

## Ferienkurs Experimentalphysik 4 - SS 2008

### 1 Hundsche Regel

Geben Sie eine anschauliche Erklärung der Hundschen Regel, dass der energetisch tiefste Zustand eines Mehrelektronenatoms durch den maximalen mit dem Pauli-Prinzip verträglichen Gesamtspin aller Elektronen realisiert wird.

#### Lösungsvorschlag

Bei maximalem Spin aller Elektronen in einer nicht aufgefüllten Schale haben die Elektronen den grössten mittleren Abstand voneinander. Da ihre Spinfunktion symmetrisch gegen Vertauschung zweier Elektronen ist, muss der räumliche Anteil der Wellenfunktion antisymmetrisch sein. Dies gibt Nullstellen von  $|\psi|^2$  immer dann, wenn zwei Elektronen am gleichen Ort sind, d.h.  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$  für  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ . Die Elektronen haben daher eine grössere mittlere Entfernung zueinander, was schliesslich die Wechselwirkungsenergie (Abstossung) verringert.

### 2 Auswahlregeln

- Macht der Begriff *verbotener Übergang* Sinn? Was besagt die Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$  für ein-Elektronensysteme? Macht hier der Begriff Auswahlregel Sinn?
- Welche Spektrallinien im höchsten Anregungsniveau kann man in der Emission von H-Atomen beobachten, wenn diese durch Elektronenstoss eine Anregungsenergie von  $E = 13.3eV$  erhalten? Zuvor sind alle H-Atome im Grundzustand. Beachten Sie nur die Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$ .
- Geben Sie ein Beispiel bei den Übergängen von (b) an, das durch die Auswahlregel  $\Delta j = 0, \pm 1$  verboten ist.
- Geben Sie ein Beispiel für zwei Übergänge von (b) an, die energetisch entartet sind.

#### Lösungsvorschlag

- Der Begriff des *verbotenen Übergangs* ist aus historischer Sicht der Atomphysik zu betrachten. Man hat verschiedene Frequenzen beobachtet, die durch eine relativ einfache Formel zu beschreiben sind. Aber nicht alle Übergänge, die damit möglich wären sind in der Natur auch realisiert. Aus der damaligen Unwissenheit des genauen Vorgangs (d.h. Emission von einem Lichtquant mit Drehimpuls  $\hbar$ ) sprach man von einem *verbotenen Übergang*. Die einfache Erklärung für die Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$  ist, dass zu der Energieerhaltung (die einfache Formel) noch die Drehimpulserhaltung kommt. Auswahlregel und *verbotener Übergang* sind also nichts anderes als die Befolgung von Erhaltungssätzen. Hinweis: Nach der Dirac-Gleichung sind die Energieniveaus im Wasserstoffatom gegeben durch:

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

Mit  $E_n$  aus 2 und der Feinstrukturkonstanten  $\alpha \approx 1/137$ . Die Niveaus hängen also nur von  $j$  und  $n$  ab.

- (b) Die Energie im Wasserstoffatom bei der Hauptquantenzahl  $n$  ist gegeben durch:

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2} \quad (2)$$

Im Grundzustand mit  $n = 1$  ist die Energie  $E_1 = -13.6\text{eV}$ . Diese wird durch das Elektron mit der Energie  $E_a = 13.3\text{eV}$  erhöht. Das neu besetzte Niveau mit der Energie  $E_n$  muss kleiner gleich dieser Energie sein:

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2} \leq E_1 + E_a \quad (3)$$

$$\rightarrow n \leq \sqrt{\frac{R_y}{E_1 - E_a}} = \sqrt{\frac{13.6}{13.6 - 13.3}} = \sqrt{45.3} \quad (4)$$

$$\rightarrow n \leq 6 \quad (5)$$

Für  $n = 6$  folgen dann mit  $\Delta l = \pm 1$  und  $\Delta j = 0, \pm 1$  diese Übergänge:

$$6s \rightarrow 5p, 4p, 3p, 2p \quad (6)$$

$$6p \rightarrow 5s, 4s, 3s, 2s, 1s, 5d, 4d, 3d \quad (7)$$

$$6d \rightarrow 5p, 4p, 3p, 2p, 5f, 4f \quad (8)$$

$$6f \rightarrow 5d, 4d, 3d, 5g \quad (9)$$

$$6g \rightarrow 5f, 4f \quad (10)$$

$$6h \rightarrow 5g \quad (11)$$

- (c) Der Übergang  $6p_{1/2} \rightarrow 5d_{5/2}$  ist wegen  $\Delta j = 5/2 - 1/2 = 2$  nicht erlaubt.

