

Atome & Kerne

Sommersemester 2024

Vorlesung # 14, 13.06.24

Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

7. Atome im Magnetfeld und im elektrischen Feld

- 7.2 Zeeman-Effekt – b. Anomaler Effekt
- 7.3 Paschen-Back Effekt
- 7.4 Kernspin-Resonanz (NMR)
- 7.5 Stark-Effekt



Wh.: Präzession im externem B-Feld

■ Präzession von Spin- und Bahnmomenten

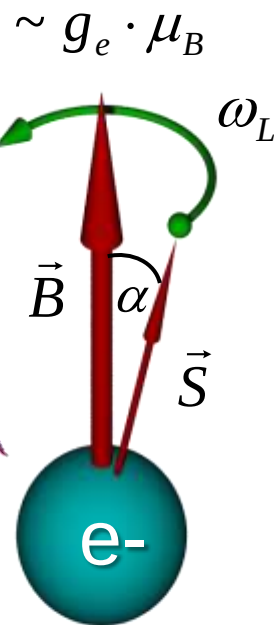
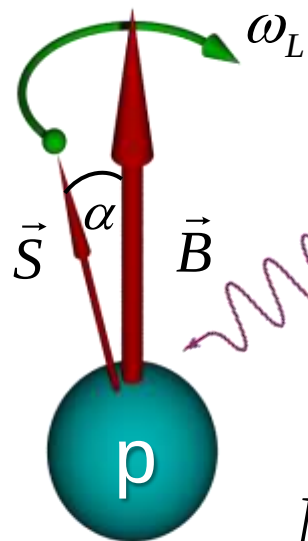
■ Präzession - Larmorfrequenz:

Larmorfrequenz: $\omega_L = g \cdot \frac{\mu_{B,N}}{\hbar} \cdot B_0$

Resonanz:

$$\omega = \omega_L$$

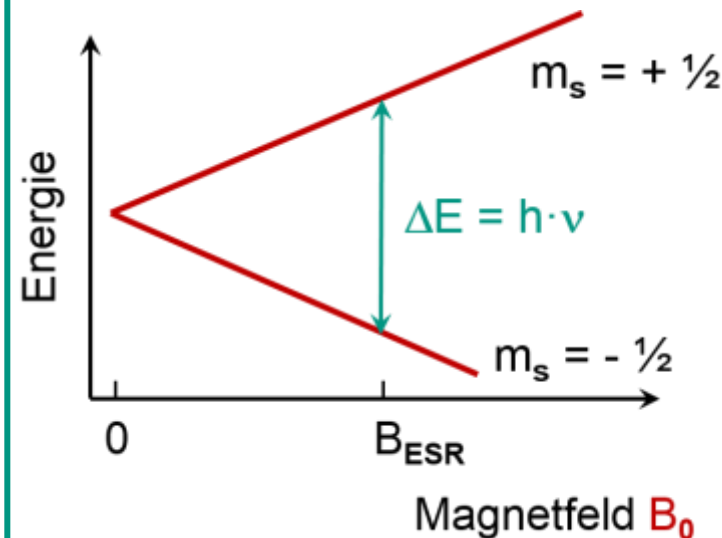
$$\sim g_p \cdot \mu_N$$



$$\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

■ Elektron-Spin-Resonanz (ESR):

- Variation des externen B-Felds
für Resonanzfall $\omega = \omega_L$



$$\nu = 9,5 \text{ GHz}$$
$$B_0 \sim 0,3 \text{ T}$$

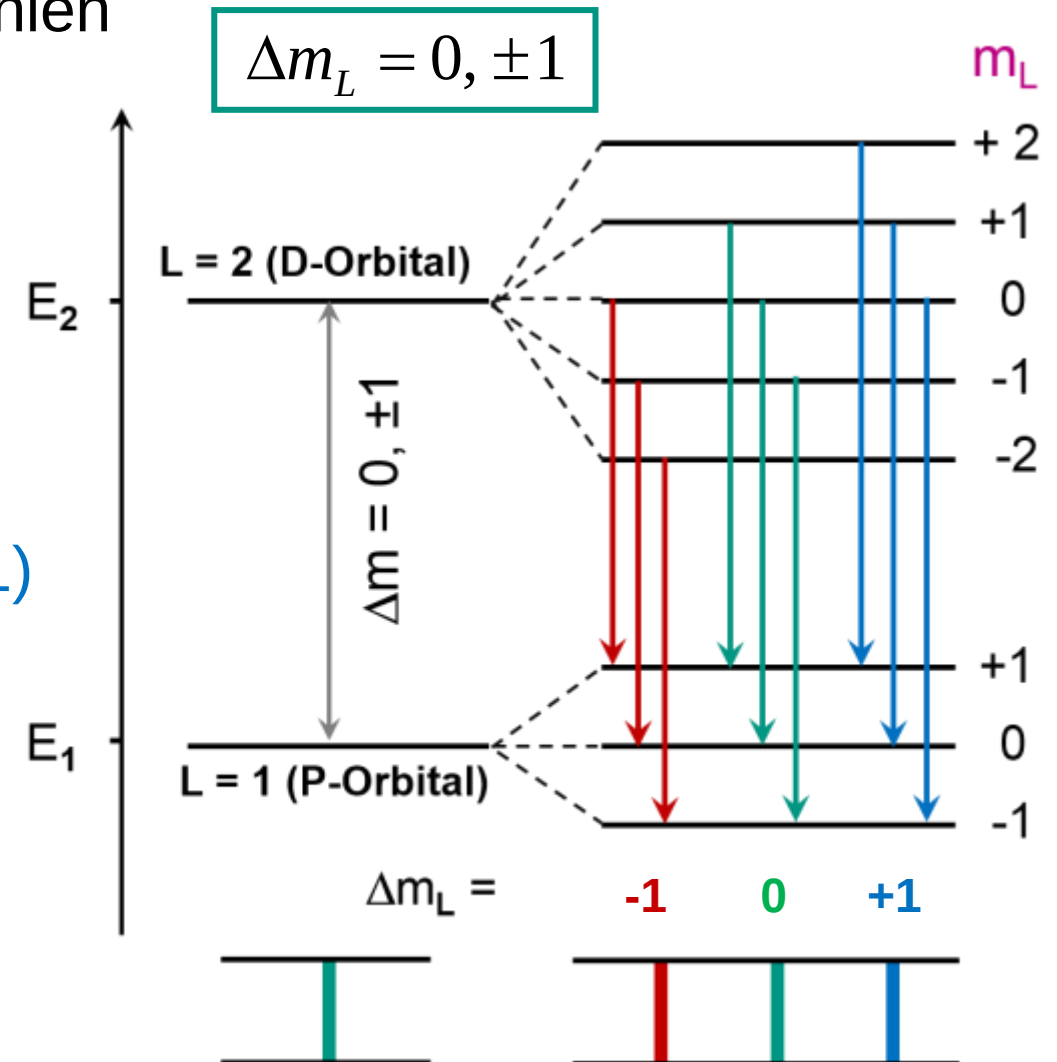
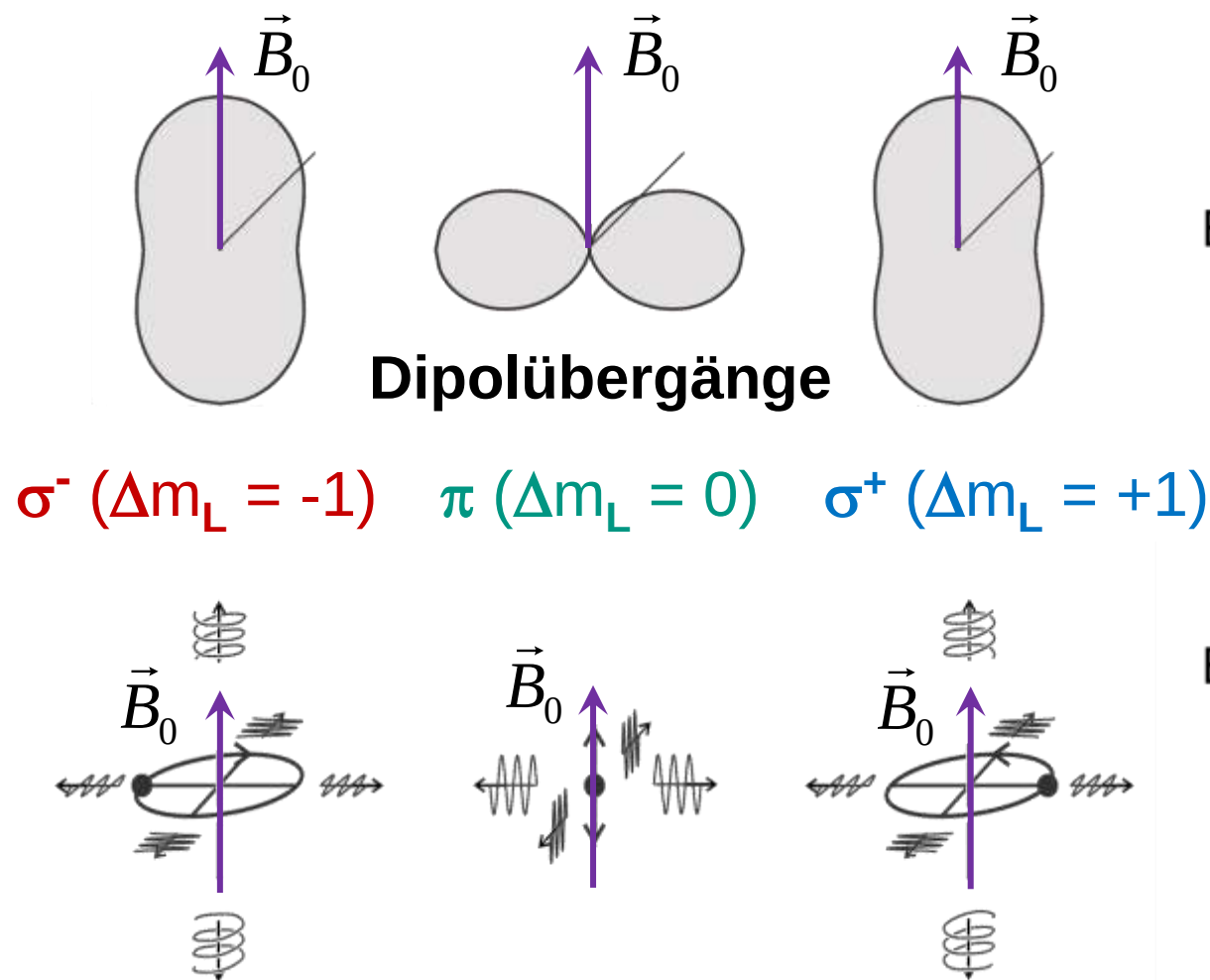
$$\Delta E = \hbar \cdot \omega_L = g_S \cdot \mu_B \cdot B_0$$

ESR-Spektrometer



Wh.: a. Normaler Zeeman-Effekt

- Äquidistante Energieaufspaltung in **(2L+1) Zeeman-Niveaus** via Wechselwirkung des Bahnmagnetismus μ_L mit externem Feld B_0 & Beobachtung der **Polarisation** der Linien

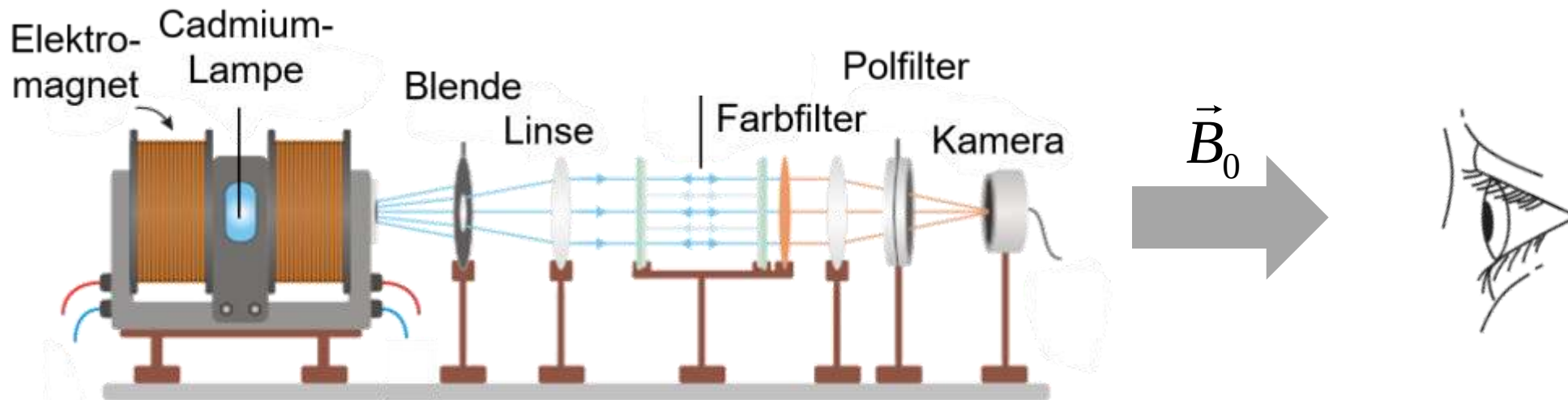


Experiment: Zeeman-Effekt bei Cadmium

■ Zeeman-Effekt: Polarisierungseffekte

Longitudinale Beobachtung ($\uparrow\uparrow$ zu B-Feld) :

