

Atom & Molekülphysik

FSU Jena - WS 2008/2009

Serie 04 - Lösungen

Stilianos Louca

27. November 2008

Aufgabe 01

- a) Es seien E_n^0, Ψ_{nlm}^0 bzw. E_n^1, Ψ_{nlm}^1 jeweils die Energie des n -ten Zustands Ψ_n^0 im ungestörten Fall bzw. Ψ_n^1 in 1. Näherung im gestörten Fall. Betrachten den Hamilton-Operator des Systems

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r}}_{\mathcal{H}^0} - \underbrace{\frac{P^4}{8m^3c^2}}_{\mathcal{H}^k} = \mathcal{H}^0 - \mathcal{H}^k$$

der sich zusammensetzt aus dem ungestörten Hamiltonian \mathcal{H}^0 und einer Korrektur \mathcal{H}^k . Dabei ist

$$\mathcal{H}^k = \frac{P^4}{8m^3c^2} = \frac{1}{8m^3c^2} [P^2]^2 = \frac{1}{2mc^2} \left[\mathcal{H}^0 + \frac{e^2}{r} \right]^2 \quad (1)$$

und

$$E_n^0 = \langle \Psi_n^0, \mathcal{H}^0 \Psi_n^0 \rangle = -\frac{e^2}{2n^2a_0} \quad (2)$$

Es ergibt sich in erster Näherung

$$\begin{aligned} E_n^1 &\approx E_n^0 - \langle \Psi_n^0, \mathcal{H}^k \Psi_n^0 \rangle \stackrel{(1)}{=} E_n^0 - \frac{1}{2mc^2} \left[\underbrace{\langle \Psi_n^0, \mathcal{H}^{0^2} \Psi_n^0 \rangle}_{E_n^{0^2}} + e^4 \left\langle \Psi_{nl}^0, \frac{1}{r^2} \Psi_{nl}^0 \right\rangle + e^2 \underbrace{\left\langle \Psi_n^0, \mathcal{H}^0 \frac{1}{r} \Psi_n^0 \right\rangle}_{\langle \mathcal{H}^0 \Psi_n^0, \frac{1}{r} \Psi_n^0 \rangle} + e^2 \underbrace{\left\langle \Psi_n^0, \frac{1}{r} \mathcal{H}^0 \Psi_n^0 \right\rangle}_{E_n^0 \langle \Psi_n^0, \frac{1}{r} \Psi_n^0 \rangle} \right] \\ &= E_n^0 - \frac{1}{2mc^2} \left[E_n^{0^2} + \frac{2e^4}{n^3(2l+1)a_0^2} + \frac{2e^2 E_n^0}{n^2 a_0} \right] \stackrel{(2)}{=} E_n^0 - \underbrace{\frac{E_n^{0^2}}{2mc^2} \left[\frac{4n}{(l+\frac{1}{2})} - 3 \right]}_{E_R} \end{aligned}$$

Bemerkung: Für den (ungestörten) Grundzustand Ψ_n^0 gilt klassisch betrachtet

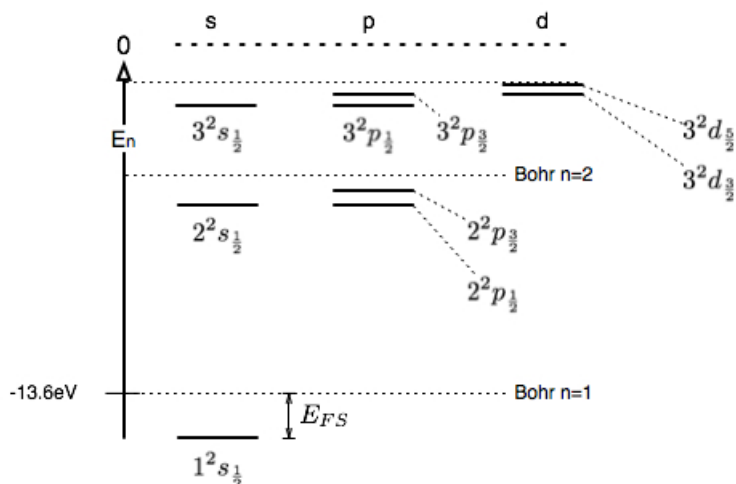
$$\frac{p^4}{8m^3c^2} = \frac{(2mE_n^0)^2}{8m^3c^2} \approx 2.9 \times 10^{-23} \text{ J} \ll 2.2 \times 10^{-18} \text{ J} \approx \left| \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \right|$$

das heißt eine Näherung 1. Ordnung ist halbwegs gerechtfertigt.

