Atomfysik - inlämningsuppgifter 1

Anton Ljungdahl,
anton.ljungdahl@fysik.su.se

24 september 2019

1. Uppgift 1

Vi betraktar två elektroner med samma l kvanttal, dvs $l_1 = l_2 = l$. Eftersom partiklarna båda är elektroner har de också samma s-kvanttal, $s_1 = s_2 = 1/2$. Tillståndet för det totala systemet kan vi skriva som $|LM_L l_1 l_2\rangle |SM_S s_1 s_2\rangle$, för att illustrera att vi kopplat l_1, l_2 till L och s_1, s_2 till S. Uttrycker vi det här i basen $\left|l_1 l_2 m_{l_1} m_{l_2}\right\rangle \left|s_1 s_2 m_{s_1} m_{s_2}\right\rangle$ får vi

$$|LM_L l_1 l_2\rangle |SM_S s_1 s_2\rangle = \sum_{m_{l_1} m_{l_2} m_{s_1} m_{s_2}} \left\langle l_1 l_2 m_{l_1} m_{l_2} \middle| LM_L l_1 l_2 \right\rangle \left\langle s_1 s_2 m_{s_1} m_{s_2} \middle| SM_S s_1 s_2 \right\rangle \left|l_1 l_2 m_{l_1} m_{l_2}\right\rangle \left|s_1 s_2 m_{s_1} m_{s_2}\right\rangle . \tag{1.1}$$

Det här tillståndet måste ju vara antisymmetriskt under utbyte av de båda elektronerna. Efter utbytet skulle vi, enligt det givna sambandet för Clebsch-Gordan koefficienter, få koefficienter i summan som ser ut som

$$(-1)^{l_1+l_2-L}(-1)^{s_1+s_2-S} \left\langle l_2 l_1 m_{l_2} m_{l_1} \middle| LM_L l_2 l_1 \right\rangle \left\langle s_2 s_1 m_{s_2} m_{s_1} \middle| SM_S s_2 s_1 \right\rangle . \tag{1.2}$$

För att Pauliprincipen skall stämma behöver vi kräva att fasfaktorn framför är -1. Detta krav kan vi uttrycka som

$$(-1)^{l_1+l_2-L+s_1+s_2-S} = (-1)^{2k+1} \tag{1.3}$$

eller

$$l_1 + l_2 - L + s_1 + s_2 - S = 2k + 1, \tag{1.4}$$

där k är ett heltal. Med $l_1 = l_2 = l$ och $s_1 = s_2 = 1/2$ skriver vi detta som

$$2l + 1 - L - S = 2k + 1 \Leftrightarrow L + S = 2(l - k). \tag{1.5}$$

Eftersom l och k är heltal så är $l - k$ ett heltal eller noll. Det betyder att Pauliprincipen kräver att $L + S$ är noll eller jämnt för två elektroner med samma l-kvanttal.

2. Uppgift 2

Med den valda representationen får vi i första ordningens störningsteori

$$\begin{aligned}\Delta E_{\mathrm{so}} \approx \langle r_1,\ldots,r_N; LM_LSM_S|\, H' \,|r_1,\ldots,r_N; LM_LSM_S\rangle = \\ A\sum_{i=1}^{N} \langle r_1,\ldots,r_N|\, \xi_i(r_i) \,|r_1,\ldots,r_N\rangle \langle LM_LSM_S|\, \mathbf{l}_i\cdot\mathbf{s}_i \,|LM_LSM_S\rangle .\end{aligned} \tag{2.1}$$

För varje i kan vi definiera väntevärdet för $\xi_i(r_i)$ gånger konstanten A med en ny konstant β_i,

$$A\,\langle \xi_i(r_i)\rangle = A\,\langle r_1,\ldots,r_N|\xi_i(r_i)|r_1,\ldots,r_N\rangle = A\,\langle r_i|\xi_i(r_i)|r_i\rangle =: \beta_i. \tag{2.2}$$

