

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

Prof. H. Weinfurter, Dr. L. Knips

## Aufgabe 31 (optional für E4p) Zeeman-Effekt im Grundzustand des Wasserstoffatoms

In dieser Aufgabe soll die Aufspaltung innerhalb der Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms im Grundzustand in einem äußeren Magnetfeld  $\mathbf{B} = \hat{e}_z B_0$  bestimmt werden. Die entsprechenden Eigenzustände und die Abhängigkeit der Energieeigenwerte in beliebigen B-Feldern ("Breit-Rabi-Formel") kann durch Diagonalisierung des Hamiltonoperators berechnet werden. Da im Grundzustand  $l = 0$  gilt, und da wir den Einfluss des Kernmoments vernachlässigen können ( $\mu_B \gg \mu_N$ ), ist das magnetische Moment des Atoms durch den Elektronenspin bestimmt ( $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -g_s \mu_B \frac{1}{\hbar} \hat{\mathbf{S}}$ ,  $g_s \approx 2$ ). Damit ergibt sich für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{HFS}} + \hat{H}_B = A \frac{1}{\hbar^2} \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{I}} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_s \cdot \mathbf{B} = A \frac{1}{\hbar^2} \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{I}} + B \frac{1}{\hbar} \hat{S}_z$$

mit Hyperfeinkonstante  $A \approx h \cdot 1420 \text{ MHz}$  und  $B = 2\mu_B \cdot B_0$ .

- Stellen Sie den Operator  $\hat{H}$  in Matrixschreibweise in der Produktbasis dar.
- Berechnen Sie die Eigenzustände und Energieeigenwerte durch Diagonalisieren von  $\hat{H}$ .
- Ordnen Sie für  $B_0 = 0$  den vier Eigenzuständen die Quantenzahlen  $f$  und  $m_F$  zu.
- Zeichnen Sie den Verlauf der Energie  $E$  in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke  $B$  für die vier Energieeigenwerte von  $\hat{H}$  für  $B_0 = 0 \dots 0.1 \text{ T}$ .
- Welche Quantenzahlen eignen sich zur Beschreibung des Systems für sehr starkes Magnetfeld (hier  $B_0 \gg 0.1 \text{ T}$ )?

*Hinweise:*  $\hat{H}$  kann (wegen  $l = 0$ ) im Produkt-Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_I$  von  $\hat{\mathbf{S}}$  und  $\hat{\mathbf{I}}$  dargestellt werden. Da sowohl der Elektronen- als auch der Kernspin gleich  $1/2$  sind, hat der Hilbertraum die Dimension  $2 \times 2$ , mit Basisvektoren  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ , wobei  $|\uparrow\uparrow\rangle := \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_S \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_I$ , etc. Die Drehimpulsoperatoren im Produktraum können als Tensorprodukte von Paulimatrizen dargestellt werden. Verwenden Sie ferner  $\hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{I}} = \hat{S}_x \hat{I}_x + \hat{S}_y \hat{I}_y + \hat{S}_z \hat{I}_z$ .

### Aufgabe 32 LCAO-Methode

In dieser Aufgabe soll die LCAO-Methode (*linear combination of atomic orbitals*) explizit auf das Beispiel des  $H_2^+$  Ions angewandt werden. Dieses System besteht aus zwei Protonen (A, B) im Abstand  $R$  zueinander und einem Elektron, das sich im Abstand  $r_A$  zu A und  $r_B$  zu B befindet. Der Hamiltonian hat die Form

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}$$

Als Ansatz nimmt man  $\Psi = c_1\phi_A(r_A) + c_2\phi_B(r_B)$ , wobei  $\phi_{A/B}(r_{A/B}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r_{A/B}}{a_0}}$  Lösungen für das Wasserstoffatom sind.

