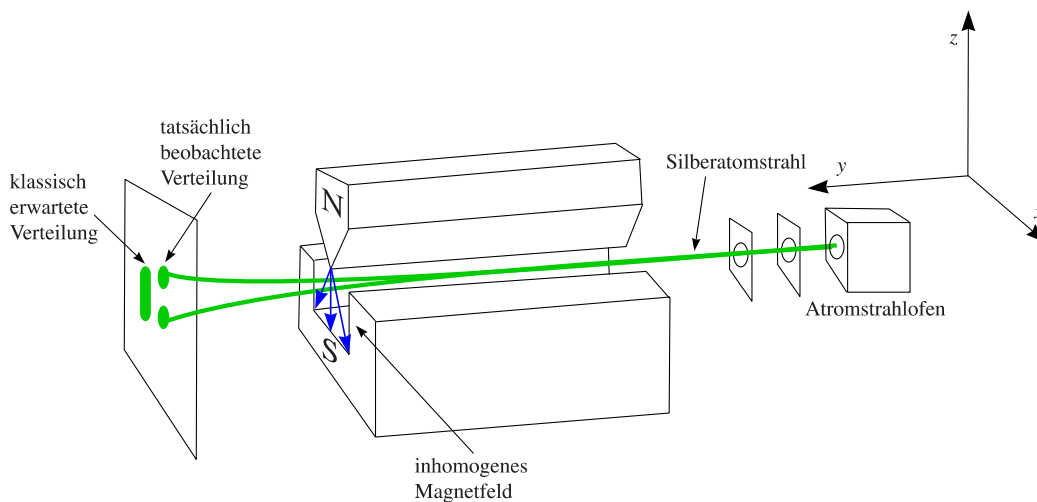


# HANDOUT ZUM ÜBUNGSBLATT NR.8

## Aufgabe 1

a)

In einem Ofen wird Silber zum Verdampfen gebracht, so dass aus einem Loch Silberatome austreten. Diese Silberatome werden mittels zweier Lochblenden zu einem Strahl fokussiert. Der Strahl durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld und trifft auf einen Schirm; auf diesem entstehen zwei silberne Flecken.



Silberatome bestehen aus einem positiv geladenen Atomkern (mit 47 Protonen und Neutronen, deren Anzahl vom betrachteten Isotop abhängt) und einer Elektronenhülle mit 47 Elektronen. Die Elektronen sind in Aufenthaltswahrscheinlichkeitsräumen (Orbitalen) angeordnet. Diese Orbitale kennzeichnet man wiederum durch ihre charakteristischen Quantenzahlen, nämlich der Hauptquantenzahl  $n$ , der Drehimpulsquantenzahl  $l$  und der magnetischen Quantenzahl  $m_l$ . Elektronen, die sich in Orbitalen mit  $l \neq 0$  befinden, besitzen einen Drehimpuls  $\mathbf{L}$  und damit ein sogenanntes magnetisches Moment:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m_e} \mathbf{L}, \quad \mu_z = \frac{e}{2m_e} L_z. \quad (1)$$

In einem inhomogenen Magnetfeld erfahren Teilchen mit einem magnetischen Moment eine Kraft. Schon 1922, als dieser Versuch von Stern und Gerlach zum ersten mal durchgeführt wurde, war bekannt, dass Silber ein äußerstes Elektron trägt und dass dieses die Drehimpulsquantenzahl  $l = 0$  besitzt. Weiterhin wusste man, dass sich die Drehimpulse der restlichen Elektronen, die in den inneren Orbitalen sitzen, gegenseitig aufheben (Hundsche Regeln). Man würde also keine Ablenkung der Silberatome im inhomogenen Magnetfeld erwarten, da diese kein magnetisches Moment besitzen dürften. Wie oben bereits erwähnt, stellt man jedoch nicht nur eine Ablenkung fest, sondern diese ist außerdem nicht kontinuierlich und es sind zwei einzelne diskrete Flecken erkennbar. Damit muss es sich um einen bisher unbekanntem quantenmechanischen Effekt handeln, würde man klassisch höchstens eine kontinuierliche Verteilung – also einen ganzen Silberstreifen – erwarten.