- zirkularpolarisierte Komponenten σ^+ σ^-
2 Linien: in Richtung B hat σ^+ Linie höhere Energie als σ^- - Linie
- linearpolarisierte Komponente π
nicht beobachtbar in longitudinaler Richtung



longitudinale Anordnung (parallel zu B-Feld)

b. Anomaler Zeeman Effekt – Grundlagen

- **Anomaler Zeeman-Effekt:** tritt auf bei Übergängen zwischen Orbitalen mit Bahndrehimpuls **L** und Spin **S** (jeweils Gesamtdrehimpuls **J**)

⇒ **atomarer Magnetismus = Bahn- + Spin- Magnetismus**

- **magnetisches Moment μ** des Atoms:

$$\vec{\mu}_J = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot (g_l \cdot \vec{L} + g_s \cdot \vec{S}) \quad g_l = 1 \quad g_s \approx 2,0023192$$

- Bahn- und Spinmagnetismus mit unterschiedlichen g-Faktoren

⇒ Größe der Aufspaltung abhängig von Quantenzahlen (L, S, J) des Zustands

⇒ **nicht-äquidistante Linienaufspaltung!**

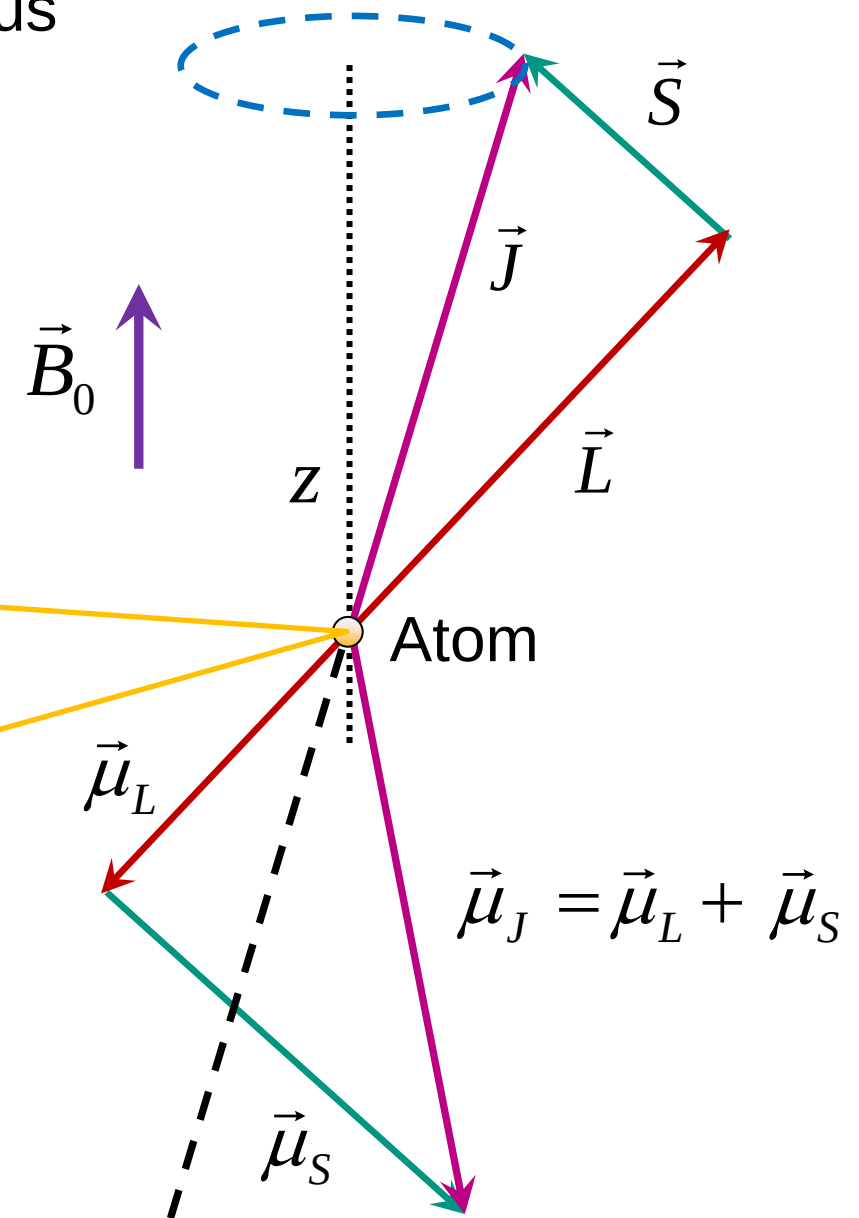
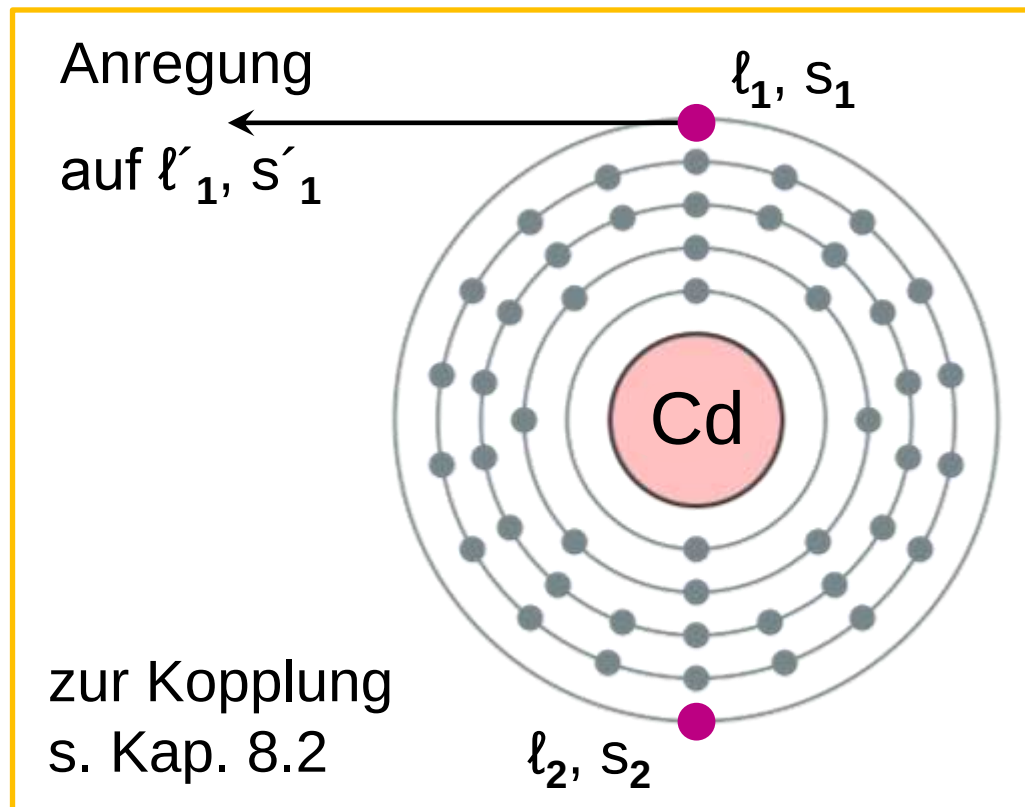
daher größere Anzahl an Linien (z.B. **Cd-grüne Linie: 9 ...**)

Anomaler Zeeman Effekt – magnet. Momente

■ **Kombination** von Bahn- & Spin- Magnetismus
wobei $\vec{L}$ und $\vec{S}$ zu $\vec{J}$ koppeln

- **magnetisches Moment** $\vec{\mu}_J$ des Atoms

$$\vec{\mu}_J = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot (g_l \cdot \vec{L} + g_s \cdot \vec{S})$$



Anomaler Zeeman Effekt – magnet. Momente

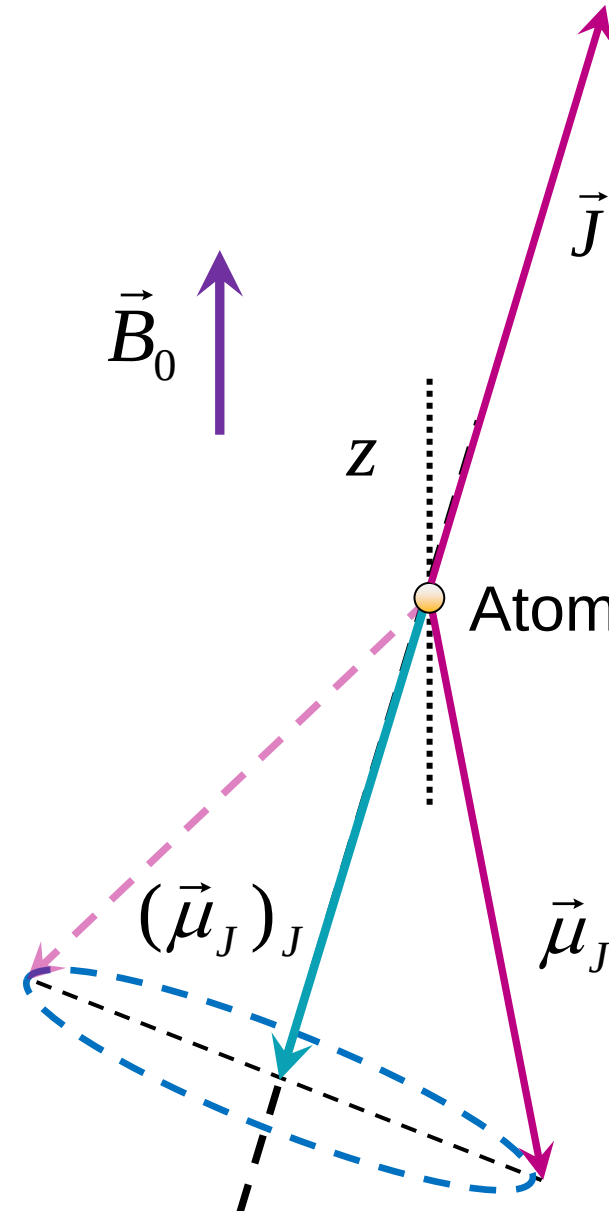
■ Kombination von Bahn- & Spin- Magnetismus

wobei $\vec{L}$ und $\vec{S}$ zu $\vec{J}$ koppeln

- magnetisches Moment $\vec{\mu}_J$ des Atoms

$$\vec{\mu}_J = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot (g_l \cdot \vec{L} + g_s \cdot \vec{S})$$

präzediert sehr schnell um die $\vec{J}$ -Achse, im Zeitmittel bleibt nur seine Projektion $(\vec{\mu}_J)_J$ auf die $\vec{J}$ -Achse konstant



