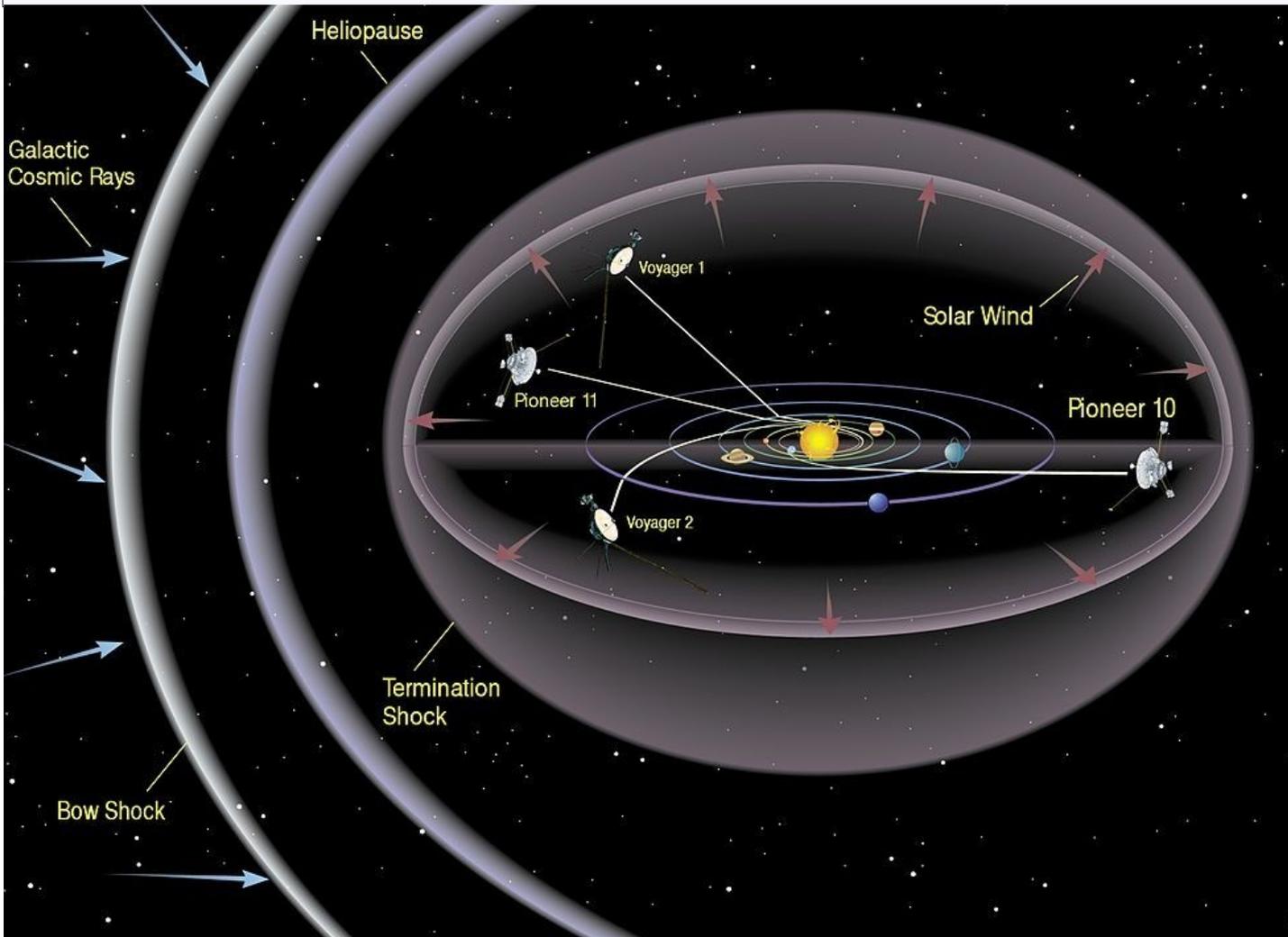
Spin-Spin-Kopplung (Energieskala 100-mal gestreckt)

