

Experimentalphysik IV (PEP4)

Dozent. Prof. S. Jochim

Übung 7

Abgabe am Montag, den 02.06.2014 vor der Vorlesung

Aufgabe 1: Zeeman Effekt (5 P)

Ein Wasserstoff-Atom im 2p-Zustand befindet sich in einem schwachen äußeren Magnetfeld.

- Geben Sie alle Niveaus und deren Energien als Funktion von B an (Feinstruktur beachten).
- Bei welcher Feldstärke B_0 (in Tesla) kreuzen sich unter Annahme der linearen Aufspaltung erstmals zwei der Niveaus des energetisch tiefer liegenden $2p_{1/2}$ mit denen des $2p_{3/2}$ Zustands?
- Führen Sie die gleiche Rechnung für die Aufspaltung des $2s_{1/2}$ Zustands durch ($B \ll B_0$) und berechnen Sie die energetischen Abstände des $2s_{1/2}$ ($m=1/2$) Niveaus zu den höher liegenden $2p_{3/2}$ ($m=-1/2, 1/2, 3/2$) Zuständen. Skizzieren Sie die Übergangsenergien als Funktion von B (in Analogie zum Experiment von Lamb und Retherford, Phys. Rev. 72 (1947) 241, zu finden auf der „e-learning platform“).
- Was ändert sich anschaulich beim Übergang zum Paschen-Back Bereich, also für $B \gg B_0$?

1) Bindungsenergie H-Atom

$$E_{n,j} = -R \frac{Z^2}{n^2} \cdot \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (\text{incl. Feinstruktur})$$

$$2p\text{-Zustand: } n=2, j=1/2, \frac{3}{2}, l=1$$

Aufspaltung im B-Feld (Zeeman)

$$\Delta E_B = \mu_B \cdot g_j \cdot m_j \cdot B \quad \text{mit } g_j = \left(1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right)$$

$$\text{für } 2p\text{-Zustand: } l=1, s=1/2, g_j = \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{3/4 - 2}{2j(j+1)} \right)$$

$$\text{für } j=1/2 \Rightarrow g_j = \frac{2}{3}$$

$$\text{für } j=3/2 \Rightarrow g_j = \frac{4}{3}$$

$$E_j = -R \frac{1}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{8} \right) \right] + \mu_B \cdot g_j \cdot m_j \cdot B \quad (\mu_B = 5.8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}, l=2)$$

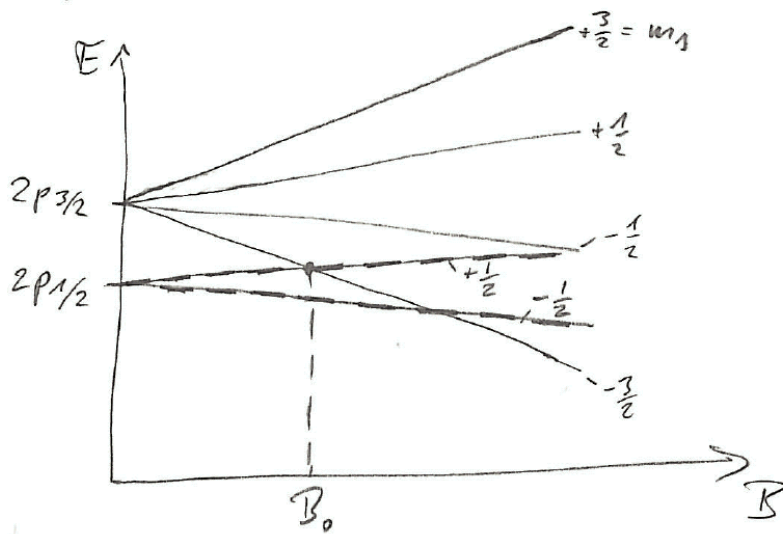
$$j=1/2:$$

$$E_{1/2} = -3.4 \text{ eV} - 5.68 \cdot 10^{-5} \text{ eV} + 3.87 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \cdot m_j \cdot B$$

$$j=3/2:$$

$$E_{3/2} = -3.4 \text{ eV} - 1.13 \cdot 10^{-5} \text{ eV} + 7.73 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \cdot m_j \cdot B$$

zu 1.)



