

# Atom & Molekülphysik

FSU Jena - WS 2008/2009

Serie 06 - Lösungen

Stilianos Louca

8. August 2010

## Aufgabe 01

Es bezeichne  $F$  das Elektrische Feld.

Die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators  $\mathcal{H}_0$  beim  $l$ -entarteten H-Atoms sind gegeben durch

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

mit

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]}} \cdot e^{-r/na_0} \cdot \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \cdot \underbrace{L_{n-l-1}^{2l+1}}_{\text{Zugeordnetes Laguerre-Polynom}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \underbrace{\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}}_{N_{lm}} \cdot \underbrace{P_l^m(\cos \vartheta)}_{\text{zugeordnetes Legendre-Polynome}} e^{im\varphi}$$

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

a) Für zwei beliebige Zustände  $\Psi_{nlm}, \Psi_{n'l'm'}$  gilt

$$\langle \Psi_{n'l'm'}, \mathcal{H}_s \Psi_{nlm} \rangle = eF \int_{\mathbb{R}^3} z \Psi_{n'l'm'}^*(\vec{r}) \Psi_{nlm}(\vec{r}) d^3r = eF \underbrace{\int_0^\infty R_{n'l'}^*(r) R_{nl}(r) r^3 dr}_{\Omega_{n'l'nl}} \cdot \int_{S^2} Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cos \vartheta dS$$

$$= eF \Omega_{n'l'nl} N_{l'm'} N_{lm} \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos \vartheta \sin \vartheta \cdot P_{l'm'}^*(\cos \vartheta) P_{lm}(\cos \vartheta) e^{-im'\varphi} e^{im\varphi} d\vartheta d\varphi$$

$$P_{l'm' \in \mathbb{R}} \frac{eF}{2} \Omega_{n'l'nl} N_{l'm'} N_{lm} \cdot \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \cdot \int_0^\pi \sin(2\vartheta) \cdot P_{l'm'}(\cos \vartheta) P_{lm}(\cos \vartheta) d\vartheta$$

Zu erkennen ist:

- Ist  $m \neq m'$  so ist  $\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = 0$  und somit auch  $\langle \Psi_{n'l'm'}, \mathcal{H}_s \Psi_{nlm} \rangle = 0$ .

- Ist  $(l', m') = (l, m)$  so ist

$$P_{l'm'}(\cos \vartheta) P_{lm}(\cos \vartheta) = P_{lm}^2(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^{2l}(l!)^2} \underbrace{(1 - \cos^2 \vartheta)^m}_{\text{symmetrisch um } \vartheta = \frac{\pi}{2}} \left[ \underbrace{\frac{d^{l+m}}{d(\cos \vartheta)^{l+m}} (\cos^2 \vartheta - 1)^l}_{\text{symmetrisch um } \vartheta = \frac{\pi}{2}} \right]^2$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{antisymmetrisch oder symmetrisch um } \frac{\pi}{2} \text{ je nach } j+m}$   
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{symmetrisch um } \vartheta = \frac{\pi}{2}}$

symmetrisch um  $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ . Da jedoch  $\sin(2\vartheta)$  um  $\vartheta = \frac{\pi}{2}$  antisymmetrisch ist, verschwindet das entsprechende Integral über  $[0, \pi]$ .

Somit ist  $\langle \Psi_{n'l'm'}, \mathcal{H}_s \Psi_{nlm} \rangle \neq 0$  höchstens dann wenn

$$\boxed{m = m' \wedge l \neq l'} \quad (1)$$

**Speziell** für  $n = 2$  ist (1) nur für

$$(l', m', l, m) \in \{(0, 0, 1, 0), (1, 0, 0, 0)\}$$

erfüllt. Insbesondere ist

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{200}, \mathcal{H}_s \Psi_{210} \rangle &= \frac{eF}{32a_0^3 \pi} \cdot \int_0^\infty \left(\frac{r}{a_0}\right) \left(-\frac{r}{a_0} + 2\right) e^{-r/a_0} r^3 dr \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \\ &= \frac{eF}{24a_0^4} \underbrace{\int_0^\infty \left(2r^4 - \frac{r^5}{a_0}\right) e^{-r/a_0} dr}_{-72a_0^5} = -3a_0 eF \stackrel{\mathcal{H}_s^\dagger = \mathcal{H}_s}{=} \langle \Psi_{210}, \mathcal{H}_s \Psi_{200} \rangle \end{aligned}$$