Detta eftersom varje ξ_i bara verkar i integralen för koordinat r_i, och resterande $\left|r_j\right\rangle$ antas vara ortonormala. Detta ger oss alltså vårt sökta uttryck i första ordningens tidsoberoende störningsteori

$$\Delta E_{\mathrm{so}} \approx \sum_{i=1}^{N} \beta_i \,\langle LM_LSM_S|\mathbf{l}_i\cdot\mathbf{s}_i|LM_LSM_S\rangle . \tag{2.3}$$

Egentligen är ju orbital angular momentum och spin angular momentum i olika vektorrum, så vi kan lika gärna skriva totala angular momentum-tillståndet som $|LM_LSM_S\rangle$ som en sammansättning $|LM_L\rangle\,|SM_S\rangle$. På samma sätt verkar operatorerna $\mathbf{l}_i$ och $\mathbf{s}_i$ bara i sina motsvarande orbital/spin rum, så vi kan skriva

$$\sum_{i=1}^{N} \beta_i \,\langle LM_LSM_S|\mathbf{l}_i\cdot\mathbf{s}_i|LM_LSM_S\rangle = \sum_{i=1}^{N} \beta_i \,\langle LM_L|\mathbf{l}_i|LM_L\rangle \cdot \,\langle SM_S|\mathbf{s}_i|SM_S\rangle . \tag{2.4}$$

Nu kan vi använda Wigner-Eckarts sats! Operatorerna $\mathbf{l}_i$ och $\mathbf{s}_i$ är ju i samma vektorrum som de motsvarande totala angular momenta L och S. Det vill säga, enligt satsen, att väntevärdet för $\mathbf{l}_i$ är proportionellt mot väntevärdet för $\mathbf{L}$,

$$\langle LM_L|\mathbf{l}_i|LM_L\rangle = c_i\,\langle LM_L|\mathbf{L}|LM_L\rangle , \tag{2.5}$$

och motsvarande för $\mathbf{s}_i$ och $\mathbf{S}$ med proportionalitetskonstant d_i. Så vi kan skriva ekvation (2.4) som

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} \beta_i c_i d_i \,\langle LM_L|\mathbf{L}|LM_L\rangle \cdot \,\langle SM_S|\mathbf{S}|SM_S\rangle = \\ \sum_{i=1}^{N} \beta_i c_i d_i \,\langle LM_LSM_S|\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|LM_LSM_S\rangle = \\ \sum_{i=1}^{N} \beta_i c_i d_i \,\langle \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\rangle = \beta_{\mathrm{LS}}\,\langle \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\rangle ,\end{aligned} \tag{2.6}$$

där vi i sista likheten definierat summan över i som β_{LS}.

3. Uppgift 3

3.1. a)

Absorptionsexcitationer för natrium är för de här energierna från $3s$ till np (därav principal series"i figuren). Därför börjar absorptionsspektrat på $7p$, och sen har vi $8p, 9p$ osv.

3.2. b)

4. Uppgift 4

4.1. a)

För att vi betraktar triplet-övergångar på typen ${}^3L_J \rightarrow^3 L'_{J'}$.

4.2. b)

Antar vi att det bara är sluttillståndet som splittras har kan vi säga att varje linje i (a)-figuren svarar mot en energi $h\nu_a = E_{J_a} - E_{\mathrm{init}}$. Skillnaden mellan två av de här fotonenergierna är då

$$\epsilon_{ab} = h\nu_a - h\nu_b = E_{J_a} - E_{\mathrm{init}} - E_{J_b} + E_{\mathrm{init}} = E_{J_a} - E_{J_b}. \tag{4.1}$$