b.) $B_0 = ? \quad E_{\frac{3}{2}, m_J = -\frac{1}{2}}(B_0) = E_{\frac{1}{2}, m_J = \frac{1}{2}}(B_0)$

$$\Rightarrow -1,13 \cdot 10^{-5} - 7,73 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{3}{2} \cdot B_0 = -5,68 \cdot 10^{-5} + 3,87 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{1}{2} B_0$$

$$-1,13 - 11,595 \cdot B_0 = -5,68 + 1,935 \cdot B_0$$

$$\underline{\underline{B_0 = 0,33 \text{ T}}}$$

c)

für $B \gg B_0$: Übergang zu Paschen-Back Bereich.
 LS-Kopplung wird unbedeutend.
 L und S orientieren sich unabhängig.

$$\mu_z = \mu_B (m_L + 2 \cdot m_S)$$

d)

$$2s_{1/2}$$

$$j = \frac{1}{2} \quad m_j = \pm \frac{1}{2}$$

$$g_j = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 2$$

$$\Delta E_{n=2, l=0, j=\frac{1}{2}, m_j=\pm \frac{1}{2}} = \pm \mu_B B$$

$$E_{n=2, j=\frac{1}{2}} = E_n \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

$$= -3,400056603 \text{ eV}$$

$$(n=\frac{3}{2}): E_{2s_{3/2}} = E_{n=2, j=\frac{1}{2}} + \mu_B B$$

Energiedifferenzen:

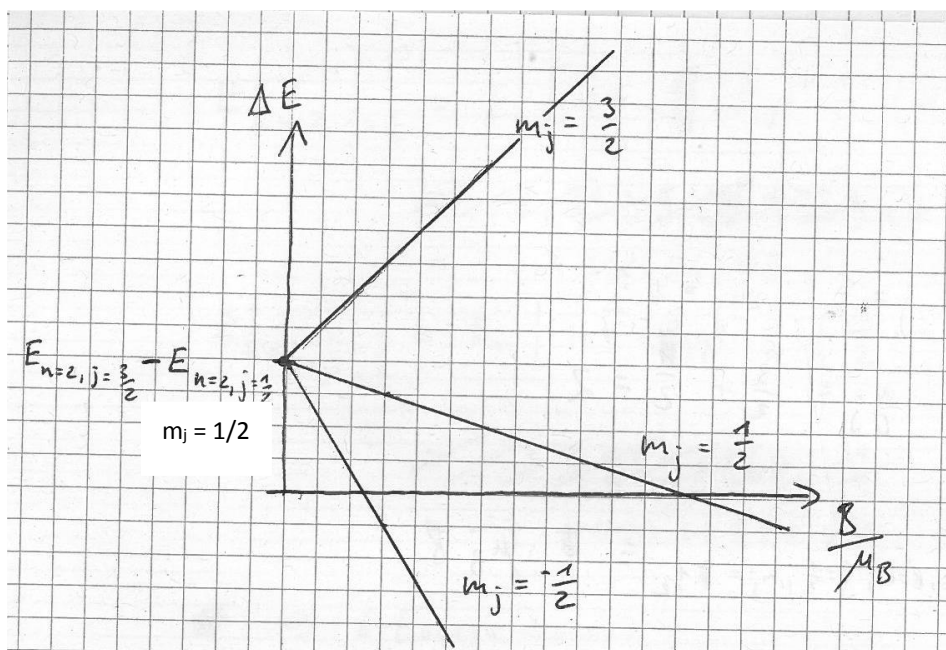
$$\rightarrow E_{2p_{3/2}(m_j=\frac{3}{2})} - E_{2s_{3/2}(m_j=\frac{1}{2})} =$$

$$= E_{n=2, j=\frac{3}{2}} + 2\mu_B B - E_{n=2, j=\frac{1}{2}} - \mu_B B$$

$$= 4,5287 \cdot 10^{-5} \text{ eV} + \mu_B B$$

$$\rightarrow E_{2p_{3/2}(m_j=\frac{1}{2})} - E_{2s_{3/2}(m_j=\frac{1}{2})} = 4,5287 \cdot 10^{-5} \text{ eV} - \frac{1}{3} \mu_B B$$

$$\rightarrow E_{2p_{3/2}(m_j=-\frac{1}{2})} - E_{2s_{3/2}(m_j=-\frac{1}{2})} = 4,5287 \cdot 10^{-5} \text{ eV} - \frac{5}{3} \mu_B B$$