Die Interpretation dafür, dass zwei abgetrennte Silberflecken entstehen, ist, dass ein Elektron zusätzlich zum bekannten Drehimpuls  $\mathbf{L}$  noch einen (bisher unbekanntem) Eigendrehimpuls besitzt. Man bezeichnet diesen Eigendrehimpuls als Spin  $\mathbf{S}$ . Der Spin ist eine rein quantenmechanische Erscheinung und besitzt kein Analogon in der klassischen Physik. Er ist nämlich eine feste Eigenschaft eines jeden Teilchens und unabänderlich. Wie dem Drehimpuls ordnet man auch dem Spin eine Quantenzahl zu, die man gewöhnlich als  $s$  bezeichnet.

b)

Wie schon erwähnt, wirkt auf die Elektronen mit dem magnetischen Moment

$$\hat{\mathbf{m}} = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{L}}, \quad (2)$$

eine Kraft. Laut der klassischen Elektrodynamik ist diese (bzw. deren Mittelwert) gegeben durch:

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \langle \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) \rangle = \langle m_x \rangle \nabla B_x + \langle m_y \rangle \nabla B_y + \langle m_z \rangle \nabla B_z. \quad (3)$$

Die mittleren magnetischen Momente in  $x$ - und  $y$ -Richtung verschwinden, also  $\langle m_x \rangle = \langle m_y \rangle = 0$ . Damit gilt, sofern wir zusätzlich annehmen, dass  $B_z$  nur von  $z$  (und nicht von  $x$  und  $y$ ) abhängig ist:

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \langle m_z \rangle \nabla B_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \langle m_z \rangle (\partial B / \partial z) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Damit besitzt die Kraft nur eine Komponente in  $z$ -Richtung. Je nach magnetischem Moment werden die Elektronen dann nach oben oder unten abgelenkt, wobei die Ablenkung nach oben der Ablenkung nach unten entspricht. Da es sich um ein s-Elektron handelt, wird das magnetische Moment in  $z$ -Richtung durch die Spineinstellung in  $z$ -Richtung verursacht. Dabei gibt es zwei mögliche Eigenzustände  $|+\rangle$ ,  $|-\rangle$  des Spinoperators in  $z$ -Richtung:

$$\hat{S}_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle, \quad \hat{S}_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle. \quad (5)$$

Wir nehmen an, dass sich das Elektron im Zustand  $|+\rangle$  befindet, was einer Ablenkung nach oben entspricht:

$$\langle m_z \rangle_+ = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \langle S_z \rangle_+ = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{2} = \mu_B. \quad (6)$$

Damit ergibt sich die Kraft

$$F_z = \mu_B \frac{\partial B}{\partial z}. \quad (7)$$

Diese ist konstant und es handelt sich um eine gleichmäßig beschleunigte Bewegung in  $z$ -Richtung. Laut Aufgabenstellung nehmen wir an, dass in  $x$ -Richtung die Atome mit konstanter Geschwindigkeit fliegen:

$$v = \sqrt{\frac{2E_{\text{kin}}}{m_e}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_e}}. \quad (8)$$

Dann folgt für die in  $z$ -Richtung zurückgelegte Strecke, sofern sich das Atom noch im  $\mathbf{B}$ -Feld befindet:

$$z_1 = \frac{1}{2} a t_1^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{F_z}{m_e} \cdot \left( \sqrt{\frac{m_e}{3k_B T}} a \right)^2 = \frac{\mu_B}{2m_e} \frac{\partial B}{\partial z} \cdot \frac{m_e}{3k_B T} a^2 = \frac{\mu_B a^2}{6k_B T} \frac{\partial B}{\partial z}. \quad (9)$$

$$z_2 = v t_2 = a t_1 \cdot t_2 = \frac{\mu_B}{m_e} \frac{\partial B}{\partial z} \cdot \sqrt{\frac{m_e}{3k_B T}} a \cdot \sqrt{\frac{m_e}{3k_B T}} b = \frac{\mu_B}{3k_B T} a b. \quad (10)$$

Weiter ergibt sich dann der gesamte Abstand zwischen den Mittelpunkten der beiden Flecken:

$$2(z_1 + z_2) = 2 \frac{a \mu_B}{3k_B T} \frac{\partial B}{\partial z} \left( \frac{a}{2} + b \right) = \boxed{\frac{a e \hbar}{3m_e k_B T} \frac{\partial B}{\partial z} \left( \frac{a}{2} + b \right)}. \quad (11)$$

c)

Wir erkennen, dass Gl. (11) nur von der Elektronenmasse  $m_e$ , aber nicht von der Masse des Kerns abhängt. Damit ergibt sich für unterschiedliche Isotope (mit unterschiedlicher Neutronenzahl und damit Kernmasse) kein Unterschied. Wichtig ist nur, dass das magnetische Moment von einem einzigen s-Elektron erzeugt wird.

