

Ferienkurs Experimentalphysik 4 - SS 2008

1 Verständnisfragen

- Was ist eine gute Quantenzahl? Was sind die guten Quantenzahlen der Wasserstoffniveaus wenn man sowohl die relativistische Energiekorrektur als auch die Feinstrukturaufspaltung berücksichtigt?
- Welcher Zusammenhang besteht zwischen Feinstruktur und Zeeman-Effekt?
- Erklären Sie kurz welches quantenmechanische Bild das klassische Bild eines Bohrschen Atoms ersetzt.

Lösungsvorschlag

- Eine gute Quantenzahl impliziert eine Erhaltungsgröße, d.h. der Operator, deren Eigenwert sie ist, kommutiert mit dem Hamiltonoperator. Gute Quantenzahlen charakterisieren einen quantenmechanischen Zustand vollständig (auf alle Zeit), falls er keiner externen Störung unterliegt. Die guten Quantenzahlen in diesem Fall sind n , j und m_j (siehe Vorlesung).
- Die Feinstrukturaufspaltung kann als Zeeman-Aufspaltung aufgefasst werden, dabei koppelt das magnetische Spinmoment mit dem durch die Bahnbewegung des Elektrons erzeugten Magnetfeld.
- Das Bild des quantenmechanischen Orbitals ersetzt das einer Bohrschen Bahn. Man kann nicht mehr von einer Bahnbewegung des Elektrons sprechen, sondern nur noch die Wahrscheinlichkeit angeben das Elektron an einer bestimmten Position im Orbital zu messen. Dabei wird oft das Bild einer Elektronenwolke herangezogen, dieses Bild ist aber nur dann richtig, wenn man sich klar macht, dass die Wolke nur eine graphische Darstellung aller möglichen Positionen des Elektrons - gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit es dort zu messen - ist.

2 Spin-Bahn-Kopplung

Die Feinstrukturaufspaltung der Wasserstoffniveaus entsteht durch die sogenannte Spin-Bahn-Kopplung: das magnetische Moment des Elektrons koppelt an das durch die eigene Bahnbewegung erzeugte Magnetfeld. Wir betrachten ein halbklassisches Modell der Spin-Bahn-Kopplung und wollen daraus einen Ausdruck für die Energieverschiebung der Wasserstoffniveaus herleiten.

- Betrachten wir zunächst das Wasserstoffatom aus dem Ruhesystem des Elektrons, dann bewegt sich der Kern um das Elektron. Welches Magnetfeld erzeugt er nach klassischer Rechnung am Ort des Elektrons?
- Wie sieht das Magnetfeld aus wenn man es klassisch ins Ruhesystem des Kerns transformiert?
- Bei vollständig relativistischer Behandlung des Feldes ergibt sich im Ruhesystem des Kerns ein zusätzlicher Faktor $1/2$, der *Thomas-Faktor* (eine schöne Herleitung des Thomas Faktors findet sich z.B. in *Jackson, klass. Elektrodynamik* auf S. 633-639). Leiten Sie nun unter Verwendung des transformierten Feldes einen Ausdruck für die Energieverschiebung ΔE_{FS} her.
- Geben Sie die Verschiebung des 'Schwerpunkts' der Energieniveaus mit der Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung an. Gewichten Sie dabei jedes Niveau (n, j) mit der Anzahl seiner magnetischen Unterzustände. Warum hätte man das Ergebnis so erwarten können?

Lösungsvorschlag

- (a) In unserer klassischen Rechnung nehmen wir an, dass das Proton sich in einer Kreisbahn um das Elektron bewegt, d.h. die Situation entspricht einer stromdurchflossenen Leiterschleife um das Elektron. Dann ist das Magnetfeld mit Biot-Savart:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \int_C \frac{d\mathbf{l} \times \mathbf{r}}{r^3} \quad (1)$$

wobei C der Weg um die geschlossene Leiterschleife und \mathbf{r} der Abstandsvektor vom Elektron im Ursprung des Koordinatensystems zum Proton ist.

Entlang der Leiterschleife ist die Winkelbeziehung zwischen $d\mathbf{l}$ und \mathbf{r} konstant und wir können $\frac{\times \mathbf{r}}{r^3}$ aus der Integration ziehen. Damit gilt unter Verwendung, dass $d\mathbf{l} = dl \hat{e}_\phi$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \frac{\hat{e}_\phi \times \mathbf{r}}{r^3} \underbrace{\int_C dl}_{=2\pi r} \quad (2)$$

Die Definition des Stroms I ist

$$I = \frac{Q}{T} \quad (T = \frac{2\pi r}{v}, \text{ Umlaufperiode um die Leiterschleife}) \quad (3)$$

Mit $Q = Ze$ gilt also

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} \mathbf{v} \times \mathbf{r} \quad (4)$$

wobei $\mathbf{v} = v \hat{e}_\phi$.