- a) Begründen Sie, warum  $\Psi_{s/a} = \frac{1}{\sqrt{N_{s/a}}} (\phi_A(r_A) \pm \phi_B(r_B))$  ein sinnvoller Ansatz ist.  
 b) Zeigen Sie, dass für die Normierung gilt

$$N_{s/a} = 2(1 \pm \langle \phi_B | \phi_A \rangle) = 2 \left( 1 \pm \left( 1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \frac{R^2}{a_0^2} \right) e^{-\frac{R}{a_0}} \right).$$

- c) Zeigen Sie, dass für die Energien der betrachteten Zustände  $E_{s/a} = \langle \Psi_{s/a} | \hat{H} | \Psi_{s/a} \rangle$  gilt (mit  $E_0$  der Energie des Grundzustands im Wasserstoff)

$$E_{s/a} = \frac{1}{1 \pm \langle \phi_B | \phi_A \rangle} \times \left[ E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} \left( 1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-\frac{2R}{a_0}} \pm \left( \left( E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} \right) \langle \phi_B | \phi_A \rangle - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0} \left( 1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-\frac{R}{a_0}} \right) \right].$$

- d) Welcher der beiden Zustände führt zu einer stabilen Bindung? Bestimmen Sie den Bindungsabstand  $R_b$  und die Bindungsenergie  $E(R_b) - E_0$  des Moleküls. Verwenden Sie dazu graphische oder numerische Methoden.

*Hinweise:* es gilt

$$K(\alpha, \beta) = \int dV \frac{e^{-\alpha r_A} \cdot e^{-\beta r_B}}{r_A} = \frac{4\pi}{R} \left( \frac{R}{\alpha^2 - \beta^2} e^{-\beta \cdot R} + \frac{2\beta}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} (e^{-\alpha \cdot R} - e^{-\beta \cdot R}) \right)$$

und für die Spezialfälle  $\beta = \alpha$ :

$$K(\alpha, \alpha) = \int dV \frac{e^{-\alpha r_A} \cdot e^{-\alpha r_B}}{r_A} = \frac{\pi}{\alpha^2} (1 + \alpha \cdot R) e^{-\alpha \cdot R}$$

$$L(\alpha, \alpha) = \int dV e^{-\alpha r_A} \cdot e^{-\alpha r_B} = \frac{\pi}{\alpha^3} \left( 1 + \alpha \cdot R + \frac{1}{3} \alpha^2 R^2 \right) e^{-\alpha \cdot R}$$

### Aufgabe 33      Feinstruktur und Hyperfeinstruktur von Kalium

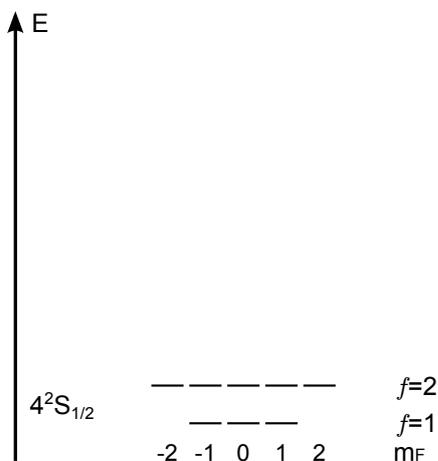
Das Alkalimetall Kalium ist in der Atom- und Quantenphysik von besonderem Interesse, da es sowohl bosonische als auch fermionische Isotope (d.h. ganz- bzw. halbzahlicher Gesamtspin) besitzt. Konkret betrachten wir hier die Isotope  $^{39}\text{K}$  mit Kernspin  $i = 3/2$  und  $^{40}\text{K}$  mit Kernspin  $i = 4$ .