d)

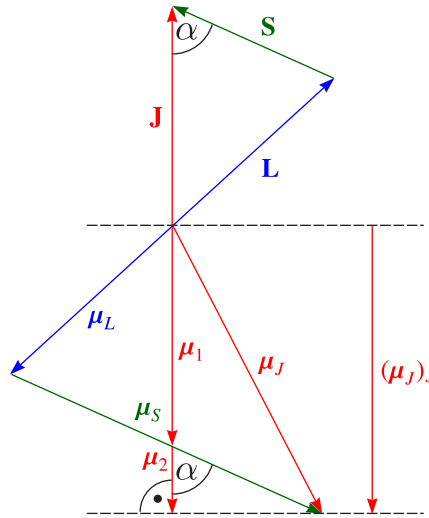
Die Silberatome im Ofen genügen der thermischen Maxwell-Boltzmann-Geschwindigkeitsverteilung. Damit haben sie unterschiedliche Geschwindigkeiten, was dazu führt, dass keine scharfen Punkte aus Silberatomen auf dem Schirm entstehen, sondern ausgewaschene Flecken.

## Aufgabe 2

Es gelten folgende Zusammenhänge zwischen den magnetischen Momenten und den jeweiligen Drehimpulsen:

$$\boldsymbol{\mu}_S = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}, \quad \boldsymbol{\mu}_L = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}, \quad (12)$$

mit  $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$  und  $g_s = 2, g_l = 1$ . Wir betrachten das Ganze im Vektorgerüstmodell:



Das magnetische Moment  $\boldsymbol{\mu}_J$  ergibt sich wiederum durch Addition von  $\boldsymbol{\mu}_S$  und  $\boldsymbol{\mu}_L$ :  $\boldsymbol{\mu}_J = \boldsymbol{\mu}_S + \boldsymbol{\mu}_L$ ; dieses zeigt jedoch dann nicht mehr in Richtung von  $\mathbf{J}$ . Der Anteil  $(\boldsymbol{\mu}_J)_J$  in Richtung von  $\mathbf{J}$  ist wie analog wie  $\boldsymbol{\mu}_S$  und  $\boldsymbol{\mu}_J$  wie folgt definiert:

$$(\boldsymbol{\mu}_J)_J = -g_j \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J}. \quad (13)$$

Zu bestimmen ist also  $g_j$ . Der Anteil  $(\boldsymbol{\mu}_J)_J$  kann ebenso als Summe von  $\boldsymbol{\mu}_1$  und  $\boldsymbol{\mu}_2$  bestimmt werden, also müssen wir zunächst diese berechnen. Hierbei ist

$$\boldsymbol{\mu}_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J}, \quad \boldsymbol{\mu}_2 = -\frac{1}{2} |\boldsymbol{\mu}_S| \cos \alpha \frac{\mathbf{J}}{|\mathbf{J}|} = -\frac{\mu_B}{\hbar} |\mathbf{S} \cos \alpha| \frac{\mathbf{J}}{|\mathbf{J}|}. \quad (14)$$

Damit ergibt sich weiter:

$$(\boldsymbol{\mu}_J)_J = \boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \left( 1 + \frac{|\mathbf{S}|}{|\mathbf{J}|} \cos \alpha \right). \quad (15)$$

Durch Quadrieren von  $\mathbf{L} = \mathbf{J} - \mathbf{S}$  (Kosinussatz) ergibt sich

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - 2|\mathbf{J}||\mathbf{S}| \cos \alpha, \quad (16)$$

und daraus lässt sich der Winkel  $\alpha$  bestimmen:

$$\cos \alpha = \frac{\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2}{2|\mathbf{J}| \cdot |\mathbf{S}|}. \quad (17)$$

Dann erhalten wir schließlich

$$\langle (\boldsymbol{\mu}_J)_J \rangle = -\frac{\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{J} \rangle \left( 1 + \frac{\langle \mathbf{J}^2 \rangle + \langle \mathbf{S}^2 \rangle - \langle \mathbf{L}^2 \rangle}{2\langle \mathbf{J}^2 \rangle} \right) = -\frac{\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{J} \rangle \left( 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right). \quad (18)$$

