

Lösung 10; Übungen (07.07 Dienstag / 09.07. Donnerstag)

1. para- und ortho
 - para-Wasserstoff: Kernspin und Elektronspin anti-parallel; singulett: ($F=J+I=1/2 - 1/2 = 0$)
 - ortho-Wasserstoff: Kernspin und Elektronspin parallel; Triplett ($F=J+I=1/2 + 1/2 = 1$)
 - Da der Kernspin beteiligt ist, gehört dies natürlich in den Bereich der Hyperfeinstruktur (21 cm Linie, 1.42 GHz)



Abbildung 1: Ortho- und Para-Wasserstoff

Beim Übergang zwischen dem Triplett- und dem Singulett-Zustand wird Strahlung der Frequenz $\nu_H = 1.42 \text{ GHz}$ bzw. der Wellenlänge $\lambda_H = 21.1 \text{ cm}$ ausgesandt, die im Mikrowellenbereich liegt. Beim Aussenden der Strahlung muss der Spin des Elektron gekippt werden, man spricht deshalb von einem Spin-Flip-Übergang. Gemäß den allgemeinen Auswahlregeln für Dipolstrahlung, auf die wir später noch zu sprechen kommen, sind Spin-Flip-Übergänge verboten. Das heißt, die Übergangswahrscheinlichkeit bei Strahlungsemission ist nur über höhere Momente möglich und daher sehr klein. Im Labor kann man deshalb diesen Übergang kaum beobachten, da die Abregung eher durch Stoß stattfindet. Da aber im Weltraum im interstellaren Gas große Mengen an atomarem Wasserstoff vorliegen, wird trotzdem die 21 cm Linie in genügender Intensität ausgesendet, um sie auf der Erde mit empfindlichen Antennen beobachten zu können.¹³ Die Untersuchung der 21 cm Linie spielt in der *Radioastronomie* eine wichtige Rolle, weil ihre Untersuchung Auskunft über die Dichteverteilung, Geschwindigkeiten und Temperatur von Wasserstoffatomen im Universum gibt.

Abbildung 2: Ortho- und Para-Wasserstoff

2. Landé g-Faktor

- (a) z.B. $\mu_l = -g_l \mu_B \frac{\vec{l}}{\hbar}$, d.h. g-Faktoren sind immer Verhältnisse von magnetischem Moment und Drehimpuls.
- (b) $g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$

- Eine Art der Herleitung ist im Haken-Wolf S217ff Kapitel 13.3.5; zum besseren Verständnis sollte jedoch auf $(\vec{\mu}_j)_j$ ein Lot in die Spitze $\vec{\mu}_l - \frac{1}{2}\vec{\mu}_s$ gefällt werden, dann erkennt man 3 rechtwinkelige Dreiecke, wobei 2 gleich sind, daher kommt der Faktor 2 im $|\mu_s|$ Term. Anstatt $|(\vec{\mu}_j)_j| = |\vec{\mu}_l| \cos(l, j) + |\vec{\mu}_s| \cos(s, j) = ..$ sollte man schreiben: $|(\vec{\mu}_j)_j| = |\vec{\mu}_l| \cos(l, j) + 2 \times \frac{1}{2} |\vec{\mu}_s| \cos(s, j) = ..$, der Cosinussatz wird dann im oberen Dreieck genutzt
- Herleitung zum aufgeführten Bild:
Hier ist das Zusammenspiel von Spin \vec{s} und Bahndrehimpuls \vec{l} zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{s} + \vec{l}$ als Vektorgerüst im \vec{B} Feld gezeigt. Der Bahndrehimpuls des Elektrons \vec{l} koppelt mit seinem Spin \vec{s} über die entsprechenden magnetischen Momente zum Gesamtdrehimpuls $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$. $\vec{\mu}_l$ bzw. $\vec{\mu}_s$ sind wegen der negativen Ladung des Elektrons \vec{l} und \vec{s} entgegengesetzt. \vec{l} und \vec{s} präzedieren gemeinsam mit ω_{ls} um \vec{j} . $\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$ weist nicht entgegengesetzt zu \vec{j} , sondern bildet einen Winkel mit der \vec{j} -Achse. $\vec{\mu}_j$ kreiselt daher mit der gleichen Frequenz um \vec{j} wie \vec{l} und \vec{s} . Ein angelegtes B-Feld (erheblich schwächer als das innere Feld (Erhaltung der Spin-Bahnkopplung)) $\rightarrow \vec{j}$ präzediert um die Feldrichtung mit der viel kleineren Larmor-Frequenz ω_j . Vom gesamt magnetischen Moment $\vec{\mu}_j$ wird bei der Wechselwirkung mit \vec{B} nur die auf \vec{j} projizierte Komponente $(\vec{\mu}_j)_j$ wirksam. Die Komponente $(\vec{\mu}_j)_{senkrecht}$ zu \vec{j} mittelt sich durch die schnelle Präzession heraus. Das äussere Magnetfeld ist im Prinzip noch so lange als schwach anzusehen, wie die Kopplung von \vec{l} und \vec{s} zu \vec{j} erhalten bleibt.

