

## 8. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Besprechung in der Woche vom 26.6.

### Aufgabe 24 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. 19. 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 25 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.

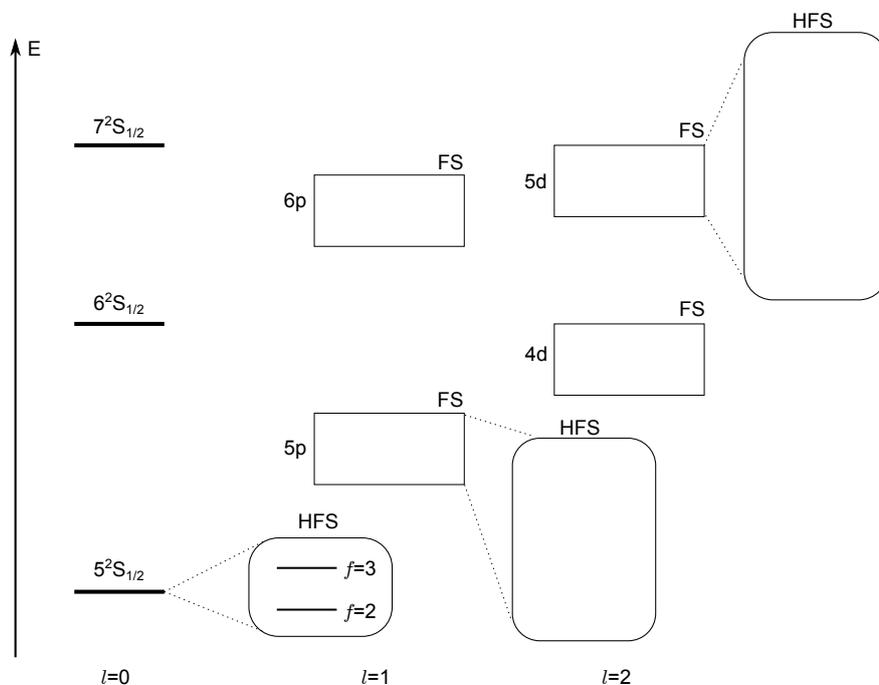
- Begründen Sie, warum für Lithium das Termsymbol des Grundzustands  $^2S_{1/2}$  lautet.
- Welche Termsymbole ergeben sich für angeregtes Lithium mit  $1s^2 2p^1$ ?
- Begründen Sie, dass sich für ein Termsymbol mit gegebenem  $L$  und  $S$  genau  $(2L+1) \times (2S+1)$  Kombinationen aus  $J$  und  $M_J$  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.

## Aufgabe 26 Niveaustuktur von Alkaliatomen

Bei Alkaliatomen sind die tief liegenden Schalen vollständig gefüllt und ein zusätzliches Elektron besetzt das nächste freie  $s$ -Niveau. Dieses System kann für viele Fälle wie den von Wasserstoff betrachtet werden, es sind jedoch diverse Modifikationen zu beachten. Der einfach positiv geladene Wasserstoffkern wird dabei durch den Atomrumpf ersetzt, der aus dem Kern mit Kernladung  $Z$  und den  $(Z - 1)$  Elektronen der Edelgaskonfiguration besteht. Das Leuchtelektron bewegt sich somit im effektiven Coulombpotential des Rumpfes, wobei der Abschirmungseffekt der inneren Elektronen von dem Abstand des Leuchtelektrons abhängt. Im unteren Bild ist ein Teil des Niveauschemas vom Leuchtelektron im Rubidiumisotop  $^{85}\text{Rb}$  zu sehen.

- Geben Sie die Elektronenkonfiguration ( $1s^2 2s^2 \dots$ ) des Grundzustands von  $^{85}\text{Rb}$  an.
- Die drei fetten waagrechten Linien zeigen die Energieniveaus mit Bahndrehimpuls  $l = 0$ . Die Rechtecke deuten Positionen von atomaren Niveaus (Grobstruktur) mit Bahndrehimpuls  $l > 0$  an. Was fällt Ihnen beim Vergleich der Positionen der Niveaus zum Wasserstoff auf?
- Tragen Sie in die Rechtecke die Energieniveaus der Feinstruktur mit der entsprechenden spektroskopischen Notation (siehe z.B. bei  $l = 0$ ) ein.



- (optional für E4p) Das abgerundete Rechteck zum Zustand  $5^2S_{1/2}$  zeigt die zugehörige Hyperfeinstrukturaufspaltung inklusive Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $f$ . Wie groß ist der Kernspin  $i$ ? Tragen Sie für die Feinstruktur-niveaus von  $5p$  und  $5d$  die zugehörigen Hyperfeinniveaus ein.

*Hinweis:* Die Vorzeichen der Hyperfeinstrukturkonstanten  $A_{\text{HFS}}$  der Zustände zu  $5d$  sind unterschiedlich. Für das Feinstruktur-niveau von  $5d$  mit größerem  $j$  ist der Vorfaktor  $A_{\text{HFS}}$  der Hyperfeinaufspaltung (siehe Aufgabe 26) negativ, in allen übrigen Fällen gilt  $A_{\text{HFS}} > 0$ .

- Welche optischen Dipolübergänge sind zwischen den dargestellten Grobstruktur-niveaus  $5s$ ,  $6s$ ,  $7s$ ,  $5p$ ,  $6p$ ,  $4d$ , und  $5d$  möglich? Zeichnen Sie alle möglichen Übergänge durch geeignete Pfeile ein und begründen Sie ihre Antwort.