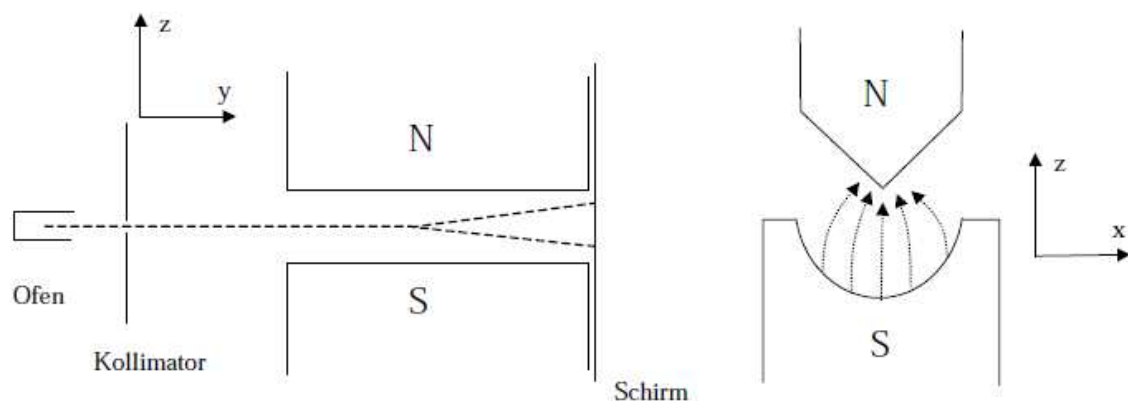


Übungsblatt 5

5.1 Externe Dynamik eines Spin 1/2 Zustandes: Das Stern-Gerlach-Experiment

Ein gut kollimierter Strahl von Natriumatomen aus einem Ofen der Temperatur $T = 700$ K durchquert einen Stern-Gerlach-Magneten. Durch Wechselwirkung des magnetischen Moments des Valenzelektrons mit dem Feldgradienten erfahren die Atome eine Ablenkung in bzw. entgegen der Richtung des Gradienten (siehe Skizze):



- Erläutern Sie kurz, warum es zu einer Aufspaltung in zwei Strahlkomponenten kommt.
- Berechnen Sie, welche Länge D der Magnet haben muss um eine Aufspaltung der beiden Strahlkomponenten vom 5 mm zu erreichen, wenn der Gradient im Magnetfeld 20 T/m beträgt.

Tipp: Verwenden Sie für die Geschwindigkeit der Na-Atome beim Austritt aus dem Ofen die nach Maxwell häufigste Geschwindigkeit $v = \sqrt{2kT/M}$.

- Berechnen Sie die Zahl der Larmorperioden, die das magnetische Moment (im klassischen Bild) während des Durchgangs durch den Magneten um die Richtung des Magnetfeldes präzediert, für ein mittleres Feld entlang der Bahn von 0,5 T.

Lösung:

(a) Die Natriumatome befinden sich in der Konfiguration $[Ne]3s^1$. Die neben dem Valenzelektron vorhandenen Elektronen bilden also eine Edelgaskonfiguration und haben somit verschwindenden Bahndrehimpuls und Spin. Somit bestimmt alleine das $3s$ -Elektron den Bahndrehimpuls und den Spin der Elektronenkonfiguration. Das $3s$ -Elektron hat einen Bahndrehimpuls von 0. Somit kann nur der Spin ein magnetisches Moment hervorrufen. Die z -Komponente des Spins kann nur die Werte $\hbar/2$ und $-\hbar/2$ annehmen. Damit kann auch das magnetische Moment des Elektrons in z -Richtung, dass durch den Spin verursacht wird, nur zwei diskrete Werte annehmen. Diese beiden Einstellungen des magnetischen Moments werden durch den Magnetfeldgradienten der Stern-Gerlach-Apperatur getrennt. Dadurch komm es also

zur Aufspaltung in zwei Strahlkomponenten.

