

Die diamagnetische Suszeptibilität eines nicht kugelsymmetrischen Systems*

Hermann Hartmann

Akademie der Wissenschaften und der Literatur zu Mainz, Geschwister-Scholl-Straße 2, D-6500 Mainz, Bundesrepublik Deutschland

Regina Schuck und Jürgen Radtke

Institut für Physikalische Chemie der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Robert-Mayer-Str. 11, D-6000 Frankfurt am Main, Bundesrepublik Deutschland

The Diamagnetic Susceptibility of a Non-Spherosymmetric System

The diamagnetic susceptibility of the ground state of a non-spherosymmetric system is calculated, and the eigenfunction used is the exact solution of the problem and can be written in a compact form.

Key words: Non-spherosymmetric system, diamagnetic susceptibility of ~

Die relativistische Schrödingergleichung enthält ein dem Quadrat H^2 der magnetischen Feldstärke \mathfrak{G} proportionales Glied, mit dessen Hilfe die diamagnetische Suszeptibilität χ eines im Grundzustand befindlichen Systems berechnet werden kann, wenn die Eigenfunktion ψ des Grundzustandes bekannt ist [1]. Für ein System mit einem Brennpunkt der Ladung $-e$ gilt

$$\chi = -N_L \frac{e^2}{4\mu c^2} \int r'^2 \sin^2 \vartheta' \psi^2(\tau') d\tau' \quad (1)$$

Dabei ist N_L die Loschmidtsche Zahl, μ die Masse des bewegten Körpers und c die Lichtgeschwindigkeit. τ' ist ein Symbol für die drei Koordinaten x', y', z' des Massenpunktes in einem (gestrichenen) rechtwinkligen cartesischen System, dessen z' -Achse dem (homogenen) Magnetfeld (\mathfrak{G}) parallel ist. r', ϑ' sind Kugelkoordinaten, die mit x', y', z' in üblicher Weise zusammenhängen.

Wenn bisher die Formel (1) auf nichtkugelsymmetrische Systeme angewendet worden ist, so standen dabei für die Eigenfunktion ψ des Grundzustandes immer nur Näherungsausdrücke zur Verfügung.

Wir teilen in dieser Notiz die Berechnung von χ für einen Fall mit, bei dem keine Kugelsymmetrie vorliegt, bei dem aber trotzdem die Eigenfunktion ψ des Grundzustandes streng und in geschlossener Form angegeben werden kann [2].

* Herrn Professor Dr. F. Hund in Verehrung zum achtzigsten Geburtstag gewidmet.

Wir gehen zunächst von dem oben genannten gestrichenen Koordinatensystem mit den drei Achsen für die rechtwinkligen cartesischen Koordinaten x', y', z' zu einem ungestrichenen System mit den Koordinaten x, y, z dadurch über, daß wir das Achsenkreuz des gestrichenen Systems um dessen y' -Achse mit dem (in Richtung der y -Achse gesehen positiven) Winkel α drehen. Der Zusammenhang der Koordinaten der beiden Systeme lautet

$$\begin{aligned} x &= x' \cos \alpha + z' \sin \alpha \\ y &= y' \\ z &= -x' \sin \alpha + z' \cos \alpha. \end{aligned} \quad (2)$$

Durch

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= r \cos \vartheta \end{aligned} \quad (3)$$

sollen auch im ungestrichenen System Kugelkoordinaten eingeführt werden.

Die Potentialfunktion für die Bewegung des Massenpunktes sei

$$V = \eta \sigma^2 \left(\frac{2a_0}{r} - \eta \frac{a_0^2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) \epsilon_0. \quad (4)$$

Dabei soll a_0 den Bohrschen Wasserstoffradius und $\epsilon_0 (< 0)$ die Energie des Wasserstoffgrundzustandes bedeuten. η und σ sind zwei positive reelle und im übrigen frei wählbare Parameter. Seinen Minimalwert $\sigma^2 \epsilon_0$ erreicht V auf einer in der Ebene $\vartheta = \pi/2$ liegenden Kreislinie mit dem Radius $r_0 = \eta a_0$. Die Potentialfunktion beschreibt eine ringförmige Potentialmulde. Der niedrigste Eigenwert der Schrödingergleichung mit der Potentialfunktion ist

$$E = [\eta^2 \sigma^4 / (1 + \eta \sigma)^2] \epsilon_0. \quad (5)$$

Die zugehörige Eigenfunktion ist

$$\psi = C (v e^{-v} \sin \vartheta) \eta \sigma \text{ mit } v = \frac{r}{r_0} \frac{\eta \sigma}{1 + \eta \sigma}. \quad (6)$$

Für die Normierungskonstante C gilt

$$C = \left[\frac{(\eta \sigma)^3 (2\eta \sigma)^{2\eta \sigma + 3} \Gamma(\eta \sigma + \frac{3}{2})}{2\pi r_0^3 (1 + \eta \sigma)^3 \Gamma(2\eta \sigma + 3) \Gamma(\eta \sigma + 1) \Gamma(\frac{1}{2})} \right]^{1/2} \quad (7)$$

Nun transformieren wir

$$\begin{aligned} r'^2 \sin^2 \vartheta' &= r^2 [\sin^2 \vartheta (\sin^2 \varphi + \cos^2 \alpha \cos^2 \varphi) + 2 \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \alpha \cos \alpha \cos \varphi \\ &\quad + \cos^2 \vartheta \sin^2 \alpha] \end{aligned} \quad (8)$$

und führen nach Einsetzen aus (5) und (7) die Integration in (1) in ungestrichenen Koordinaten aus. So erhalten wir

$$\chi = -N_L \frac{e^2 r_0^2 (\eta \sigma + 1)^2 (\eta \sigma + 2)^2}{\mu c^2 4(\eta \sigma)^4} \left\{ 1 + \frac{\eta \sigma}{\eta \sigma + 2} \cos^2 \alpha \right\}. \quad (9)$$

Die plausible Erwartung $\chi_{\parallel} > \chi_{\perp}$ ist (ausser für den nicht mehr anisotropen Grenzfall $\eta\sigma = 0$) erfüllt. Die Anisotropie der Suszeptibilität wird durch

$$\frac{\chi_{\parallel} - \chi_{\perp}}{\chi_{\parallel} + \chi_{\perp}} = \frac{\eta\sigma}{3\eta\sigma + 4} \quad (10)$$

gemessen.

Literatur

1. Hund, F.: Allgemeine Quantenmechanik des Atom- und Molekülbaus. Handbuch der Physik, Band XXIV/1, S. 617. Berlin: Springer 1933
2. Härtmann, H.: Neue wellenmechanische Eigenwertprobleme. Sitzungsberichte der wissenschaftlichen Gesellschaft der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt am Main 10, 107 (1972)

Received February 2, 1976