

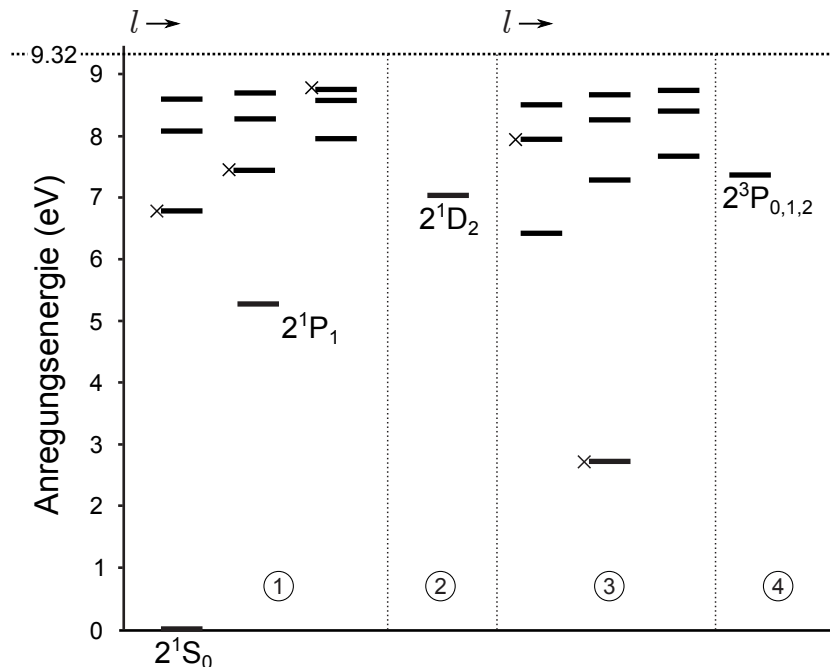
9. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Besprechung in der Woche vom 3.7.

Aufgabe 27 Termschema von Beryllium

Erdalkaliatome haben ebenso wie Helium eine ns^2 -Konfiguration der Valenzelektronen. Dementsprechend verhalten sie sich in vielerlei Hinsicht zu He wie die Alkaliatome zu H. Da die beiden Leuchtelektronen eine größere Hauptquantenzahl und damit eine Vielzahl möglicher Zustände haben und sie zusätzlich durch die abgeschlossene Edelgaskonfiguration der Elektronen mit kleinerer Hauptquantenzahl stark von der Kernladung abgeschirmt sind, kommt es zu wesentlichen Änderungen.

- Was versteht man unter *Singulett-* und *Triplet-Zuständen*? Welche Komponente der Wellenfunktion liegt als Singulett (Triplet) vor, wenn ein Zustand als *Singulettzustand* (*Tripletzustand*) bezeichnet wird?
- Geben Sie je einen Singulett- und einen Tripletzustand an. Welcher der Zustände ist verschränkt, welcher nicht?
- Geben Sie die Wellenfunktion der beiden Leuchtelektronen des 2^1S_0 -Zustands in Beryllium an (ausgedrückt durch Ortswellenfunktionen $u_{n,l,m}(\vec{r}_i)$ und Spinzustände $|\uparrow\rangle_i, |\downarrow\rangle_i$).
- (optional für E4p) Die Abbildung zeigt einen Teil des Termschemas in der Grobstruktur (d.h. ohne Feinstruktur) für Be, die Elektronenkonfiguration des Grundzustands ist $1s^2 2s^2$. Zusätzlich zu den vom He bekannten Singulett- und Tripletzweigen gibt es weitere Zustände, sogenannte deplazierte Zustände. In welchen der Bereiche (1..4) in der Abbildung sind die He-artigen Triplet- bzw. Singulettzweige gezeichnet? Geben Sie die spektroskopische Notation der mit \times markierten Zustände an. Zu welchen Zuständen (mit $n \leq 3$) ist ein Dipolübergang ausgehend vom Zustand 2^1P_1 möglich?