- Welche Elektronenkonfiguration hat Kalium im Grundzustand? Erklären Sie qualitativ, welche Form die Ladungsverteilung dieser Elektronen hat.
- Welches Isotop zeigt bosonische Teilchenstatistik, welches fermionische?
- Für abgeschlossene Schalen ist der Gesamtdrehimpuls gleich Null. In Alkaliatomen wird daher der Gesamtdrehimpuls  $j$  durch das Valenzelektron alleine bestimmt. Der Grundzustand von  $^{39}\text{K}$  hat die spektroskopische Notation  $4^2S_{1/2}$ , die beiden ersten angeregten Zustände haben die Notationen  $4^2P_{1/2}$  und  $4^2P_{3/2}$ .  
Erklären Sie, welche Effekte zu der Energiedifferenz zwischen  $4^2P_{1/2}$  und  $4^2P_{3/2}$  beitragen.
- Die Hyperfeinkonstanten der beiden Isotope sind:

$A_{\text{HF}}$	$^{39}\text{K}$ ( $h \times \text{MHz}$ )	$^{40}\text{K}$ ( $h \times \text{MHz}$ )
$4^2S_{1/2}$	230.9	-285.7
$4^2P_{1/2}$	27.8	-34.5
$4^2P_{3/2}$	6.1	-7.6

Bestimmen Sie für beide Isotope jeweils die Aufspaltung der Hyperfeinzustände von  $4^2S_{1/2}$ .

- Skizzieren Sie das Termschema der Hyperfeinzustände inklusive aller magnetischer Unterzustände für das Isotop  $^{39}\text{K}$ . Zeichnen Sie analog zu den in der Abbildung gezeigten Termen des  $4^2S_{1/2}$ -Zustands zusätzlich auch die Zustände  $4^2P_{1/2}$  und  $4^2P_{3/2}$ .
- Skizzieren Sie analog zu e) die Hyperfeinstruktur der Zustände  $4^2S_{1/2}$ ,  $4^2P_{1/2}$  und  $4^2P_{3/2}$  von  $^{40}\text{K}$  in einem Energiediagramm.
- Für die Atomkühlung sind *geschlossene* Übergänge von großer Bedeutung. Für diese gilt, dass ausgehend von einem der Hyperfeinzustände  $|f, m_F\rangle$  man einen bestimmten Zustand  $|f', m_{F'}\rangle$  anregt, von dem aus der einzige (dipol-)erlaubte Zerfall *nur* zurück auf den Zustand  $|f, m_F\rangle$  führt. Bestimmen Sie alle geschlossenen Übergänge zwischen den betrachteten Niveaus für beide Isotope.



### Aufgabe 34 (optional für alle (E4 und E4p)) Stark-Effekt

Wir betrachten ein Wasserstoffatom in einem konstanten elektrischen Feld, welches entlang der  $z$ -Richtung orientiert ist. Der Hamiltonian ist gegeben durch  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , wobei  $\hat{H}_0$  der ungestörte Hamiltonian ist und  $\hat{V} = e \cdot E_0 \cdot \hat{z}$  die Wechselwirkung mit dem Feld der Stärke  $E_0 = 10 \text{ kV/cm}$  beschreiben.

- a) Zeigen Sie, dass für den Grundzustand  $|\psi_{100}\rangle$  eine Energieverschiebung erst in 2. Ordnung entsteht (*quadratischer Stark-Effekt*). Wie groß ist diese? Zur Vereinfachung soll näherungsweise nur der Beitrag von  $|\psi_{210}\rangle$  berücksichtigt werden.
- b) Bei energetisch entarteten Zuständen kann auch der *lineare Stark-Effekt* auftreten. Betrachten Sie dazu die Zustände  $|\psi_{200}\rangle$  und  $|\psi_{210}\rangle$ . Bestimmen Sie die Matrixelemente von  $\hat{H}$  in diesem Unterraum. Leiten Sie daraus die Eigenzustände und die Energieverschiebung her.

*Hinweise:* führen Sie eine Störungsrechnung in 1. und 2. Ordnung durch. Es werden alle Effekte der Fein- und Hyperfeinstruktur, sowie Lamb-Shift vernachlässigt, so dass Lösungen vom Wasserstoffproblem benutzt und in b) die Zustände als entartet angenommen werden können. Ergebnisse der Aufgaben 16 und 17 (beide auf Blatt 5) können verwendet werden.