Vi vill försöka bestämma alla tre kvanttalen J, det ger oss direkt L eftersom vi redan vet S (triplet ger $S = 1$). I fallet då $J_a = J_b - 1$ kan vi använda Landés intervallregel $E_{J_a} - E_{J_b} = \beta J_a$. Om vi beräknar ϵ_{ij} för skillnaden mellan alla linjer kan vi ta kvoten mellan skillnaderna. I fallet då Landés intervallregel är uppfylld får vi något på formen

$$\frac{E_{J_a} - E_{J_b}}{E_{J_b} - E_{J_c}} = \frac{J_a}{J_b} = \frac{J_a}{J_a - 1}. \tag{4.2}$$

Vi testar helt enkelt det här för $\lambda_a = 4585.90$ Å, $\lambda_b = 4581.41$ Å, $\lambda_c = 4578.57$ Å, t. ex med ett python script. Vi får skillnaderna

$$\begin{aligned} \epsilon_{ab} &= -0.00264965 \text{ eV}, \\ \epsilon_{bc} &= -0.00167863 \text{ eV}, \\ \epsilon_{ac} &= -0.00432829 \text{ eV}. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Kvoterna blir (jag använder $\epsilon_{ab} = -\epsilon_{ba}$)

$$\begin{aligned} \epsilon_{ab}/\epsilon_{bc} &\approx 1.58, \\ \epsilon_{bc}/\epsilon_{ca} &\approx -0.39, \\ \epsilon_{ba}/\epsilon_{ac} &\approx -0.61. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Vi ser att $\epsilon_{ab}/\epsilon_{bc}$ ungefär är $3/2$, medan de andra kvoterna är negativa. För tre J-värden har vi bara en möjlig kvot enligt ekvation (4.2), och den måste per definition vara positiv. Så vi kan nu dra slutsatsen att $J_a = 3$, $J_b = 2$ och då $J_c = 1$. Eftersom $J = L - S, \ldots, L + S$ får vi då (med känt $S = 1$) direkt $L = 2$. Vi betraktar alltså övergångar från ett initialt tillstånd (som vi inte kan urskilja splittring i) till en triplet ${}^3D_1, {}^3D_2, {}^3D_3$.

4.3. c)

Anledningen till att vi bara ser sex övergångar är urvalsreglerna. Om man sätter sig ner och klurar med dem upptäcker vi att om vi skulle ha en övergång mellan termer med samma L skulle vi få åtta möjligheter. Alltså har vi övergångar mellan olika L. Urvalsreglerna säger oss också att de tre linjer i spektrat som ligger nära varandra alla är övergångar som har samma J-kvanttal på initial *eller* sluttillståndet. Vi kan alltså använda oss av samma idé som i uppgift b) på dessa tre linjer för att börja någonstans. Nu får vi $\lambda_a = 4456.61$ Å, $\lambda_b = 4455.88$ Å, $\lambda_c = 4454.77$ Å. I det här fallet visar det sig att kvoten som är en vettig Landé intervall-kvot är

$$\frac{E_{J_c} - E_{J_b}}{E_{J_b} - E_{J_a}} = \frac{J_c}{J_b} = J_c J_c - 1 \approx 1.5 \Longrightarrow J_c = 3, \tag{4.5}$$

alltså har vi igen triplett D termer. Frågan nu är om det är i den övre eller undre termen i övergången som vi beräknat kvanttalen för. Det här kan vi lista ut genom att betrakta fotonenergierna (våglängderna i spektrumet). λ_c är den kortaste våglängden av de tre, och den svarade mot det högsta J-kvanttalet i vår kvot. Alltså ökar energin med J, vilket måste betyda att vi beräknat J för den *övre* termen, som alltså är en triplett D. Nu behöver vi lista ut om vi går till en P eller F term.