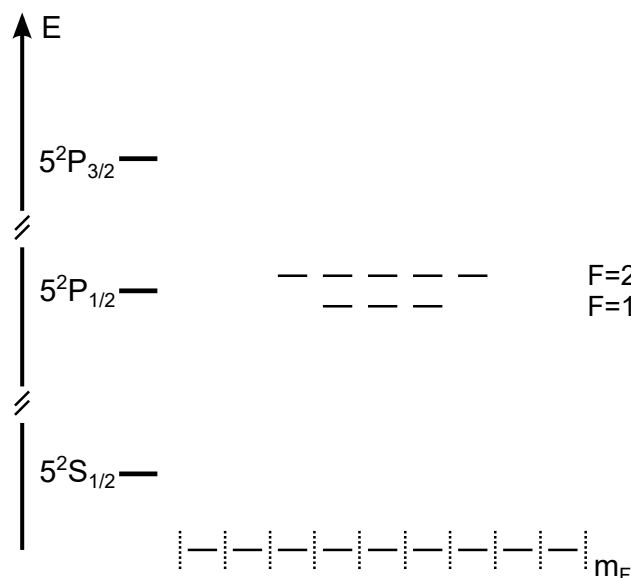
Zweifach angeregte Zustände:

- e) Was versteht man unter Autoionisation? Am Beispiel von He: geben Sie einen autoionisierenden Zustand an. Was gilt in He allgemein für die Elektronenkonfiguration von nicht-autoionisierenden Zuständen?
- f) (**optional für E4p**) Ausgehend vom Grundzustand der $2s^2$ Leuchtelektronen in Be ergeben sich natürlich mehr Anregungsmöglichkeiten, verglichen mit den $1s^2$ Elektronen in He. Im Termschema finden sich nun die Zustände 2^1D_2 und $2^3P_{0,1,2}$. Was kann man aus der spektroskopischen Notation und dem Wissen, dass es sich um zweifach angeregte Zustände handelt, über deren Elektronenkonfiguration aussagen?

Aufgabe 28 Niveaustuktur von Rubidium

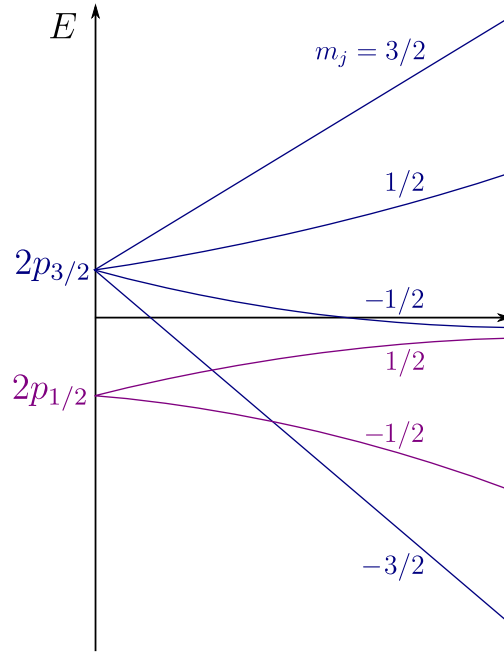
Rubidium kommt in der Natur in 2 Isotopen vor: $^{85}_{37}\text{Rb}$ und $^{87}_{37}\text{Rb}$.

- Rubidium ist ein Mehrelektronenatom mit genau einem Elektron in der äußersten Schale mit $n = 5$. Wie nennt man solche Atome, die wie Rb ein Elektron in der äußersten Schale haben? Nennen Sie ein anderes Atom dieser Art.
- Wie lautet die Elektronenkonfiguration des Grundzustands bzw. des Zustands $5^2P_{1/2}$? Benutzen Sie die Schreibweise $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \dots$
- Wie viele Elektronen kann die Atomschale mit Hauptquantenzahl $n = 4$ maximal aufnehmen? Begründen Sie Ihre Antwort.
- Beschreiben Sie die Winkelabhängigkeit bzw. Symmetrie der Ladungsverteilung aller Elektronen im Grundzustand von Rb.
- Beschreiben Sie zwei Effekte, die den Unterschied zwischen den Energien der Zustände der beiden Isotope verursachen. Von welchen physikalischen Größen des Rb-Atoms hängen diese Effekte ab?
- Wie Sie unten sehen, hat der Zustand $5^2P_{1/2}$ die Wert $F = 1$ und $F = 2$ für die Gesamtdrehimpulsquantenzahl F . Welcher Wert folgt daraus für den Kernspin I des Rubidiumatoms ^{87}Rb ? Welche Werte kann daher die Gesamtdrehimpulsquantenzahl F sowie die magnetische Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses m_F für die Zustände $5^2S_{1/2}$ und $5^2P_{3/2}$ annehmen?
- Wie hängt die Energieverschiebung ΔE_{HFS} aufgrund der Hyperfeinwechselwirkung von den Quantenzahlen F , J , und I ab? Zwischen den $5^2P_{1/2}$ -Zuständen mit $F = 1$ und $F = 2$ beobachten wir bei ^{87}Rb eine Energiedifferenz von $\Delta E = h \cdot 814.5 \text{ MHz}$. Berechnen Sie daraus auch die Hyperfeinkonstante A_{HFS} .
- Die Hyperfeinkonstante des $5^2D_{5/2}$ -Zustands hat ein negatives Vorzeichen. Welche Konsequenz hat dies für die Energien der einzelnen Hyperfeinzustände?
- Das Atom sei im Zustand $5^2S_{1/2}$ mit $F = 2$ und $m_F = 1$ präpariert und wird mit linkszirkularem Licht (σ^-) resonant mit dem Übergang zu $5^2P_{3/2}$ beleuchtet. Geben Sie alle Zustände an, zu denen ein Dipolübergang möglich ist. Ergänzen Sie dazu erst die Skizze mit allen möglichen Zuständen und zeichnen Sie die Übergänge ein.



