

# FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK 4

## 2011

### Übung 3 - Musterlösung

#### 1. Spinresonanz

- Welche Frequenz ist nötig, um in einem Magnetfeld von  $10^{-1}$  T Elektronen-Spin-Übergänge von der parallelen zur antiparallelen Ausrichtung zu induzieren?
- Zur medizinischen Bildgebung werden Patienten in der Kernspinresonanztomographie in ein starkes äußeres Magnetfeld von etwa 3 T gebracht, wo die im körpereigenen Wasser gebundenen Protonen ( $I = 1/2$ ) zwei verschiedene Energieniveaus für ihre Kernspins erfahren. Welche Energie müssen hier eingestrahlte Photonen haben, um einen Übergang zu induzieren? Vergleichen Sie das kurz mit typischer Röntgenstrahlung!

#### Lösung

- Der Energieunterschied zwischen den beiden Spin-Niveaus ist gegeben durch:

$$\Delta E = g_s \mu_B B = 2 \cdot 5,78 \cdot 10^{-5} eV/T \cdot 10^{-1} T = 1,12 \cdot 10^{-5} eV \quad (1)$$

Dies entspricht einer Frequenz von:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1,12 \cdot 10^{-5} eV}{4,13 \cdot 10^{-5} eVs} = 2,79 GHz \quad (2)$$

- Das magnetische Moment auf Grund des Kernspins ist gegeben durch:

$$\vec{\mu}_I = g_I \frac{\mu_K}{\hbar} \vec{I} \quad (3)$$

Somit gilt für die Energieaufspaltung im Magnetfeld:

$$E = -\vec{\mu}_K \cdot \vec{B} = g_I \frac{\mu_K}{\hbar} I_z B = \pm g_I \mu_K B \quad (4)$$

Deswegen muss man Photonen mit der Energie:

$$\Delta E = g_I \mu_K B = \frac{5,58 \cdot \mu_B \cdot 3T}{1836} = 5,27 \cdot 10^{-7} eV \quad (5)$$

einstrahlen, um Übergänge zu erzeugen.

Die Energie von Röntgenstrahlung befindet sich typischerweise im keV Bereich und ist somit ein Vielfaches härter und schädlicher.

- 2. Zeeman-Effekt** Die Spektrallinien, die dem Übergang  $3p \leftrightarrow 3s$  der sogenannten D-Linie bei Natrium entsprechen, haben die Wellenlängen  $\lambda_2 = 5895.9\text{\AA}$  und  $\lambda_1 = 5889.6\text{\AA}$ .

Bestimmen Sie die Magnetfeldstärke, bei der das unterste Zeeman-Niveau des Terms  ${}^2P_{3/2}$  mit dem obersten Niveau des Terms  ${}^2P_{1/2}$  zusammenfallen würde, wenn die Bedingungen für den anomalen Zeeman-Effekt noch erfüllt wären.

### Lösung

Die Energiedifferenz  $\Delta E$  zwischen den beiden Zuständen  ${}^2P_{3/2}$  und  ${}^2P_{1/2}$  ist gegeben durch:

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2} = 2,23\text{meV} \quad (6)$$

Damit nun das unterste Zeeman-Niveau von  ${}^2P_{3/2}$  und das oberste Zeeman-Niveau von  ${}^2P_{1/2}$  zusammenfallen, muss die zusätzliche Energie, um welche die  $m_j$ -Zustände insgesamt verschoben werden, gleich diesem  $\Delta E$  sein.

Die Verschiebung lautet dabei:

$$E_{m_j} = g_j m_j \mu_B B \quad (7)$$

das heißt, wir müssen für die beiden Zustände  ${}^2P_{3/2}$  und  ${}^2P_{1/2}$  sowohl das größt- bzw. kleinstmögliche  $m_j$  finden und den Landé-Faktor berechnen.

Für  ${}^2P_{3/2}$  hat  $j$  den Wert  $j = 3/2$  und  $l = 1$ , somit ist der Landé-Faktor:

$$g_{3/2} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} = 4/3 \quad (8)$$

und die kleinstmögliche magnetische Quantenzahl für den Gesamtdrehimpuls  $\vec{j}$  ist  $m_j = -3/2$ .

Für  ${}^2P_{1/2}$  hat  $j$  den Wert  $j = 1/2$  und  $l = 1$ , somit ist hier der Landé-Faktor:

$$g_{1/2} = 2/3 \quad (9)$$

und das größtmögliche  $m_j$  lautet  $m_j = 1/2$ .