Hyperfeinstruktur-Übergang in der Astronomie

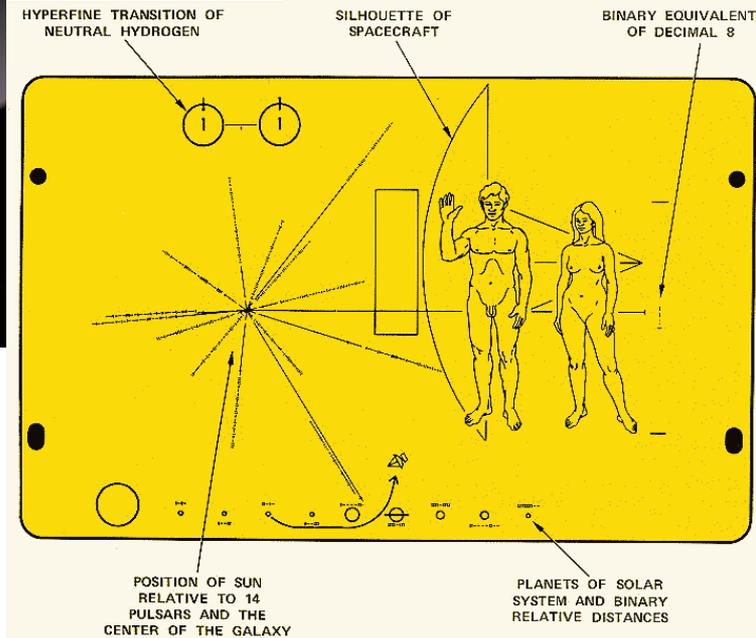
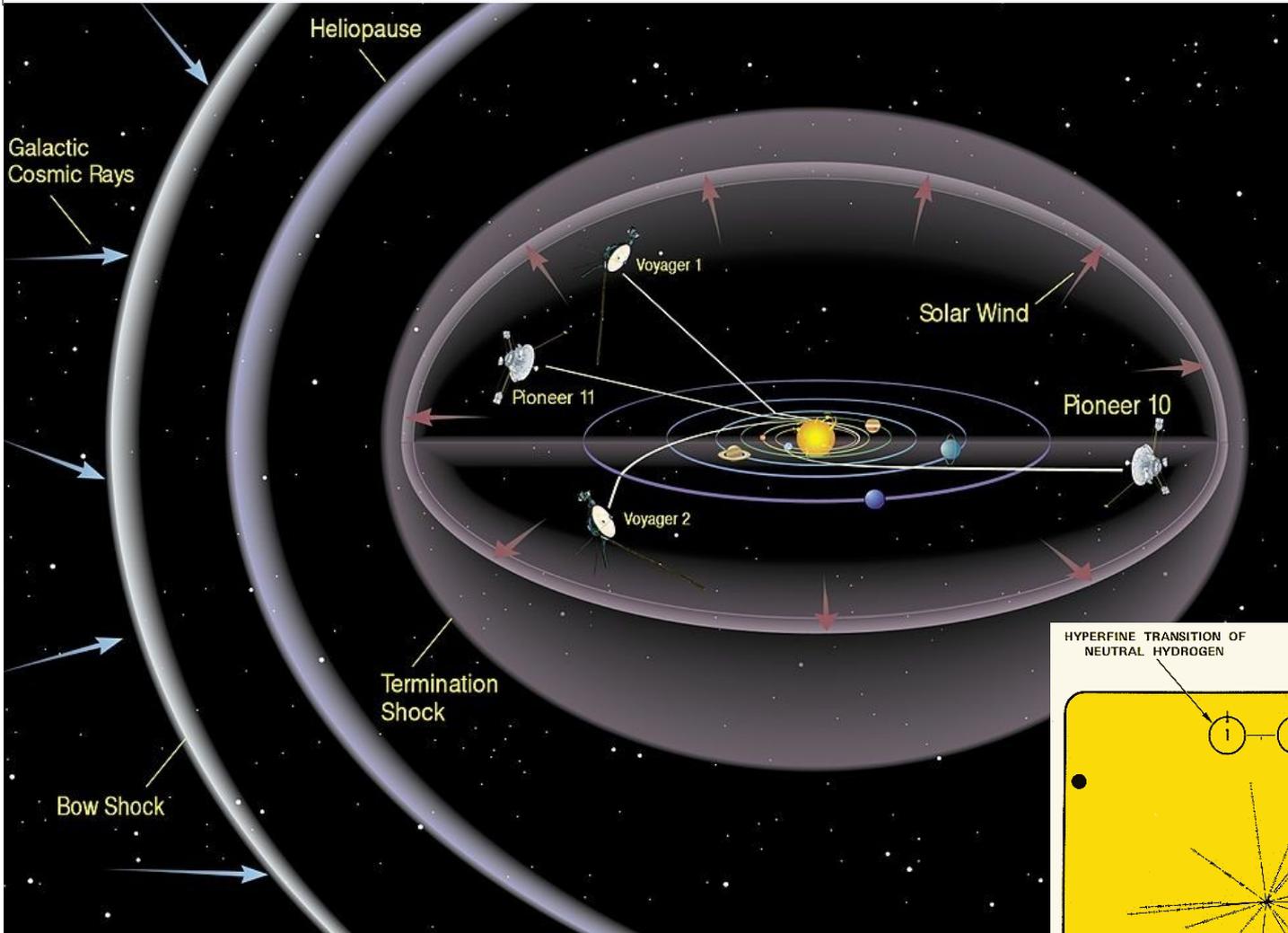
- bei 21 cm Wellenlänge kaum Absorption im interstellaren Medium
- Linie gibt Auskunft über Verteilung von H (90% der interstellaren Materie)
- Dopplerverschiebung der 21 cm Linie: Bewegung von Objekten