Die Wechselwirkung lautet demnach:

$E = -(\vec{\mu}_j)_j \vec{B}$, $(\vec{\mu}_j)_j =$ Komponenten von $\vec{\mu}_j$ in \vec{j} -Richtung
 $(\vec{\mu}_j)_j$ setzt sich aus den entsprechenden Komponenten von $\vec{\mu}_l$ und $\vec{\mu}_s$ zusammen

$$(\vec{\mu}_j)_j = \frac{\vec{\mu}_l \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|} + \frac{\vec{\mu}_s \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|},$$

$$(\vec{\mu}_j)_j |\vec{j}|^2 = (\vec{\mu}_s \cdot \vec{j}) \vec{j} + (\vec{\mu}_l \cdot \vec{j}) \vec{j} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{l} \cdot \vec{j} + 2\vec{s} \cdot \vec{j}) \vec{j}.$$

$$\text{Mit } \vec{\mu} = -\frac{e}{2M_e} \vec{l} \text{ und } \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2M_e} \vec{s}$$

$$\vec{\mu}_l = -\frac{\beta}{\hbar} \vec{l}, \vec{\mu}_s = -g_s \frac{\beta}{\hbar} \vec{l} \text{ mit } g_s = 2$$

$$\text{Wegen } 2\vec{l} \cdot \vec{j} = \vec{j}^2 + \vec{l}^2 - \vec{s}^2 \text{ und } 2\vec{s} \cdot \vec{j} = \vec{j}^2 + \vec{s}^2 - \vec{l}^2$$

$$\text{können wir schreiben } (\vec{\mu}_j)_j |\vec{j}|^2 = -\frac{\beta}{\hbar} \frac{1}{2} (3\vec{j}^2 - \vec{l}^2 + \vec{s}^2) \vec{j}$$

Legen wir für die Verknüpfungen von $(\vec{\mu}_j)_j$ mit \vec{j} den gleichen

Zusammenhang wie bei Bahndrehimpuls und Spin zugrunde
 $(\vec{\mu}_j)_j = -g_j \frac{\beta}{\hbar} \vec{j}$ mit g_j g-Faktor des Gesamtdrehimpulses, dann ist

$$-g_j \frac{\beta}{\hbar} |\vec{j}|^2 = -\frac{\beta}{\hbar} (3\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2) \vec{j}$$

Quantisierung: $\vec{j}^2 \rightarrow j(j+1)\hbar^2, \vec{l}^2 \rightarrow l(l+1)\hbar^2, \vec{s}^2 \rightarrow s(s+1)\hbar^2$.

Daher ist der g-Faktor:

$$g_j = \frac{3j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

(c) $p_{1/2} : l = 1, j = 1/2; s = 1/2 \rightarrow g_j^I = 2/3 \rightarrow \Delta E_{m_j, m_{j-1}}^I = \frac{2\mu_B}{3} |\vec{B}|$

$s_{1/2} : l = 0, j = 1/2; s = 1/2 \rightarrow g_j^{II} = 2 \rightarrow \Delta E_{m_j, m_{j-1}}^{II} = 2\mu_B |\vec{B}|$

Aufspaltung der Zeemann Komponente

Ein bekanntes in der Vorlesung vorgestelltes Beispiel ist die Na D-Linie! Übergänge $2p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2} : 4; 2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2} : 6$

3. Alkaliatome

(a) Die zwischen dem äusseren Elektron (Leuchtelektron) und Kern befindlichen Elektronen schirmen die Kernladung ab (abh. von r, also der Position des Leuchtelektrons auf seiner Bahn.)