5. Uppgift 5

Uttrycket för första ordningens energiskifte som vi är ute efter är

$$\Delta E = g_J \mu_B B_z M_J, \tag{5.1}$$

där g_J är Landé g-faktorn

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, \tag{5.2}$$

och μ_B är Bohr magnetonen, B_z magnetfältets komponent i z-riktningen (vi antar $\mathbf{B} = B_z \hat{\mathbf{e}}_z$). Vi antar ett svagt magnetfält så är termen proportionell mot $|\mathbf{B}|^2$ i Hamiltonianen inte bidrar nämnvärt. Vår störning är alltså Zeeman-Hamiltonianen $H' = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}$, och energin är i första ordningen

$$\langle H' \rangle = - \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \rangle . \tag{5.3}$$

Här är $\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$, där vi tagit $g_S = 2$. Vi antar att LS-koppling gäller och vi använder $|JM_JLS\rangle$ som bastillstånd för väntevärdet. Magnetfältsvektorn är ingen operator här, så vi betraktar först bara väntevärdet

$$-\langle\hat{\boldsymbol{\mu}}\rangle = \mu_B(\langle\mathbf{L}\rangle + 2\langle\mathbf{S}\rangle). \tag{5.4}$$

Nu kan vi använda Wigner-Eckarts sats igen! Både **L** och **S** är i samma vektorrum som $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, så deras väntevärden är proportionella mot **J** (kom ihåg att vi räknar väntevärden mellan $\langle JM_JLS|$ och $|JM_JLS\rangle$):

$$\langle\mathbf{L}\rangle = \frac{\langle\mathbf{L}\cdot\mathbf{J}\rangle}{J(J+1)}\langle\mathbf{J}\rangle, \tag{5.5}$$

och motsvarande för $\langle\mathbf{S}\rangle$. Då har vi alltså totalt

$$\langle H'\rangle = \frac{\langle\mathbf{L}\cdot\mathbf{J}\rangle + 2\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}\rangle}{J(J+1)}\mu_B\langle\mathbf{J}\rangle\cdot\mathbf{B}. \tag{5.6}$$

Eftersom $\mathbf{J}\cdot\mathbf{B} = J_zB_z$ och $\langle J_z\rangle = M_J$ får vi

$$\langle H'\rangle = \left[\frac{\langle\mathbf{L}\cdot\mathbf{J}\rangle + 2\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}\rangle}{J(J+1)}\right]\mu_B B_z M_J. \tag{5.7}$$

Nu återstår det bara att visa att vi kan få Landés g-faktor (5.2) från faktorn i brackets. Det åstadkommer vi med lite algebra utifrån att $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ och $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$, dvs vi kan beräkna väntevärdena om vi uttrycker dem i termer av $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$. Vi får att

$$\begin{aligned}
\langle\mathbf{L}\cdot\mathbf{J}\rangle + 2\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}\rangle &= \\
\langle\mathbf{L}\cdot(\mathbf{L}+\mathbf{S})\rangle + 2\langle\mathbf{S}\cdot(\mathbf{L}+\mathbf{S})\rangle &= \\
\left\langle\mathbf{L}^2 + \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\right\rangle + 2\left\langle\mathbf{S}^2 + (\mathbf{L}\cdot\mathbf{S})\right\rangle &= \\
\left\langle\mathbf{L}^2\right\rangle + 2\left\langle\mathbf{S}^2\right\rangle + 3\langle\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\rangle &= \\
\left\langle\mathbf{L}^2\right\rangle + 2\left\langle\mathbf{S}^2\right\rangle + \frac{3}{2}\left\langle\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2\right\rangle &= \\
\frac{3\left\langle\mathbf{J}^2\right\rangle - \left\langle\mathbf{L}^2\right\rangle + \left\langle\mathbf{S}^2\right\rangle}{2}&.
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Med $\left\langle\mathbf{J}^2\right\rangle = J(J+1)$, $\left\langle\mathbf{L}^2\right\rangle = L(L+1)$ och $\left\langle\mathbf{S}^2\right\rangle = S(S+1)$ får vi alltså att

$$\begin{aligned}
\frac{\langle\mathbf{L}\cdot\mathbf{J}\rangle + 2\langle\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}\rangle}{J(J+1)} &= \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = \\
1 &+ \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = g_J.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Då har vi visat att första ordningens energikorrektion från interaktion med magnetfält ges av

$$\Delta E = \langle H'\rangle = g_J\mu_B B_z M_J. \tag{5.10}$$

6. Uppgift 6

6.1. a)