- (b) Wir wollen nun das Magnetfeld klassisch ins Ruhesystem des Protons transformieren. Man kann sich leicht klar machen, dass diese Transformation den Betrag von \mathbf{v} nicht verändert, da es sich um eine Relativbewegung von Elektron und Proton handelt; zudem muss \mathbf{v} auch im neuen Koordinatensystem in \hat{e}_ϕ -Richtung zeigen. Zudem ist der radiale Abstand r in beiden Koordinatensystemen gleich.

Im Ruhesystem des Elektrons haben wir für die Berechnung in (a) verwendet, dass \mathbf{r} der Abstandsvektor vom Elektron im Ursprung des Koordinatensystems zum Proton ist, also $\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e$, wobei wir $\mathbf{r}_e = 0$ gesetzt haben. Setzen wir nun den Koordinatenursprung an die Position des Protons, dann ist der Abstandsvektor weiterhin $\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e$ aber nun ist $\mathbf{r}_p = 0$, d.h. der Ausdruck für das Magnetfeld aus (a) ist nun

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} \mathbf{v} \times (-\mathbf{r}_e) \quad (5)$$

Weiterhin können wir obigen Ausdruck mit der Definition des Drehimpulses des Elektrons im Ruhesystems des Protons, $\mathbf{l} = m_e (\mathbf{r}_e \times \mathbf{v})$, umschreiben zu

$$\mathbf{B}_l(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3 m_e} \mathbf{l} \quad (6)$$

Anmerkung:

Man kann sich das Wechseln des Vorzeichens des Magnetfelds bei der Transformation auch damit klar machen, dass nach der Transformation nun ein negatives statt ein positives Teilchen umläuft, der Drehsinn sich aber nicht geändert hat. Betrachtet man es so, darf man nicht die Definition des Abstandsvektors ändern.

- (c) Die Energieverschiebung ΔE_{FS} entsteht aus der Kopplung des magnetischen Spinmoments des Elektrons an das aus der Bahnbewegung erzeugte Magnetfeld, also

$$\Delta E_{FS} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l \quad (7)$$

mit $\vec{\mu}_s = -g_s (\mu_b/\hbar) \mathbf{s}$, dem magnetischen Spinmoment.

Folglich ist mit dem um den Thomas-Faktor modifizierten Magnetfeld aus (b)

$$\Delta E_{FS} = \frac{\mu_0 g_s Z e^2}{16 \pi m_e^2 r^3} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \quad (8)$$

das Skalarprodukt lässt sich noch wie folgt umschreiben

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = \frac{1}{2} [\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2] = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (9)$$

und damit erhalten wir

$$\Delta E_{FS} = \frac{\mu_0 g_s Z e^2 \hbar^2}{32 \pi m_e^2 r^3} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (10)$$

- (d) Für $s = \frac{1}{2}$ spaltet die Spin-Bahn-Kopplung ein Energieniveau in zwei Niveaus mit $j = l \pm s$ auf. Um uns Schreibarbeit zu sparen kürzen wir den Vorfaktor des in (c) hergeleiteten Ausdrucks mit c ab, $c = \frac{\mu_0 g_s Z e^2 \hbar^2}{32 \pi m_e^2 r^3}$. Dann gilt

$$\Delta E_{l+\frac{1}{2}} = c \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = c \left(l^2 + 2l + \frac{3}{4} - l^2 - l - \frac{3}{4} \right) = c l \quad (11)$$

$$\Delta E_{l-\frac{1}{2}} = c \left[\left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = c \left(l^2 - \frac{1}{4} - l^2 - l - \frac{3}{4} \right) = -c(l+1) \quad (12)$$

Die Anzahl der magnetischen Unterzustände ist jeweils $2j+1$ und damit erhält man für die beiden Niveaus

$$N_{l+\frac{1}{2}} = 2 \left(l + \frac{1}{2} \right) + 1 = 2(l+1) \quad (13)$$

$$N_{l-\frac{1}{2}} = 2 \left(l - \frac{1}{2} \right) + 1 = 2l \quad (14)$$

Folglich ist das gewichtete Energiemittel der Spin-Bahn-Aufspaltung

$$\begin{aligned} \langle \Delta E \rangle &= \frac{1}{N_{ges}} (\Delta E_{l+\frac{1}{2}} N_{l+\frac{1}{2}} + \Delta E_{l-\frac{1}{2}} N_{l-\frac{1}{2}}) \\ &= \frac{1}{N_{ges}} c \cdot 2 \cdot (l(l+1) - (l+1)l) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (15)$$

Das Ergebnis war auch so zu erwarten, denn die durch die Spin-Bahn-Kopplung hervorgerufene energetische Aufspaltung in Unterniveaus kann nicht die Gesamtenergie des Ausgangsniveaus ändern, d.h. der Energieschwerpunkt muss auf der Höhe des Ausgangsniveaus liegen.

