

ÜBUNGSAUFGABEN XI

Abgabe am: 19.07.2023, 10:00 Uhr

Aufgabe 1: Hundsche Regeln (3 Punkte)

Bestimmen Sie den Grundzustand für die folgenden Ionen:

- Sm²⁺ [Xe]4f⁶
- Na [Ne]3s¹
- Ti³⁺ [Ar]3d¹

Aufgabe 2: Paschen-Back-Effekt (10 Punkte)

Beachten Sie die zulässigen Übergänge von Natriumdampf, die im Tutorial der letzten Woche beschrieben wurden.

- Wie sieht die Aufspaltung der Natrium-D-Linien bei sehr starkem äußerem Magnetfeld aus? Überlegen Sie sich, welche Kopplung nun aufgehoben ist und wie sich die Niveaus demnach verschieben.
- Skizzieren Sie das Termschema und zeichnen Sie die erlaubten Übergänge ein. Skizzieren Sie auch das Spektrum.
- Wie groß muss das Magnetfeld mindestens sein, um den Paschen-Back-Effekt beobachten zu können?

Aufgabe 3: Hyperfein-Wechselwirkung in ¹⁶⁵Ho³⁺:YSO (7 Punkte)

Holmium (¹⁶⁵Ho³⁺) ist ein Element aus der Gruppe der Lanthanoide (auch als Seltene Erden bezeichnet) und bekannt für seine starke Hyperfein-Wechselwirkung (~10 GHz). Da es sich bei diesem Ion um ein Mehrelektronensystem handelt, ist die gesamte Levelstruktur sehr kompliziert. Wir wollen uns daher hier lediglich auf einen speziellen Übergang zwischen zwei 4f-Niveaus beschränken. Für das freie Ion ist dieser Übergang dipolverboten, wenn die Ionen aber in einen YSO Kristall dotiert werden, wird dieser Übergang schwach erlaubt und zusätzlich die Entartung des Grund- (Z) und ersten angeregten Zustands (Y) aufgehoben. Dies resultiert in mehreren Stark-Zuständen (die Stark Aufspaltung wird durch das Kristallfeld hervorgerufen). Die niedrigsten Zustände sowohl des Grund- als auch ersten angeregten Zustands werden als Pseudo-Duplet bezeichnet, da die Stark Zustände eng beieinander liegen (Z₁/Z₂ und Y₁/Y₂). Wir wollen hier die kürzlich untersuchten Hyperfeinübergänge der Z₁/Z₂ → Y₁/Y₂ Zustände in Kristallposition 2 von ¹⁶⁵Ho³⁺:YSO betrachten (@ 4.2 K, DOI: [10.1103/PhysRevB.103.104109](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.104109)). Solch ein System ist ein potentieller Kandidat für einen Quantenspeicher oder Quantenkommunikationsgeräte mit hoher Bandbreite. Der Kernspin von ¹⁶⁵Ho³⁺ beträgt $I = 7/2$.

- Das untenstehende Diagramm zeigt alle erlaubten Hyperfein-Übergänge ohne Magnetfeld (Fig.2 im Paper). In diesem Falle ist die Hyperfein-Quantenzahl F keine gute Quantenzahl mehr, weshalb die Zustände mit der Quantenzahl m_I bezeichnet werden. Lesen Sie aus dem Diagramm die Auswahlregeln für die Quantenzahl m_I ab und markieren Sie jeden Zustand mit dem entsprechenden Wert von m_I . Beachten Sie, dass die y-Achse in der Einheit Wellenzahl (cm^{-1}) gegeben ist.

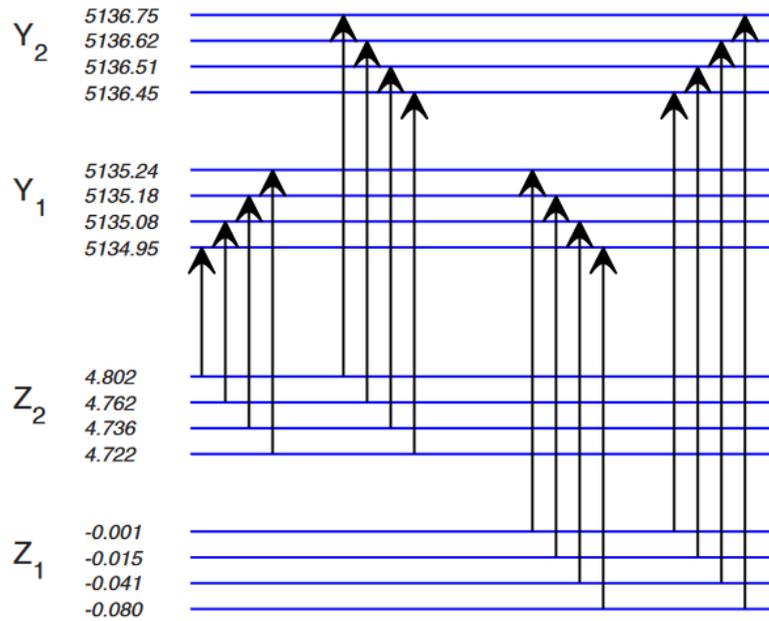


FIG. 2. Calculated hyperfine energy level structure for Site 2 of $\text{Ho}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$. Vertical arrows show the strong transitions between Z_1 - Z_2 and Y_1 - Y_2 .

- b) Zeichnen Sie das Absorptionsspektrum, welches aus diesen erlaubten Übergängen resultiert. Diskutieren Sie die Eigenschaften des Graphs.
Hinweis: verwenden Sie eine Lorentz-Kurve für jeden Übergang mit einer Halbwertsbreite von $FWHM = 0.07\text{cm}^{-1}$. Sie dürfen hierzu ein Computerprogramm wie z.B. Python verwenden und den Code an die Aufgabe anhängen.
- c) Vergleichen Sie Ihr Spektrum mit demjenigen aus dem Paper Fig. 1a). Kommentieren Sie die Unterschiede und die möglichen Gründe dafür.