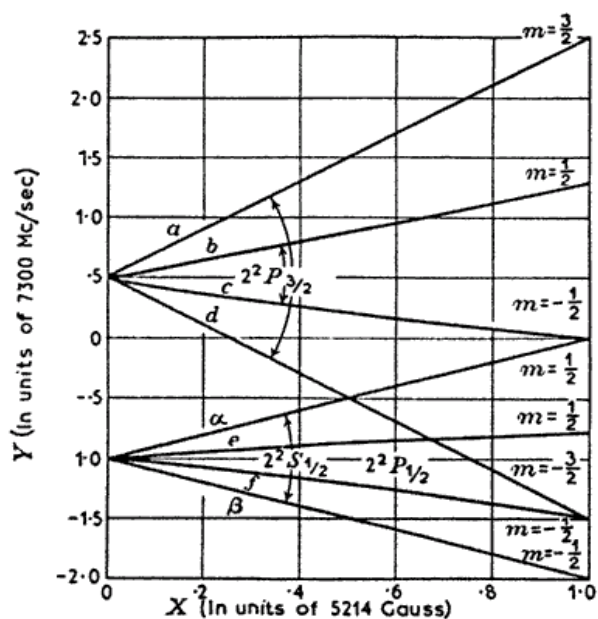
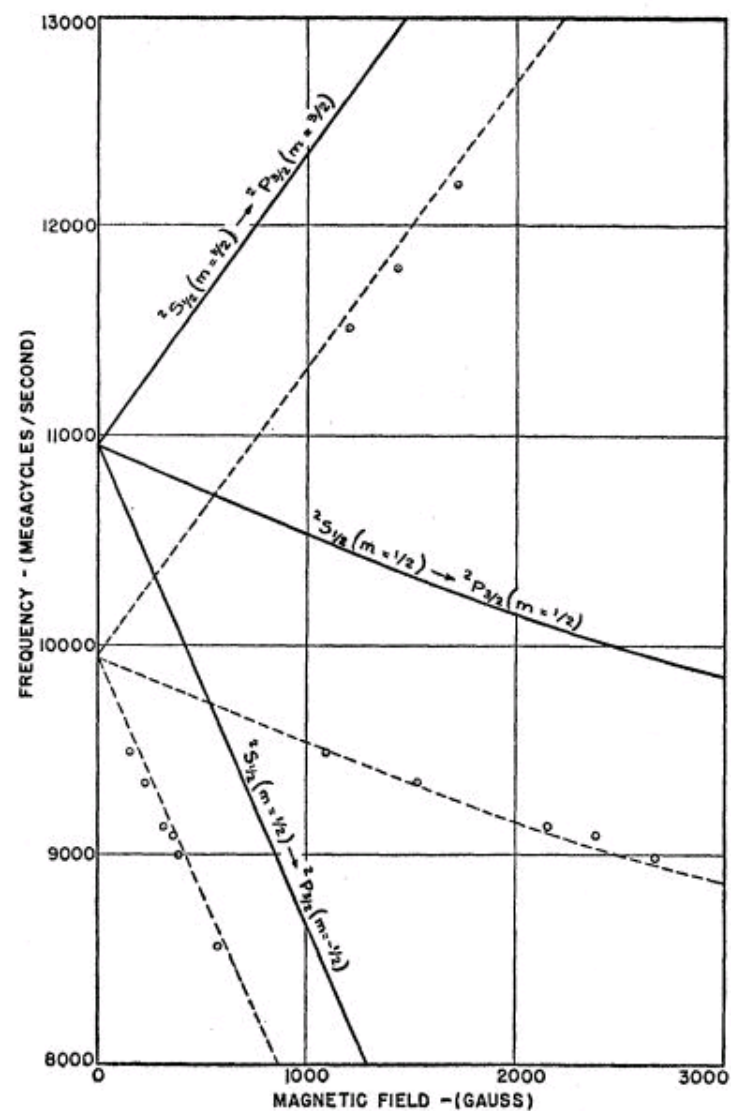
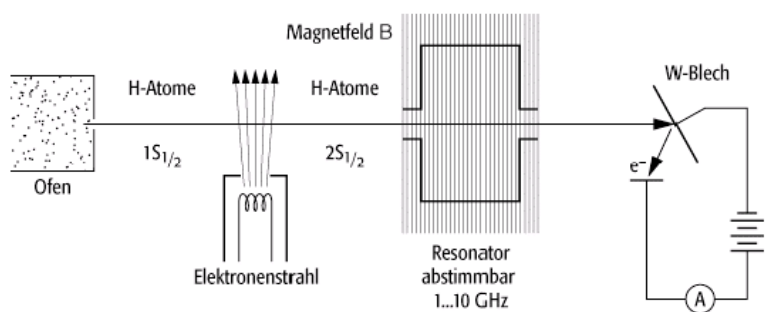