- Berechnung der **Linien-Aufspaltung** ΔE beim anomalen Zeeman-Effekt:
aus Vektormodell für $\vec{\mu}_L, \vec{\mu}_S, \vec{\mu}_J, (\vec{\mu}_J)_J$
 $\Rightarrow$ Abhängigkeit von den Quantenzahlen **L**, **S**, und **J**
- Aufspaltung einzelner **Zeeman-Komponenten** (unterschiedliches m_j):

$$\Delta E(m_J, m_{J-1}) = g_J \cdot \mu_B \cdot B_0$$

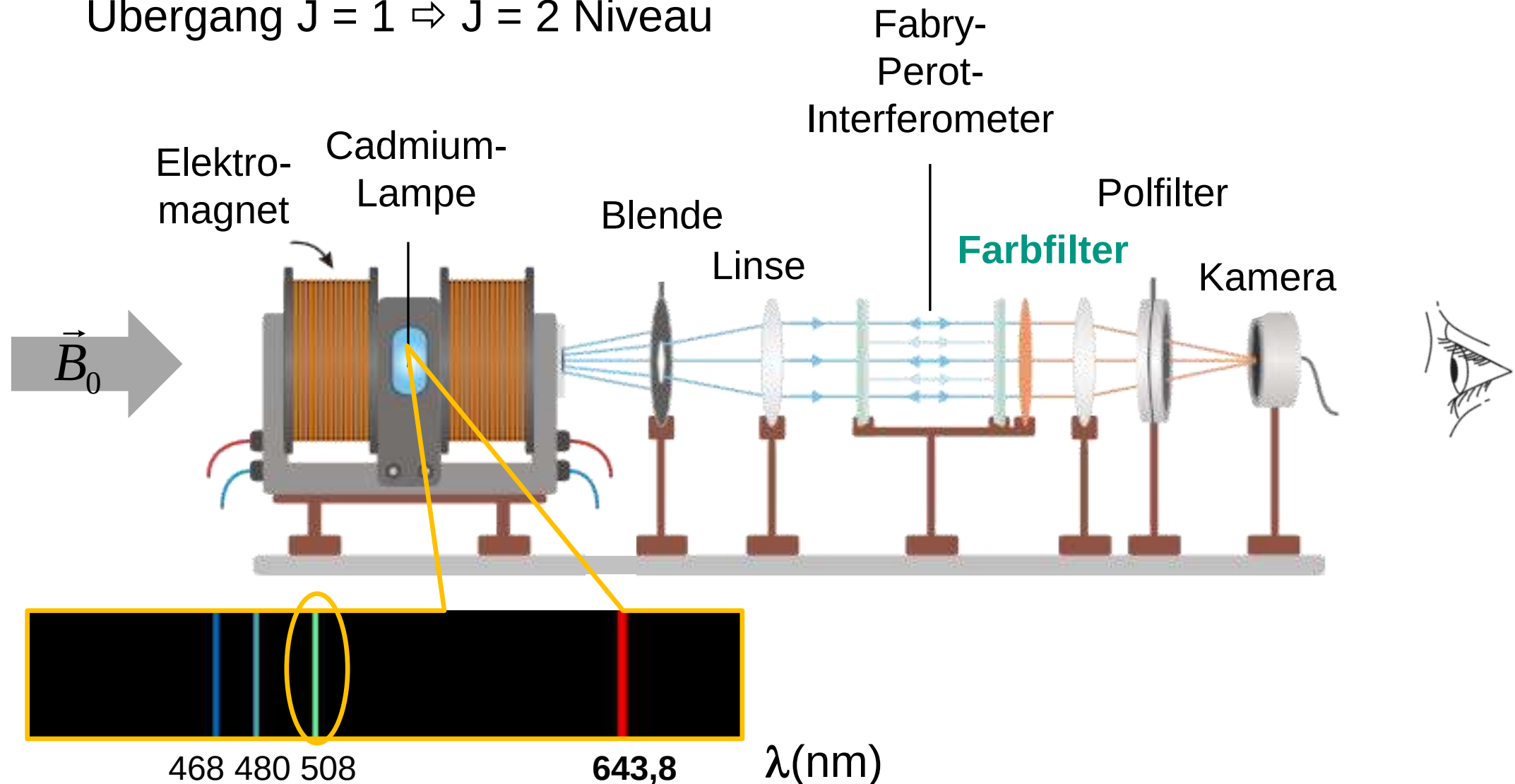
- **Landé-Faktor** g_J des Atoms wird festgelegt durch Quantenzahlen L, S, J der Hüllenelektronen

$$g_J = 1 + \frac{J \cdot (J + 1) + S \cdot (S + 1) - L \cdot (L + 1)}{2J \cdot (J + 1)}$$

$\Rightarrow$ Bestimmung der Termschemata von Atomen (L, S, J)

Experiment: anomaler Zeeman-Effekt bei Cd

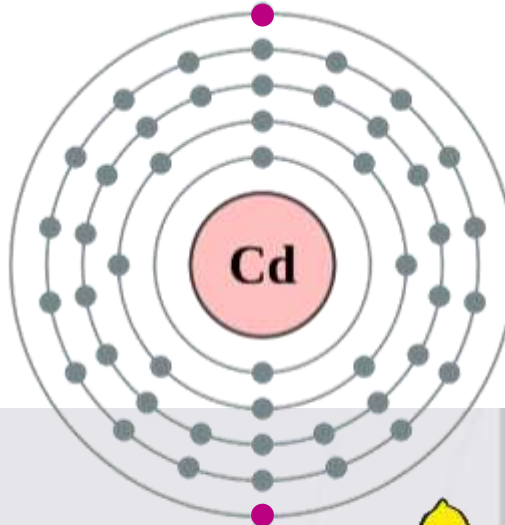
- **Zeeman-Effekt:** Cadmium-Lampe wird in **starkes B-Feld** gebracht
 - wir beobachten die **grüne Linie** (via Farbfilter) mit $\lambda = 508,59 \text{ nm}$
 - Übergang $J = 1 \Rightarrow J = 2$ Niveau



Experiment: Zeeman-Effekt bei Cadmium

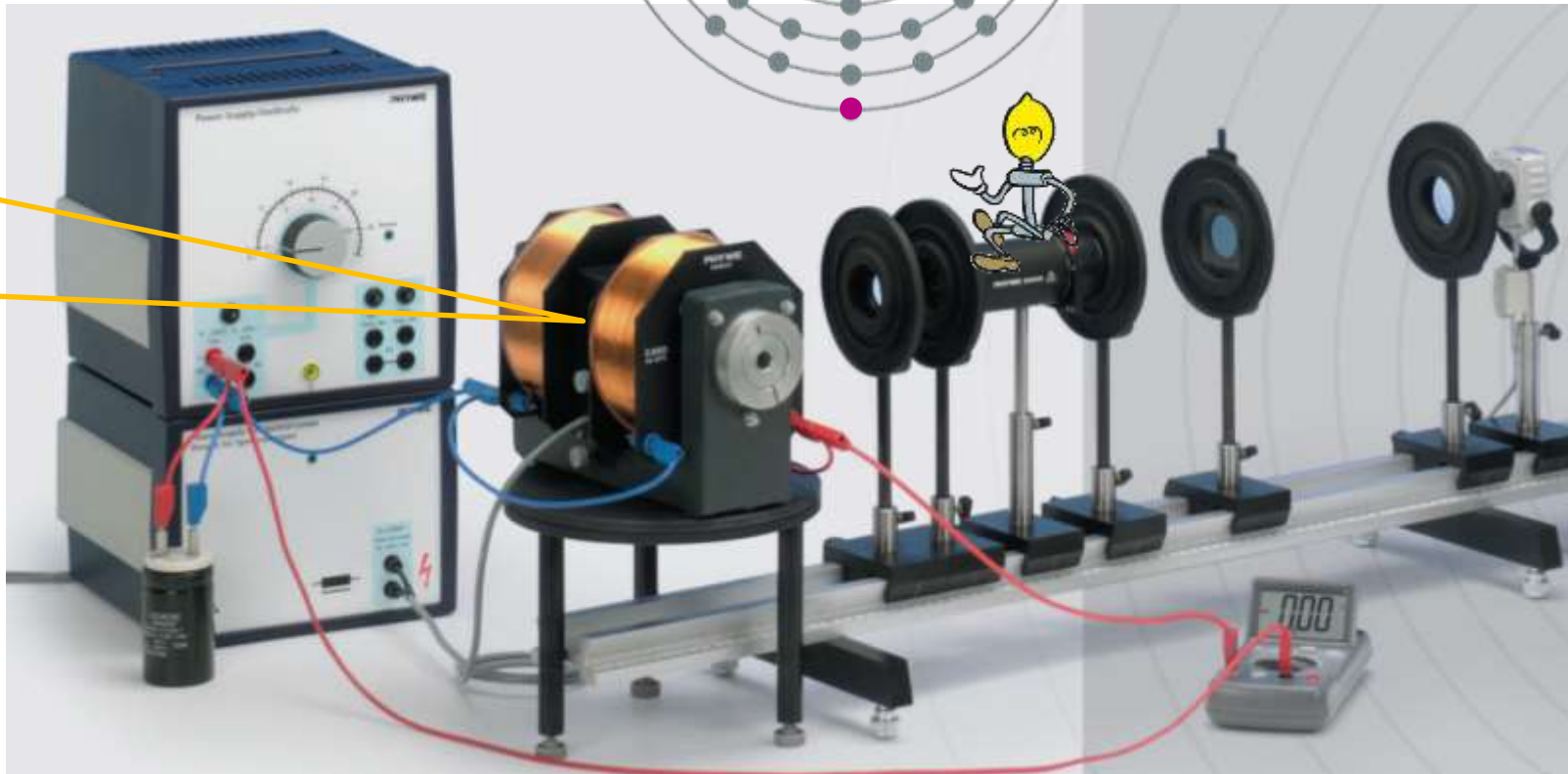
- **anomaler Zeeman-Effekt:** Aufspaltung der grünen Linie in ein **Nonett**

*Cd-Orbitale mit:
Spin S
Bahndrehimpuls L
Gesamtdrehimpuls J*



Zeeman-
Aufspaltung für
jeden J -Zustand
unterschiedlich

Cd-
Lampe



Experiment: Zeeman-Effekt bei Cadmium

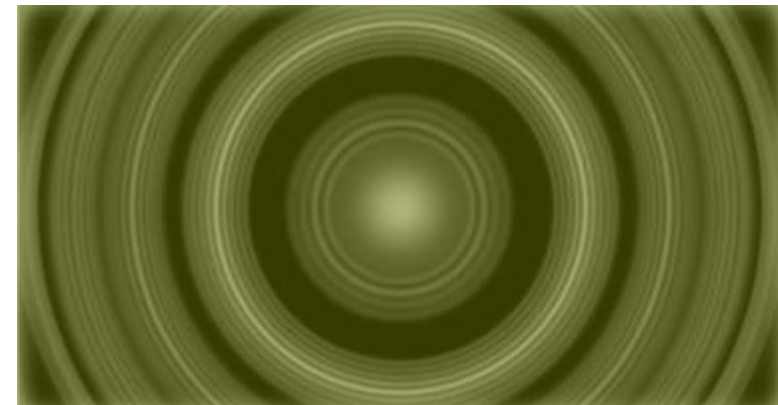
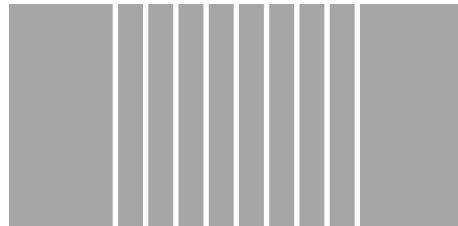
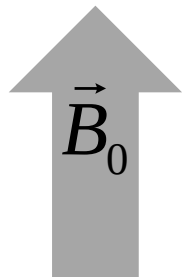
■ anomaler Zeeman-Effekt: Aufspaltung der grünen Linie in ein **Nonett**

- grüne Linie aus Übergang von **Orbital** ($J = 1, S = 1, L = 0$) zu **Orbital** ($J = 2, S = 1, L = 1$) **Dipol-Übergang** ($\Delta L = 1$)

- bei transversalem B-Feld:

⇒ Aufspaltung in **9 Linien**

mit $\Delta\lambda/\lambda \sim 3 \cdot 10^{-5}$ bei **$B = 1 \text{ T}$**



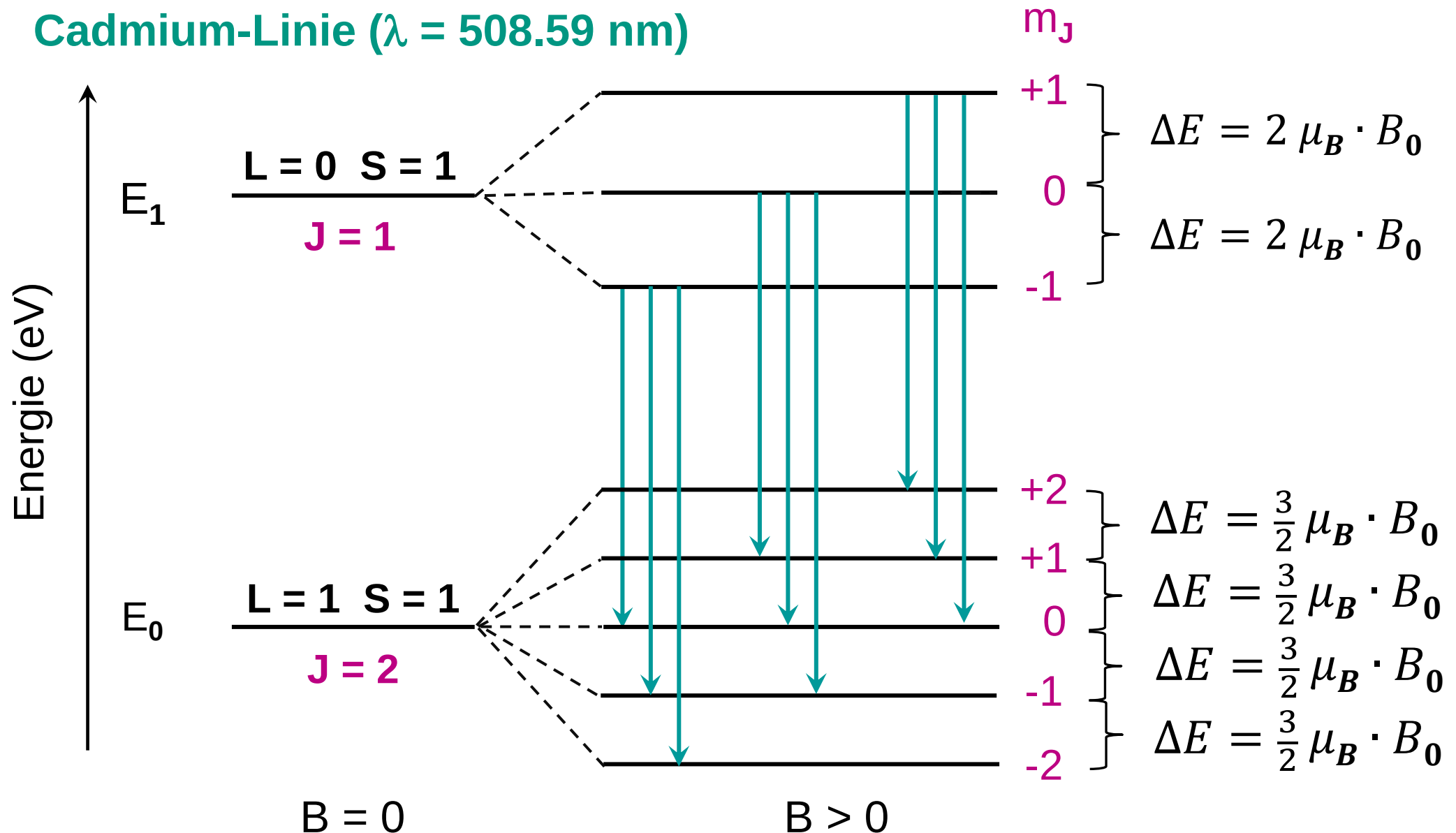
mit B-Feld

- $J = 1$ Orbital: $(2J + 1) = 3 m_J$ Zustände

- $J = 2$ Orbital: $(2J + 1) = 5 m_J$ Zustände

Anomaler Zeeman-Effekt bei Cadmium

■ Zeeman-Aufspaltung der grünen Cadmium-Linie ($\lambda = 508.59 \text{ nm}$)



Zeeman Effekt - Grenzen

- Anomale Zeeman-Aufspaltung beruht auf Kopplung von Bahndrehimpuls L und Spin zu Gesamtdrehimpuls J . Dieses Kopplungsschema (J -Zustände) gilt nur für „moderate“ Magnetfelder bis zu einigen Tesla

$$\Delta E \sim \mu_B \cdot B_0 = 5 \text{ eV bei } B_0 = 10^5 \text{ T (Neutronenstern)}$$



- bei extrem hohen B-Feldern: **neue Kopplung von L und S**



Magnetare –
ultra-starke magnetische
Neutronensterne mit höchsten
bekannten B-Feldern im
Universum mit $B = 10^{10}\text{-}10^{11} \text{ T} !!$



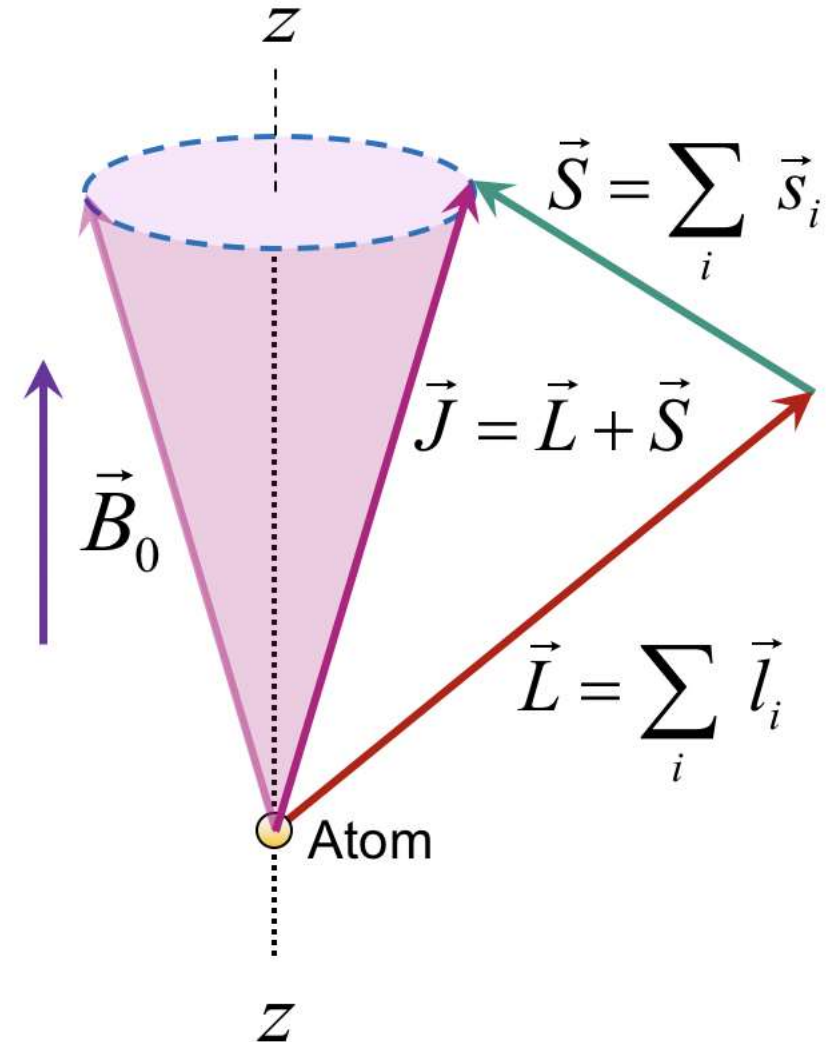
⇒ Paschen-Back Effekt



7.3 Paschen-Back Effekt

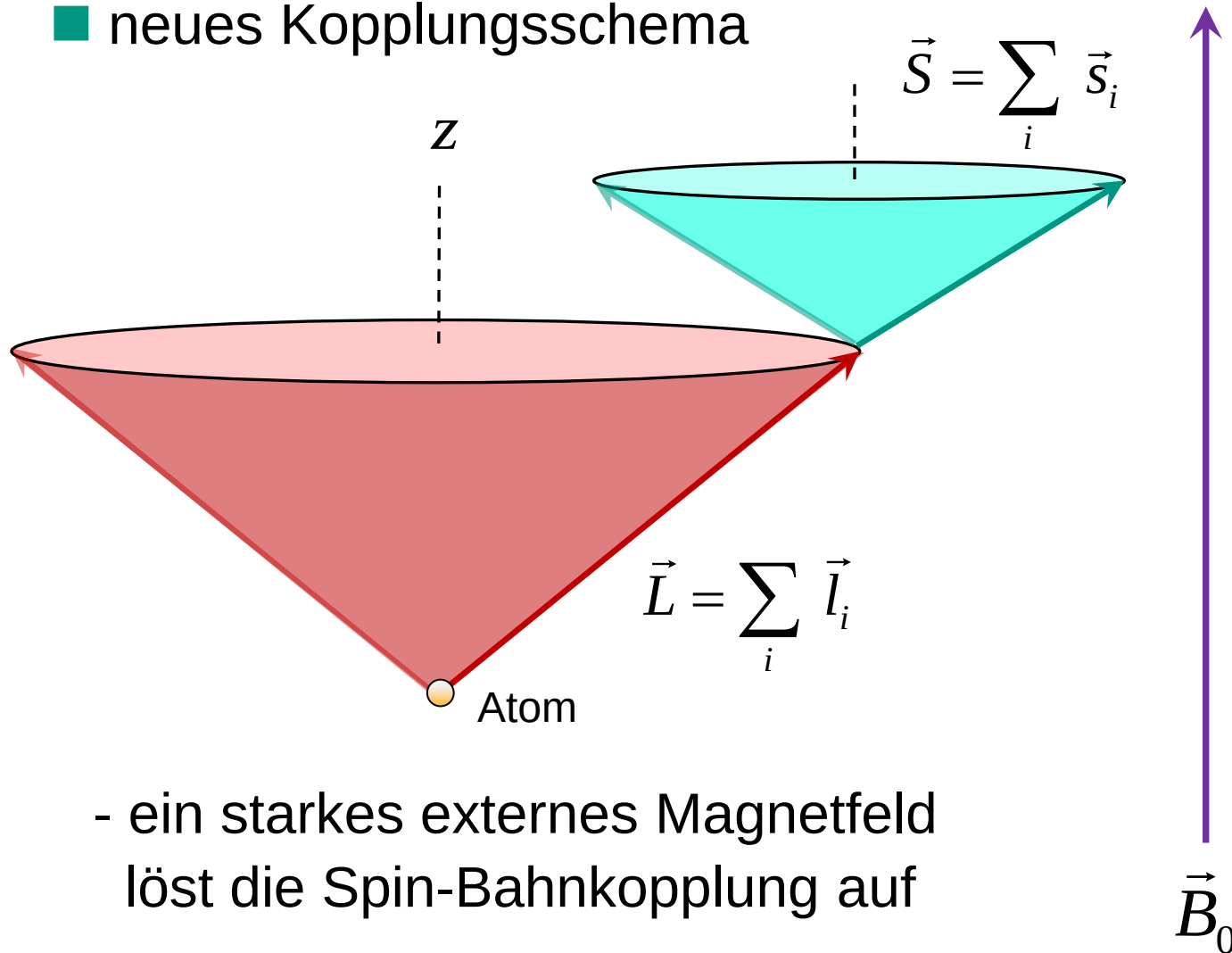
■ Paschen-Back-Effekt:

- Änderungen der Kopplungsart von Spin- & Bahn-Magnetismus, falls **externes Feld B_0 „sehr stark“**



Paschen-Back Effekt – Kopplungsschema

■ neues Kopplungsschema



- ein starkes externes Magnetfeld löst die Spin-Bahnkopplung auf
- $\Rightarrow \vec{L}$ und $\vec{S}$ entkoppeln & präzedieren separat um die Achse von $\vec{B}_0$

