7. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2021

Prof. H. Weinfurter, Dr. L. Knips

Aufgabe 21 **Kopplung von Drehimpulsen und Landé-Faktor**

Wir betrachten allgemein zwei Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{S}}$ mit Eigenzuständen $|l, m_l\rangle$ und $|s, m_s\rangle$ zu $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ bzw. $\hat{S}^2$, $\hat{S}_z$. Wir definieren einen kombinierten Drehimpuls $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, mit Eigenzuständen $|j, m_j\rangle$ zu $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$, welche Linearkombinationen aus $|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$ sind. Für feste Quantenzahlen l und s sollen die Eigenschaften des Produktraums und des Operators untersucht werden.

a) Die Zusammensetzung der Drehimpulse erlaubt verschiedene Werte für j. Zeigen Sie, dass $j_{max} = l + s$ gilt.

   Hinweis: betrachten Sie den maximalen Wert von m_j.

b) Zeigen Sie, dass $j_{min} = |l - s|$ gilt.

   Hinweis: bestimmen Sie die Anzahl der Basiszustände im Produktraum $|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$. Die Gesamtheit aller $|j, m_j\rangle$-Zustände muss gleich dieser sein.

c) Der Wechselwirkungsoperator der Spin-Bahn-Kopplung ist proportional zu $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$. Zeigen Sie, dass $|j, m_j\rangle$ auch Eigenzustände dieses Operators sind.

d) Das magnetische Moment eines Systems ist proportional zu seinem Drehimpuls ($\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = -g_l \mu_B \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}$, $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -g_s \mu_B \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}$), mit Bohr'schem Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ und (Landé-)Proportionalitätsfaktor g_l bzw. g_s. Bestimmen Sie den Landé-Faktor g_j des zusammengesetzten Systems für den Spezialfall $g_l = 1$, $g_s = 2$.

   Hinweis: benutzen Sie $g_j = -\frac{\hbar}{\mu_B} \frac{\langle \hat{\boldsymbol{\mu}}_j \cdot \hat{\mathbf{J}} \rangle}{\langle \hat{J}^2 \rangle}$.

Aufgabe 22 (nur E4) **Spin-Bahn-Kopplung und Feinstrukturaufspaltung**

In dieser Aufgabe wollen wir die Spin-Bahn-Kopplung, die relativistische Korrektur sowie den Darwin-Term und ihren Beitrag zur Feinstruktur des Wasserstoffatoms untersuchen.

a) Das magnetische Moment des Elektrons ist gegeben durch $\hat{\boldsymbol{\mu}} = -g_s \mu_B \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}$, siehe Aufgabe 21. Das vom Elektron in dessen Ruhesystem wahrgenommene Magnetfeld beträgt $\mathbf{B} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{c^2}$ mit $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ und $\mathbf{E} = e\mathbf{r}/\left(4\pi\epsilon_0 r^3\right)$. Bestimmen Sie mithilfe von $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ den Ausdruck der Spin-Bahn-Kopplung

$$H_{\mathrm{SB}} = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}, \tag{1}$$

   der von $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ abhängt. Reduzieren Sie dann das Ergebnis um den Faktor 1/2 (Thomas-Faktor, der aus einer relativistischen Rechnung folgt), um daraus den Hamilton-Operator $\hat{H}_{\mathrm{SB}}$ zu erhalten.

b) Der Hamilton-Operator $\hat{H}_{\mathrm{SB}}$ hängt vom Produkt $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ ab. Verwenden Sie den Gesamtdrehimpuls-Operator $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, um $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ durch die Operatoren $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{\mathbf{S}}^2$ auszudrücken.

c) Berechnen Sie den Erwartungswert der Spin-Bahn-Kopplung $\Delta E_{\mathrm{SB}} = \langle \hat{H}_{\mathrm{SB}} \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}$ in Abhängigkeit der Quantenzahlen l und j.
   Hinweise: Verwenden Sie