FIG. 4.
Energy levels
 $n = 2$
Dirac theory.

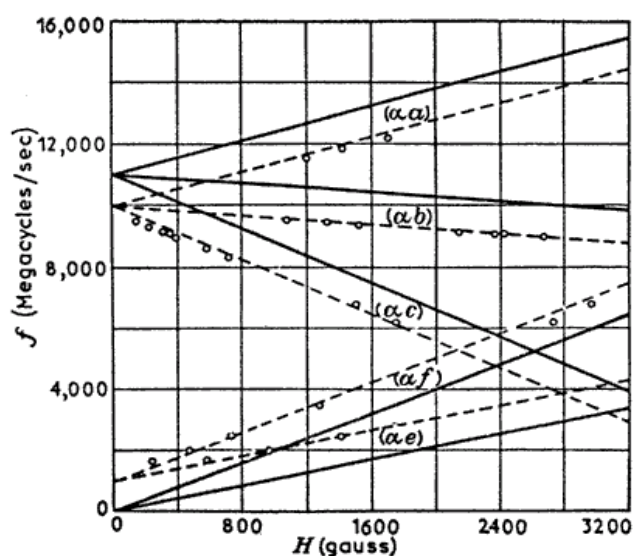


FIG. 5.
Transitions
— Theory
--- Expt.

Aufgabe 2: Bindungsenergie des Heliumatoms (4 P)

Schätzen Sie die totale Bindungsenergie des Heliumatoms ab. Der Hamilton-Operator sei gegeben durch (Spineffekte werden vernachlässigt):

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{ee}$$

$$\text{mit } \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|} \quad \text{und} \quad \hat{H}_{ee} = +\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

a) Lassen Sie zunächst die Elektron-Elektron-Wechselwirkung $\hat{H}_{ee}$ außer Acht und berechnen Sie die Grundzustandsenergie des Heliums mittels Lösung der Schrödinger-Gleichung (d.h. unter der Annahme von zwei unabhängigen Elektronen und $Z = 2$). Warum wird die Stärke der Bindung mit dieser Methode sehr wahrscheinlich überschätzt?

b) Behandeln Sie das erste Elektron des Heliumatoms wie in a) und nehmen Sie für das zweite Elektron eine abgeschirmte, effektive Kernladung $Z^* = Z - 1$ an. Schätzen Sie so die Bindungsenergie für das zweite Elektron in den Zuständen $n = 1, 2, 3$ ab. Diskutieren Sie die Güte dieser Näherung anhand des tatsächlichen Termschemas.