Jetzt können wir, da  $m_{3/2} < 0$  aus der Bedingung:

$$\Delta E = m_{\frac{1}{2}} g_{\frac{1}{2}} \mu_B B - m_{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}} \mu_B B \quad (10)$$

die Größe des  $B$ -Feldes berechnen. Es lautet:

$$B = \frac{\Delta E}{\left(m_{\frac{1}{2}} g_{\frac{1}{2}} - m_{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}\right) \mu_B} = 16,53T \quad (11)$$

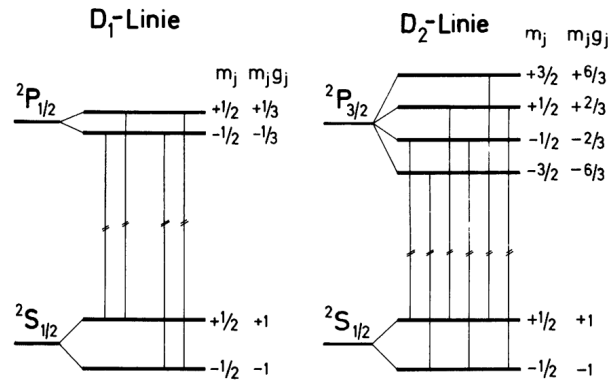


Abbildung 1: Aufspaltung der Natrium D-Linien

### 3. Paschen-Back-Effekt

- Wasserstoffatome befinden sich in einem Magnetfeld  $B = 4.5$  T. Wird bei dieser Feldstärke die Aufspaltung der  $H_\alpha$ -Linie ( $n = 3 \rightarrow n = 2$ ) durch den anomalen Zeeman-Effekt oder den Paschen-Back-Effekt verursacht? (Die Spin-Bahn-Aufspaltung zwischen den Termen  $3^2p_{1/2}$  und  $3^2p_{3/2}$  des Wasserstoffatoms beträgt  $0.108 \text{ cm}^{-1}$ .)
- Bestimmen Sie die spezifische Ladung  $e/m$  des Elektrons, wenn die Frequenzaufspaltung zwischen zwei benachbarten Komponenten  $6.29 \cdot 10^{10} \text{ Hz}$  beträgt. Die Feinstruktur kann vernachlässigt werden.

### Lösung

- Das Magnetfeld, bei dem der Zeeman- zum Paschen-Back Effekt übergeht, kann durch die Größe der Linienaufspaltung abgeschätzt werden. Dabei liegt der Paschen-Back-Effekt vor, wenn die Aufspaltung durch das Magnetfeld groß gegenüber der Aufspaltung durch die Feinstruktur ist. Der Grund liegt im Aufbrechen der LS-Kopplung. Die Beschreibung des Zeeman-Effekts beruht darauf, dass  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  zu  $\vec{j}$  koppeln. Die Stärke, mit der dies geschieht,

kann mit der Größe der Feinstrukturaufspaltung beschrieben werden.  
Die Aufspaltung durch die Feinstruktur steht in der Angabe mit:

$$\Delta E_{FS} = \frac{hc}{\lambda} = 4,13 \cdot 10^{-15} eVs \cdot 2,99 \cdot 10^8 m/s \cdot 0,108 \cdot 10^2 1/m = 1,14 \cdot 10^5 eV \quad (12)$$

Der Energieunterschied für die Aufspaltung im Magnetfeld lautet wiederum:

$$\Delta E = \mu_B B \quad (13)$$

Die B-Feldstärke, von der der Zeeman- in den Paschen-Back-Effekt übergeht, lautet also:

$$B_{Grenz} = \frac{\Delta E_{FS}}{\mu_B} = \frac{1,14 \cdot 10^{-3} eV}{5,78 \cdot 10^{-5} eV} T = 0,2 T \quad (14)$$

Da in unserem Fall eine Feldstärke von 4,5 T vorliegt, sind  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  entkoppelt und wir haben den Paschen-Back Effekt.

