

## 8. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2021

Prof. H. Weinfurter, Dr. L. Knips

### Aufgabe 25 Sequentielle Messungen an Spin-1/2-Systemen

Wir betrachten ein Spin-1/2-System. Gegeben seien zwei Operatoren

$$\begin{aligned}\hat{A} &= a_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + a_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|, \\ \hat{B} &= b_1 |\phi_1\rangle \langle \phi_1| + b_2 |\phi_2\rangle \langle \phi_2|.\end{aligned}$$

Operator  $\hat{A}$  repräsentiert die Observable  $A$  und hat zwei Eigenzustände  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  mit den Eigenwerten  $a_1, a_2$ . Entsprechendes gilt für den Operator  $\hat{B}$  (Observable  $B$ ) mit Eigenzuständen  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$  und Eigenwerten  $b_1, b_2$ . Zwischen den Eigenzuständen gelten die Beziehungen

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{5} (3|\phi_1\rangle + 4|\phi_2\rangle), \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{5} (4|\phi_1\rangle - 3|\phi_2\rangle).$$

- Zunächst wird die Observable  $A$  gemessen und man erhält den Wert  $a_1$ . In welchem Zustand befindet sich das System (direkt) nach der Messung? Mit welcher Wahrscheinlichkeit erhalten Sie bei einer wiederholten Messung von  $A$  die Ergebnisse  $a_1$  bzw.  $a_2$ ?
- Nun wird die Observable  $B$  gemessen. Welche Ergebnisse kann man erhalten und mit welcher Wahrscheinlichkeit? Bestimmen Sie den Erwartungswert  $\langle \hat{B} \rangle$ .
- Danach werde wieder die Observable  $A$  gemessen. Wie hoch ist jetzt die Wahrscheinlichkeit, den Wert  $a_2$  zu erhalten? Betrachten Sie die beiden Fälle:
  - das Ergebnis der vorherigen Messung von  $B$  ist  $b_1$ ,
  - das Ergebnis der vorherigen Messung von  $B$  ist unbekannt.

### Aufgabe 26 Hyperfeinaufspaltung

Hat ein Atom einen nicht-verschwindenden Kernspin  $I$ , so wechselwirkt dieser mit dem Gesamtdrehimpuls  $J$  der Elektronenhülle. Diese Wechselwirkung führt zu einer zusätzlichen Aufspaltung der atomaren Eigenzustände  $|\Psi_{n,l,j}\rangle$  in mehrere Hyperfeinzustände. Die Energieverschiebungen  $\Delta E_{\text{HFS}}$  dieser Zustände sind durch

$$\Delta E_{\text{HFS}} = \frac{A}{2} (f(f+1) - j(j+1) - i(i+1))$$

gegeben, wobei  $j$  die Drehimpulsquantenzahl des Gesamtdrehimpulses der Elektronenhülle,  $i$  die des Kerns, und  $f$  des gesamten Atoms darstellt.

- Zeigen Sie, dass für die Energiedifferenz zweier benachbarter Hyperfeinzustände die Beziehung  $\Delta E_{f+1} - \Delta E_f = A(f+1)$  gilt. Alle anderen Quantenzahlen seien dabei identisch.
- Für eine bestimmte Atomsorte wird im Experiment für den Zustand mit  $j = 5/2$  eine Hyperfeinaufspaltung in sechs verschiedene Komponenten beobachtet. Die gemessenen Energiedifferenzen benachbarter Komponenten seien  $\tilde{\nu}_1 = 0.19 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\tilde{\nu}_2 = 0.251 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\tilde{\nu}_3 = 0.318 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\tilde{\nu}_4 = 0.378 \text{ cm}^{-1}$  und  $\tilde{\nu}_5 = 0.439 \text{ cm}^{-1}$ . Bestimmen Sie die Kernspinquantenzahl  $i$  und die Hyperfeinstrukturkonstante  $A$ .

*Hinweise:* Benutzen Sie die Erkenntnisse aus Aufg. 21. Die Wellenzahl  $\tilde{\nu} = 1/\lambda$  (Einheit  $\text{cm}^{-1}$ ) ist eine gängige Einheit in der Spektroskopie. Beachten Sie, dass die gemessenen Werte mit Messfehlern behaftet sind!
- Skizzieren Sie die Lage der Hyperfeinzustände relativ zum unaufgespaltenen Niveau in Einheiten von  $A$ .

## Aufgabe 27 Elektronenkonfiguration und Termsymbole

Zur Bezeichnung von Energieniveaus von Mehrelektronenatomen verwendet man sogenannte *Termsymbole*. Diese ergeben sich durch die Kopplung der Bahndrehimpulse  $l_i$  der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtbahndrehimpuls  $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i$  und der Einzelspins  $\mathbf{s}_i$  zu einem Gesamtspin  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$ . Der Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$  folgt dann aus der Kopplung von  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{S}$ . Das ergibt das Termsymbol

$$^{2S+1}L_J,$$

wobei  $(2S + 1)$  die Spin-Multiplizität (Singulett, Dublett, Triplett, etc.) bezeichnet. Abgeschlossene Schalen bzw. Unterschalen tragen weder Spin noch Bahndrehimpuls und spielen daher für die Rechnung keine Rolle.

Betrachten wir zuerst die Elektronenkonfiguration des Grundzustands von Lithium mit  $1s^2 2s^1$ , d.h. die  $1s$ -Schale ist doppelt besetzt,  $2s$  ist einfach besetzt, so dass es insgesamt 3 Elektronen gibt, von denen 2 in einer abgeschlossenen Schale sind.

- Begründen Sie, warum für Lithium das Termsymbol des Grundzustands  $^2S_{1/2}$  lautet.
- Welche Termsymbole ergeben sich für angeregtes Lithium mit  $1s^2 2p^1$ ?
- Begründen Sie, dass sich für ein Termsymbol mit gegebenem  $L$  und  $S$  genau  $(2L+1) \times (2S+1)$  Kombinationen aus  $J$  und  $M_J$  ergeben.
- Die Elektronenkonfiguration laute  $np^1 n'p^1$  mit  $n \neq n'$ . Welche Termsymbole sind möglich?
- (optional für E4p)** Die Elektronenkonfiguration laute  $np^1 n'p^1 n''d^1$  mit unterschiedlichen  $n$ ,  $n'$ ,  $n''$ . Welche Termsymbole sind möglich?
- (optional)** Welche Termsymbole sind für die Elektronenkonfiguration vom Grundzustand von Fluor möglich?

*Hinweis:* Anstatt Elektronen zu koppeln, können wir *Defektelektronen* (auch Elektronenlöcher genannt) koppeln und von einer abgeschlossenen Schale ausgehen. Da ein Loch einem fehlenden Elektron entspricht, kann es ebenfalls als Spin-1/2-Teilchen betrachtet werden.