so dass sich die Störmatrix ergibt als

b) Nach Teil (a) ergibt sich die Störmatrix gemäß

$$S = -3a_0 eF \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Da  $\det S = 0$  ist klar dass  $\mathcal{E}_0 = 0$  ein Eigenwert ist. Da  $\text{rang } S = 2$  ist, ist  $\dim \text{kernel } S = \dim E_{\mathcal{E}_0}(S) = 2$ . Tatsächlich spannen

$$\Psi_0 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_1 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

den gesamten Nullraum von  $S$  auf. Durch scharfes hinschauen erkennt man analog dass

$$\Psi_2 := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Psi_3 := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

jeweils (normierte) Eigenzustände zu  $\mathcal{E}_1 := -3a_0 eF$  und  $\mathcal{E}_2 := 3a_0 eF$  sind. Die vier Eigenzustände bzw. Eigenenergiekorrekturen entsprechen jeweils den Zuständen

$$\Psi_{211}, \Psi_{21-1}, \Psi_+ := \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{210} + \Psi_{200}], \quad \Psi_- := \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{210} - \Psi_{200}]$$

bzw. Energiekorrekturen (1. Ordnung)

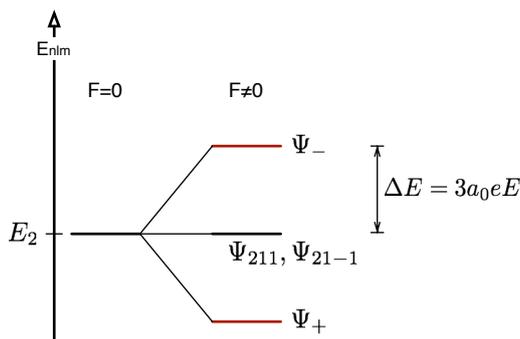
$$\Delta E_0 = \Delta E_1 = 0, \quad \Delta E_2 = -3a_0 eF, \quad \Delta E_3 = 3a_0 eF$$

c) Die durch das  $E$ -Feld  $F$  entstehenden Energieniveaus sind Tabelle 1 zu entnehmen.

Zustand	Energie
$\Psi_{211}$	$E_2$
$\Psi_{21-1}$	$E_2$
$\Psi_+$	$E_2 - 3a_0eE$
$\Psi_-$	$E_2 + 3a_0eE$

**Tabelle 1:** Zur Aufspaltung der Energieniveaus. Ungestörter Energieeigenwert beträgt  $E_2 = -\frac{e^2}{8a_0}$

Das entsprechende Termschema ist illustriert in Abbildung 1.



**Abbildung 1:** Termschema für  $n = 2$  bei äußerem Elektrischem Feld  $F$

## Aufgabe 02

a) Das magnetische Dipolmoment eines Kerns ist gegeben durch

$$\mu = g \frac{e}{2m_p} \mathbf{I}$$

mit dem Kernspin  $\mathbf{I}$  und dem gyromagnetischen Verhältnis  $g$ , bzw.

$$\mu_z = g \frac{e}{2m_p} I_z = g \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_p}}_{\mu_N} m_I, \quad -I \leq m_I \leq I$$

wobei  $\mu_N \approx 5.0508 \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$  das Kern-Magneton ist. Die Energie die dem Kern im Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\vec{e}_z$  bei einem bestimmten  $m_I$  entspricht ist demnach gegeben durch

$$U_{m_I} = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B = -g m_I \mu_N B$$

Nach der Boltzman-Verteilung der Kernenergien im thermischen Gleichgewicht ergeben sich die Orientierungswahrscheinlichkeitsverhältnisse gemäß

$$\begin{aligned} \frac{P_{m_I}}{P_{m'_I}} &= \frac{e^{-U_{m_I}/kT}}{e^{-U_{m'_I}/kT}} = \frac{e^{m_I \cdot g \mu_N B / kT}}{e^{m'_I \cdot g \mu_N B / kT}} = e^{g \mu_N B (m_I - m'_I) / kT} \\ \Rightarrow P_{m_I} - P_{m'_I} &= \frac{1 - e^{g \mu_N B (m_I - m'_I) / kT}}{1 + e^{g \mu_N B (m_I - m'_I) / kT}} \end{aligned}$$