Eftersom vi startar från $J = 1$ och går till $J = 2$ får vi följande tabell över möjliga övergångar:

$M_{J=1} \backslash M_{J=2}$	-2	-1	0	1	2
-1	σ^-	π	σ^+		
0		σ^-	π	σ^+	
1			σ^-	π	σ^+

I ruta (a) har vi inget magnetfält och alltså ingen Zeemaneffekt (M_J splittring), dvs inga övergångar (vi har M_J degeneration). I ruta (b) ser vi alla nio möjliga övergångar (jämför tabellen) eftersom vi inte har någon polarisering. Det är givet att vi observerar vinkelrätt mot magnetfältet, så i (c) får vi maximal observation av π-övergångar (3 st). Detta eftersom att fotonerna är polariserade längs z (samma riktning som magnetfältet ligger i). I ruta (d) har vi istället planpolariserat ljus vinkelrätt mot fältet, och det ger oss bara hälften av de möjliga σ-övergångarna, vilket vi ser i hur topparna minskar i magnitud jämfört ruta (b).

6.2. b)

För att verifiera att det vi ser verkligen verkar vara Zeemaneffekten kan vi göra följande beräkning. Om vi antar Zeemaneffekten så ändras övergångarnas slut- och starttillstånd enligt

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{init}} &= g_{J_{\text{init}}} \mu_B B_z M_{J_{\text{init}}}, \\ \Delta E_{\text{final}} &= g_{J_{\text{final}}} mu_B B_z M_{J_{\text{final}}}. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Så om vi tar skillnaden mellan standard-övergången (den utan splittring, dvs $M_J = 0$ för både start och slut) och någon av de andra övergångarna får vi

$$h\nu - h\nu_{\text{standard}} = \left(g_{J_{\text{final}}} M_{J_{\text{final}}} - g_{J_{\text{init}}} M_{J_{\text{init}}} \right) \mu_B B_z. \tag{6.2}$$

Delar vi bort $\mu_B B_z$ får vi ett enkelt numeriskt samband för hur topparna förhåller sig till mitten-toppen sett till våglängd/energi, som vi kan jämföra med det faktiska spektrumet. I vårt fall har vi $g_{J_{\text{init}}} = 2$ och $g_{J_{\text{final}}} = 3/2$, vilket vi beräknar med uttrycket för Landés g-faktor i uppgift 5. Exempel: för π-topparna (de närmast mitten") har vi $M_{J_i} = M_{J_f} = \pm 1$, och de ska alltså vara skiftade med $\pm(3/2 - 2) = \mp 1/2$. För första σ^+ toppen (andra till vänster räknat från mitten, kortare våglängd ger högre energi) har vi $M_{J_i} = 1$ och $M_{J_f} = 2$ vilket ger oss ett skifte $(3/2)2-2 = 1$, och så vidare. Räknat från vänster ska vi alltså ha skiften

$$2,\ 1.5,\ 1,\ 0.5,\ 0,\ -0.5,\ -1,\ -1.5,\ -2 \tag{6.3}$$

enligt Zeemaneffekten. Med en kort kod för att beräkna energier från våglängder tagna med ögonmått från figuren får vi snabbt (mittentaget som 5460.75 Å) beräknade skiften

$$2.06,\ 1.56,\ 1.11,\ 0.57,\ 0.0,\ -0.50,\ -0.99,\ -1.49,\ -2.01 \tag{6.4}$$

vilket verkar bekräfta Zeemaneffekten väl.