3 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinstruktur ist eine weitere Aufspaltung magnetischer Zustände, die analog zur Spin-Bahn-Kopplung durch die Kopplung des magnetischen Moments μ_j eines Hüllenelektrons mit dem magnetischen Moment des Kerns μ_I entsteht. Dabei bezeichnet \mathbf{j} den Gesamtspin des Hüllenelektrons, \mathbf{I} den Gesamtspin des Kerns, zusammen ergeben die beiden den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{F} = \mathbf{j} + \mathbf{I}$.

- (a) Schätzen Sie das Verhältnis $\frac{\Delta E_{HFS}}{\Delta E_{FS}}$ der Hyperfeinaufspaltung zur Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung ab.
- (b) Der Grundzustand des Deuteriums ist in zwei Hyperfein-Niveaus mit $F = 1/2$ und $F = 3/2$ aufgespalten. Welchen Wert muss entsprechend die dem Deuterium zugeordnete Spinquantenzahl I haben? Was kann man daraus über den Spin des Protons und Neutrons im Kern schließen?

- (c) In welche Hyperfeinzustände spaltet dann das $p_{3/2}$ -Niveau des Deuteriums auf?

Lösungsvorschlag

- (a) Bei der Spin-Bahn-Kopplung wechselwirkt der Spin des Elektrons mit dem Bahndrehimpuls,

$$\Delta E_{FS} = \frac{g_s \mu_b}{\hbar} \mathbf{s} \cdot \mathbf{B}_l \quad (16)$$

während bei der Hyperfeinstruktur der Kernspin mit dem vom Gesamtdrehimpuls der Hülle erzeugte Magnetfeld wechselwirkt

$$\Delta E_{HFS} = \frac{g_I \mu_k}{\hbar} \mathbf{I} \cdot \mathbf{B}_j \quad (17)$$

Die Drehimpulse \mathbf{s} , \mathbf{l} , \mathbf{j} und \mathbf{I} sind alle in der Größenordnung von \hbar , auch \mathbf{B}_l und \mathbf{B}_j sind von der gleichen Größenordnung. Die beiden Lande-Faktoren sind von der Größenordnung 1, damit liegt der Hauptunterschied im Verhältnis von μ_k zu μ_b .

Mit der Definition des Bohr'schen Magnetons

$$\mu_b = \frac{e \hbar}{2 m_e} \quad (18)$$

und der Definition des Kernmagnetons

$$\mu_k = \frac{e \hbar}{2 m_k} \quad (19)$$

sowie der Tatsache, dass $m_k \approx 1836 m_e$ (für Wasserstoff), können wir damit das gewünschte Verhältnis abschätzen:

$$\frac{\Delta E_{HFS}}{\Delta E_{FS}} \sim \frac{\mu_k}{\mu_b} \approx \frac{1}{1836} \quad (20)$$

Also ist $\frac{\Delta E_{HFS}}{\Delta E_{FS}}$ ungefähr von der Größenordnung $1/2000$.

- (b) Die Elektronenkonfiguration des Grundzustandes des Deuteriums ist identisch zu der des Wasserstoffatoms, also $l = 0$, $s = j = 1/2$. Aus der Tatsache, dass \mathbf{I} und \mathbf{j} zu \mathbf{F} koppeln, wissen wir, dass

$$|j - I| \leq F \leq j + I \quad (21)$$

und da es nur die beiden Niveaus $F = 1/2$ und $F = 3/2$ gibt, muss $I = 1$ sein.

Das Proton und Neutron im Kern haben jeweils halbzahligen Spin, d.h. um eine Kernspin von $I = 1$ zu erzeugen müssen ihre Spins parallel ausgerichtet sein.

- (c) Das $p_{3/2}$ -Niveau hat Gesamtimpuls $j = 3/2$ ($l = 1$, $s = 1/2$) und mit (b) wissen wir $I = 1$, dann folgt wiederum aus

$$|j - I| \leq F \leq j + I, \quad (22)$$

dass es drei Hyperfeinzustände geben kann: $F = 1/2$, $F = 3/2$ und $F = 5/2$.

4 Wasserstoffatom

Wir betrachten am Beispiel des $2p \rightarrow 1s$ Übergang des Wasserstoffatoms atomare Übergänge in Ein-Elektronensystemen.