Aufgabe 29 Zeeman-Effekt im Wasserstoffatom

- a) Unter welchen Bedingungen erwarten Sie den Fall des normalen bzw. des anomalen Zeeman-Effekts? Erwarten Sie für H bei niedrigen Feldern den normalen oder den anomalen Zeeman-Effekt? Warum?
- b) Wie unterscheidet sich der normale Zeeman-Effekt vom anomalen bezüglich der beobachtbaren Linien im Spektrum? Warum?
- c) Betrachten Sie die Zustände $2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$: In wieviele Niveaus spalten diese Zustände beim normalen bzw. beim anomalen Zeeman-Effekt auf? Warum? Diskutieren Sie das Verhalten an Hand der Graphik.



Ab hier optional für E4p: Im Weiteren soll die Aufspaltung innerhalb der Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms im Grundzustand in einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B} = \hat{e}_z B_0$ bestimmt werden. Relativistische Massenänderung und Darwinterm führen zu einer ersten Verschiebung, die aber nicht vom Magnetfeld abhängt. Wir betrachten hier nur die magnetfeldabhängige Energieverschiebung.

Die entsprechenden Eigenzustände und die Abhängigkeit der Energieeigenwerte in beliebigen B-Feldern (die sogenannte "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 ($\hat{\mu}_s = -g_s \mu_B \frac{1}{\hbar} \hat{\mathbf{S}}$, $g_s \approx 2$). Die Kopplung zwischen Elektron und Kernspin $\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{I}}$ vereinfacht sich daher zu $\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{I}}$. Damit ergibt sich für den (feldabhängigen Teil des) Hamiltonoperator

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

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

- d) Stellen Sie den Operator \hat{H} in Matrixschreibweise in der Produktbasis $\mathcal{S} \otimes \mathcal{I}$ dar. Zeigen Sie, dass sich für den gesamten Hamiltonian im Produktraum folgender Ausdruck ergibt:

$$\hat{H} = A \frac{1}{\hbar^2} \hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{I}} + B \frac{1}{\hbar} \hat{S}_z = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} A + 2B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A + 2B & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A - 2B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A - 2B \end{pmatrix}_{\mathcal{S} \otimes \mathcal{I}} .$$

- e) Berechnen Sie die Eigenzustände und Energieeigenwerte durch Diagonalisieren von \hat{H} .
- f) Ordnen Sie für $B_0 = 0$ den vier Eigenzuständen die Quantenzahlen f und m_F zu.
- g) Zeichnen Sie den Verlauf der Energie E in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke B für die vier Energieeigenwerte von \hat{H} für $B_0 = 0 \dots 0.1$ T.
- h) Welche Quantenzahlen eignen sich zur Beschreibung des Systems für sehr starkes Magnetfeld (hier $B_0 \gg 0.1$ 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 2×2 , mit Basisvektoren $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$, wobei $|\uparrow\uparrow\rangle := |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle_S |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle_I$, etc. Die Drehimpulsoperatoren im Produktraum können als Tensorprodukte von Paulimatrizen dargestellt werden. Verwenden Sie ferner $\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{I}} = \hat{S}_x\hat{I}_x + \hat{S}_y\hat{I}_y + \hat{S}_z\hat{I}_z$, was als Kurzschreibweise für $\hat{S}_x \otimes \hat{I}_x + \hat{S}_y \otimes \hat{I}_y + \hat{S}_z \otimes \hat{I}_z$ steht.