c) Ermitteln Sie den Grundzustand, indem Sie mit einer von Z^* abhängigen Testwellenfunktion die Bindungsenergie berechnen und diese dann minimieren. Verwenden Sie als Testfunktion $\psi^* = \psi_{100}^*(r_1) \cdot \psi_{100}^*(r_2)$ mit $\psi_{100}^*(r) = 1/\sqrt{\pi} \cdot (Z^*/a_B)^{3/2} \exp(-Z^*r/a_B)$. Hierbei dient Z^* als freier Parameter, a_B ist der Bohr'sche Radius. Beachten Sie, dass der Hamiltonian abhängig von Z ist und nicht von Z^* . Werten Sie daher den Erwartungswert des Hamiltonians für jeden Term einzeln aus, z.B.

$$E_{kin} = \left\langle \psi^* \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right| \psi^* \right\rangle. \text{ Wenden Sie hierbei den Virialsatz an}$$

(<http://de.wikipedia.org/wiki/Virialsatz>)

Der Elektron-Elektron-Anteil ist gegeben durch $\langle \psi^* | H_{ee} | \psi^* \rangle = \frac{5}{4} \text{Ryd } Z^*$ (dieser Wert ergibt sich aus einer Störungsrechnung). Als Zwischenergebnis dieser Rechnung erhalten Sie:

$$E(Z^*) = -\text{Ryd} \left(-2Z^{*2} + 4Z^*Z - \frac{5}{4}Z^* \right)$$

Bestimmen Sie dann Z^* durch Minimieren der Energie (diese Methode nennt man Ritz'sches Variationsverfahren: siehe zum Beispiel <http://de.wikipedia.org/wiki/Rayleigh-Ritz-Prinzip>).

d) Bestimmen Sie mit dem Z^* aus c) die Grundzustandsenergie des Heliums und vergleichen Sie diese mit dem Literaturwert.

Lösung:

- a) Ohne $\hat{H}_{ee}$ erhält man für den Grundzustand des Heliumatoms:

$$\begin{aligned}\langle \psi | H_1 + H_2 | \psi \rangle & \quad \text{mit} \quad \psi = \psi_{100}(r_1) \cdot \psi_{100}(r_2) \\ &= \langle \psi_{100}(r_1) | H_1 | \psi_{100}(r_1) \rangle + \langle \psi_{100}(r_2) | H_2 | \psi_{100}(r_2) \rangle = \\ &= -Ryd Z^2 - Ryd Z^2 = -8 Ryd \approx 109 \text{ eV} \quad (Z = 2)\end{aligned}$$

Diese Energie ist zu groß, da ja die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt wurde. Diese hat einen repulsiven Anteil.

- b) $\langle \psi | H_1 + H_2 | \psi \rangle = \dots = -Ryd Z^2 - Ryd Z^{*2} = -Ryd Z^2 - Ryd 1/n^2$

Memo: $Z^* = Z - 1 = 1$ wegen He: $Z = 2$

$$\begin{aligned}n = 1 & \rightarrow -54,4 \text{ eV} + (13,6 \text{ eV}) = -68 \text{ eV} \\ n = 2 & \rightarrow -54,4 \text{ eV} - (3,4 \text{ eV}) = -57,8 \text{ eV} \\ n = 3 & \rightarrow -54,4 \text{ eV} - (1,5 \text{ eV}) = -55,9 \text{ eV}\end{aligned}$$

Diese Methode liefert für angeregte Zustände bessere Resultate als für den Grundzustand. Dies ist i. A. eine gute Methode für den Fall, dass ein Elektron nah am Kern und ein Elektron weit entfernt ist.

- c) Bekannt:

$$\begin{aligned}\langle \psi | H_{ee} | \psi \rangle &= \frac{m e^2 \alpha^2}{2} \frac{5}{4} Z^* = \frac{5}{4} Ryd Z^* \\ \langle \psi | H_i | \psi \rangle &= \frac{m e^2 \alpha^2}{2} Z^2 = -Ryd Z^2\end{aligned}$$

Dies gilt auch für $Z = Z^*$:

$$\langle \psi^* | H_i^* | \psi^* \rangle = \frac{m e^2 \alpha^2}{2} Z^{*2} = -Ryd Z^{*2}$$