(b) Für die Zeit T_{Flug} , die die Natriumatome durch den Magneten fliegen, gilt:

$$T_{\text{Flug}} = \frac{D}{v}.$$

Während dieser Zeit erfahren die Natriumatome in z-Richtung durch den Magnetfeldgradienten eine Kraft

$$F_z = -\mu_z \text{ grad}\mathbf{B} = \mu_B \text{ grad}\mathbf{B}.$$

Damit werden die Atome um eine Strecke

$$s = \frac{1}{2} \frac{F_z}{M} T_{\text{Flug}}^2 = \frac{1}{4} \frac{F_z D^2}{kT}.$$

abgelenkt und somit ist

$$D = \sqrt{\frac{4skT}{\mu_B \text{ grad}\mathbf{B}}}.$$

Damit die Strahlkomponenten 5mm auseinander liegen, muss eine Komponente die Hälfte dieser Strecke abgelenkt werden. Damit ergibt sich aus obiger Formel für die Länge $D = 0.72 \text{ m}$.

(c) Die Larmorfrequenz ist

$$f_l = \frac{g_s \mu_B B}{2\pi \hbar} \text{ mit } g_s = 2.$$

und ergibt sich mit $B = 0,5 \text{ T}$ zu

$$f_l = 1,3996 \cdot 10^{10} \text{ Hz}.$$

Damit ergibt sich für die Anzahl der Umdrehungen

$$n = f_l T_{\text{Flug}} = f_l \frac{D}{v}.$$

Mit der Masse $M = 3,82 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ der Natriumatome ergibt sich $v = 711,77 \text{ m/s}$. Für $D = 0,72 \text{ m}$ ist damit $n = 1,416 \cdot 10^7$ Umdrehungen.

5.2 Interne Dynamik eines Spin 1/2 Zustandes

Ein Natriumatom befinde sich jetzt in einem **homogenen** Magnetfeld $\mathbf{B}$, das in z-Richtung zeigt. In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die Wechselwirkung des magnetischen Moments $\hat{\mathbf{M}}$ mit dem Magnetfeld durch

$$\hat{\mathbf{H}} = -\hat{\mathbf{M}} \cdot \mathbf{B} = -\gamma B_z \hat{S}_z \text{ mit } \gamma = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar}$$

gegeben ist.

Wir benutzen die selbe Darstellung der Spinoperatoren wie in Aufgabe 3.2 vom 3. Übungsblatt, d.h.

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(a) Was sind die Energieeigenwerte des Systems $\hat{\mathbf{H}}$ und was sind die zugehörigen Eigenvektoren?

(b) 1. Durch eine Stern-Gerlach-Apperatur haben wir ein Natriumatom so präpariert, dass es zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$\psi_1(t=0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

sei. Geben Sie die Zeitentwicklung $\psi_1(t)$ dieses Zustandes an.

Tipp: Machen Sie sich klar, wie sich ein Energieeigenzustand in der Zeit entwickelt.

2. Diesmal präparieren wir ein Natriumatom so, dass es zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$\psi_2(t=0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

sei. Geben Sie auch hier die Zeitentwicklung $\psi_2(t)$ an.

3. In einem letzten Versuch präparieren wir ein Natriumatom so, dass es zum Zeitpunkt $t = 0$ in einer Überlagerung der Zustände $\psi_1(t=0)$ und $\psi_2(t=0)$ sei. Der Zustand ist gegeben durch

$$\psi_3(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Benutzen Sie Teil 1 und 2 um die Zeitentwicklung $\psi_3(t)$ zu bestimmen.

(c) Berechnen Sie den Erwartungswert von $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ und $\hat{S}_z$ im Zustand $\psi_3(t)$. Was bedeutet dieses Ergebnis anschaulich?

