Aufgabe 1

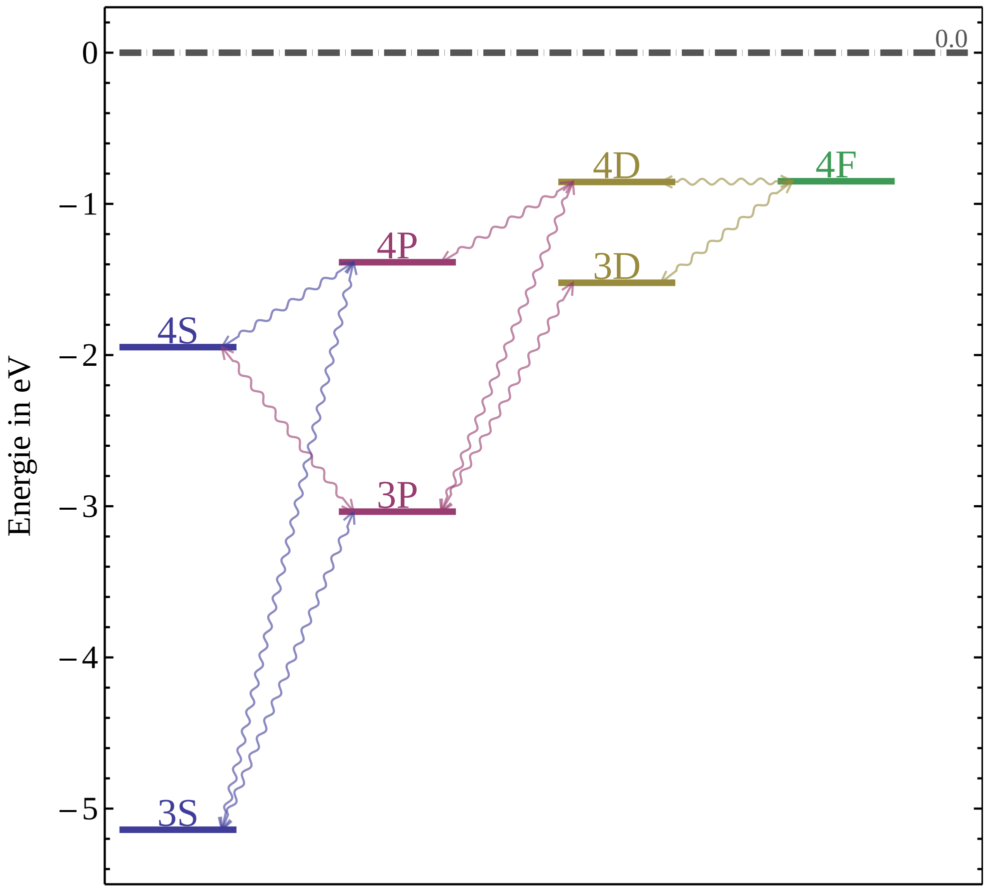
a)

Für Natrium gilt: $E_{n,l} = -hcR_\infty \cdot \frac{1}{n_{eff}^2}, n_{eff} = n - \Delta(n,l)$

Tabelle 1: Die Werte der Quantendeffekte und die dazugehörigen Energien

$\Delta(n,l)$	n=3	n=4
l=0; s	1,373	1,357
l=1; p	0,883	0,867
l=2; d	0,010	0,011
l=3; f	–	0,000

$E_{n,l}$ (eV)	n=3	n=4
l=0; s	-5,13979	-1,94772
l=1; p	-3,03584	-1,38612
l=2; d	-1,52187	-0,855052
l=3; f	–	-0,850356



b)

Für die Spin-Bahn-Kopplung gilt:

$$\Delta E = a\frac{\vec{l}\cdot\vec{s}}{\hbar^2} = \frac{a}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right], j = l + s$$

Ziel: Berechnung der Energie des $3^2P_{1/2}$ und $3^2P_{3/2}$ Niveaus ausgehend vom $3D$ Niveau mithilfe der Übergangsenergie, anschließend Berechnung der Spin-Bahn-Kopplung sowie Berechnung der Energie des