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} = \frac{m^3 c^3 \alpha^3}{\hbar^3 n^3 l \,(l + 1/2)\,(l + 1)}.$$

   Für den Landé-Faktor des Elektrons (mit $s = 1/2$) gilt nährungsweise $g_s \approx 2$, für die Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi c \epsilon_0 \hbar} \approx 1/137$. Der berechnete Ausdruck gilt nur für $l > 0$. Für $l = 0$ verschwindet die Spin-Bahn-Kopplung.

d) Um einen relativistischen Ausdruck für die Energie des Elektrons zu erhalten, entwickeln Sie

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \tag{2}$$

in Ordnungen von p^2 bis zur Ordnung von $\left(p^2\right)^2$ für kleine p^2. Der Term der Ordnung p^4 ergibt den relativistischen Hamilton-Operator $\hat{H}_R$. Berechnen Sie dessen Erwartungswert ΔE_{R} in Abhängigkeit der Quantenzahlen l und n.

Hinweis: Es gilt $\left\langle \Psi_{n,l,j,m_j} \middle| \hat{p}^4 \middle| \Psi_{n,l,j,m_j} \right\rangle = \frac{4m^4c^4\alpha^4}{n^3}\left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n}\right)$.

e) Berechnen Sie den Erwartungswert ΔE_{D} des *Darwin-Terms*

$$\hat{H}_D = \frac{\pi\hbar^2 e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\delta^{(3)}\left(\mathbf{r}\right) \tag{3}$$

mit der 3-dimensionalen Dirac'schen Delta-Distribution $\delta^{(3)}\left(\mathbf{r}\right)$ in Abhängigkeit von n und l.

Hinweis: Es gilt $\left|\Psi_{n00}\left(0\right)\right|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a_0^3}$. Überlegen Sie, für welche Quantenzahlen die Delta-Distribution verschwindet und für welche nicht.

f) Damit ergeben sich mit den Feinstrukturkorrekturen die Energiewerte

$$E_{n,j}^{\mathrm{FS}} = E_n + \Delta E_{\mathrm{SB}} + \Delta E_{\mathrm{R}} + \Delta E_{\mathrm{D}}. \tag{4}$$

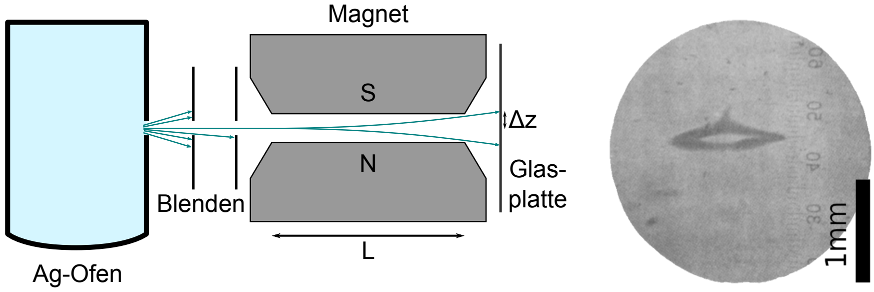
Zeigen Sie, dass, obwohl die Korrekturen selbst teilweise von n, l und j abhängen, $E_{n,j}^{\mathrm{FS}}$ nur noch von n und j abhängt.

Hinweise: Beachten Sie, dass ΔE_{SB} nur für $l \neq 0$ relevant ist, während ΔE_{D} nur für $l = 0$ einen nicht-verschwindenden Beitrag liefert. Vereinfachen Sie dann $E_{n,j}$ separat für die Fälle $j = l + 1/2$ und $j = l - 1/2$ (bei $l \neq 0$) und $j = 1/2$ (bei $l = 0$) und fassen Sie die Ergebnisse wieder in einem allgemeinen Ausdruck zusammen, der nicht mehr von l abhängt.

g) Tabellieren Sie die entsprechenden Energiewerte für alle Zustände mit $n \leq 3$. Listen Sie dazu zuerst die möglichen Werte der relevanten Quantenzahlen auf.