Es ist aber: $\langle \psi^* | H_i | \psi^* \rangle \neq -Ryd Z^{*2}$

Die Energie zur Testfunktion ist:

$$\begin{aligned}E &= \langle \psi^* | H_1 + H_2 + H_{ee} | \psi^* \rangle \\ &= \langle \psi^* | E_{kin,1} + E_{kin,2} + E_{pot,1} + E_{pot,2} + H_{ee} | \psi^* \rangle \\ \dots \text{Virial: } \langle E_{kin} \rangle &= -\langle E \rangle \quad \text{und} \quad \langle E_{pot} \rangle = 2\langle E \rangle \\ \dots \frac{Z}{Z^*} \langle \psi^* | E_{pot}^* | \psi^* \rangle \\ &= Ryd Z^{*2} + Ryd Z^{*2} - \frac{Z}{Z^*} 2 Ryd Z^{*2} - \frac{Z}{Z^*} 2 Ryd Z^{*2} + \frac{5}{4} Ryd Z^* \\ &= -2Ryd \left(-Z^{*2} - \frac{5}{8} Z^* + 2 Z^* Z \right) \\ \frac{\partial E}{\partial Z^*} &= 0 \quad \leftrightarrow \quad Z^* = Z - \frac{5}{16} = \frac{27}{16} \quad \text{im letzten Schritt für } Z = 2\end{aligned}$$

- d) Einsetzen von Z^* liefert $E \approx -77,48 \text{ eV}$
Experimentell gefunden wird $\approx -79 \text{ eV}$

Aufgabe 3: Angeregte Zustände im Helium (3 P)

Ein He-Atom wird durch UV-Licht vom Grundzustand in den doppelt angeregten 2s4p-Zustand angeregt, der durch so genannte Autoionisation zerfällt. Dabei fällt ein Elektron zurück in einen tiefer gebundenen Zustand während das andere Elektron durch direkten Energieübertrag zwischen ihnen weiter angeregt wird. Nehmen Sie an, das 2s-Elektron bewege sich im reinen Coulomb-Feld des Kerns ($Z = 2$) und das 4p-Elektron in einem durch das innere Elektron vollständig abgeschirmten Coulomb-Potential (Kernladung $Z = 1$). (Alle Beiträge zur Bindungsenergie die auf relativistischen Effekten, den Spin, oder die Symmetrie der Wellenfunktion bzw. den Austausch von Elektronen beruhen sollen vernachlässigt werden).

a) Schätzen Sie die Bindungsenergie des angeregten Zustands ab und geben Sie die entsprechende Energie der absorbierten UV-Strahlung an.

b) Wie groß ist die Energie des emittierten Elektrons wenn der autoionisierende Zustand 2s4p in ein freies Elektron und ein He^+ -Ion im 1s-Grundzustand zerfällt?

a) Binding energy 2s-electron:

$$Z_{\text{eff}} = 2 \quad E_{2s} = -13.6 \text{ eV}$$

4p-electron:

$$Z_{\text{eff}} = 1 \quad E_{4p} = -0.85 \text{ eV}$$

$$\text{Total: } E = -14.45 \text{ eV}$$

$$\text{He ground state: } E = -79 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow \Delta E = 64.55 \text{ eV} = E_{\gamma}$$

$$b) E_{\text{kin}} = E_{\text{e}}^{(i)} - E_{\text{e}}^{(f)} = -14.45 \text{ eV} - (-54.4 \text{ eV}) = 39.95 \text{ eV}$$