- (a) Verifizieren Sie, dass der $2p \rightarrow 1s$ Übergang ein erlaubter elektrischer Dipolübergang ist, also die Bedingung $\Delta l = \pm 1$ und $\Delta m = 0, \pm 1$ erfüllt.
- (b) Zeigen Sie, dass die relative Linienbreite $\frac{\Delta\omega}{\omega}$ des $2p \rightarrow 1s$ Übergangs von der Größenordnung α^3 ist. Schätzen Sie dabei großzügig ab. (Hinweis: Die Linienbreite $\Delta\omega$ entspricht der Zerfallswahrscheinlichkeit.)

Die folgenden Formeln könnten sich als nützlich erweisen:

$$R_{10}(r) = 2 a_B^{-3/2} e^{-r/a_B}, \quad R_{21}(r) = \frac{r}{\sqrt{24}} a_B^{-5/2} e^{-r/(2a_B)}, \quad \int_0^\infty x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, a > 0)$$

Lösungsvorschlag

- (a) Die beiden Zustände - nach Quantenzahlen aufgeschlüsselt - sind

$$1s : n = 1, l = 0, m = 0 \quad (23)$$

$$2p : n = 2, l = 1, m = 0, \pm 1 \quad (24)$$

und man sieht sofort, dass der Übergang $2p \rightarrow 1s$ immer die Dipolwahlregeln erfüllt.

- (b) Zur Berechnung der relativen Linienbreite müssen wir zuerst die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand $2p$ in den Zustand $1s$ berechnen. Es handelt sich bei dem Übergang um einen spontanen Übergang, daher verwenden wir den entsprechenden Einsteinkoeffizienten

$$A_{2p,1s} = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c^3} \omega_{2p,1s}^3 |\langle 1s | \mathbf{r} | 2p \rangle|^2 \quad (25)$$

wobei $\omega_{2p,1s} = (E_{2p} - E_{1s})/\hbar$ und $|\langle 1s | \mathbf{r} | 2p \rangle|$ das Matrixelement des Ortsoperators \mathbf{r} ist.

Wir wollen nun das Matrixelement abschätzen:

$$\begin{aligned} |\langle 1s | \mathbf{r} | 2p \rangle| &= \left| \int_0^\infty R_{21}(r) r R_{10}(r) r^2 dr \int Y_{1m}^*(\vartheta, \phi) \hat{\mathbf{r}} Y_{00}(\vartheta, \phi) d\Omega \right| \\ &\propto \int_0^\infty R_{21}(r) R_{10}(r) r^3 dr \end{aligned} \quad (26)$$

da das Integral über den Einheitsvektor $\hat{\mathbf{r}}$ und die Kugelflächenfunktionen lediglich einen konstanten nicht-verschwindenden Beitrag (in $\hat{\mathbf{e}}_z$ -Richtung) liefert.

Das Radialintegral können wir mit der angegebenen Formel exakt berechnen:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_{21}(r) R_{10}(r) r^3 dr &= \frac{2}{\sqrt{24} a_B^4} \int_0^\infty r^4 e^{-3/(2a_B)} dr \\ &= \frac{2}{\sqrt{24} a_B^4} \frac{4!}{(3/2)^5} a_B^5 = 1,29 a_B \approx a_B \end{aligned} \quad (27)$$

Damit ist also das Matrixelement von der Größenordnung des Bohrschen Radius, $|\langle 1s | \mathbf{r} | 2p \rangle| \sim a_B$.

Die Frequenz des Übergangs berechnet sich aus den Energieniveaus des Wasserstoffatoms ($Z = 1$),

$$\begin{aligned} \omega_{2p,1s} &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\hbar} \frac{1}{a_B} \left[-\frac{1}{4} - (-1) \right] \\ &= \frac{3}{8} \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}}_{=\alpha \cdot c} \frac{1}{a_B} \sim \frac{\alpha c}{a_B} \end{aligned} \quad (28)$$

Und damit erhalten wir als grobe Abschätzung

$$A_{2p,1s} = \underbrace{\frac{e^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c}}_{\approx\alpha} \frac{1}{c^2} \left(\frac{\alpha c}{a_B}\right)^2 \omega_{2p,1s} a_B^2 = \alpha^3 \omega_{2p,1s} \quad (29)$$

Mit dem Hinweis aus der Angabe kennen wir den Zusammenhang zwischen Linienbreite und Zerfallswahrscheinlichkeit, $\Delta\omega = A_{2p,1s}$, also erhalten wir

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_{2p,1s}} \sim \alpha^3 \quad (30)$$

wie in der Aufgabenstellung gefordert.