Aufgabe 23 Stern-Gerlach-Versuch

In dem Experiment von Otto Stern und Walther Gerlach (1922) tritt ein Strahl von Silberatomen aus einem Ofen (1000° C) aus. Der Strahl passiert einen $L = 3.3\,\mathrm{cm}$ langen Magneten mit einem Magnetfeldgradienten von $\frac{\partial B}{\partial z} = 1.12 \cdot 10^3\,\mathrm{T/m}$. Direkt dahinter befindet sich eine Glasplatte, auf der sich das Silber niederschlägt.



a) Berechnen Sie die Ablenkung des Strahls Δz unter der Annahme, dass das magnetische Moment der Silberatome $\mu_B = 9.27 \cdot 10^{-24}\,\mathrm{J/T}$ beträgt.

b) Warum wird im Experiment eine Aufspaltung in zwei diskrete Teilstrahlen beobachtet?

Aufgabe 24 Grundzustand von Helium

Bei Mehrelektronen-Atomen ist die Schrödinger-Gleichung zu dem Hamiltonian $\hat{H}$ nicht mehr exakt lösbar. Eine Methode, Näherungslösungen für den Grundzustand zu finden, ist die so genannte Variationsmethode. Hierbei nutzt man die Eigenschaft, dass für jede normierte „Testfunktion" ϕ^c gilt: $\langle E\rangle = \langle\phi|\,\hat{H}|\phi\rangle \geq E_0$, wobei E_0 die Energie des Grundzustands ist. Um eine Näherung für den Grundzustand zu finden, wählt man eine geeignete Testfunktion ϕ^c mit einem freien Parameter c und minimiert den Energieerwartungswert $\langle E\rangle$ in Abhängigkeit von c (die Güte der Näherung ist von dem Ansatz abhängig). Diese Methode soll am Beispiel von Helium ausprobiert werden.

Der Hamilton-Operator für das Helium-Atom ist

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{V}_{12}, \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_i}, \quad \hat{V}_{12} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Die Testfunktion sei definiert als

$$\phi^c := \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2)\chi_{12}.$$

Dabei ist $\psi_{1s}^c(i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}c^{\frac{3}{2}}e^{-cr_i}$ der räumliche Anteil der Wellenfunktion, $|\chi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\right)$ der Spin-Zustand der Elektronen.

a) Argumentieren Sie, warum dieser Ansatz für ϕ^c sinnvoll ist. Vergleichen Sie insbesondere ψ_{1s}^c mit der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms.

b) Stellen Sie c in Bezug zum Bohrschen Radius. Was kann man über die effektive Kernladungszahl aussagen?

c) Zeigen Sie, dass für den Energieerwartungswert $\langle E\rangle$ gilt

$$\langle E\rangle = \left\langle \psi_{1s}^c(1)\left|\hat{H}_1\right|\psi_{1s}^c(1)\right\rangle + \left\langle \psi_{1s}^c(2)\left|\hat{H}_2\right|\psi_{1s}^c(2)\right\rangle + \left\langle \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2)\left|\hat{V}_{12}\right|\psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2)\right\rangle$$

d) (**optional für E4p**) Drücken Sie den Wert von $\langle E\rangle$ als Funktion des Parameters c aus.

e) (**optional für E4p**) Bestimmen Sie den Wert von c bei dem $\langle E\rangle$ minimal wird. Welcher Wert für $\langle E\rangle$ ergibt sich?

Hinweise: für kugelsymm. Wellenfunktionen ist $\nabla_i^2 = \frac{d^2}{dr_i^2} + \frac{2}{r_i}\frac{d}{dr_i}$. Es gilt $\int_0^\infty dr \cdot e^{-b\cdot r}r^k = \frac{k!}{b^{k+1}}$. Für den Erwartungswert $\left\langle \hat{V}_{12}\right\rangle$ ergibt sich $\left\langle \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2)\left|\hat{V}_{12}\right|\psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2)\right\rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{5}{8}e^2c$.