Grundzustandes.
Die Wellenlängenenergie ist: $E = \frac{hc}{\lambda}$
Die $\Delta(n,l)$ lassen sich ausgehend von folgender Gleichung berechnen: $(n - \Delta(n,l))^2 = -\frac{hcR_\infty}{E_{n,l}}$ Obwohl die Quadratische Gleichung zwei Lösungen liefern wird, ist nur die Lösung, welche kleiner als n selbst ist, interessant.
Es folgt:

$$\begin{aligned}
E_{3d} &= -1{,}52187\,\mathrm{eV}, \\
E_{818{,}3256\,\mathrm{nm}} &= 1{,}5151\,\mathrm{eV},\ E_{819{,}4824\,\mathrm{nm}} = 1{,}5129\,\mathrm{eV} \\
E_{3^2P_{1/2}} &= E_{3d} - E_{818{,}3256\,\mathrm{nm}} = -3{,}02684\,\mathrm{eV} \\
E_{3^2P_{3/2}} &= E_{3d} - E_{819{,}4824\,\mathrm{nm}} = -3{,}02467\,\mathrm{eV} \\
E_{589{,}593\,\mathrm{nm}} &= 2{,}10288\,\mathrm{eV},\ E_{588{,}996\,\mathrm{nm}} = 2{,}10501\,\mathrm{eV} \\
\text{Variante 1: } E_{3^2S_{1/2}} &= E_{3^2P_{1/2}} - E_{589{,}593\,\mathrm{nm}} = -5{,}1297\,\mathrm{eV} \\
\text{Variante 2: } E_{3^2S_{1/2}} &= E_{3^2P_{3/2}} - E_{588{,}996\,\mathrm{nm}} = -5{,}1297\,\mathrm{eV},\ \Delta(3,0) = 1{,}3714
\end{aligned}$$

Wie man anhand der Formel für ΔE erkennt, ist $\Delta E(l = 2, s = \frac{1}{2}) = \Delta E(l = 2, s = -\frac{1}{2})$, daraus folgt, dass der entartete Zustand ohne Spin-Bahn-Kopplung genau zwischen den beiden Niveaus liegt. Entsprechend folgt für die Energie aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung:

$$\Delta E(l = 2, s = \pm\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\left|E_{3^2P_{1/2}} - E_{3^2P_{3/2}}\right| = -0{,}00213874\,\mathrm{eV}$$

Daraus folgt für den Zustand $3P$:

$$E_{3p} = -3{,}02577\,\mathrm{eV} \to \Delta(3,1) = 0{,}87948$$

Außerdem kann man ablesen, dass der 3P Zustand um $\Delta E = 1{,}51403\,\mathrm{eV}$ verschoben ist, und der 3S Zustand um $\Delta E = 3{,}61796\,\mathrm{eV}$, vergleicht man dies mit der Spin-Bahn-Kopplungsenergie erkennt man, dass letztere um vier Größenordnungen kleiner ist.

Aufgabe 2

a)

$$\mathrm{H} = \mathrm{H}_0 + \mathrm{H}',\ \ \mathrm{H}' = -\frac{\mathrm{p}^4}{8m^3c^2}$$

Berechne $\Delta E =< \psi_n^0|\mathrm{H}'|\psi_n^0 >$ in Ortskoordinaten: $\vec{p} = -i\hbar\nabla, \psi_{n,l,m} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta\varphi)$

$$\Delta E =< \psi_{n,l,m}|\mathrm{H}'|\psi_{n,l,m} >= -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\int \psi^\dagger_{n,l,m}\nabla^4\psi_{n,l,m}\,\mathrm{d}^3r$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{H}_0 = \frac{\mathrm{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \to \frac{\mathrm{p}^2}{2m} &= \mathrm{H}_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\
\frac{\mathrm{p}^4}{4m^2} &= \left(\mathrm{H}_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)^2 \\
\frac{\mathrm{p}^4}{4m^2} = \frac{\hbar^4\nabla^4}{4m^2} &= \mathrm{H}_0^2 + 2\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\mathrm{H}_0 + \frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 r^2}
\end{aligned}$$

Setzt man dies ein kommt man auf:

$$\Delta E = -\frac{1}{2mc^2}\int \psi^\dagger_{n,l,m}\left(\mathrm{H}_0^2 + 2\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\mathrm{H}_0 + \frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2 r^2}\right)\psi_{n,l,m}\,\mathrm{d}^3 r$$
$$\Delta E = \frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 + 2E_n\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{n^2 a_0} + \frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2}\frac{2}{n^3(2l+1)a_0^2}\right)$$

Mithilfe von $E_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0\cdot n^2}$, sowie folgt:

$$\Delta E = -\frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 - 4E_n^2 + \underbrace{\frac{e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2}\frac{1}{4n^4a_0^2}}_{E_n^2}\frac{8n}{(2l+1)}\right)$$
$$\Delta E = -\frac{1}{2mc^2}E_n^2\left(-3 + \frac{4n}{(l+\frac{1}{2})}\right)$$
$$\Delta E = \frac{2}{mc^2}E_n^2\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{(l+\frac{1}{2})}\right)$$

Die Feinstrukturkonstante lautet: $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{c\hbar}$ und der Bohrsche Radius $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$, umstellen liefert:

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar c}{e^2}\cdot\frac{\hbar}{m_e c} = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{m_e c}$$
$$E_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0\cdot n^2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c\hbar}\cdot\frac{c\hbar}{2a_0\cdot n^2} = -\alpha\cdot\frac{c\hbar}{2a_0\cdot n^2} = -\alpha^2\frac{m_e c^2}{2n^2}$$

Somit folgt schließlich:

$$\Delta E = -\frac{\alpha^2 E_n}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{(l+\frac{1}{2})}\right)$$

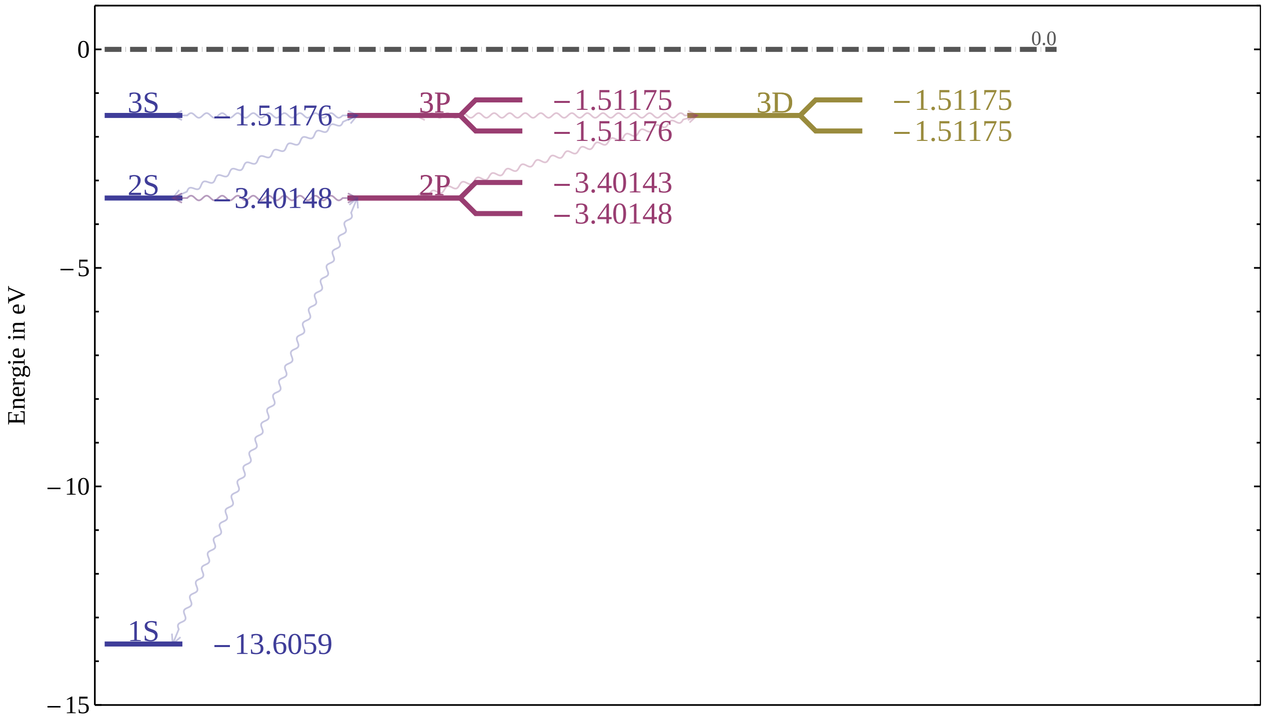
b)

Für die gesamte Feinstrukturkorrektur gilt: $E_{FS} = \frac{\alpha^2 E_n}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)$ mit $j = l + s$. Damit ergibt sich die Gesamtenergie:

$$E(n,j) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0\cdot n^2} + \frac{\alpha^2 E_n^0}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)$$
$$E(n,j) = -E_n^0\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

Die Berechnungen für die Feinstrukturaufspaltung ergibt:

$$1S_{1/2}:\quad E_{FS} = -1{,}8113\cdot 10^4\,\mathrm{eV} \qquad 2S_{1/2}:\quad E_{FS} = -0{,}566032\cdot 10^4\,\mathrm{eV}$$
$$2P_{1/2}:\quad E_{FS} = -0{,}566032\cdot 10^4\,\mathrm{eV} \qquad 2P_{3/2}:\quad E_{FS} = -0{,}113206\cdot 10^4\,\mathrm{eV}$$


0.0
0
−5
−10
−15
Energie in eV
3S
−1.51176
2S
−3.40148
1S
−13.6059
3P
−1.51175
−1.51176
2P
−3.40143
−3.40148
3D
−1.51175
−1.51175