

Quantenmechanisches Analogon?

Betrachte also die Energie eines quantenmechan. Teilchens (H-Atom) im Feld \underline{B} , bzw. den zugehörigen Beitrag im Hamiltonian \hat{H}

Klassische Mechanik:
Hamiltonfunktion: $H(\underline{r}, \underline{p}) = \frac{1}{2m} (\underline{p} - q\underline{A})^2 + V(\underline{r})$

dabei ist q : Ladung
 \underline{A} : Vektorpotential
mit $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}(\underline{r})$

Korrespondenzprinzip

$$\left. \begin{array}{l} \underline{p} \rightarrow \hat{\underline{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \\ \underline{A}(\underline{r}) \rightarrow \hat{\underline{A}}(\underline{r}) \rightarrow \underline{A}(\underline{r}) \end{array} \right\} \text{in der Ortsdarstellung}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \hat{\underline{A}} \cdot \hat{\underline{p}} - \hat{\underline{p}} \cdot \frac{q}{2m} \hat{\underline{A}} + \frac{q^2}{2m} \hat{\underline{A}}^2 + \hat{V} \quad \text{Poisson}$$

Ortsdarstellung:

$$\hat{H} \psi(\underline{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{q}{2m} \underline{A} \frac{\hbar}{i} \nabla \psi - \frac{\hbar}{i} \nabla \left(\frac{q}{2m} \underline{A} \cdot \psi \right) + \frac{q^2}{2m} \underline{A}^2 \psi + V(\underline{r}) \psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{q}{2m} \underline{A} \frac{\hbar}{i} \nabla \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{q}{2m} (\nabla \cdot \underline{A}) \psi + \frac{q^2}{2m} \underline{A}^2 \psi - \frac{\hbar}{i} \frac{q}{2m} \underline{A} \cdot \nabla \psi + V(\underline{r}) \psi$$

Aus Elektrodynamik:

Es gibt verschiedene "Eichungen" des Vektorpotentials

↳ Transformationen, die das physikalische Feld \underline{B} invariant lassen!

hier: Coulombbedingung: $\nabla \cdot \underline{A} = 0$
Divergenz

Damit ergibt sich:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{q}{m} \frac{\hbar}{i} \underline{A} \cdot \nabla \psi + \frac{q^2}{2m} \underline{A}^2 \psi + V(\underline{r}) \psi$$

Spezialisierung auf Elektronen: $q = -e_0$, $m = m_e$
↑
Elementarladung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi + \frac{e_0 \hbar}{m_e i} \underline{A} \cdot \nabla \psi + \frac{e_0^2}{2m_e} \underline{A}^2 \psi + V(\underline{r}) \psi$$

Hamiltonian eines Elektrons im Vektorpotential \underline{A}

umschreiben so, daß statt \underline{A} das Feld $\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$ vorkommt

mit Coulombbedingung

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A} \quad \xleftrightarrow{\nabla \cdot \underline{A} = 0} \quad \underline{A} = \frac{1}{2} (\underline{B} \times \underline{r})$$

Einssetzen in \hat{H} :

lineare Term: $\frac{e_0}{m_e} \frac{\hbar}{i} \underline{A} \cdot \nabla \rightarrow \frac{e_0}{m_e} \underline{A} \cdot \hat{p}$
 $= \frac{e_0}{m_e} \frac{1}{2} (\underline{B} \times \underline{N}) \cdot \hat{p}$
 $= \frac{e_0}{2m_e} \underline{B} \cdot (\underline{N} \times \hat{p})$
 $= \frac{e_0}{2m_e} \underline{B} \cdot \hat{L}$
Bahn-Drehimpuls-Operatoren!

$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \frac{e_0}{2m_e} \underline{B} \cdot \hat{L} + \frac{e_0^2}{8m_e} \frac{(\underline{N} \times \underline{B})^2}{N^2 B^2 \sin^2 \alpha} + V(\underline{r})$

$\underline{N} \times \underline{B} = |\underline{N}| |\underline{B}| \sin \alpha$
↑ Winkel zw. \underline{N} und \underline{B}

man sieht:
Das Magnetfeld koppelt linear an den Drehimpuls!

Frage: Was ist jetzt das magnet. Moment in der QM?

Klassisch: $W = -\underline{m} \cdot \underline{B} \Rightarrow \underline{m} = -\nabla_{\underline{B}} W$

QM: $\hat{H} \stackrel{?}{=} \text{Energie}$

\Rightarrow definiere

$\hat{\underline{\mu}} = -\nabla_{\underline{B}} \hat{H}$

Operator des magnet. Moments!