Vergleichen wir dies mit

$$\langle (\boldsymbol{\mu}_J)_J \rangle = -g_j \frac{\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{J} \rangle, \quad (19)$$

so kommen wir auf:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}. \quad (20)$$

c)

Einsetzen von  $l = 1$ ,  $s = 1/2$  und  $j = 1/2$  (für  $p_{1/2}$ ) in die hergeleitete Formel für  $g_j$  führt auf  $g_j = 2/3$ . Andererseits führt  $l = 0$ ,  $s = 1/2$  und  $j = 1/2$  (für  $s_{1/2}$ ) auf  $g_j = 2$ . Dies führt zu den Zeeman-Aufspaltungen

$$\Delta E_{m_j, m_j-1} = \begin{cases} 2\mu_B |\mathbf{B}|/3 & \text{für } p_{1/2} \\ 2\mu_B |\mathbf{B}| & \text{für } s_{1/2} \end{cases} . \quad (21)$$

Für reinen Bahnmagnetismus (also mit  $s = 0$  und  $j = l$ ) ergibt sich  $g_j = 1$  und für reinen Spilmagnetismus (mit  $l = 0$ ,  $s = 1/2 = j$ ) folgt  $g_j = 2$ , was auch zu erwarten war.

### Aufgabe 3

a)

Die Erwartungswert der Energieverschiebung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung lässt sich schreiben wie folgt:

$$\langle \Delta E_{l,s} \rangle = \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2\hbar^2} \frac{\langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \rangle}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} . \quad (22)$$

Wegen

$$\langle \mathbf{j}^2 \rangle = \langle (\mathbf{s} + \mathbf{l})^2 \rangle = \langle \mathbf{s}^2 \rangle + \langle \mathbf{l}^2 \rangle + 2\langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \rangle , \quad (23)$$

$$\Leftrightarrow \langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \rangle = \frac{1}{2} (\langle \mathbf{j}^2 \rangle - \langle \mathbf{s}^2 \rangle - \langle \mathbf{l}^2 \rangle) = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)) , \quad (24)$$

ergibt sich:

$$\langle \Delta E_{l,s} \rangle = \frac{\alpha^4 m_e c^2}{4} \frac{j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} . \quad (25)$$

Weiterhin gilt:

$$j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \begin{cases} l & \text{für } j = l + 1/2, s = 1/2 \\ -(l+1) & \text{für } j = l - 1/2, s = 1/2 \end{cases} , \quad (26)$$

und damit ergeben sich die folgenden Energieverschiebungen:

$$\langle \Delta E_{l,s} \rangle_{j=l+1/2} = \frac{\alpha^4 m_e c^2}{4} \frac{1}{n^3 (l+1/2)(l+1)} , \quad \langle \Delta E_{l,s} \rangle_{j=l-1/2} = -\frac{\alpha^4 m_e c^2}{4} \frac{1}{n^3 l(l+1/2)} . \quad (27)$$

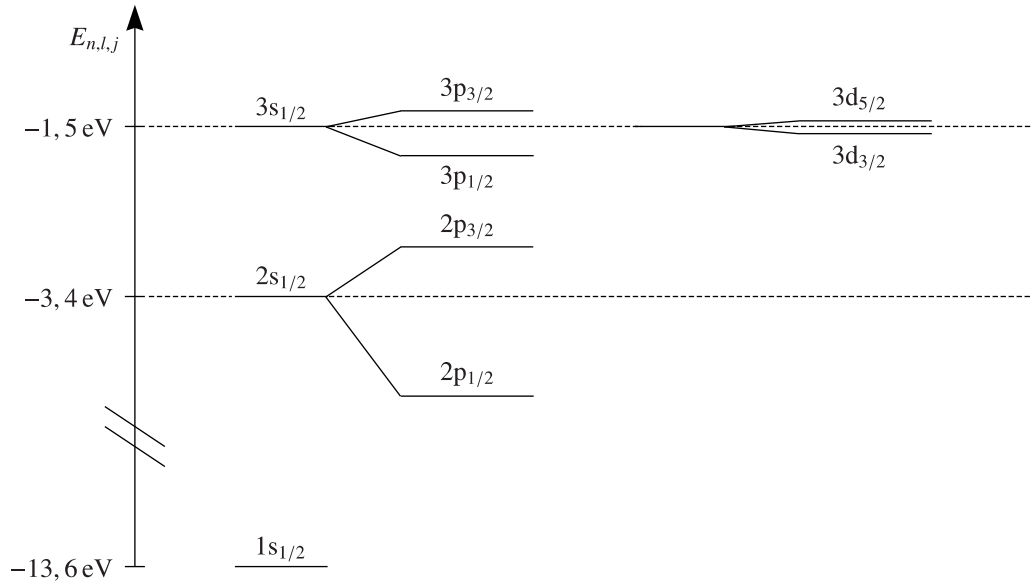
b)