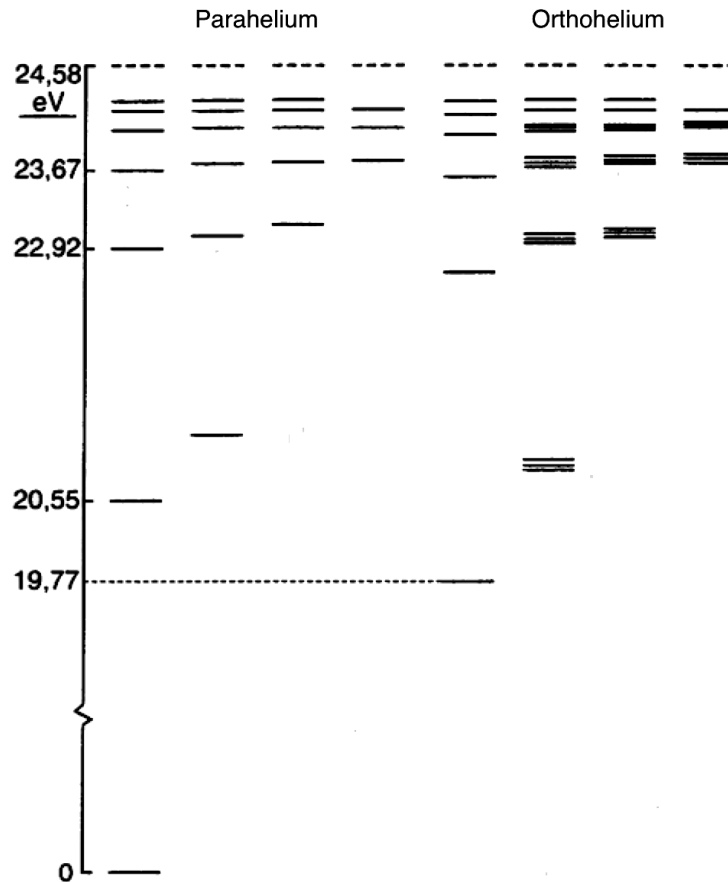
- (d) Nach Gleichung 1 hängen die Energieniveaus nur von  $n$  und  $j$  ab. So sind z.B. die Übergänge  $6s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$  und  $6p_{1/2} \rightarrow 5s_{1/2}$  energetisch entartet.

### 3 Para- und Orthohelium

Das Helium-Atom ist ein Zweielektronensystem. Die Spins der Elektronen können dabei parallel und antiparallel orientiert sein, damit gibt es Spin-Triplett und Spin-Singulett Zustände. Man nennt die Heliumzustände mit Spin-Triplett *Orthohelium* und solche mit Spin-Singulett *Parahelium*.

Im Helium sind die Kopplungsenergien zwischen den magnetischen Bahnmomenten und den Spinmomenten der beiden Elektronen groß gegen die Kopplungsenergie zwischen dem Spin- und Bahn-Moment. Man spricht in diesem Fall von einer L-S-Kopplung (oder auch Russel-Sanders-Kopplung), d.h. die Bahndrehimpulse  $\mathbf{l}$  bzw. Spins  $\mathbf{s}$  koppeln erst zu einem Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{L}$  bzw. Gesamtspin  $\mathbf{S}$  und dann erst zum Drehimpuls  $\mathbf{J}$  der gesamten Elektronenhülle.