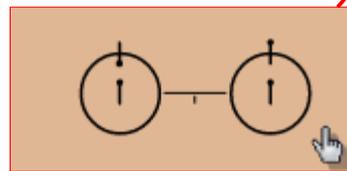
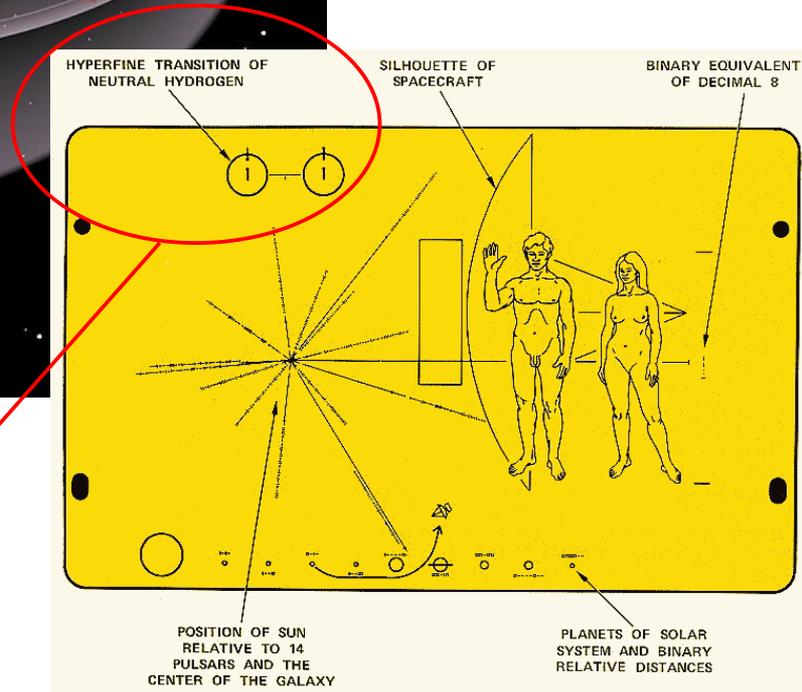
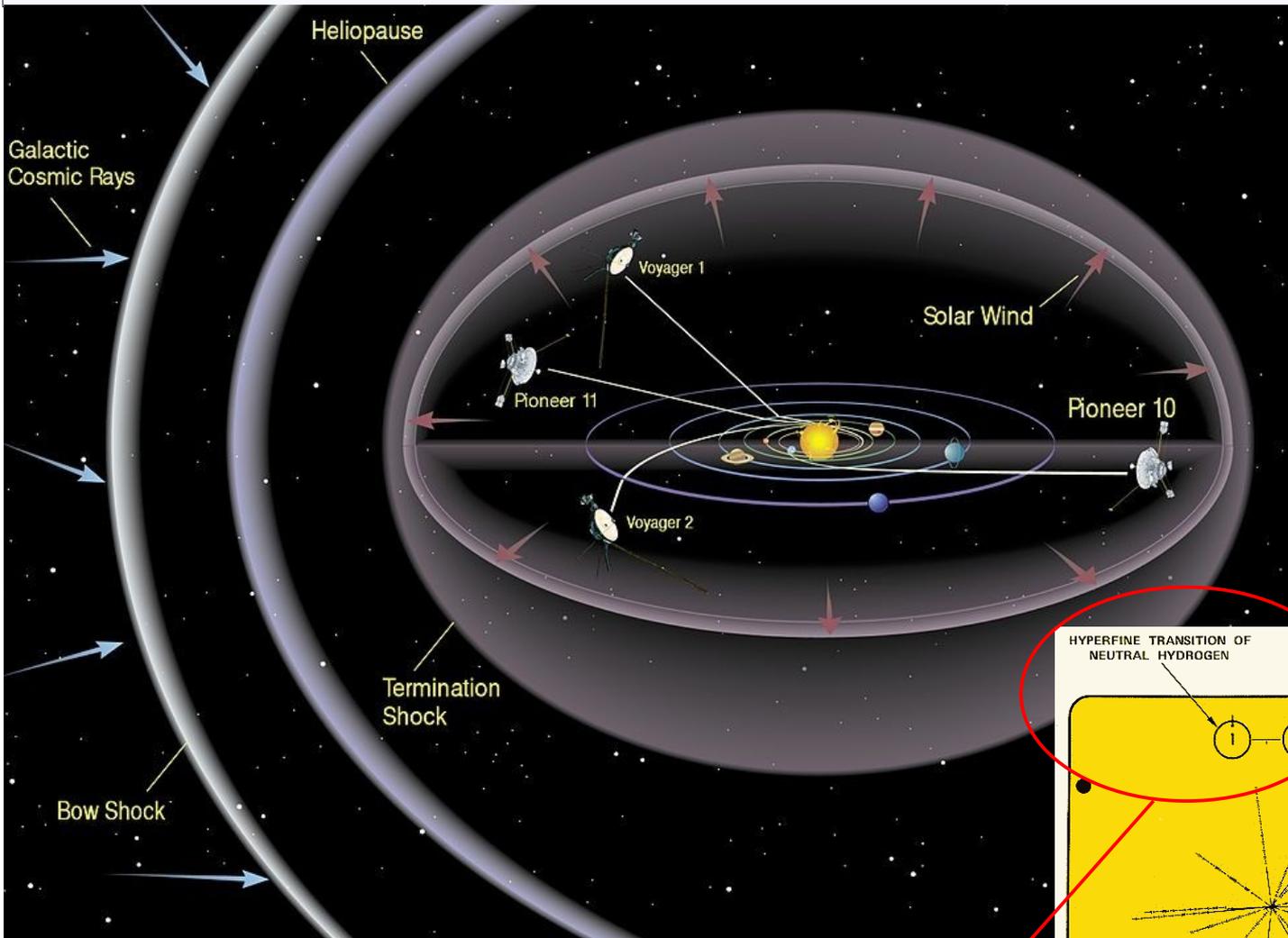
Hyperfeinstruktur-Übergang: Pioneer-Plackete