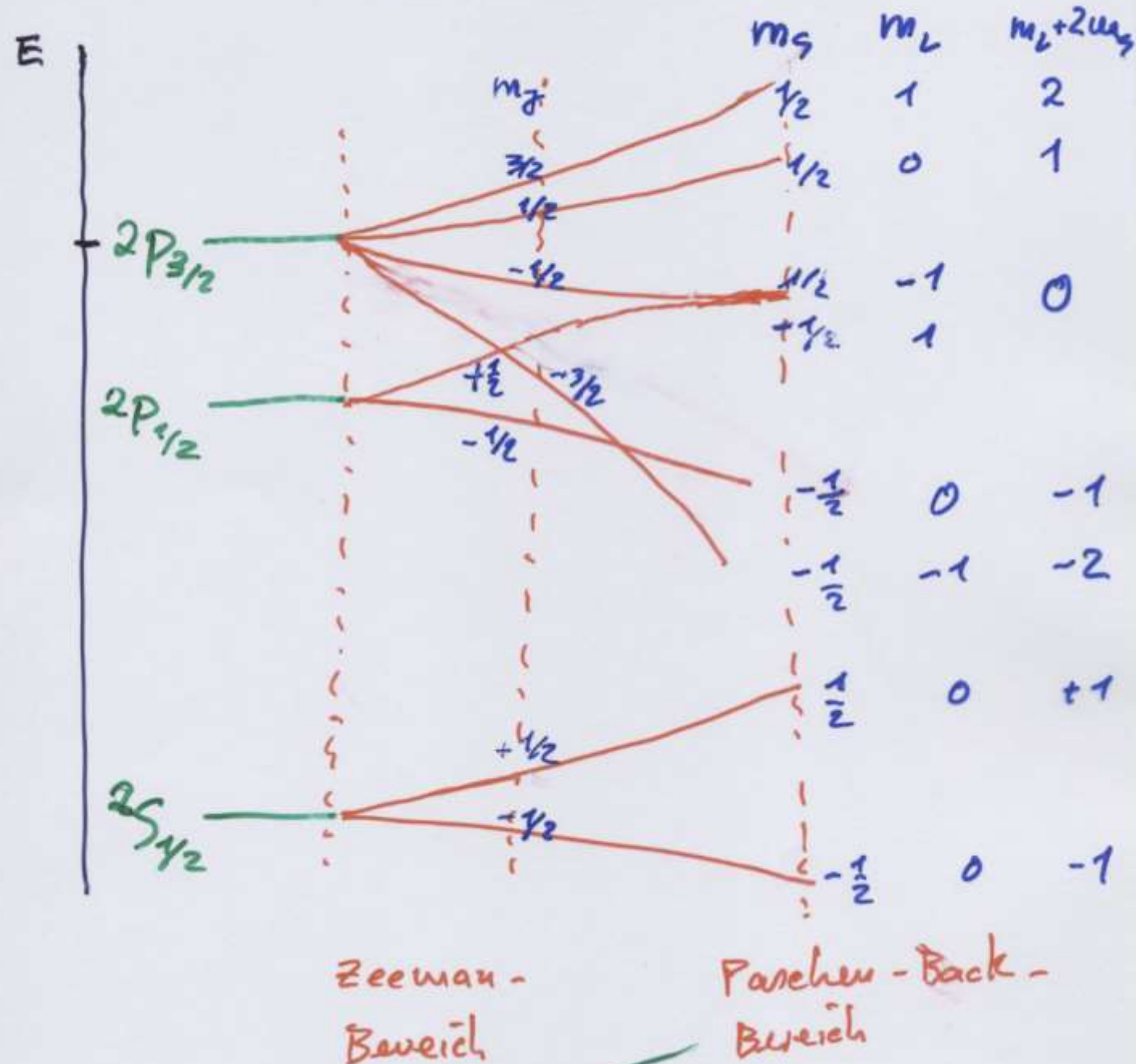
$$V_{Z/S,B} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$= -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_S \cdot \vec{B}$$

$$\Delta E_{Z/S,B} = (m_L + 2m_S) \mu_B B$$

$$\Delta \omega = (m_L + 2m_S) \frac{M_B B}{\hbar}$$

Bs : Na



■ Notation für Hüllenelektron-Orbitale

Notationen

Mehr-Elektronensystem:

L, S, J Quantenzahlen

Einzel-Elektronensystem:

l, s, j Quantenzahlen

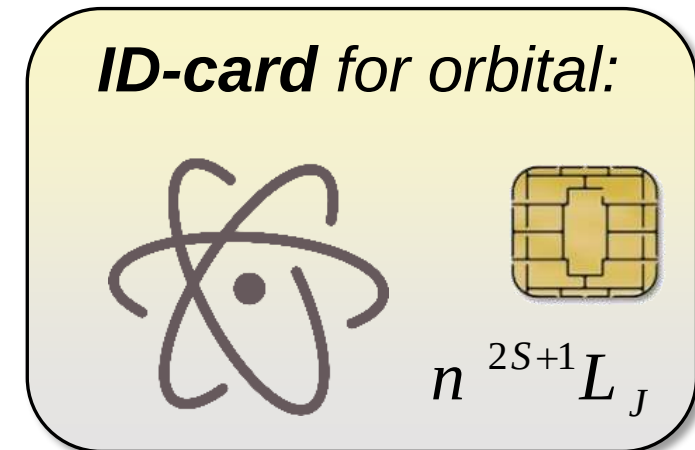
n Hauptquantenzahl

$$n^{2S+1}L_J \quad (2S+1: \text{Spin-Multiplizität})$$

Beispiel: $2^2P_{3/2}$

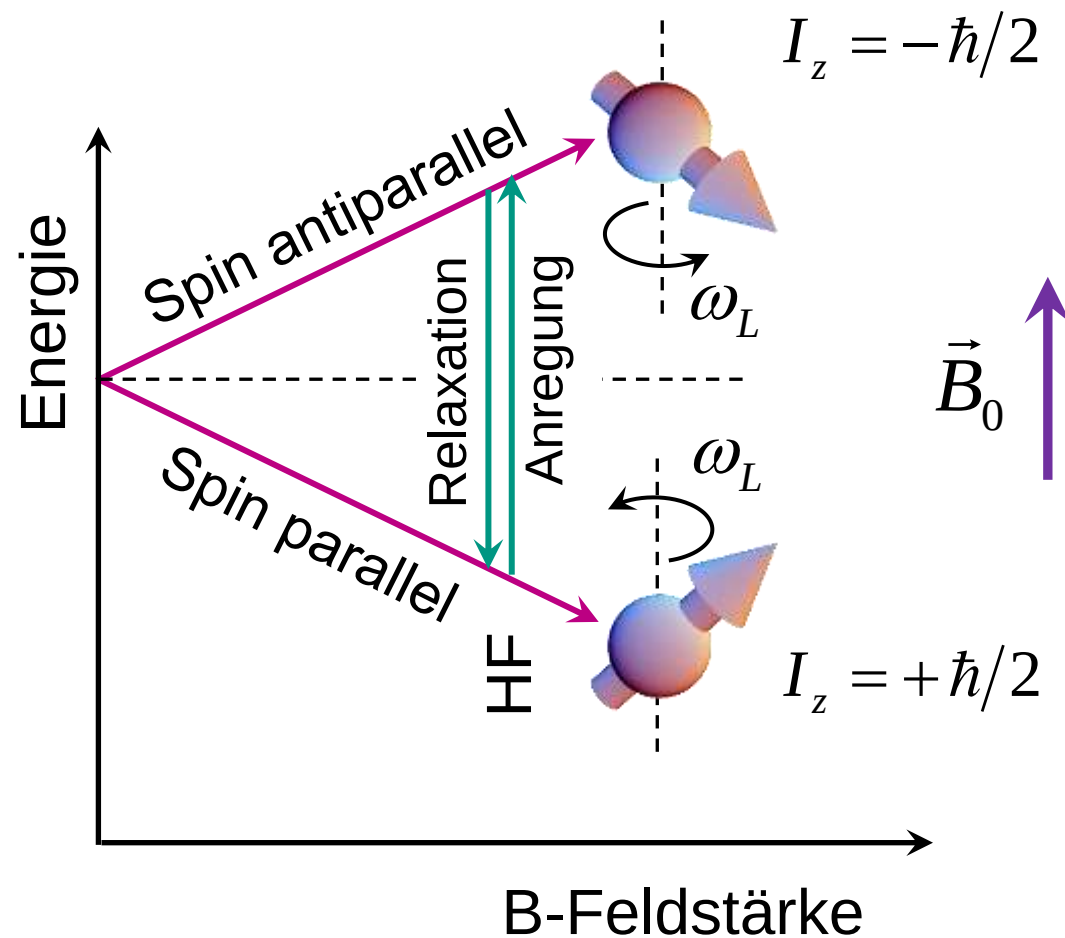
Leuchtelektron mit

$n = 2$, $s = 1/2$ (Dublett), $l = 1$, $j = 3/2$



7.4 Kernspinresonanz

- 1937: Isidor Rabi entwickelt die **Magnetresonanz- Methode** für Kerne zur Messung magnetischer Momente μ durch die Technik der HF-Einstrahlung

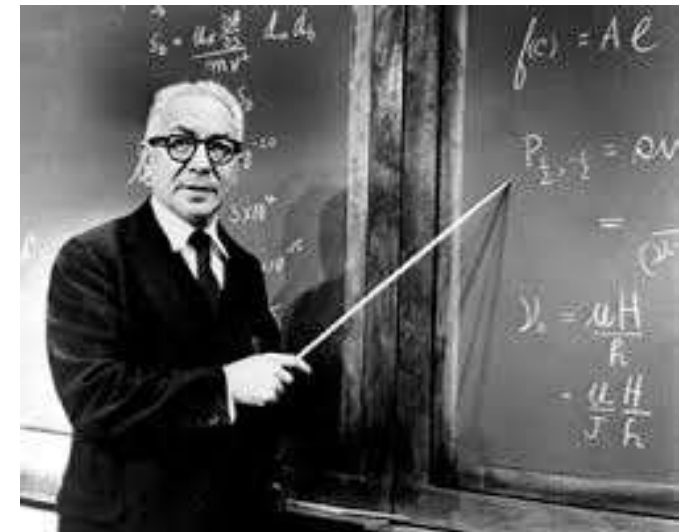


Nobel-
preis 1944

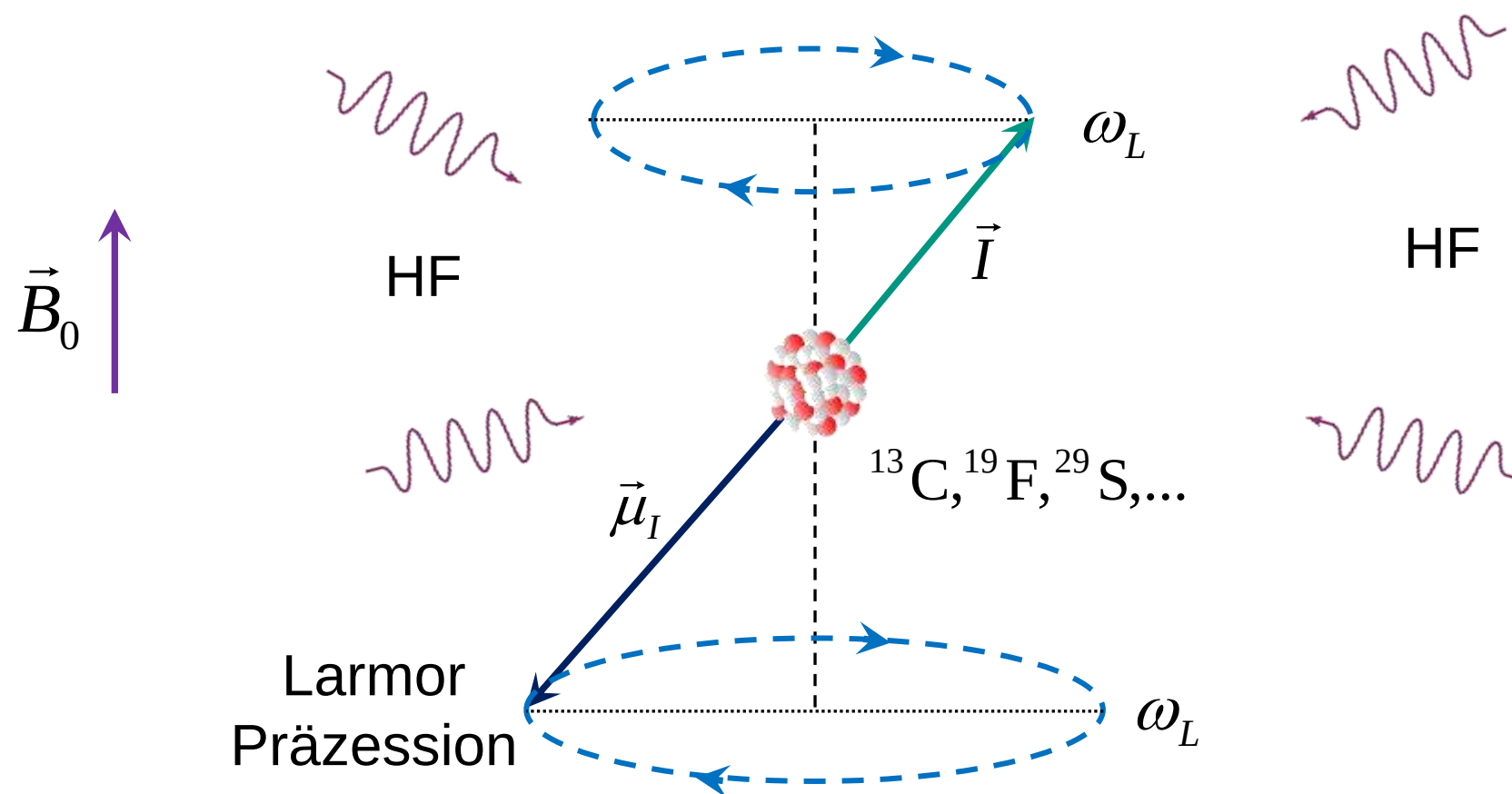


*for his resonance method
for recording the magnetic
properties of atomic nuclei*