- (a) Geben Sie den Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{L}$  und den Gesamtspin  $\mathbf{S}$  an. Was ist ihr Betrag und welche Werte können sie annehmen?
- (b) Geben Sie die möglichen Werte von  $\mathbf{J}$  in Abhängigkeit von  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$  an. Veranschaulichen Sie sich mit Hilfe von Vektordiagrammen die Kopplung der Bahndrehimpulse (bis  $L = 2$ ) und weiterhin die Kopplung der Spin- und Bahndrehimpulse zum Drehimpuls der Elektronenhülle für den Fall  $L = 2$  im Triplett-Zustand.
- (c) In der folgenden Grafik ist das Termschema des Heliums (bis  $L = 3$ ) gezeigt. Benennen Sie die Zustände bis  $n = 2$  entsprechend ihrer Quantenzahlen,  $n^{2S+1}L_J$ . Rechtfertigen Sie dabei die energetische Reihenfolge der Zustände in der Feinstrukturaufspaltung des  $2^3P$ -Niveaus. (Hinweis:  $C_{SL}^{He} \propto (Z - 3) \alpha^2$ )



- (d) Warum gibt es kein Orthoheliumniveau mit  $n = 1$ ?
- (e) Erklären Sie qualitativ warum die Energieniveaus des Orthohelium bei gleichen räumlichen Quantenzahlen unter denen des Paraheliums liegen.

### Lösungsvorschlag

- (a) Der Gesamtdrehimpuls der beiden Elektronen ist definiert als

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2, \quad (12)$$

sein Betrag entspricht der Wurzel des Eigenwerts des Operators  $\hat{\mathbf{L}}^2$ , also  $|\mathbf{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$ .  $L$  nimmt dabei für  $l_1 \leq l_2$  ganzzahlige Werte zwischen  $l_1 - l_2$  und  $l_1 + l_2$  an.

Analog ist der Gesamtspin der beiden Elektronen gegeben durch

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2, \quad (13)$$

mit  $|\mathbf{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$ , dem Eigenwert des Operators  $\hat{\mathbf{S}}^2$ .  $S$  kann die Werte  $S = s_1 \pm s_2$  annehmen, also  $S = 0$  oder  $S = 1$ .

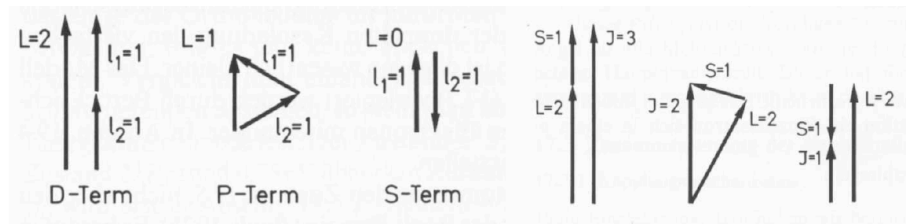
(Eine Herleitung zu den Eigenwerten von Drehimpulsoperatoren ist z.B. in *Schwabl, Quantenmechanik* auf S. 110 - 112 zu finden.)

- (b) Der Gesamtdrehimpuls der Hülle ist definiert als

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (14)$$

sein Betrag ist  $|\mathbf{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$ , dem Eigenwert des Operators  $\hat{\mathbf{J}}^2$ .

Er kann dabei Werte zwischen  $L - S$  und  $L + S$  annehmen, also für  $S = 0$  ist  $J = L$  (Singulett-Zustand), und für  $S = 1$  gilt offensichtlich  $J = 1$  falls  $L = 0$  und  $J = L - 1, L, L + 1$  falls  $L \geq 1$  (Triplet-Zustand).



Die linken drei Diagramme veranschaulichen die Drehimpulskopplung von  $l_1$  und  $l_2$  zum Gesamtdrehimpuls  $L$  (bis  $L=2$ ), die rechten drei Diagramme veranschaulichen für  $L = 2$  und  $S = 1$  die Kopplung zum Gesamtdrehimpuls  $J$ .

