

Aufgabe 3.1 Anomaler Zeeman-Effekt

In Aufgabe 2.1 haben wir gezeigt, dass der Hamiltonoperator für ein Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ geschrieben werden kann als

$$H = -\frac{1}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{|\vec{x}|} - \frac{e}{2mc}L_zB + \frac{e^2}{8mc^2}B^2(x^2 + y^2) - g\frac{e}{2mc}S_zB + H_{\text{rel}}, \quad (1)$$

wobei $g = 2$ für Elektronen und H_{rel} die relativistischen Korrekturen bezeichnet. Für $\langle L_z \rangle \neq 0$ ist der diamagnetische Term, $B^2(x^2 + y^2)$, viel kleiner als der paramagnetische, L_zB , und wird im Folgenden vernachlässigt. Somit ist die Kopplung des Elektrons an das Magnetfeld durch den Zeeman-Term

$$H_Z = -\frac{e}{2mc}(L_z + 2S_z)B = -\mu_0(L_z + 2S_z)B \quad (2)$$

bestimmt. In einem schwachen Magnetfeld ist $H_Z \ll H_{\text{rel}}$. Da in diesem Fall die Zeeman-Aufspaltung gering ist gegen den Abstand der Feinstrukturkomponenten, dürfen wir bezüglich H_Z die Störungsrechnung anwenden.

- a) Aus dem Wigner-Eckart-Theorem folgt, dass für jeden Vektoroperator \vec{A} gilt

$$\langle \alpha' j m' | A_k | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha' j m | \vec{J} \cdot \vec{A} | \alpha j m \rangle}{j(j+1)} \langle j m' | J_k | j m \rangle. \quad (3)$$

Bestimme damit die Zeeman-Verschiebung der Energieeigenwerte in erster Ordnung Störungstheorie. Wie sieht diese Verschiebung für ein Mehrelektronenatom aus?

- b) Unter die relativistischen Korrekturen H_{rel} fällt auch die Spin-Bahn-Kopplung H_{S-B} . Berechne für ein Mehrelektronenatom die Energieverschiebung ΔE ($^{2S+1}L_J$) in erster Ordnung Störungstheorie. Das Resultat wird als Landésche Intervallregel bezeichnet.

Hinweis: H_{S-B} transformiert im Unterraum $\mathcal{H}_E(L, S)$ wie der Operator $\vec{S} \cdot \vec{L}$.

Aufgabe 3.2 Schalenmodell der Atome

- a) Wir betrachten den gestörten Hamiltonoperator für das Schalenmodell

$$H^{(N)} = H^{(0)} + H^{(1)}, \quad (4)$$

$$H^{(0)} = \sum_{j=1}^N \left[-\frac{1}{2m}\Delta_j + \phi_{\text{eff}}(\vec{x}_j) \right], \quad (5)$$

$$H^{(1)} = -\sum_{j=1}^N \left[\phi_{\text{eff}}(\vec{x}_j) + \frac{Ze^2}{|\vec{x}_j|} \right] + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}, \quad (6)$$

wobei ϕ_{eff} ein sphärisch-symmetrisches Potential ist.

- i) Verwende das Pauli-Prinzip, um die Eigenbasis von $H^{(0)}$ zu finden.
- ii) Zeige, dass aus dem Pauli-Prinzip in der Formulierung um Gl. 8.8 im Skript die ursprüngliche Formulierung folgt: *Keine zwei Elektronen können dieselben Quantenzahlen haben.*

iii) Der Hilbertraum der Elektronen ist gegeben durch $\mathcal{H}_a^{(N)} = P^{(a)} \left(\mathcal{H}_B^{(N)} \otimes \mathcal{H}_S^{(N)} \right)$. Die Basis dieses Raumes können wir durch die Slaterdeterminante darstellen. Sie ist eindeutig durch die Elektronenkonfiguration $(n_1 l_1) \cdots (n_N l_N)$ charakterisiert. Zur Bestimmung der (L, S) -Terme für eine Elektronenkonfiguration müssen wir den Raum $\mathcal{H}_a^{(N)}$ nach $SU(2) \times SU(2)$ ausreduzieren. Die irreduziblen Darstellungen sind von der Form $D^L \times D^S$; die auftretenden Paare (L, S) geben die gesuchten Terme. Wie lassen sich die irreduziblen Darstellungen und deren Multiplizität allgemein mit Hilfe der Charaktere bestimmen? Betrachte den konkreten Fall von vier äquivalenten p -Elektronen.

b) Es gibt Regeln, die das Aufsuchen der (L, S) -Terme vereinfachen:

Regel I: Vollbesetzte Schalen in einer Elektronenkonfiguration erhöhen die Termmannigfaltigkeit nicht, d.h. sie können bei der Bestimmung der Terme fortgelassen werden.

Regel II: Sind zwei verschiedene Gruppen äquivalenter Elektronen vorhanden, so kann man zuerst jede Gruppe für sich behandeln und am Schluss ohne Berücksichtigung des Pauliprinzip die beiden Gruppen zusammenfassen. Das Pauliprinzip bewirkt also keine weitere Reduktion der Terme.

Regel III: Eine Anzahl h von äquivalenten Elektronen in einer Schale (n, l) geben dieselbe Termmannigfaltigkeit wie $2(2l + 1) - h$ Elektronen in derselben Schale.

Beweise Regeln I-III.