→ das effektive Potential ist nicht mehr $\sim \frac{1}{r}$ (verantwortlich für die l-Entartung)

→ l-Entartung aufgehoben.

(b) Vergleich Termschema Alkali- und Wasserstoffatom

Siehe Abbildung 3

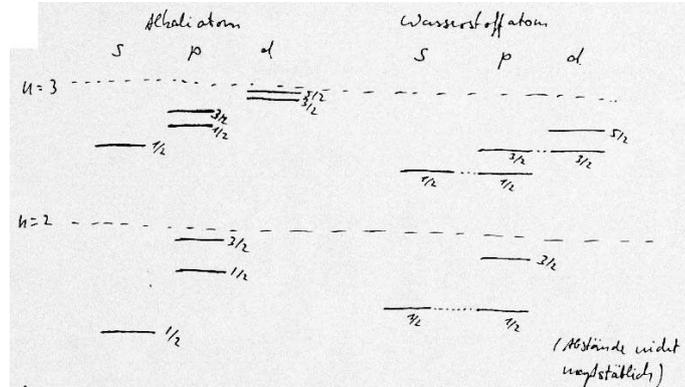


Abbildung 3: Termschema: Alkali- und Wasserstoffatom.

(c) Termschema mit Zeemann-Aufspaltungen

Siehe Abbildung 4

Es handelt sich um einen anomalen Zeemann Effekt, daher wird g_j wie in Aufgabe 2 berechnet.

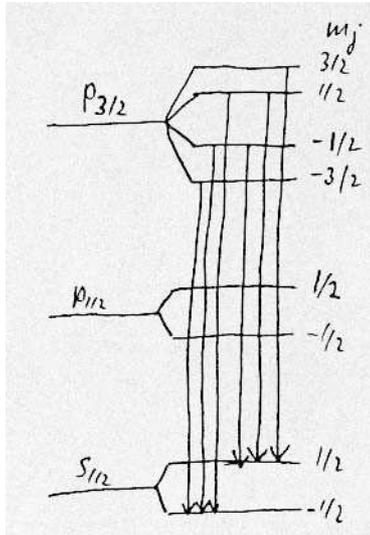


Abbildung 4: Termschema mit Zeemann-Aufspaltungen.

(d) $\Delta E = (E_{p_{1/2}} + \frac{2}{3}m_j\mu_B B) - (E_{s_{1/2}} + 2m'_j\mu_B B) = \Delta E_{p_{1/2} \rightarrow s_{1/2}} + \mu_B B(\frac{2}{3}m_j - 2m'_j) = 16960.88 \frac{1}{cm} + 0.404 \frac{1}{cm}(m_j - 3m'_j)$ mit $\frac{2\mu_B B}{3hc} = 0.404 \frac{1}{cm}$ mit $s_{\frac{1}{2}} : g_j = 2; p_{\frac{1}{2}} : g_j = \frac{2}{3}; p_{\frac{3}{2}} : g_j = \frac{4}{3}$ (siehe auch Aufgabe 2)

m_j	-1/2	-1/2	+1/2	+1/2
m'_j	-1/2	+1/2	-1/2	+1/2
$\Delta E[\frac{1}{cm}]$	+0,404	-0,808	+0,808	-0,404

4. Stark Effekt

- (a) Lichtemission von H-Atomen in einem starken E-Feld eines Kondensators. Stark beobachtete die Aufspaltung der Balmer Serie.
- (b) • linear:
zur Feldstärke proportionale Aufspaltung der Terme mit $l \neq 0$. Tritt aus, wenn l-Entartung durch äusseres Feld und nicht schon durch innere atomare Felder aufgehoben wird: nur bei Wasserstoff, oder Wasserstoffähnlichen Atomen, insb. Rydbergatome
- quadratisch:
zu E^2 proportionale Aufspaltung: $V \sim \alpha E^2$, mit α : Polarisierbarkeit, tritt bei allen anderen Atomen auf (das angelegte E-Feld induziert ein Dipolmoment αE).
- (c) Es werden *sehr hohe* Felder benötigt. (Durchschlaggefahr im Kondensator)
- (d) Elektrisches Feld unterscheidet nicht zwischen m_j und $-m_j$ (Analogie: Wirkung des E-Feldes auf links bzw. rechtsdrehendes Elektron)

im Zeitmittel dasselbe)

$\Rightarrow j+1$ (bei ganzzahligen j) bzw. $j \Rightarrow +\frac{1}{2}$ (bei halbzahligen j) Aufspaltungen.