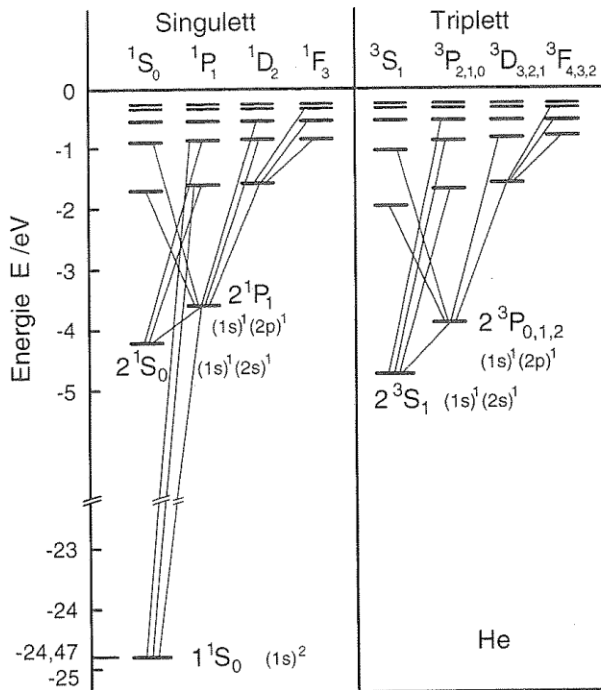


Abb. 17.1. Termschema des He-Atoms. Einige der erlaubten Übergänge sind eingezeichnet. Es gibt zwei Termsysteme, zwischen denen strahlende Übergänge verboten sind, das Singulett- und das Triplett-System. Die Übergänge im Singulett-System überspannen einen Energiebereich von 25 eV, die im Triplett-System nur 5 eV. Die 3-fache Aufspaltung der Triplett-Terme (außer 3S) durch Spin-Bahn-Kopplung ist hier nicht eingezeichnet. Die Indizes 0, 1, 2 bei dem Termsymbol $^3P_{0,1,2}$ stehen für die möglichen Quantenzahlen $J=0, 1, 2$

Mit großen Buchstaben sind hier Quantensymbole von Zuständen bezeichnet, die aus der Kopplung von mehreren (hier 2) Elektronen hervorgehen.

Das Triplett-Helium, bei dem im Gegensatz zum Singulett-System Feinstruktur vorhanden ist, heißt Orthohelium. Tiefstes Niveau ist 2^3S . Hier steht die 2 für das angeregte Elektron mit $n=2$, die hochgestellte 3 für die Multiplizität (Triplett) und der Buchstabe S für $L=0$. Leider wird sowohl die Gesamtspin-Quantenzahl wie auch ein Term mit dem Gesamtbahndrehimpuls $L=0$ mit dem gleichen Buchstaben S bezeichnet. Der Leser muß auf diesen Unterschied achten.

In diesem System stehen die Spins der beiden Elektronen parallel zueinander, die Quantenzahl des Gesamtspins ist $s_1 + s_2 = S = 1$, das magnetische Moment $\mu_S = \mu_{s_1} + \mu_{s_2}$ ist von Null verschieden. Der resultierende Gesamtspin S hat 3 Einstellmöglichkeiten zu einem inneren Magnetfeld B_i , das mit dem Bahndrehimpuls der Elektronen verknüpft ist. Die so resultierende Spin-Bahn-Kopplung führt zu einer 3fachen Feinstruktur-Aufspaltung aller Terme mit nicht verschwindendem Gesamt-Bahndrehimpuls.

Das Spektrum von Parahelium liegt hauptsächlich im ultravioletten Spektralbereich, dasjenige des Orthoheliums im infraroten und sichtbaren. Interkombination wird nicht beobachtet, d.h. es gibt keine optischen Übergänge zwischen Singulett- und Triplett-system. Vergleicht man einander entsprechende Konfigurationen in den beiden nicht kombinierenden Systemen, so stellt man besonders bei kleinen Quantenzahlen erhebliche Energieunterschiede fest. Der Zustand 2^1S_0 liegt rund 0,8 eV über dem Zustand 2^3S_1 , der Zustand 2^1P_1 rund 0,25 eV über dem Zustand 2^3P_2 . Die Bedeutung der Indizes 0, 1, 2 z. B. in 1S_0 wird erst in Abschn. 17.3.2 erläutert. – Dieser Energieunterschied zwischen Singulett- und Triplett-Konfiguration ist eine Folge der unterschiedlichen elektrostatischen Wechselwirkung der beiden Elektronen bei antiparalleler und paralleler Spin-Einstellung. Sie wird auch als Symmetrie-Energie bezeichnet, weil sie durch den unterschiedlichen mittleren Abstand der beiden Elektronen bei symmetrischer bzw. antisymmetrischer Wellenfunktion entsteht (vgl. Abschn. 17.2). Für P -Zustände wird das auch in Abb. 17.9 ersichtlich.