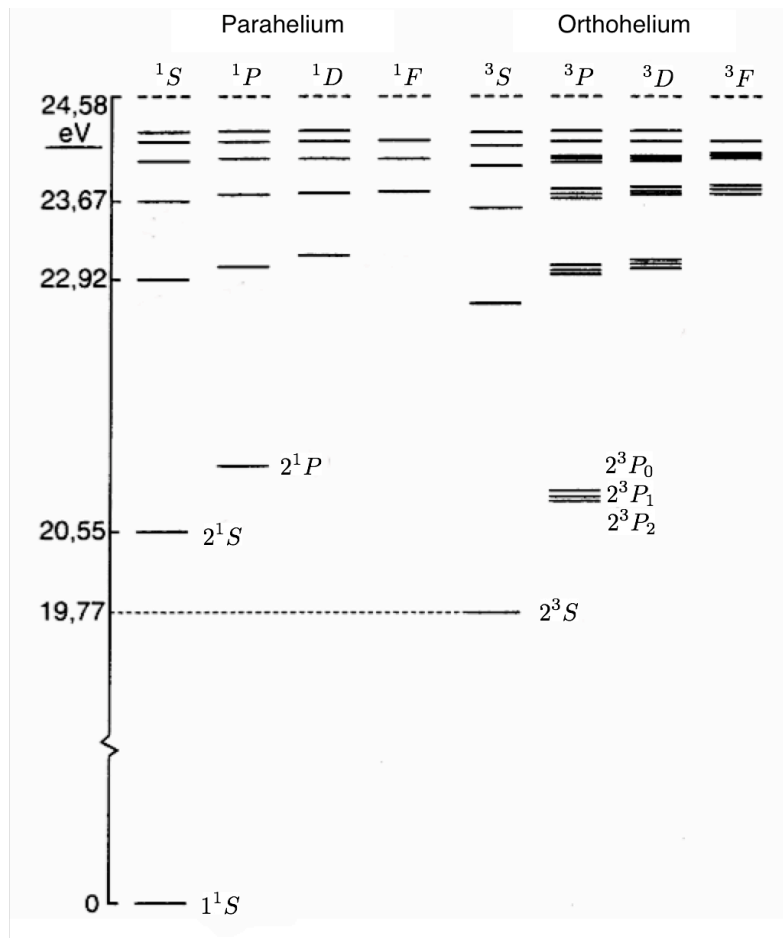
- (c) Die energetische Abfolge der  $2^3P$ -Zustände lässt sich aus den Eigenschaften der L-S-Kopplung herleiten. Für die Energie der Feinstrukturkomponenten gilt

$$E_j = E(n, L, S) + C_{SL}^{He} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = E(n, L, S) + \frac{1}{2} C_{SL}^{He} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \hbar^2 \quad (15)$$

Im Falle von Helium gilt  $C_{SL}^{He} \propto (Z-3)\alpha^2 < 0$ , d.h. das Feinstrukturspektrum ist 'invertiert'.

Damit lässt sich sofort ablesen, dass im Falle von  $2^3P$ -Zuständen, also für  $S = 1$  und  $L = 1$ , der Zustand mit  $J = 2$  am niedrigsten liegen muss, darüber der Zustand mit  $J = 1$  und dann der Zustand mit  $J = 0$ .

Die nachfolgende Grafik zeigt das Termschema des Heliums; die Zustände bis  $n = 2$  sind explizit benannt, für die übrigen gezeigten Zustände ist die grundsätzliche Nomenklatur am oberen Rand angegeben:



- (d) Wenn sich die beiden Elektronen im tiefstmöglichen Zustand ( $n = 1$ ) befinden, sind die Quantenzahlen  $l = 0$  und  $m_l = 0$  identisch. Im Spin-Triplett sind weiterhin wegen  $S = 1$ , die Spin-Quantenzahlen  $m_{s,1} = m_{s,2}$  identisch, diese Konfiguration ist nach dem Pauli-Prinzip verboten, da sonst beide Elektronen komplett identische Quantenzahlen hätten! Folglich kann im Spin-Triplett, also dem Orthohelium, kein

Zustand mit  $n = 1$  existieren.