Isidor
Rabi



Kernspinresonanz



Kernspinresonanz – Energieaufspaltung

■ **potenzielle Energie** eines Kernmoments im externen Feld B_0 :

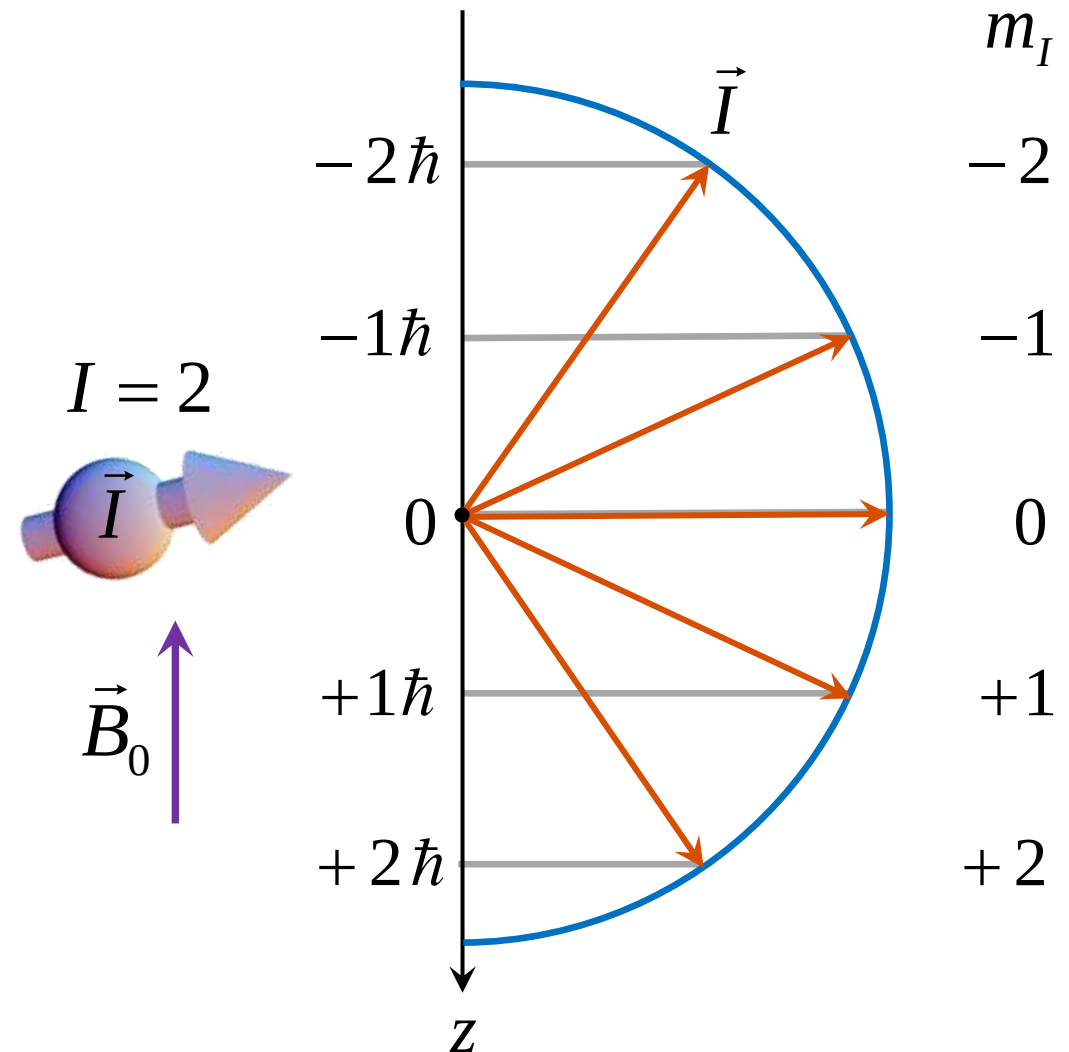
$$V_{pot} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{B}_0$$

$$= -g_I \cdot \mu_N \cdot B_0 \cdot m_I$$

$$\Delta m_I = \pm 1$$

- Energieaufspaltung:

$$|\Delta E| = g_I \cdot \mu_N \cdot B_0$$

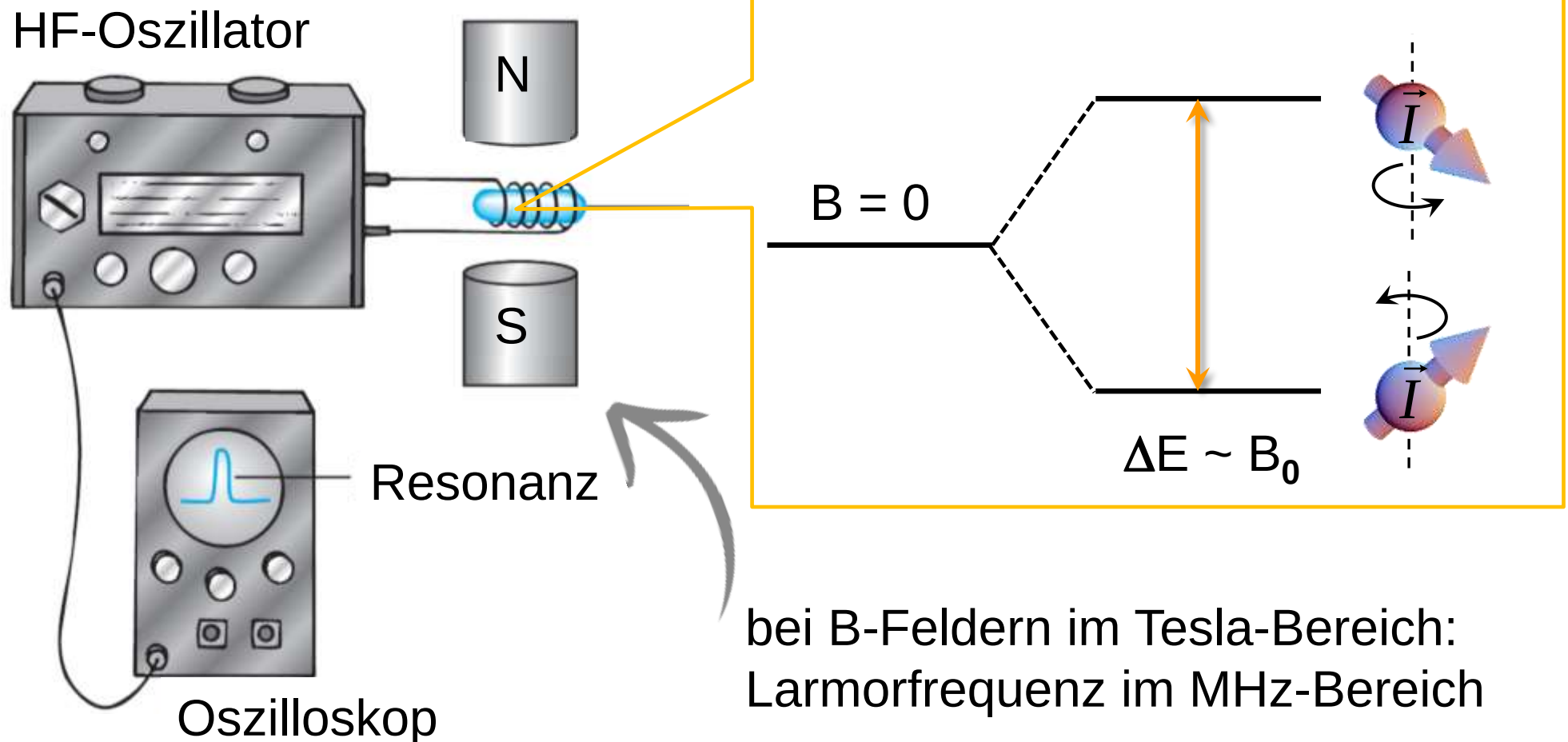


Kernspinresonanz – Frequenzen

- **Larmor-Frequenz** ω_L
eines Kerns im B-Feld:

$$\omega_L = \frac{g_I \cdot \mu_N}{\hbar} \cdot B_0 = \gamma \cdot B_0$$

großes B_0 :
 $\Rightarrow$ hohes ω_L



bei B-Feldern im Tesla-Bereich:
Larmorfrequenz im MHz-Bereich

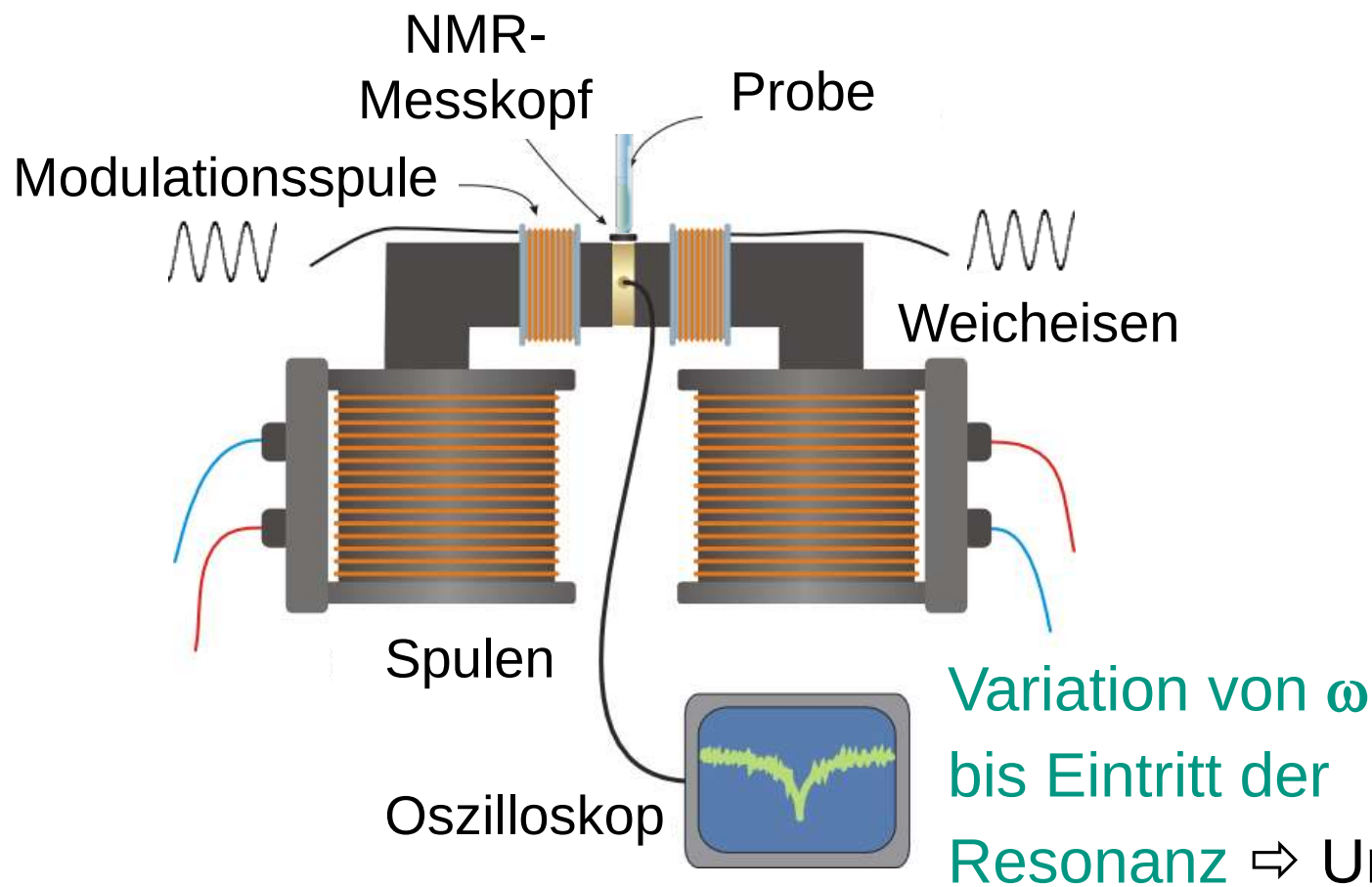
■ Larmor-Frequenz eines Kerns im B-Feld:

HF – Zahlenwerte für verschiedene NMR-relevante Quantensysteme

Teilchen	Spin	$\omega_{\text{Larmor}}/B_0$ [$\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$]	f / B_0
Elektron	$\frac{1}{2}$	$1,761 \cdot 10^{11}$	28,025 GHz/T
Proton	$\frac{1}{2}$	$2,675 \cdot 10^8$	42,578 MHz/T
Deuteron	1	$0,411 \cdot 10^8$	6,535 MHz/T
^{23}Na	$\frac{3}{2}$	$0,708 \cdot 10^8$	11,262 MHz/T
^{14}N	1	$0,193 \cdot 10^8$	3,08 MHz/T
^{13}C	$\frac{1}{2}$	$0,673 \cdot 10^8$	10,71 MHz/T
^{19}F	$\frac{1}{2}$	$2,518 \cdot 10^8$	40,08 MHz/T

NMR: „Fingerabdruck eines Moleküls“

- **NMR-Aufbau:** weitgehend analog zur Elektronenspinresonanz (9,5 GHz)
 - Probe in homogenem B-Feld (Spule mit Weicheisen)
 - Modulationsspule: elektromagnetisches Wechselfeld mit $\omega = \text{MHz}$
 - HF-Feld durch Spule, da bei MHz kleine kapazitive Verluste ($\sim 1/\omega \cdot C$)

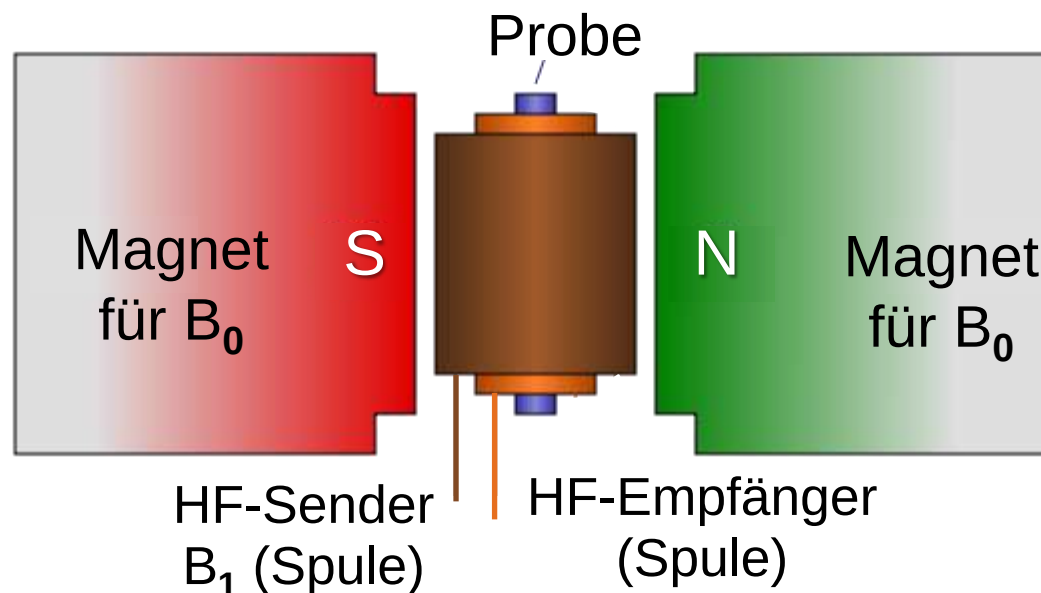


NMR =
Nuclear **M**agnetic **R**esonance



Kernspinresonanz – Historie: erste Arbeiten

- 1946: F. Bloch & E.M. Purcell weisen erstmals Kernspin-Resonanz-Signale nach



"for their development of new methods for nuclear magnetic precision measurements and discoveries in connection therewith"

Nobel-
preis 1952



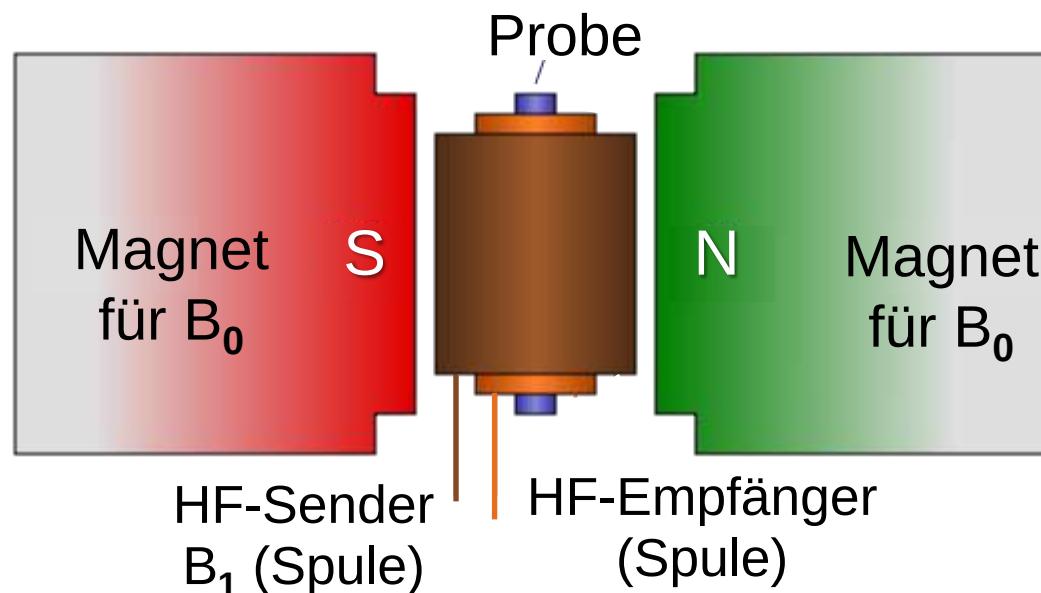
Felix Bloch



E.M. Purcell

Kernspinresonanz – Historie: erste Arbeiten

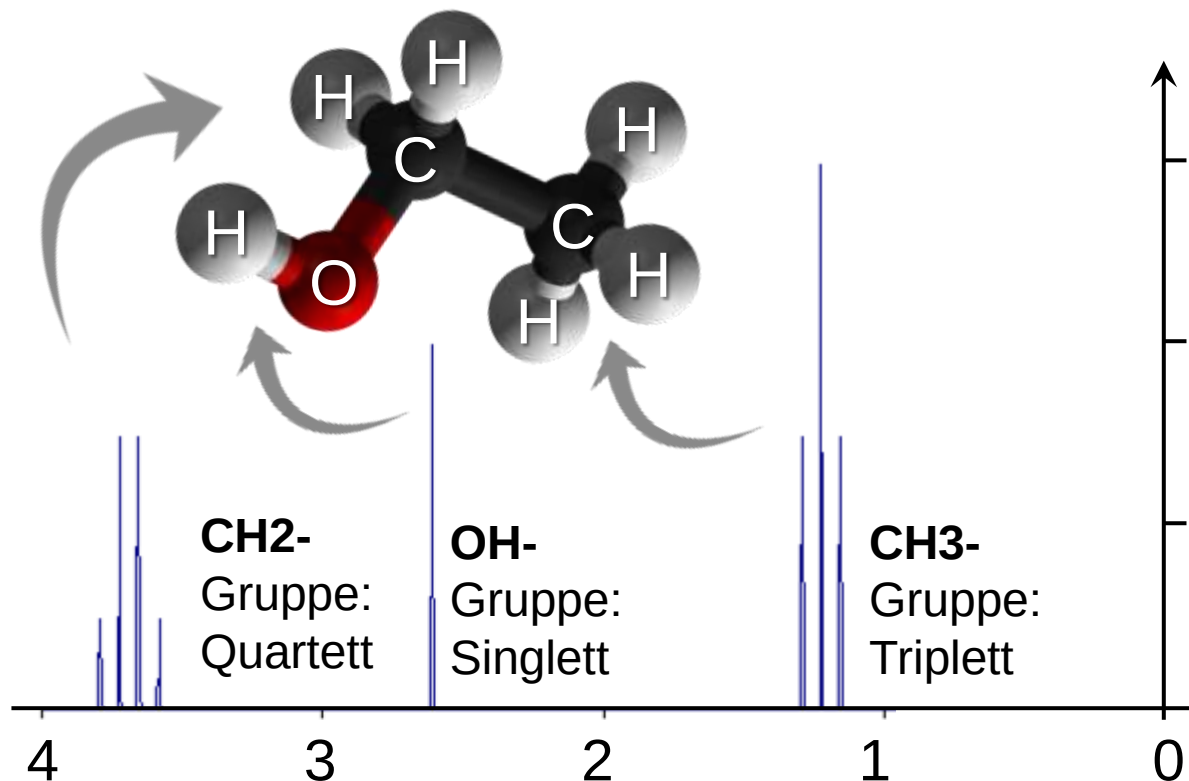
- starker Magnet erzeugt horizontales (homogenes) Feld B_0
 - eine **Senderspule** erzeugt ein vertikales (hochfrequentes) Zusatzfeld B_1
- NMR-Resonanzfall $\omega = \omega_L$



- zweite (transversale) **Empfängerspule**:
 - ⇒ Induktion & Nachweis eines Resonanzsignals

- Chemische Umgebung der Kerne (d.h. i.a. Protonen) beeinflusst NMR-Frequenz $\Rightarrow$ **Strukturuntersuchung von Molekülen**

- lokale Elektrondichte erzeugt lokales Magnetfeld entgegen B_0 -Feld
Protonen werden gegen externes Feld „abgeschirmt“
 $\Rightarrow$ kleine Änderung der Resonanzfrequenz im **ppm-Bereich**



- Chemische Shift δ :