- b) Die Frequenzaufspaltung zwischen zwei benachbarten Linien ist gegeben durch  $\Delta\nu = 6,29 \cdot 10^{10} Hz$ , das entspricht der Energie:

$$\Delta E = h\Delta\nu \quad (15)$$

Diese Energie entspricht der Aufspaltung:

$$\Delta E = \mu_B B = \frac{e\hbar}{2m} B \quad (16)$$

im Magnetfeld. Somit folgt für die spezifische Masse in diesem Experiment:

$$\frac{e}{m} \frac{4\pi\Delta\nu}{B} = \frac{4\pi 6,29 \cdot 10^{10} Hz}{4,5 T} = 1,76 \cdot 10^{11} C/kg \quad (17)$$

#### 4. Helium I

Zeigen Sie, dass sich für den Grundzustand von Helium

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_{100}(r_1)\Psi_{100}(r_2)$$

mit  $\Psi_{100} = Ae^{-\frac{Zr}{a}}$  (A: Normierungskonstante) eine Gesamtenergie von

$$E_1 = -108,8 eV = -2Z^2 \cdot 13,6 eV = -2Z^2 E_{H1}$$

ergibt, bzw. dass  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  die Schrödingergleichung mit

$$\hat{H} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_1}^2 - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_1} \right\} + \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_2}^2 - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_2} \right\}$$

und  $E = E_1$  löst ( $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ ).

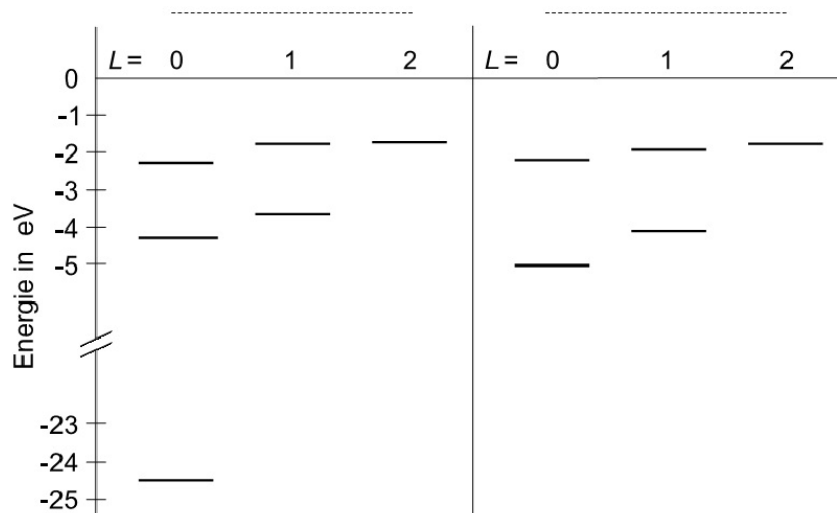
(Hinweis:  $\nabla^2(f(r, \vartheta, \Phi)) = \Delta(f(r, \vartheta, \Phi)) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial f}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin\vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \Phi^2}$ )

Lösung:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= E\Psi = A^2 \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_1}^2 - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_2}^2 - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_2} \right) (e^{-\frac{Z}{a}(r_1+r_2)}) \\ &= A^2 e^{-\frac{Z}{a}(r_1+r_2)} \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( -\frac{2Z}{ar_1} + \frac{Z^2}{a^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( -\frac{2Z}{ar_2} + \frac{Z^2}{a^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right) \\ &= \Psi \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{Z^2}{a^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{Z^2}{a^2} \right) = \Psi \left( -2Z^2 \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \right) \\ &= \Psi(-2Z^2 \cdot 13,6eV) \rightarrow E = -Z^2 \cdot 13,6eV \end{aligned}$$

## 5. Helium II

- a) Die folgende Abbildung zeigt einen Ausschnitt aus dem Termschema des Heliumatoms für die niedrigsten Energieniveaus. Beschriften Sie die Energieniveaus vollständig mit den entsprechenden spektroskopischen Symbolen (Feinstrukturaufspaltung wird vernachlässigt) und benennen sie die beiden Heliumsysteme.



- b) Erläutern Sie den Unterschied zwischen dem Triplett- und dem Singulett-System des Heliumatoms. Welches der beiden Systeme weist für  $L \neq 0$  Feinstrukturaufspaltung auf?
- c) Warum gibt es keinen  $1^3S_1$ -Zustand, wenn sich beide Elektronen im 1s-Orbital befinden?
- d) Warum werden die Übergänge  $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0$  und  $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0$  nicht beobachtet?

Lösung:

a) Siehe Vorlesung

b) Der Unterschied zwischen den zwei Systemen besteht im Zustand der Spins der Elektronen. Im Triplettssystem herrscht die symmetrische ( $S = 1$ ), im Singulett die antisymmetrische ( $S = 0$ ) Stellung.