$n$	1	2		3		3	
$l$	0	1		1		2	
		eV	1/cm	eV	1/cm	eV	1/cm
$\langle \Delta E_{l,s} \rangle_{j=l+1/2}$	0	$1,51 \cdot 10^{-5}$	0,122	$4,48 \cdot 10^{-6}$	0,036	$1,79 \cdot 10^{-6}$	0,014
$\langle \Delta E_{l,s} \rangle_{j=l-1/2}$	0	$-3,03 \cdot 10^{-5}$	-0,244	$-8,97 \cdot 10^{-6}$	-0,072	$-2,69 \cdot 10^{-6}$	-0,022

- Aufspaltungen sehr gering, aufgrund der Dopplerverbreiterung deshalb mit konventionellen Methoden meistens nicht messbar
- bei bestimmten Atomen (wie beispielsweise Lithium mit einem Elektron in der nicht-abgeschlossenen äußeren Schale) doch messbar, da die Aufspaltung mit  $Z^4$  skaliert (bei Lithium führt dies zu einem Faktor  $3^4 = 81$ )

c)

Das zugehörige Termschema sieht wie folgt aus:



Die Aufspaltungen der Niveaus wurden um mehrere Zehnerpotenzen skaliert.

- für  $l = 0$ : nur Spin-Magnetismus, deshalb keine Spin-Bahn-Kopplung und daher auch keine Spin-Bahn-Aufspaltung
- Spin-Bahn-Aufspaltung hebt sowohl  $l$ - als auch  $j$ -Entartung auf

## Aufgabe 4

a)

Es handelt sich dabei um relativistische Korrekturen zur Elektronmasse (Dirac-Gleichung) und Korrekturen zum elektrischen Feld.

b)

Die gesamte Feinstrukturaufspaltung berechnet sich durch

$$\langle \Delta E_{\text{FS}} \rangle = \langle \Delta E_{n,j} \rangle = E_n \frac{\alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}. \quad (28)$$

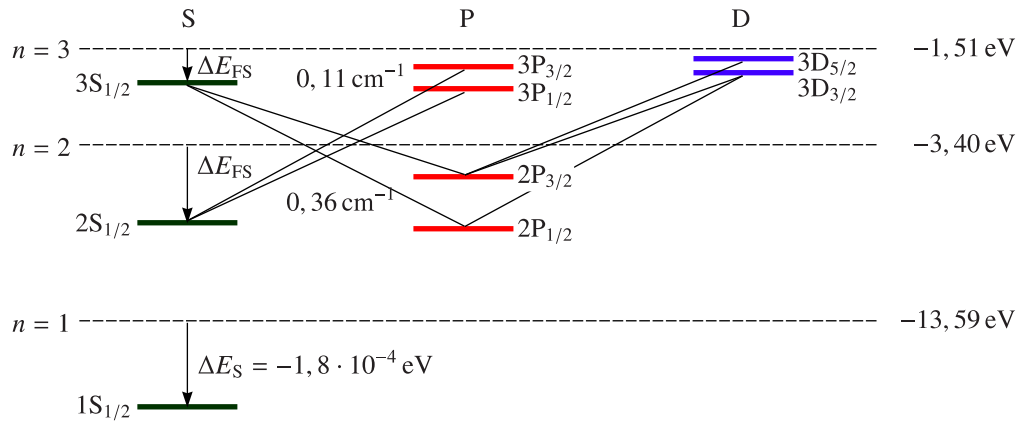
Die Werte  $n \in \{1, 2, 3\}$  sollen untersucht werden. Dabei ist  $l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$  und  $j = l+1/2$  bzw.  $j = l-1/2$ . Machen wir dazu eine Tabelle:

$n$	1	2	2	2	3	3	3	3	3
$l$	0	0	1	1	0	1	1	2	2
$j$	1/2	1/2	3/2	1/2	1/2	3/2	1/2	3/2	5/2
$\langle \Delta E_{\text{FS}} \rangle [10^{-5} \text{ eV}]$	-18,12	-5,66	-1,13	-5,66	-2,01	-0,67	-2,01	-0,67	-0,22