- b) Für $n = 1, 2, 3$ ergeben sich die Energieniveaus E_n , die Feinstrukturkorrektur E_{FS} und die Entartung (inklusive Spinzustandsvielfalt) entsprechend

n	j	E_{FS} [eV]	E_n [eV]	Entartung
1	1/2	-0.0001810	-13.598471	2
2	1/2	-0.0000566	-3.399629	5
2	3/2	-0.0000113	-3.399584	3
3	1/2	-0.0000201	-1.510941	5
3	3/2	-0.0000067	-1.510928	8
3	5/2	-0.0000022	-1.510923	5

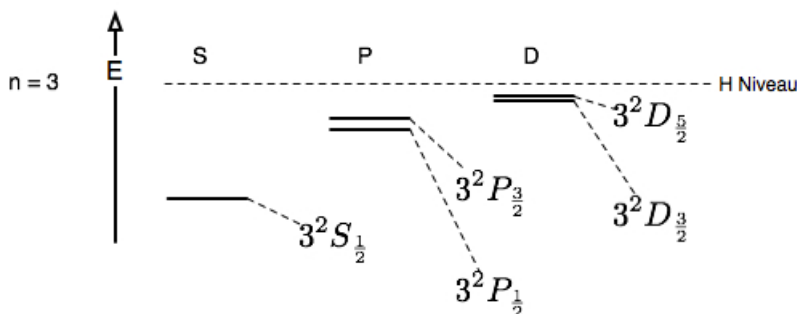
Im folgenden ist das entsprechende Termschema zu sehen.



Wie zu erkennen ist, existiert für $n = 1$ keine Feinstrukturaufspaltung, da kein Bahndrehimpuls vorhanden ist. Für $n = 2$ ergibt sich eine Aufspaltung zwischen $2^2 P_{\frac{1}{2}}$ und $2^2 P_{\frac{3}{2}}$ von etwa 4.53×10^{-5} eV.

Aufgabe 02

Zu betrachten wäre beim Na-Atom sowohl die Kernabschirmung (Korrektur durch Quantendefekt) als auch die Feinstrukturaufspaltung. Dabei ist letztere im Vergleich zur, aufgrund des nicht-wasserstoffatomartigen Potentials zustande kommenden, Energieaufspaltung zwischen den 3S,3P und 3D Niveaus um Größenordnungen kleiner.



Bei wachsender Drehimpulsquantenzahl l ist eine Annäherung der Energieniveaus an den dem Wasserstoffatom entsprechenden Energiewert zu erkennen. Dies lässt sich auf die Tatsache, dass für wachsende Entfernungen des Elektrons vom Kern, das Feld des letzteren immer mehr dem eines einzelnen Protons entspricht, zurückführen. Diese Energiekorrektur ist gegeben durch

$$\Delta E_Z = E_n^{\text{Na}} - E_n^{\text{H}} = hc \left[\frac{R_{\text{Na}}}{n_{\text{eff}}^2} - \frac{R_{\text{H}}}{n^2} \right], \quad n_{\text{eff}} := n - \Delta(n, l)$$

wobei sich R_{Na} von R_{H} nur geringfügig unterscheidet (andere reduzierte Masse). Geht man z.B. bei 3S von einem Quantendefekt von etwa $\Delta(3, 0) \approx 1.37$ aus, so ergibt sich eine Verschiebung des Niveaus bzgl. dem des H-Atoms um etwa

$$\Delta E_Z = \sum_{l=0}^{n-3} \approx -3.607 \text{ eV}$$

Andererseits entsteht die Feinstrukturaufspaltung der Niveaus 3P und 3D unter anderem durch die Spin-Bahn Kopplung des Elektrons und entspricht den beiden Spin-Orientierungen bzgl. des Bahndrehimpulses \vec{l} . Sie ist gegeben durch

$$\Delta E_{\text{FS+R}} = -\frac{R_{\text{Na}} hc}{n_{\text{eff}}^4} \cdot (Z\alpha)^2 \cdot \left[\frac{n_{\text{eff}}}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] = \frac{E_n^{\text{Na}}}{n_{\text{eff}}^2} \cdot (Z\alpha)^2 \cdot \left[\frac{n_{\text{eff}}}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right]$$

Zu erkennen ist dass deren Einfluss bei wachsendem l geringer wird. Deren Größenordnung liegt in etwa 1×10^{-3} eV.

Aufgabe 03

- a) Die Matrixdarstellung eines linearen Operators T auf dem Hilbertraum $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ in der Basis $\{\psi_i\}_i$ ist (per Definition der Matrix) gegeben durch

$$T_{ij} = \psi_i^*(T\psi_j) \cong (T\psi_j)^i \quad \text{mit} \quad T\psi_j =: \sum_i (T\psi_j)^i \psi_i \quad (3)$$

mit den entsprechenden Dualen ψ_i^* .

- b) Aus Gleichung 3 folgt: Ist $\{\psi_i\}_i$ außerdem Basis aus Eigenvektoren von T zu Eigenwerten λ_i so ist

$$T_{ij} = (\lambda_j \psi_j)^i = \delta_{ij} \lambda_j$$

Speziell in unserem Fall ist somit

$$(S_z^{ij}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (S_{ij}^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- c) Aus Gleichung 3 folgt sofort

$$(S_+) = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (S_-) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}$$

Per Konstruktion ist

$$(S_x) = \frac{1}{2} (S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_1}, \quad (S_y) = \frac{1}{2i} (S_+ - S_-) = \frac{\hbar}{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_2}$$

wobei σ_1 und σ_2 genau die ersten 2 Pauli-Matrizen sind!