Feinstrukturaufspaltung erhält man im Singulettssystem **nicht**, da hier  $S = 0$  gilt, der Gesamtdrehimpuls dann  $J = L$  ist und nicht aufspaltet, im Triplettssystem spielt die LS-Kopplung jedoch sehr wohl eine Rolle. Für jedes  $L \geq 1$  ergibt sich hier eine dreifache Aufspaltung.

c) Beide Elektronen sind äquivalent (also in der selben Unterschale). Sind sie dies jedoch, so wäre die Kombination von  $L = 0$  (symmetrisch) und  $S = 1$  (symmetrisch) nicht möglich, da sich insgesamt eine symmetrische Wellenfunktion ergeben würde.

d) Ersterer wird nicht beobachtet, weil Übergänge von  $J = 0 \rightarrow J = 0$  verboten sind. Letzterer, weil  $\Delta S = 0$  gilt.

**6. Entartung und Grundzustand** Geben Sie zu folgenden Atomen in deren Grundzustandskonfiguration den Grad der Entartung, sowie den Spektralterm des jeweiligen Grundzustandes an:

B, N, F, Mg, Al, K, Fe, Cr (= (Ar)(4s)(3d)<sup>5</sup>).

Lösung:

Für den Entartungsgrad wird hier der Buchstabe D verwendet. Man berechnet ihn, indem man abzählt, wieviele Möglichkeiten es für die Elektronen gibt, die nicht vollen Orbitale zu besetzen.

B: (He)(2s)<sup>2</sup>(2p)  $D = \binom{6}{1} = 6$   $L = 1$   $S = \frac{1}{2}$ ; Schale weniger als halbvoll

→  $J = \frac{1}{2}$  und somit ergibt sich  ${}^2P_{1/2}$

N:  $(He)(2s)^2(2p)^3$   $D = \binom{6}{3} = 20$   $L = |1+0-1| = 0$   $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ ; Schale genau halbvoll →  $J = \frac{3}{2}$ , also  ${}^4S_{3/2}$

F:  $(He)(2s)^2(2p)^5$   $D = \binom{6}{5} = 6$   $L = |1+0-1+1+0| = 1$   $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ ; Schale mehr als halbvoll →  $J = L + S = \frac{3}{2}$ , also  ${}^2P_{3/2}$

Mg:  $(Ne)(3s)^2$   $D = \binom{2}{2} = 1$   $L = 0$   $S = 0$  →  $J = 0$ , also  ${}^1S_0$

Al:  $(Ne)(3s)^2(3p)$   $D = \binom{6}{1} = 6$   $L = 1$   $S = \frac{1}{2}$ ; Schale weniger als halbvoll →  $J = |L - S| = \frac{1}{2}$ , also  ${}^2P_{1/2}$

K:  $(Ar)(4s)$   $D = \binom{2}{1} = 2$   $L = 0$   $S = \frac{1}{2}$  →  $J = \frac{1}{2}$ , also  ${}^2S_{1/2}$

Fe:  $(Ar)(4s)^2(3d)^6$   $D = \binom{10}{6} = 210$   $L = |2 + 1 + 0 - 1 - 2 + 2| = 2$   $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 2$ ; Schale mehr als halbvoll →  $J = L + S = 4$ , also  ${}^5D_4$

Cr:  $(Ar)(4s)(3d)^5$   $D = \binom{2}{1} \cdot \binom{10}{5} = 504$   $L = 0 + |2 + 1 + 0 - 1 - 2| = 0$   $S = 3$ ; Schale genau halbvoll →  $J = |L - S| = 3$ , also  ${}^7S_3$

## 7. Spektraltermine

- Welche Spektraltermine sind für die Grundzustandskonfiguration folgender Atome möglich: Si, Al? Welche für die Konfigurationen Be:  $(He)(2s)(2p)$ ; Ca:  $(Ar)(4s)(3d)$ ?
- In welche Spektraltermine und Multipletts zerfällt die Konfiguration von Kohlenstoff  $(1s)^2(2s)^2(2p)(3p)$ ? Welche Dimension hat also diese Konfiguration?

Lösung:

a) Si:  $(Ne)(3s)^2(3p)^2$   $l_1 = 1; l_2 = 1$  →  $L = 0, 1, 2$   $s_1 = \frac{1}{2}; s_2 = \frac{1}{2}$  →  $S = 0, 1$ . Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion schließt Kombinationen  $(L = 0, 2; S = 1)$  und  $(L = 1; S = 0)$  aus, es bleiben:  $(L = 0, 2; S = 0)$  und  $(L = 1; S = 1)$ . Also:  ${}^1S_0, {}^1D_2, {}^3P_{0,1,2}$ .