**Speziell** für in 1 l Wasser enthaltene ( $\approx 3.346 \times 10^{25}$ ) H-Atome ist  $I = 1/2$  so dass sich bei einer Temperatur  $T \approx 293$  K, einer Feldstärke  $B = 2 \times 10^{-5}$  T mit  $g \approx 5.58$  eine Differenz zwischen Nord- und Süd-Ausrichtungen von

$$N_{\text{Nord}} - N_{\text{Sd}} = N \cdot \left( P_{\frac{1}{2}} - P_{-\frac{1}{2}} \right) \approx 4.54 \times 10^{15}$$

ergibt. Die Ausrichtung ist praktisch gleichverteilt.

b) Das transversal schwingende Feld  $B_y = B_y^0 \cos(\omega t)$  induziert im Fall der Resonanz

$$\omega = \omega_R = g_i \frac{\mu_i}{\hbar} B_z, \quad i \in \{p, e\}$$

eine Rotation der Spin-Erwartungswerte mit der Frequenz

$$2\Omega = \frac{\mu_i g_i}{\hbar} B_y^0$$

Eine  $90^\circ$  Drehung findet z.B. für eine Pulszeit

$$2\Omega t = \frac{\pi}{2} \Rightarrow t = \frac{\pi}{4\Omega} = \frac{\pi \hbar}{2\mu_i g_i B_y^0}$$

statt. Speziell in unserem Fall wäre für Proton bzw. Elektron:

$$t_p \approx 1.176 \times 10^{-6} \text{ s}, \quad t_e \approx 1.78 \times 10^{-6} \text{ s}$$

### Aufgabe 03

a) Wie schon aus der Vorlesung bekannt, bleiben beim anomalen Zeeman Effekt Spin und Bahndrehimpuls gekoppelt, und präzedieren gemeinsam mit der Frequenz  $\omega_{l_s}$  um den resultierenden Gesamtdrehimpuls  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ . Spin und Bahndrehimpuls erzeugen jeweils die magnetischen Momente

$$\vec{\mu}_l = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{l}, \quad \vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s}$$

deren Summe  $\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$  jedoch aufgrund der unterschiedlichen  $g_l, g_s$  nicht genau antiparallel zu  $\vec{j}$  ist, sondern präzediert vielmehr auch mit der gleichen Frequenz  $\omega_{l_s}$  um  $\vec{j}$ . Was effektiv von  $\vec{\mu}_j$  messbar ist, ist seine Projektion  $(\vec{\mu}_j)_j$  auf  $\vec{j}$ . In einem äußeren Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\vec{e}_z$  ist dann das Potential gegeben durch

$$W_{\text{magn}} = -(\vec{\mu})_j \cdot \mathbf{B} = -(\vec{\mu}_j)_{j,z} \cdot B \quad (2)$$

wobei  $(\vec{\mu}_j)_{j,z}$  wiederum die Projektion von  $(\mu_j)_j$  auf die z-Achse ist. Aus Vektoralgebraischen Überlegungen ergibt sich

$$(\vec{\mu}_j)_j = \vec{\mu}_l \frac{\vec{j}}{\|\vec{j}\|} \cdot \frac{\vec{j}}{\|\vec{j}\|} + \vec{\mu}_s \frac{\vec{j}}{\|\vec{j}\|} \cdot \frac{\vec{j}}{\|\vec{j}\|} = -\frac{\mu_B}{\hbar \|\vec{j}\|^2} \left( g_l (\vec{l}\vec{j}) + g_s (\vec{s}\vec{j}) \right) \vec{j} \quad (3)$$

Nach dem cos-Satz ist

$$2\vec{l}\vec{j} = \|\vec{l}\|^2 + \|\vec{j}\|^2 - \|\vec{s}\|^2, \quad 2\vec{s}\vec{j} = \|\vec{s}\|^2 + \|\vec{j}\|^2 - \|\vec{l}\|^2$$

so dass eingesetzt in Gl. 3 und darauf folgend in Gl. 2 folgt

$$W_{\text{magn}} = \frac{\mu_B}{2\hbar \|\vec{j}\|^2} B \cdot \left[ g_l \left( \|\vec{l}\|^2 + \|\vec{j}\|^2 - \|\vec{s}\|^2 \right) + g_s \left( \|\vec{s}\|^2 + \|\vec{j}\|^2 - \|\vec{l}\|^2 \right) \right] \cdot \underbrace{j_z}_{m_j \hbar} \quad (4)$$

Setzt man nun speziell  $g_l = 1, g_s = 2$  so lautet Gl. 4:

$$W_{\text{magn}} = m_j \mu_B B \cdot \underbrace{\frac{1}{2\|\vec{j}\|^2} \left[ -\|\vec{l}\|^2 + 3\|\vec{j}\|^2 + \|\vec{s}\|^2 \right]}_{g_j}$$

also

$$g_j = \frac{3j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (5)$$

b) Das Feld  $\mathbf{B} = B\vec{e}_z$  sei o.B.d.A in  $z$ -Richtung gerichtet. Dann spaltet jeder Zustand  $(n, j, l)$  in  $2j + 1$  Energieniveaus auf, deren Energien sich vom ursprünglichen Wert um

$$\Delta E^Z = m_j g_j \mu_B B, \quad -j \leq m_j \leq j, \quad g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

unterscheiden, vgl. Tabelle 2.