Anwenden auf den obigen Ausdruck für $\underline{\mu}$.

$$\textcircled{+} \quad \underline{\mu} = -\frac{e_0}{2m_e} \underline{L} - \frac{e_0^2}{4m_e} r^2 \sin^2 \vartheta \underline{B}$$

~~das~~ magnet. Moment des Elektronen

Bemerkungen

i) Bahndrehimpuls \underline{L} des Elektronen führt zu einem (permanenten) magnet. Moment, das (wegen der negativen Ladung!) antiparallel zu \underline{L} gerichtet ist!

„permanent“, da dieser Term auch für $\underline{B} = 0$ existiert!
linear

ii) Über diesen permanenten Anteil hinaus gibt es noch einen zweiten, „diamagnetischen“ Anteil

$$\left(-\frac{e_0^2}{4m_e} r^2 \sin^2 \vartheta \underline{B} \right)$$

linear in \underline{B} !
→ verschwindet für $\underline{B} \rightarrow 0$

Dieser diamagnetische Term ist für Atome meist vernachlässigbar, da der Vorfaktor $\sim \frac{e_0^2}{4m_e}$ viel kleiner ist als der des permanenten Anteils

Einsetzen des Ausdrucks (*) für $\underline{\mu}$ in \hat{H}
 unter Vernachlässigung des diamagnetischen Terms

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}) - \underline{\mu} \cdot \underline{B}$$

Hamiltonoperator
 des Elektrons im
 äußeren Magnetfeld

"Anklopfung"
 mit $\underline{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc} \underline{\hat{L}}$

Formel analog zur klass. Magnetspin,
 wo $W = -\underline{m} \cdot \underline{B}$
 Energiedicht

Schließlich:
 wie wirkt sich das \underline{B} -Feld auf das Spektrum
 (d.h. die Energie-Eigenwerte) aus?

• $\underline{B} = B \underline{e}_z$

$$\Rightarrow -\underline{\mu} \cdot \underline{B} = -\mu_z B = B \frac{e\hbar}{2mc} \hat{L}_z$$

• nehme an, dass $V(\underline{r}) = V(r)$

Zentralpotential
 (z.B. Coulombpotential)

$$\Rightarrow \begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}^2] &= 0 \\ [\hat{H}, \hat{L}_z] &= 0 \end{aligned}$$

Erhaltung des Drehimpulses

Der zusätzliche Term für die Ankopplung an \underline{B} ist linear in \hat{L}_z !

\Rightarrow Dieser Term vertauscht ebenfalls mit $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$!

\Rightarrow Eigenzustände bleiben unverändert!
(im Vergleich zum Fall $B=0$!)

Energie-Eigenwerte?

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\mu}_z B \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

$$\hat{H}_0 |n, l, m\rangle = E_{nl} |n, l, m\rangle$$

(speziell H-Atom
d.h. Coulombpotential
 $E_{nl} = E_n$)

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

mit $m = -l, \dots, l$

$$\begin{aligned} \hat{H} |n, l, m\rangle &= (\hat{H}_0 - \hat{\mu}_z B) |n, l, m\rangle \\ &= \left(\hat{H}_0 + \frac{e_0}{2mc} \hat{L}_z B \right) |n, l, m\rangle \\ &= \left(E_{nl} + B \frac{e_0}{2mc} \hbar m \right) |n, l, m\rangle \quad ! \end{aligned}$$

also:

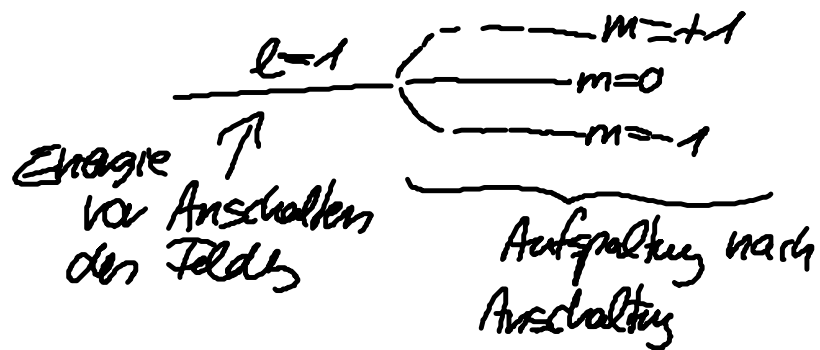
Energie niveaus im äußeren B -Feld

$$E = \bar{E}_{nl} + \mu_B B m$$
$$= E_{nlm}$$

mit $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e}$
Bohr'sches Magneton

äußeres Feld ändert also nichts an den den Eigenzuständen, aber es hebt die Entartung der Energie eigenwert bezgl. der Quantenzahl m auf!

\Leftrightarrow Aufspaltung in $(2l+1)$ Niveaus
energetisch äquivalent



"Zeeman - Effekt"