5. (a) Das Element hat 14 Elektronen \Rightarrow Silizium.
(b) Das Element hat 20 Elektronen \Rightarrow Kalzium.

6. Spektren komplexer Atome

T. Mayer-Kuckuk Kapitel 8.4 Seite 180.

(<http://books.google.com/books?id=EbpshzRJCzsC&pg=PA214&dq=mayer-kuckuk+kernphysik&ei=CBVJSvjFIYzqzATbmqlS&hl=de>)

Hier geht es darum, auch in der Vorlesung nicht besprochene Terme bf anzureissen und zu vervollständigen (siehe Abbildung 5).

7. Erklären Sie die Unterschiede zwischen dem normalen, dem anomalen Zeemann-Effekt und dem Paschen-Back-Effekt!

L: *Zeemann und Paschen Back allgemein: Aufspaltung der Spektrallinien aufgrund der Wechselwirkugn der magnetischen Momente μ_s und μ_l mit einen äußeren Magnetfeld.*

*anomaler Zeemann Effekt : **Schwache Felder; Spin-Bahnkopplung ist noch vorhanden.** Der Anomale ist der quantenmechanisch normale Fall. Normaler Zeemann Effekt: 3 Linien-Aufspaltung; gilt nur für Atome bei denen Elektronen vorhanden sind, deren Spins sich durch Antiparallellstellung gegenseitig zu 0 **kompensieren**, dadurch wird Spin kompensiert, nur Wirkung auf l*

*Paschen Back Effekt: **starke Magnetfelder: Spin-Bahnkopplung aufgelöst**, Spin und Bahn koppeln direkt an B .*

Anomaler und Paschen Back lassen sich quantenmechanisch, störungstechnisch gut brechnen.

*Übungsleiter: Frank Hartmann, Forschungszentrum Karlsruhe,
Tel.: +41 (76) 487 4362; Email: Frank.Hartmann@cern.ch*

www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~hartmann/atom09

Wir wollen uns zunächst klarmachen, welche Beiträge in einer vollständigeren Hamilton-Funktion eigentlich berücksichtigt werden müßten. Für N Elektronen lautet sie

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + V(\vec{r}_1 \vec{s}_1, \vec{r}_2 \vec{s}_2, \dots, \vec{r}_N \vec{s}_N), \quad (8.10)$$

wobei zum Potential V folgende Energien beitragen:

a) Coulomb-Anziehung V_{Ke} zwischen Kern und Elektronen

$$V_{Ke} = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} \quad (8.11)$$

b) Coulomb-Abstoßung V_{ee} zwischen den Elektronen

$$V_{ee} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (8.12)$$

c) Spin-Bahn-Energien

$$V_{sl} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r_i} \frac{dV(r)}{dr_i} (\vec{s}_i \cdot \vec{l}_i) \quad (8.13)$$

d) Spin-Spin-Wechselwirkungen

$$V_{ss} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} \frac{e^2}{m^2} \left[\frac{\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{\sigma}_i \vec{r}_{ij})(\vec{\sigma}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (8.14)$$

e) Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten der Bahndrehimpulse

$$V_{ll} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} (\vec{l}_i \cdot \vec{l}_j) \quad (8.15)$$

f) Elektronspin-Kernspin Wechselwirkung

g) Elektronbahndrehimpuls-Kernspin Wechselwirkung

h) Relativistische Korrekturen

i) Die Antisymmetrie der Wellenfunktion, d. h. die Austauschintegrale.

In die Zentralfeldnäherung gehen die Energien a) (vollständig) und b) (teilweise) ein. Von den restlichen Termen liefern glücklicherweise die meisten so kleine Energien, daß man sie nicht zu berücksichtigen braucht. Wirklich wichtig sind daher nur die folgenden Ergänzungen zum Zentralfeld:

- (1) Die Wirkung des Symmetriecharakters der Raumfunktion auf die Coulomb-Energie (Beitrag i)
- (2) Der nicht im Zentralpotential enthaltene Teil der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen (nicht kugelsymmetrischer Rest von Beitrag b)
- (3) Die Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie, die von zunehmendem Einfluß bei steigendem Z ist (Beitrag c).

Mayer-Kuckuk Kernphysik

Abbildung 5: *Hamilton Terme im Vielelektronenatom.*