Die Zustände mit  $n \geq 2$  sind Mischzustände aus Elektron in verschiedenen Schalen, z.B. der Zustand  $2^3S_1$  des Orthoheliums hat Quantenzahlen  $n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0, m_{s,1} = m_{s,2} = 1/2$  und ist damit erlaubt.

- (e) Aus dem Pauli-Prinzip wissen wir, dass die Gesamtwellenfunktion eines Systems mit mehreren Elektronen immer antisymmetrisch ist unter Vertauschung zweier Elektronen. Der Spin-Singulett Zustand ist antisymmetrisch, d.h. die zugehörige Ortsfunktion ist symmetrisch, und umgekehrt ist der Spin-Triplett Zustand symmetrisch und damit die entsprechende Ortsfunktion antisymmetrisch. Im Falle einer antisymmetrischen Ortsfunktion haben die beiden Elektronen im zeitlichen Mittel einen größeren Abstand voneinander im Vergleich zur symmetrischen Ortsfunktion, die sogar für  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$  nicht Null ist. D.h. die resultierende mittlere Coulombenergie zwischen den Elektronen im Triplett-Zustand ist kleiner als im Singulett-Zustand. Folglich liegen die Orthoheliumniveaus unterhalb der Paraheliumniveaus mit gleichen räumlichen Quantenzahlen.

## 4 Positronium

Das Positronium ist ein wasserstoffähnliches exotisches Atom, das aus einem  $e^+$  und einem  $e^-$  besteht, die einen kurzlebigen gebundenen Zustand bilden können. Beide Leptonen kreisen (im gebundenen Zustand) um den gemeinsamen Schwerpunkt, der sich in der Mitte zwischen den beiden befindet.

- (a) Berechnen Sie die (klassischen) Energieniveaus und die Radien der Bohr'schen Bahnen des Positroniums als Funktion der Hauptquantenzahl  $n$  und vergleichen Sie diese mit denen des Wasserstoffs.
- (b) Im Positronium koppeln beide Spins zum Gesamtspin  $\mathbf{S}$  und dann mit dem Drehimpuls  $\mathbf{L}$  zum Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{F}$ . Im Wasserstoffatom dagegen koppeln  $\mathbf{s}$  und  $\mathbf{l}$  zu  $\mathbf{j}$  und  $\mathbf{j}$  koppelt zusammen mit dem Kernspin  $\mathbf{I}$  zu  $\mathbf{F}$ . Trotzdem können wir die Hyperfeinaufspaltung der Energiezustände des Positroniums aus dem für das Wasserstoffatom hergeleiteten Ausdruck berechnen. Warum?
- (c) Welche Spektroskopischen Niveaus des Positroniums gibt es für  $n = 1$  und  $n = 2$ ?
- (d) Die Energieabstände zwischen welchen Spektroskopischen Niveaus berechnet man, wenn man die Hyperfeinstrukturaufspaltung des Positroniums bestimmt?
- (e) Berechnen Sie nun die Hyperfeinaufspaltung des Grundzustands im Wasserstoff und die entsprechende Hyperfeinaufspaltung des Positroniums. Um welche Größenordnung unterscheiden sich die beiden?

(Hinweis: im Grundzustand ist  $\Delta E_{HFS}^H = \frac{2}{3} g_s g_I \frac{\alpha^4 \mu^3 c^2}{m_e m_k n^3} \frac{F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)}{2}$ )

- (f) Skizzieren Sie nun das Termschema von Positronium für die Zustände mit  $n = 1$  und  $n = 2$ . Tragen Sie die zuvor berechnete Hyperfeinaufspaltung des Positroniums in die Skizze ein.

