

Physik IV (Atomphysik)

Vorlesung SS 2003

Prof. Ch. Berger

Zusammenfassung

Das Skript gibt eine gedrängte Zusammenfassung meiner Vorlesung an der RWTH Aachen im SS 2003. Verglichen mit vielen, auch neueren Lehrbüchern wird versucht, alte Zöpfe abzuschneiden. Sie werden also keine Diskussion des Bohrschen Atom-Modells finden, die Behandlung des Zeeman-Effekts ist auf das nötigste zusammengedrängt, der Stark-Effekt fehlt, etc.etc. Bitte weisen Sie eventuell Ihre Prüfer im Vordiplom darauf hin.

5.4 Atome im Magnetfeld

Die Untersuchung des Spektrums von Atomen, die sich in einem Magnetfeld befinden, hat enorm zur Aufklärung der Termstruktur beigetragen. Aus der modernen Sicht ist klar, was passieren wird. Im Wasserstoff beträgt das vom Bahndrehimpuls herrührende Magnetfeld am Ort des Elektrons etwa 12 T! Bei kleineren Magnetfeldern in der Apparatur wird also die Spin-Bahn-Kopplung nicht aufgebrochen, sondern das magnetische Moment μ_A des Atoms richtet sich im Magnetfeld aus. Damit ist eine klassische Wechselwirkungsenergie von

$$W = -\mu_A \mathbf{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \mathbf{B} \quad (353)$$

verbunden, wobei der Faktor 2 vor dem Spin das anomale magnetische Moment berücksichtigt. Um die quantenmechanische Energieverschiebung durch diese Wechselwirkung zu berechnen, wird (353) wieder als Operator aufgefaßt, woraus

$$\Delta W = \frac{\mu_B}{\hbar} (\langle J_z \rangle + \langle S_z \rangle) \quad (354)$$

folgt. Die z -Achse wird hier durch das Magnetfeld definiert. Die Berechnung von $\langle S_z \rangle$ bei der Zusammensetzung $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ der Drehimpulse erfordert eine längere Rechnung unter Benutzung der Methoden der Drehimpuls-Algebra. Einfacher ist es, das Modell rotierender Kreisel zu benutzen und das klassische Ergebnis in die Quantenmechanik zu übersetzen. Aus Abb. 54 lesen wir

$$S_z = \frac{J_z}{J^2} \mathbf{J} \mathbf{S} \quad (355)$$

ab. Mit

$$\mathbf{J} \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \quad (356)$$

ergibt sich

$$\langle S_z \rangle = \hbar J_z \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (357)$$

wobei auf der rechten Seite alle Symbole des Drehimpulses als Quantenzahlen interpretiert werden müssen. Damit folgt das Endresultat

$$\Delta W = g_L \mu_B B J_z \quad (358)$$

mit dem sog. Landéschen g -Faktor

$$g_L = 1 + J_z \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (359)$$

In Analogie zu (244) wird also das magnetische Moment eines Atoms durch

$$\boldsymbol{\mu} = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \quad (360)$$

gegeben. Jeder Term im Grotrian-Diagramm wird in $2J + 1$ äquidistante Terme mit einem Energieunterschied

$$\Delta W = g_L \mu_B B \quad (361)$$

aufgespalten. In Atomen ohne resultierenden Spin ($S = 0$) gilt $g_L = 1$, wie man von einem reinen Bahndrehimpuls erwartet. Dies ist als der normale Zeemann-Effekt bekannt. Im Fall $S \neq 0$ ist der Landé-Faktor etwas komplizierter (anomaler Zeemann-Effekt). Zum Beispiel spaltet das Niveau $^2P_{3/2}$ in vier Terme mit $\Delta W = (4\mu_B B)/3$ auf. In Abb. 55 wird dies für die Natrium D Linien erläutert. Da die Auswahlregeln

$$\Delta J_z = 0, \pm 1 \quad (362)$$

gelten, wird die D_1 -Linie in ein Quartett und die D_2 -Linie in ein Sextett aufgespalten. Ohne Magnetfeld werden hieraus wieder einzelne Linien, aber jetzt wird verständlich, warum die D_2 -Linie intensiver leuchtet als die D_1 -Linie: D_2 besteht aus 6 Übergängen und D_1 nur aus vier Übergängen.