- Feinstruktur-Aufspaltung senkt alle Niveaus (auch das s-Niveau)
- hebt die  $l$ -Entartung auf und bewahrt die  $j$ -Entartung

## Das Spektrum des Wasserstoffatoms

Wir betrachten die Eigenschaften des Spektrums des Wasserstoffatoms (mit Feinstruktur-Aufspaltung):

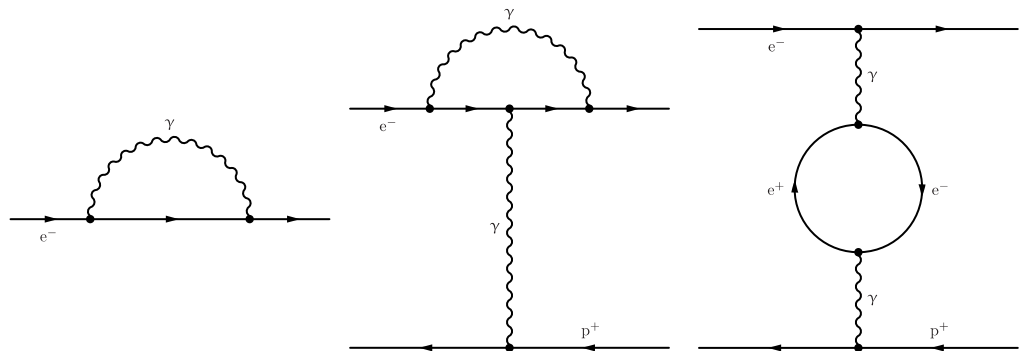


- Die Zustände  $n = 1, 2, 3$  (gestrichelte Linien) entsprechen dem Bohr-Modell, die Zustände  $l = 1$  (S),  $l = 2$  (P) und  $l = 3$  (D) dem Sommerfeld-Modell.
- Inneratomare Wechselwirkungen im Wasserstoffatom:

- Coulomb-Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron, führt zur Energieniveaus  $E_{n,l} = -R_y Z^2/n^2$ , wobei  $R_y \sim \alpha^2$  mit der Feinstrukturkonstanten

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (29)$$

- Energieniveaus liegen im eV-Bereich
- Kopplung von Spin  $S$  und Drehimpuls  $L$  des Elektrons (Spin-Bahn-Kopplung): ein Beitrag der Feinstruktur-Aufspaltung; die relativistische Elektronenmasse ist ein weiterer Beitrag
- Kopplung von Gesamtdrehimpuls  $J = L+S$  des Elektrons und Kernspin  $I$ : führt zur Hyperfeinstruktur-Aufspaltung
- Effekte der Quantenelektrodynamik (QED): Wechselwirkung des Elektrons mit seinem eigenen Strahlungsfeld, Erzeugung virtueller Elektron-Positron-Paare (oft auch anschaulich als Zitterbewegung des Elektrons bezeichnet aufgrund der Emission und Absorption virtueller Photonen)



führt zu einer Abänderung des Coulomb-Potentials, der erste Beitrag führt zu einem Potential der Form

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + C \cdot \frac{\alpha^2}{m_e^2}, \quad (30)$$

mit einer Konstanten  $C$ .

- Niveaus sind infolge der Feinstruktur-Aufspaltung abgesenkt
- Aufspaltung allein durch die Spin-Bahn-Kopplung führt zur Aufhebung der  $L$ - und der  $J$ -Entartung
- Feinstruktur (Spin-Bahn-Kopplung plus relativistische Korrekturen zur Energie-Impuls-Beziehung des Elektrons (Darwin-Term): Berücksichtigung der Diracgleichung) führt zur Aufhebung der  $L$ -Entartung, bestehende  $J$ -Entartung,  $\Delta E_{FS} \sim R_y Z^4 \alpha^4$ , also zusätzliche Unterdrückung mit  $1/137^2$  im Vergleich zu den Niveaus  $E_{n,l}$

- Hyperfeinstruktur: Unterdrückung von  $\Delta E_{\text{HFS}}$  mit  $\alpha^2$  und dem Inversen der Kernmasse  $1/m_K$
- Lamb-Shift führt zur Aufhebung der  $J$ -Entartung
- Erlaubt sind Übergänge mit  $\Delta L \in \{-1, +1\}$ ;  $\Delta J \in \{-1, 0, +1\}$ ,  $\Delta M_J \in \{-1, 0, +1\}$