### Lösungsvorschlag

- (a) Ein Positron hat als Antiteilchen des Elektrons die gleiche Masse wie ein Elektron und eine positive Ladung. Die reduzierte Masse des Positroniums ist damit

$$\mu_{e^+e^-} = \frac{m_{e^+} \cdot m_{e^-}}{m_{e^+} + m_{e^-}} = \frac{1}{2} m_e \quad (16)$$

(im Vergleich  $\mu_H \approx m_e$ ). Damit erhalten wir für die Energiezustände

$$E_n^{e^+e^-} = -\frac{Z^2 e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \frac{\mu_{e^+e^-}}{n^2} = -\frac{Z^2 \alpha^2 \mu_{e^+e^-} c^2}{2 n^2} = \frac{1}{2} E_n^H \quad (17)$$

und für den Bohr'schen Radius

$$r_n^{e^+e^-} = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{Z e^2} \frac{n^2}{\mu_{e^+e^-}} = \frac{\hbar c n^2}{Z \alpha \mu_{e^+e^-} c^2} = 2r_n^H \quad (18)$$

(b) Die Definition des Gesamtdrehimpulses für Wasserstoff ist:

$$\mathbf{F}_H = \mathbf{j} + \mathbf{I} = \mathbf{l} + \mathbf{s} + \mathbf{I} \quad (19)$$

Betrachtet man nun das Positronium in einem Bezugssystem in dem das Positron ruht, dann gilt  $\mathbf{L} = \mathbf{l}$  und  $\mathbf{I} = \mathbf{s}_{e^+}$ . Folglich ist

$$\mathbf{F}_H = \mathbf{l} + \mathbf{s} + \mathbf{I} = \mathbf{L} + \underbrace{\mathbf{s}_{e^-} + \mathbf{s}_{e^+}}_{=\mathbf{S}} = \mathbf{F}_{e^+e^-} \quad (20)$$

also sind die beiden Definitionen von  $\mathbf{F}$  identisch.

Setzt man nun noch  $g_I \rightarrow g_s = 2$ ,  $m_k \rightarrow m_e$  und  $\mu \rightarrow \frac{m_e}{2}$ , wie oben berechnet, dann lässt sich die Hyperfeinaufspaltung im Positronium analog zum Wasserstoff berechnen.

(c) Die Spins des Elektrons und Positron können antiparallel ausgerichtet sein (also  $S = 0$ ), dann gibt es die folgenden Zustände:

$$\begin{aligned} 1^1S_0 & (n_1 = n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^1S_0 & (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^1P_1 & (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = 0, \pm 1, m_{l,2} = 0) \end{aligned}$$

Sind die Spins von Elektron und Positron parallel ausgerichtet, dann ist  $S = 1$  und wir erhalten die folgenden Zustände:

$$\begin{aligned} 1^3S_1 & (n_1 = n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^3S_1 & (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^3P_0 & (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = -1, m_{l,2} = 0) \\ 2^3P_1 & (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = 0, m_{l,2} = 0) \\ 2^3P_2 & (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = 1, m_{l,2} = 0) \end{aligned}$$

wobei die letzten drei Zustände die Spin-Bahn aufgespaltenen Zustände von  $2^3P$  sind.

*Bemerkungen:*

*Der spektroskopische Zustand  $2^3S_1$  lässt sich z.B. auch aus  $n_1 = 2, n_2 = 2, l_1 = l_2 = 1, m_{l,1} = 1, m_{l,2} = -1$  konstruieren. Wir haben oben nur der Einfachheit halber immer  $n_2 = 0$  zur Konstruktion verwendet.*

*Man verwendet hier die spektroskopische Notation - obwohl man ja eigentlich ein Positron und ein Elektron beschreibt - da ihre Drehimpulse L-S-koppeln. Das mag auf den ersten Blick seltsam erscheinen, da wir ja ein Wasserstoff-ähnliches System vorliegen haben, aber wenn man dieses System im Bezug auf den gemeinsamen (klassischen) Schwerpunkt betrachtet, dann ist es einem zwei-Elektronensystem strukturell näher als dem Wasserstoff-Atom. Wichtig ist, dass wir es hier mit unterscheidbaren Teilchen zu tun haben, das Pauli-Verbot also nicht gilt!*

(d) Die Hyperfeinaufspaltung im Wasserstoff ergibt sich aus der parallelen bzw. antiparallelen Ausrichtung von  $\mathbf{j}$  und  $\mathbf{I}$ . Dies entspricht im Positronium der parallelen bzw. antiparallelen Ausrichtung von  $\mathbf{s}_{e^-}$  und  $\mathbf{s}_{e^+}$ , d.h. die Hyperfeinwechselwirkung bewirkt im Positronium eine energetische Aufspaltung zwischen Zuständen mit gleichen räumlichen Quantenzahlen und Spin-Unterschied  $\Delta S = 1$ .