Lösung:

(a) Da der Hamiltonoperator schon Diagonalgestalt hat, kann man die Eigenvektoren aus den Spalten ablesen und damit sofort die Eigenwerte bestimmen. Mit der Definition $\omega_0 := -\gamma B_z$ ergibt sich

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ mit Eigenwerten } E_1 = \frac{\hbar}{2}\omega_0, \quad E_2 = -\frac{\hbar}{2}\omega_0.$$

(b) Für Eigenvektoren $\psi(t=0)$ zum Hamiltonoperator $\hat{\mathbf{H}}$ mit Eigenwert E gilt die Zeitentwicklung

$$\psi(t) = \exp(-iEt/\hbar)\psi(t=0).$$

In Teil 1 und 2 sind die Anfangszustände direkt Eigenzustände des Hamiltonoperator. Damit kann man direkt obige Formel benutzen:

$$\begin{aligned}\psi_1(t) &= \exp(-iE_1t/\hbar) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \exp(-\frac{i}{2}\omega_0t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\psi_2(t) &= \exp(-iE_2t/\hbar) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \exp(\frac{i}{2}\omega_0t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Der Zustand $\psi_3(t)$ lässt sich direkt in die beiden Eigenzustände zerlegen. Da wir die Zeitentwicklung dieser Zustände kennen, kennen wir damit auch die Zeitentwicklung des Gesamtzustandes.

$$\psi_3(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}\psi_3(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-\frac{i}{2}\omega_0t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(\frac{i}{2}\omega_0t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp(-\frac{i}{2}\omega_0t) \\ \exp(\frac{i}{2}\omega_0t) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

(c) Mit $\psi_3(t)$ von oben berechnen sich die Erwartungswerte zu

$$\begin{aligned}\langle S_z \rangle &= \psi(t)^\dagger S_z \psi(t) = \\ \frac{\hbar}{4} &\left(\exp(\frac{i}{2}\omega_0t), \exp(-\frac{i}{2}\omega_0t) \right) \cdot \begin{pmatrix} \exp(-\frac{i}{2}\omega_0t) \\ -\exp(\frac{i}{2}\omega_0t) \end{pmatrix} = \\ \frac{\hbar}{4} &(1 - 1) = 0,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle S_x \rangle &= \psi(t)^\dagger S_x \psi(t) = \\
&= \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} \exp(\frac{i}{2}\omega_0 t) & \exp(-\frac{i}{2}\omega_0 t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \exp(\frac{i}{2}\omega_0 t) \\ \exp(-\frac{i}{2}\omega_0 t) \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{4} (\exp(i\omega_0 t) + \exp(-i\omega_0 t)) = \\
&= \frac{\hbar}{2} \cos(\omega_0 t)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\langle S_y \rangle &= \psi(t)^\dagger S_y \psi(t) = \\
&= \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} \exp(\frac{i}{2}\omega_0 t) & \exp(-\frac{i}{2}\omega_0 t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -i \exp(\frac{i}{2}\omega_0 t) \\ i \exp(-\frac{i}{2}\omega_0 t) \end{pmatrix} = \\
&= -i \frac{\hbar}{4} (\exp(\omega_0 t) - \exp(-\omega_0 t)) = \\
&= \frac{\hbar}{2} \sin(\omega_0 t).
\end{aligned}$$

Das B-Feld in z-Richtung lässt die z-Komponente des Erwartungswertes vom Spin also invariant. Die anderen beiden Komponenten präzidieren mit der Lamorfrequenz ω_0 um das B-Feld. Insgesamt präzidiert der Erwartungswert des Spins also um das B-Feld.

5.3 Effektive Kernladung und Quantendefekt

Die folgende Tabelle enthält die Bindungsenergie (in eV) des äußersten Elektrons im Natrium-Atom im Zustand n, l .

n	l=0 (s)	l=1 (p)	l=2 (d)
3	5,139	3,036	1,519
4	1,948	1,386	0,856
5	1,023	0,794	0,547
6	0,629	0,515	0,380
7	0,426	0,361	0,279
8	0,308	0,267	0,213
9	0,232	0,205	0,169
10	0,182	0,163	0,136

(a) Die obigen Energien lassen sich als Rydberg-Serie

$$E_{nl} = R_{\infty} \frac{Z_{eff}^2(n, l)}{n^2}$$

darstellen mit $R_{\infty} = 13,6 \text{ eV}$. Erstellen Sie daraus eine Tabelle der Werte von $Z_{eff}(n, l)$.