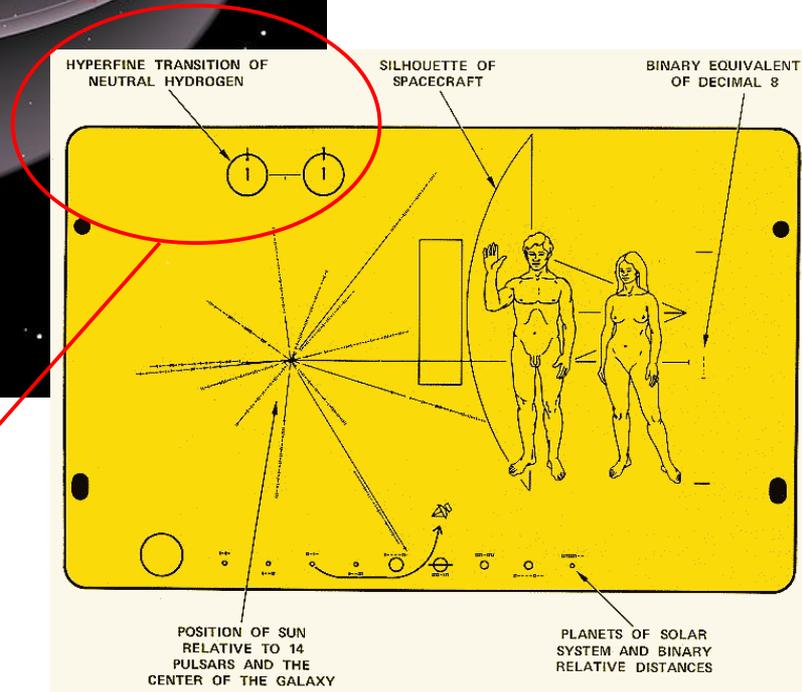
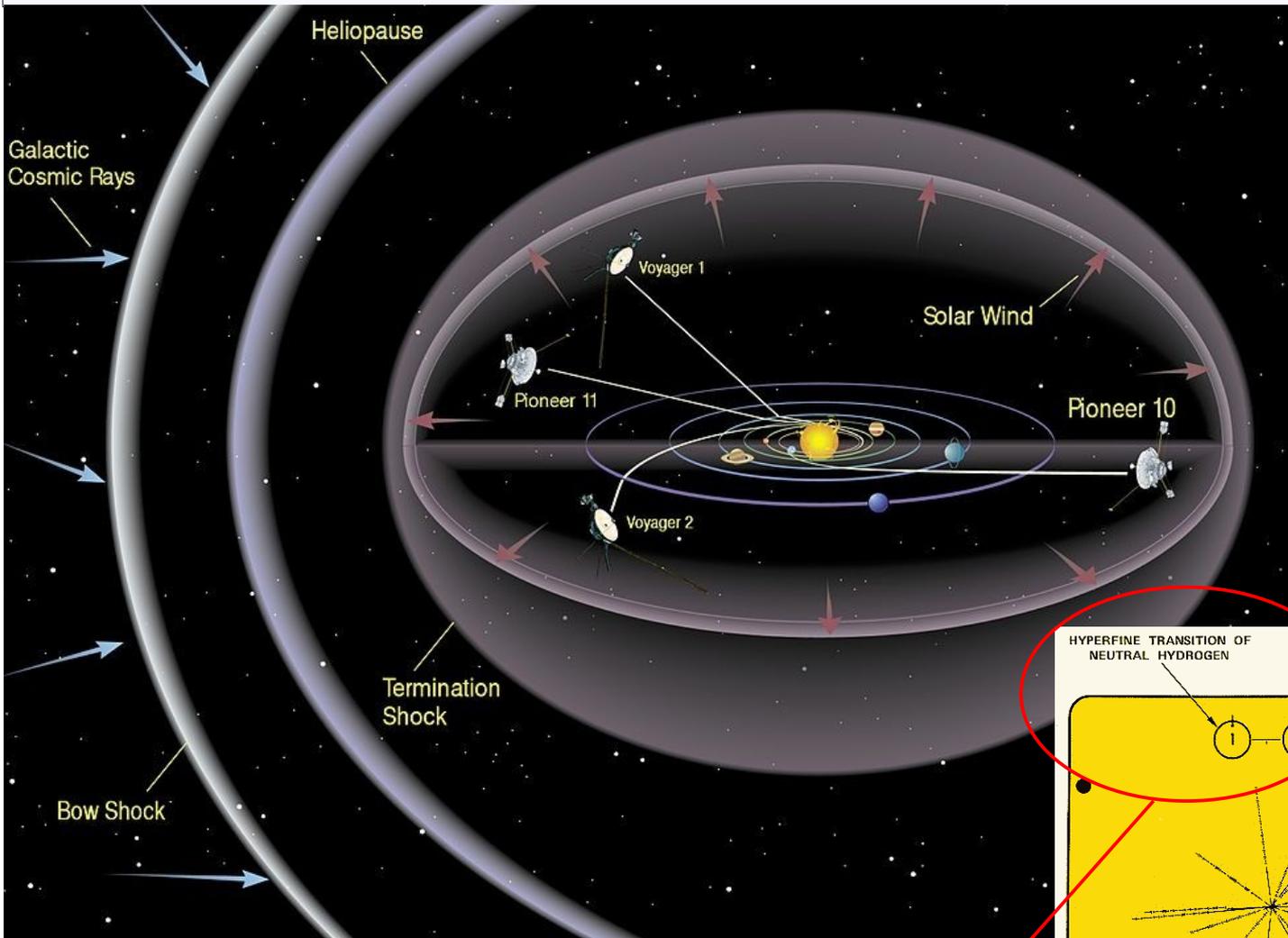
Hyperfeinstruktur-Übergang: Pioneer-Plackete



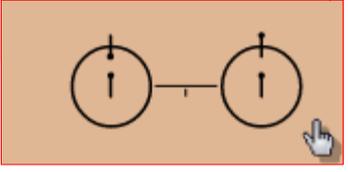
Hyperfeinstruktur-Übergang: Pioneer-Plackete



Hyperfeinstruktur-Übergang: Pioneer-Plackete



Symbol für Hyperfeinstruktur-Übergang beim Wasserstoff



Ende VL11

und Zeit für Fragen ?