(e) Die Formel für Hyperfeinverschiebung des Wasserstoff-Grundzustands war in der Angabe gegeben:

$$\Delta E_{HFS}^H = \frac{2}{3} g_s g_I \frac{\alpha^4 \mu^3 c^2}{m_e m_k n^3} \frac{F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)}{2} \quad (21)$$

Damit können wir sofort mit  $n = 1$ ,  $j = I = 1/2$ ,  $g_I = 5,58$ ,  $\alpha \approx 1/137$ ,  $\mu \approx m_e$  und  $m_k = 1836,15 m_e$  die Hyperfeinaufspaltung berechnen:

$$\Delta E_{HFS} = \Delta E_{HFS}^H|_{F=1} - \Delta E_{HFS}^H|_{F=0} = \frac{1}{3} g_s g_I \frac{\alpha^4 \mu^3 c^2}{m_e m_k n^3} \left[ \frac{1}{2} - \left(-\frac{3}{2}\right) \right] = 5,87 \cdot 10^{-6} eV \quad (22)$$

Für die Aufspaltung des untersten Positronium Hyperfeinniveaus, was der Energiedifferenz zwischen  $1^1S_0$  und  $1^3S_1$  entspricht, verwenden wir die Formel wie oben mit den Ersetzungen  $g_I \rightarrow g_s = 2$ ,  $m_k \rightarrow m_e$  und  $\mu \rightarrow \frac{m_e}{2}$ ; wir müssen weiterhin  $n = 1$ ,  $j = I = 1/2$  verwenden, dann entspricht  $\Delta E_{HFS}^H |_{F=1}$  der Verschiebung von  $1^3S_1$  und  $\Delta E_{HFS}^H |_{F=0}$  der Verschiebung von  $1^1S_0$  (siehe dazu auch die Argumentation in (b)). Wir erhalten also:

$$\begin{aligned} \Delta E_{HFS}^{e^+e^-} &= \Delta E_{HFS}^{e^+e^-} |_{F=1} - \Delta E_{HFS}^{e^+e^-} |_{F=0} = \frac{1}{3} g_s^2 \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2^3 n^3} \left[ \frac{1}{2} - \left(-\frac{3}{2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{3} \alpha^4 m_e c^2 = 4,83 \cdot 10^{-4} eV \end{aligned} \quad (23)$$

*Anmerkung:* Der tatsächliche experimentelle Wert ist  $\Delta E_{HFS}^{e^+e^-} = 8,5 \cdot 10^{-4} eV$ . Dabei kommt eine zusätzliche Verschiebung des  $1^3S_1$ -Niveaus zum tragen,  $\Delta(1^3S_1) = \frac{1}{4} \alpha^4 m_e c^2$ . Diese Korrektur ergibt sich aus einem virtuellen  $e^+e^- \rightarrow \gamma \rightarrow e^+e^-$  Prozess und kann in der QED berechnet werden.

Die Hyperfeinaufspaltung des Wasserstoffs und des Positroniums unterscheiden sich um zwei Größenordnungen. Die Hyperfeinaufspaltung im Positronium ist damit von der gleichen Größenordnung wie die Feinstruktur.

- (f) Die folgende Grafik zeigt das Termschema des Positroniums (bis  $n = 2$ ), die zuvor berechnete Hyperfeinaufspaltung ist eingezeichnet. Die Feinstrukturaufspaltung der  $2^3P$ -Zustände ließe sich analog zum Wasserstoff berechnen.