(b) Stellen Sie die drei Serien graphisch dar, indem Sie $\sqrt{R_{\infty}/E_{nl}}$ gegenüber der Hauptquantenzahl n auftragen. Was fällt Ihnen an dieser Darstellung auf?

(c) Ausgehend von (b) ergibt sich eine weitere Darstellung als Rydbergserie (mit $Z = 1$):

$$E_{nl} = R_{\infty} \frac{1}{n^{*2}} \text{ mit } n^* = n - \delta_{nl}.$$

Die Verschiebung δ_{nl} nennt man "Quantendefekt". Erstellen Sie eine Tabelle der Quantendefekte für jedes n, l und interpretieren Sie diese auch im Hinblick auf die Ergebnisse aus (a) und (b). Welche Rolle spielt der Bahndrehimpuls?

Lösung: (a) Umstellen und einsetzen in die obige Formel ergibt für Z_{eff}

n	l=0 (s)	l=1 (p)	l=2 (d)
3	1,844	1,417	1,003
4	1,514	1,277	1,004
5	1,371	1,208	1,003
6	1,290	1,168	1,003
7	1,239	1,140	1,003
8	1,204	1,121	1,001
9	1,175	1,105	1,003
10	1,157	1,095	1,000

Man sieht, dass die s Zustände noch am meisten von der Kernladung "sehen", da sie die höchste Wahrscheinlichkeit haben, sich am Kern zu befinden. Mit steigendem Drehimpuls nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe ab und damit sieht das Valenzelektron immer weniger von der Kernladung, da diese dann gut von den anderen Elektronen abgeschirmt

werden kann.

Mit größer werdenden n wird der Kern schnell von den restlichen Elektronen abgeschirmt, so dass die effektive Ladung schnell abnimmt. Der Abschirmungseffekt nimmt am stärksten für niedrige n zu und nimmt dann nur noch schwach für hohe n zu. Dies wird klar, wenn man sich vorstellt, dass irgendwann ein Elektronenradius erreicht ist, ab dem das Valenzelektron den Kern durch die anderen Elektronen als sehr effektiv abgeschirmt wahrnimmt.

(b) (Abbildungen sind auf der letzten Seite) Die einzelnen Serien sind in ziemlich guter Näherung proportional zu n mit Steigung 1. Die Abweichung von der Linearität kann man mit dem Quantendefekt beschreiben, der in Teil (c) eingeführt wird.

(c) Der Quantendefekt bestimmt sich zu

$$\delta_{nl} = n - \sqrt{\frac{R_\infty}{E_{nl}}}.$$

Damit ergibt sich folgende Tabelle für die Quantendefekte:

n	l=0 (s)	l=1 (p)	l=2 (d)
3	1,373	0,8835	0,0078
4	1,358	0,8675	0,0140
5	1,354	0,8613	0,0137
6	1,350	0,8612	0,0175
7	1,350	0,8622	0,0182
8	1,355	0,8630	0,0093
9	1,344	0,8550	0,0293
10	1,356	0,8657	0,0000

Die Abhängigkeit des Quantendefektes von n für ein festes l ist sehr gering (allein beim Wechsel von $n=3$ auf $n=4$ ist sie etwas größer, da hier die Änderung in der Abschirmung noch am größten ist, wie in Aufgabe (a) besprochen). Dies heißt, dass die Abschirmung der Kernladung durch die restlichen Elektronen kaum durch n beeinflusst wird. Bei gleichem n hingegen variiert δ_{nl} stark mit l . Für s Schalen hat das Elektron die größte Wahrscheinlichkeit sich am Kern aufzuhalten und der Kern wird nicht von allen restlichen Elektronen abgeschirmt. Dadurch steigt der Quantendefekt. Mit größer werdendem Drehimpuls verlagert sich der Erwartungswert für den Elektronenradius nach außen. Damit wird auch die Abschirmung des Kernes besser, so dass der Quantendefekt abnimmt.