Al:  $(Ne)(3s)^2(3p)$   $L = 1$   $S = \frac{1}{2}$  →  $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ . Es folgt:  ${}^2P_{1/2,3/2}$ .

Be:  $(He)(2s)(2p) \quad l_1 = 0; l_2 = 1 \rightarrow L = 1 \quad S = 0, 1$ . Es folgt für J:  $J = 1$  bzw.  $J = 0, 1, 2$  und somit:  $^1P_1, ^3P_{0,1,2}$ .

Ca:  $(Ar)(4s)(3d) \quad l_1 = 0; l_2 = 2 \rightarrow L = 2 \quad S = 0, 1$ . Es folgt für J:  $J = 2$  bzw.  $J = 1, 2, 3$  und somit:  $^1D_2, ^3D_{1,2,3}$ .

b) C:  $(He)(2s)^2(2p)(3p) \quad l_1 = 1; l_2 = 1 \rightarrow L = 0, 1, 2 \quad S = 0, 1$ . Es folgt für J:  $J = 0, J = 1, J = 2, J = 1, J = 0, 1, 2$  bzw.  $J = 1, 2, 3$ . Also:  $^1S_0, ^1P_1, ^1D_2, ^3S_1, ^3P_{0,1,2}, ^3D_{1,2,3}$ .

Die Dimension entspricht dem Entartungsgrad, wenn man es sich also einfach machen will, rechnet man:  $D = \binom{6}{1} \cdot \binom{6}{1} = 36$ . Andererseits ist jeder genannte spektroskopische Term  $(2J + 1)$ -fach entartet. Alle Zustände aufsummieren ergibt dann:  $D = 1 + 3 + 5 + 3 + 1 + 3 + 5 + 3 + 5 + 7 = 36$ .

## 8. Spektrale Übergänge

- Betrachten Sie Titan in der Konfiguration  $(Ar)(4s)^2(3d)(4p)$ . Welche Spektraltermine sind hier möglich? Erstellen sie hiermit ein qualitatives Termschema, indem sie annehmen, dass die Energie mit steigendem  $L$  ansteigt. Vernachlässigen sie hierbei die Feinstrukturaufspaltung.
- Betrachten Sie nun die zwei Energieniveaus mit der höchsten Energie im Tripletsystem unter Berücksichtigung der  $LS$ -Kopplung und zeichnen Sie dann die möglichen spektralen Übergänge zwischen diesen Niveaus ein.
- Ein schwaches externes Magnetfeld werde nun hinzu geschaltet. Betrachten sie nun das  $F$ -Niveau mit  $J = 3$  und das  $D$ -Niveau mit  $J = 2$  und skizzieren sie deren Aufspaltung im Magnetfeld? Welche Übergänge sind hier erlaubt?

Lösung:

a)  $(Ar)(4s)^2(3d)(4p) \quad l_1 = 2; l_2 = 1 \rightarrow L = 1, 2, 3 \quad S = 0, 1$ .  
Es ergeben sich die Terme  $^1P, ^1D, ^1F, ^3P, ^3D, ^3F$ . Energetisch gesehen ergeben sich folgende Reihenfolgen:  $^3F > ^3D > ^3P$  bzw.  $^1F > ^1D > ^1P$ .

b) Gemeint sind  $^3F$  und  $^3D$ . Berücksichtigt man die  $LS$ -Kopplung, so erhält man für den ersten Term  $^3F_{2,3,4}$  und für den zweiten  $^3D_{1,2,3}$ . Die erlaubten Übergänge sind in Abbildung 2 dargestellt.

c) Die Rede ist von  $^3F_3$  und  $^3D_2$ . Die dazu erlaubten Übergänge sieht man in Abbildung 3.



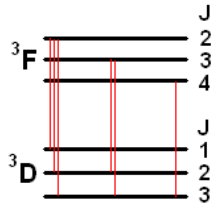


Abbildung 2: Lösung zu Aufgabe 8 b).

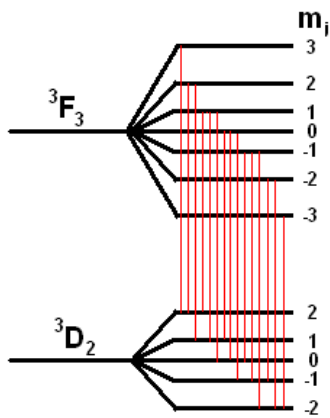


Abbildung 3: Lösung zu Aufgabe 8 c).