$$\delta = \frac{f_{\text{Probe}} - f_{\text{Referenz}}}{f_{\text{Referenz}}}$$

para/diamagnetische Fälle
elektronegative Umgebung

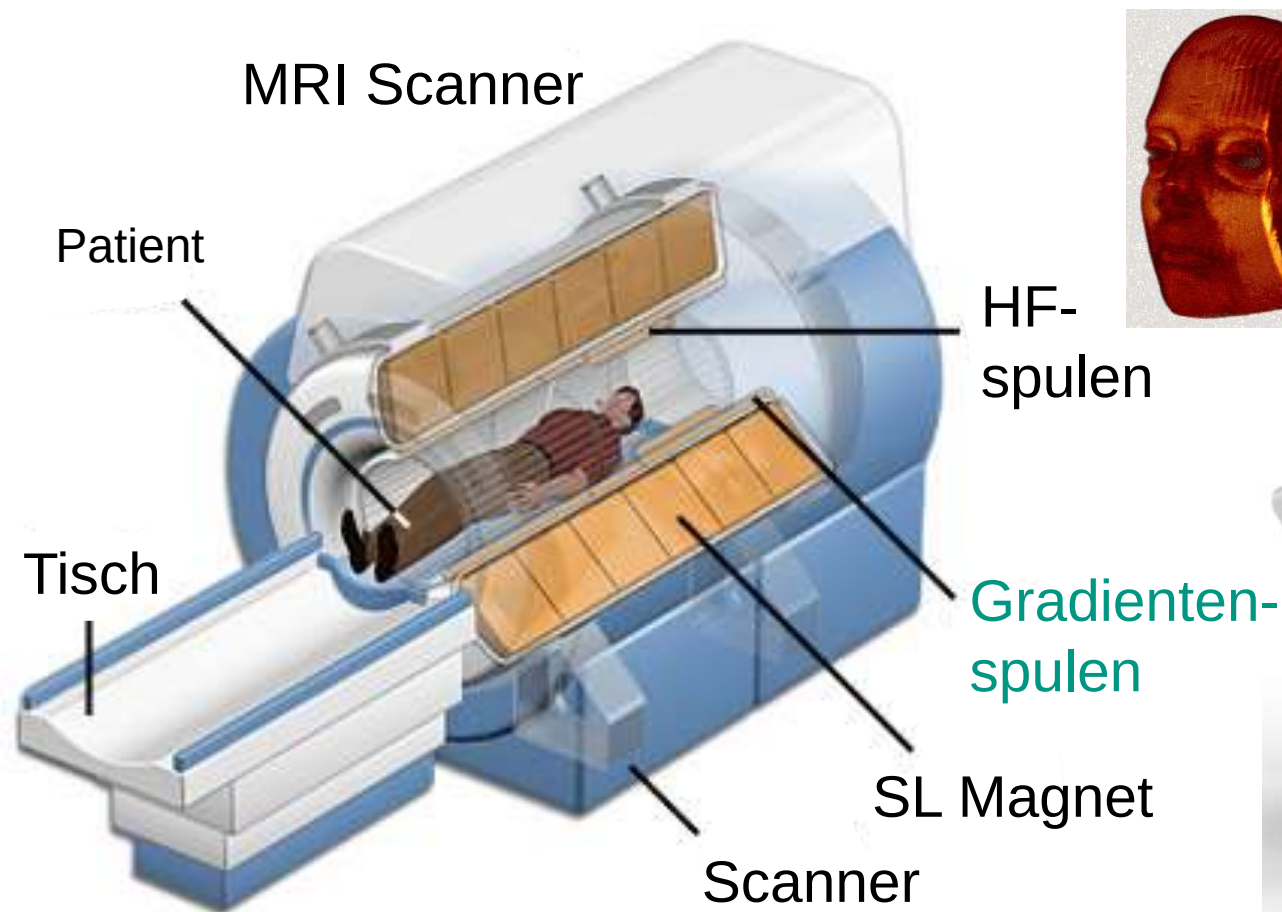
...

Frequenz-Shift δ in ppm

Magnet-Resonanz – Tomographie

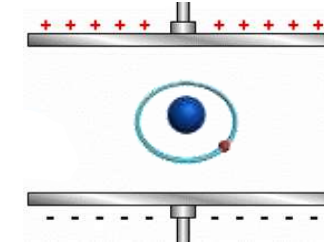
■ **MRT** - **M**agnet-**R**esonanz-**T**omographie – bildgebendes Verfahren auf der Basis von NMR („Feldgradienten-NMR“)

- linearer **Feldgradient** bekannter Größe: $\Rightarrow$ Ort!
(statisch/gepulste Gradienten)



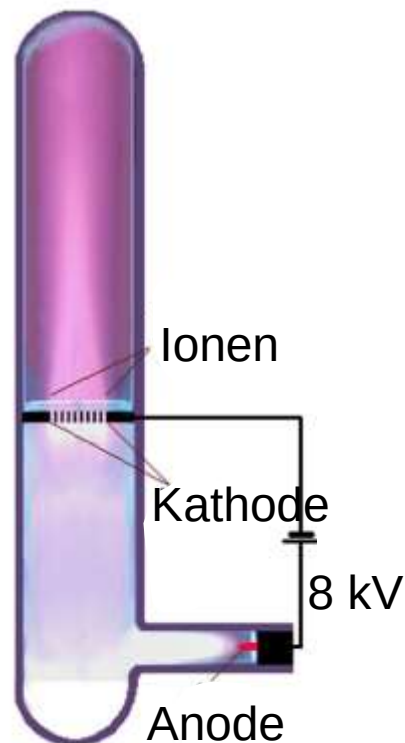
7.5 Stark-Effekt

■ **Stark-Effekt:** Shift und Aufspaltung von Zuständen (Spektrallinien) bei Anlegen eines elektrischen Felds

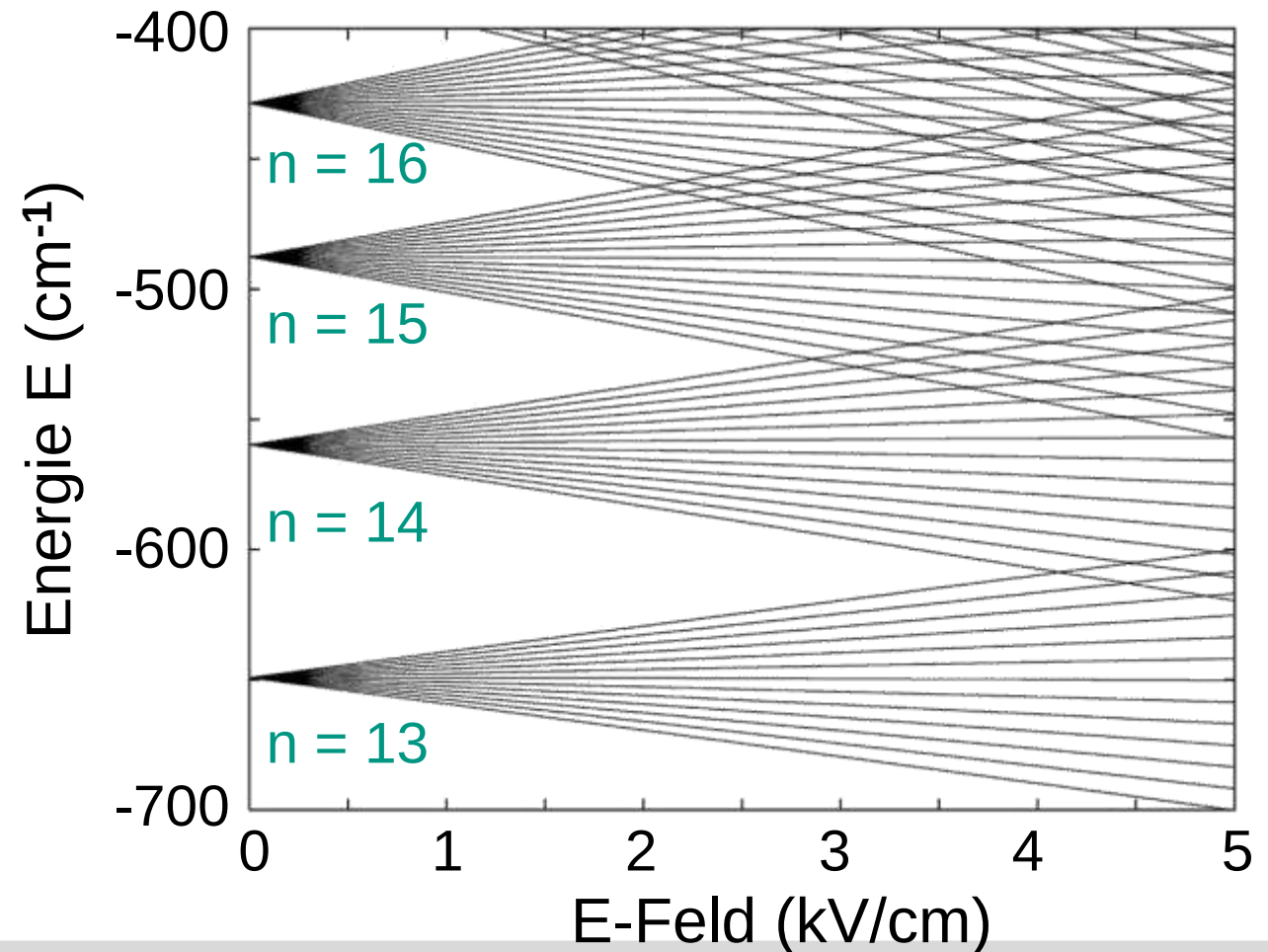


$$V \sim \vec{p}_{el} \cdot \vec{E}$$

- erste Beobachtungen in Kanalstrahlröhren



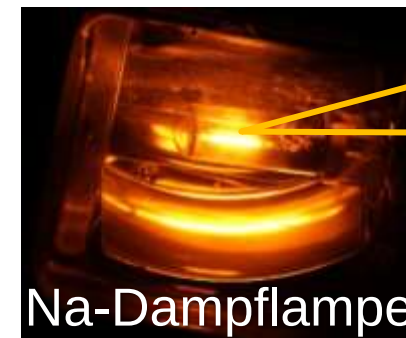
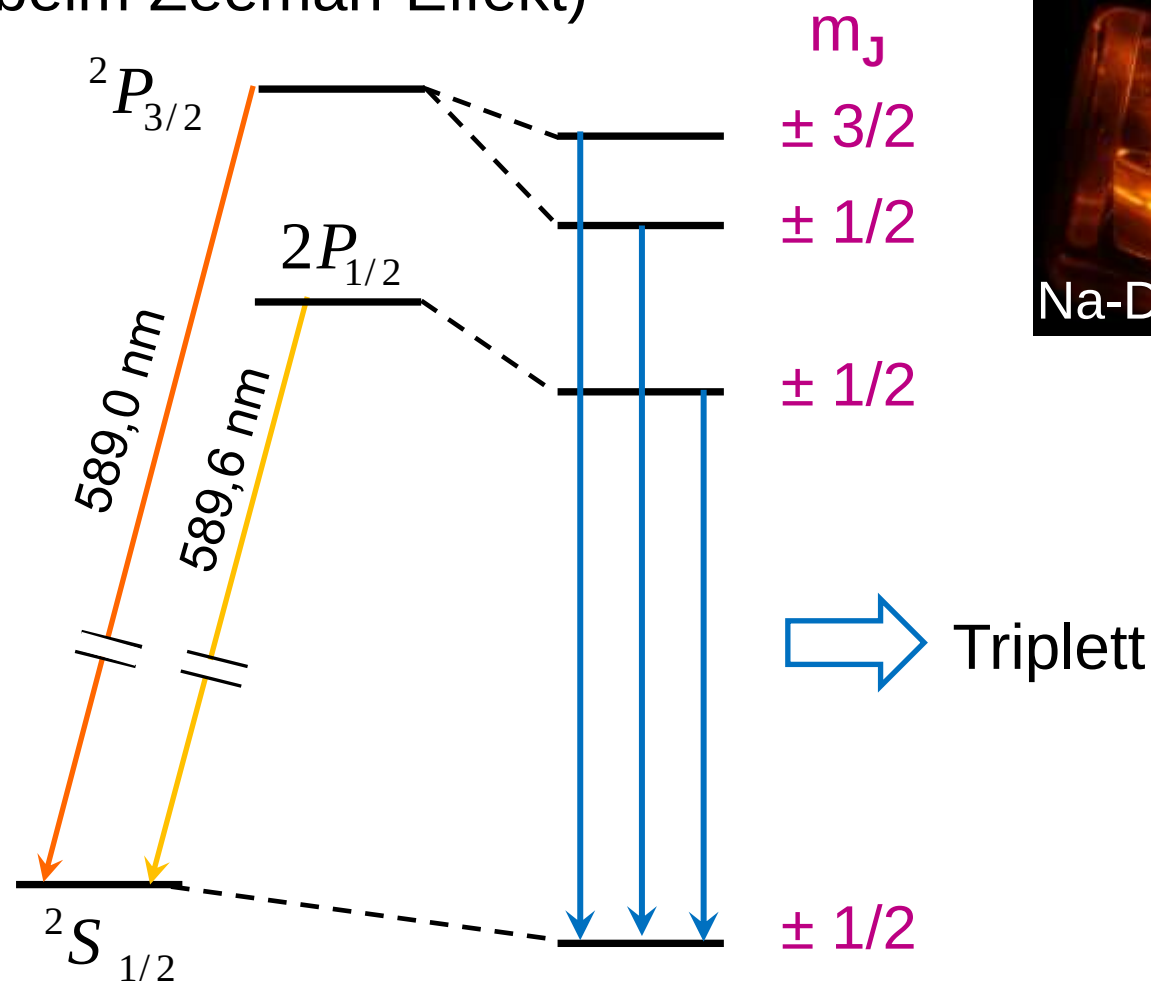
H-Atom im E-Feld: Rydberg-Zustände ($m=0$)



Stark-Effekt – Aufspaltung

■ Orbitale im elektrischen Feld:

- gleiches Verhalten von Zuständen mit magnetischen Quantenzahlen $+m_j$ und $-m_j$ ($\Rightarrow$ kleinere Anzahl an Aufspaltungs-Komponenten als beim Zeeman-Effekt)



D-Linien



$$\lambda = 589 \text{ nm} \quad \lambda = 589,6 \text{ nm}$$