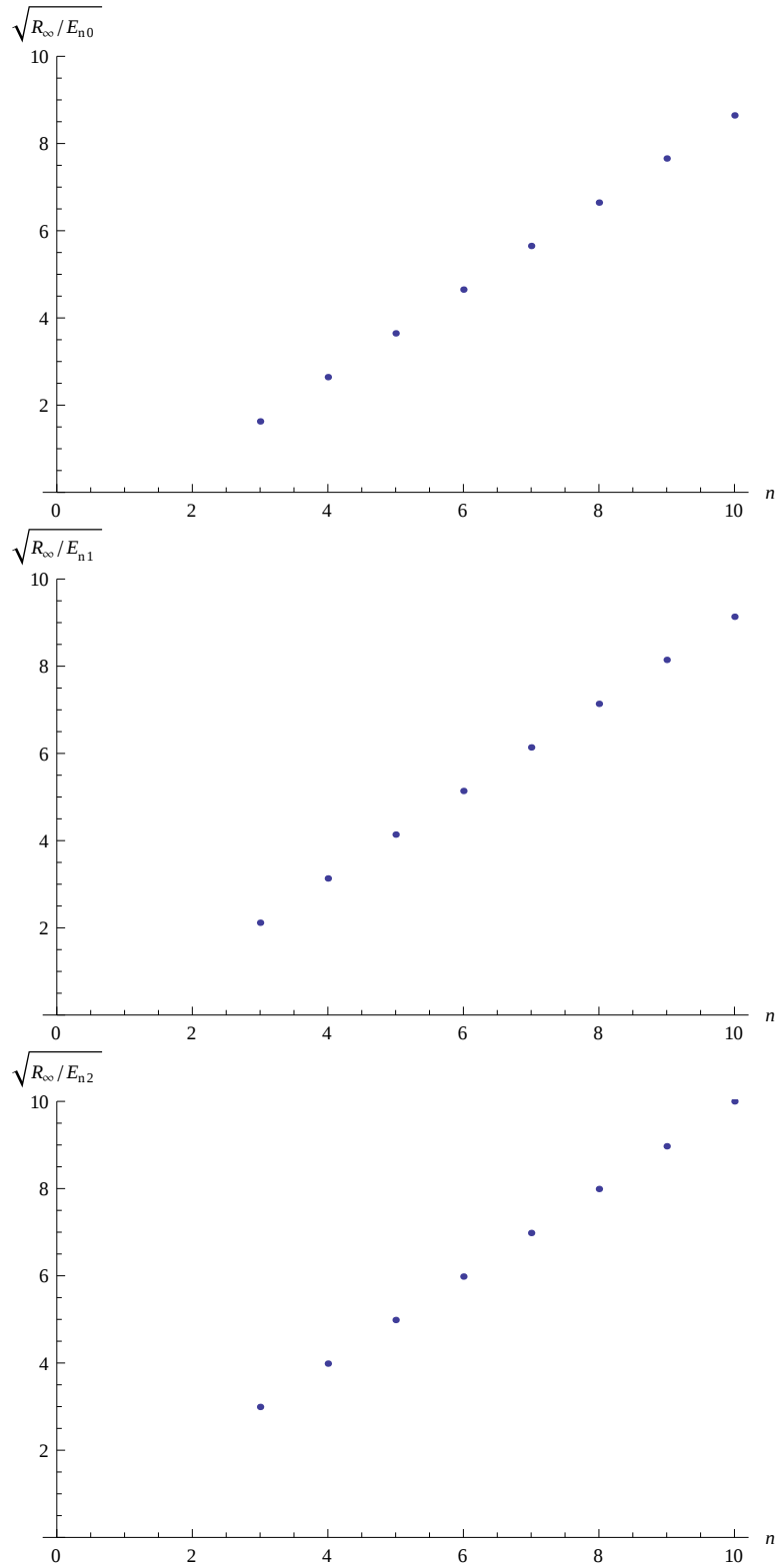


Figure 1: Die Funktion $\sqrt{R_\infty/E_{nl}}$ über n aufgetragen. Von oben nach unten ist zu sehen: $l = 0$, $l = 1$ und $l = 2$.