$n^{2s+1}L_j$	$m_j$	$E_{nlj}^{FS}$	$\Delta E^Z [\mu_B B]$
$3^2S_{\frac{1}{2}}$	-1/2	-1	
$3^2S_{\frac{1}{2}}$	1/2	+1	
$3^2P_{\frac{1}{2}}$	-1/2	-1/3	
$3^2P_{\frac{1}{2}}$	1/2	1/3	
$3^2P_{\frac{3}{2}}$	-3/2	-2	
$3^2P_{\frac{3}{2}}$	-1/2	-2/3	
$3^2P_{\frac{3}{2}}$	1/2	+2/3	
$3^2P_{\frac{3}{2}}$	3/2	+2	

**Tabelle 2:** Zum Zeeman-Effekt im Na-Atom für  $n = 3$

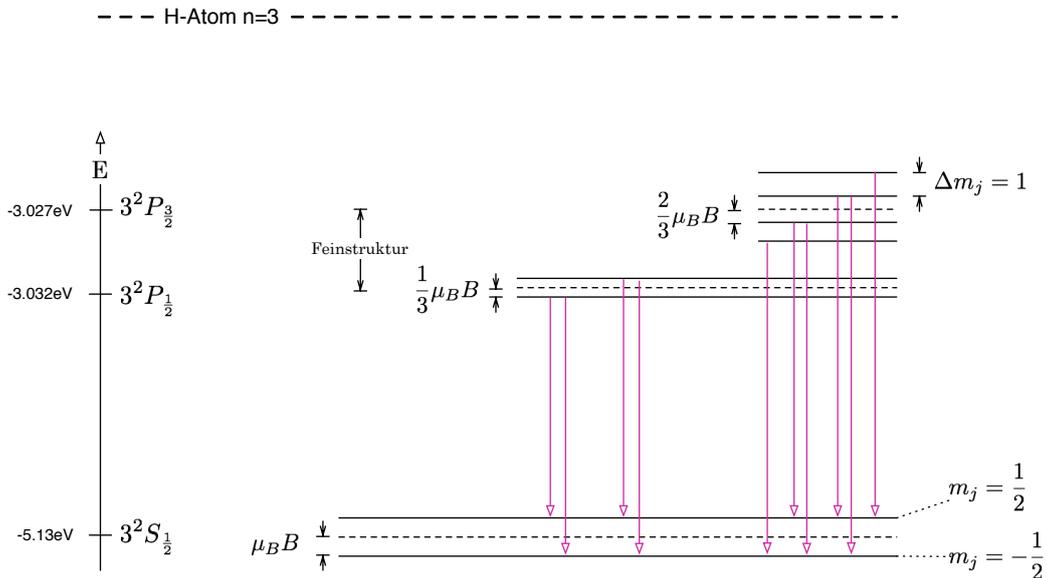
Diese Aufspaltung findet dabei zusätzlich zu der schon vorhandenen Feinstrukturaufspaltung statt, nach der dem Zustand  $(n, l, j)$  jeweils die Energie

$$E_{nlj}^{FS} = E_{n_{\text{eff}}} + \frac{E_{n_{\text{eff}}}}{n_{\text{eff}}^2} (\alpha Z)^2 \left[ \frac{n_{\text{eff}}}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right], \quad n_{\text{eff}} = n - \underbrace{\Delta(n, l)}_{\text{Quantendefekt}}$$

entspricht. Dabei gelten bei Dipolübergängen stets die Auswahlregeln

$$\Delta m_j = 0, \pm 1, \quad \Delta l = \pm 1$$

Das entsprechende Termschema ist in Abbildung 2 zu sehen.



**Abbildung 2:** Termschema des Na-Atoms bei  $n = 3$  unter Feinstrukturaufspaltung & Zeeman Effekt. Gestrichelte Linien sind nicht existente, allein durch die Feinstruktur entstehende Niveaus.