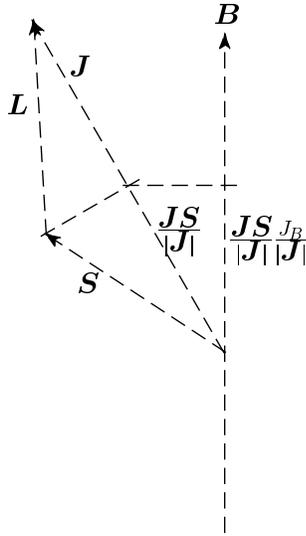


Abbildung 54: Die Zusammensetzung von Bahndrehimpuls und Spin zu einem Gesamtdrehimpuls J und die Komponente des Spins in Richtung eines Feldes.

Besonders interessant ist die Beobachtung, daß die Spektrallinien polarisiert sind. Man unterscheidet zwischen den π und den σ Linien. Die π -Linien gehören zu $\Delta J_z = 0$. Das Licht ist in Richtung des Magnetfeldes linear polarisiert und es gibt keine Ausstrahlung parallel zum Magnetfeld. Die σ -Linien gehören zu $\Delta J_z = \pm 1$. Bei Beobachtung in Richtung des Magnetfeldes ist das Licht rechts- bzw. linkszirkular polarisiert. Bei Beobachtung senkrecht zum Magnetfeld ist es linear polarisiert. Diese Polarisationen können quantenmechanisch berechnet werden. Das ist sogar einfacher als die klassische Herleitung. Trotzdem soll diese für die π -Linien kurz skizziert werden. Diese Linien stammen von Elektronen, die parallel (π !) zum Magnetfeld schwingen. Ein Dipol strahlt nicht in Schwingungsrichtung, das elektrische Feld ist in Schwingungsrichtung linear polarisiert. Da der Dipol in Feldrichtung schwingt, wirkt auf ihn keine Kraft. Die quantenmechanische Übersetzung lautet $\Delta J_z = 0$.

Direkte Übergänge zwischen den im Magnetfeld aufgespaltenen Termen eines Zustands zu festem n, J, L sind optisch nicht möglich, da die Auswahlregel der elektrischen Dipolstrahlung $\Delta L = \pm 1$ verlangt. Sie können aber durch ein senkrecht zum ausrichtenden Feld angelegtes magnetisches Wechselfeld erreicht werden (magnetische Dipolübergänge). Die Frequenz ergibt

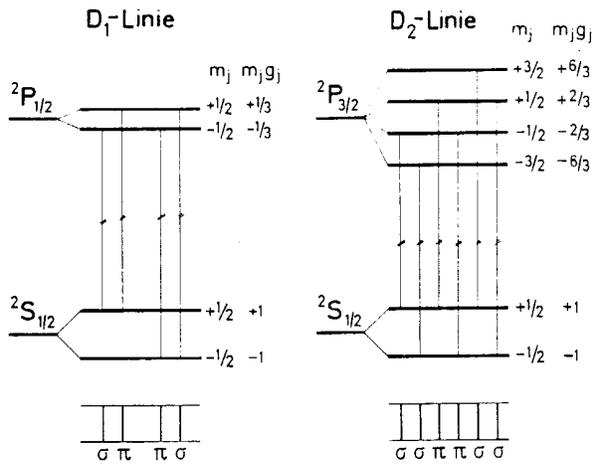


Abbildung 55: Der anomale Zeeman-Effekt der Natrium D-Linien. Aus Haken Wolf, Atomphysik.

sich aus (358) zu

$$f = \frac{g_L \mu_B B \Delta J_z}{2\pi \hbar} \quad (363)$$

also z.B. 13.996 GHz bei einem Feld von 1T, $\Delta J_z = 1$ und $g_L = 1$. Zur Beobachtung dieser *Elektronenspinresonanz* muß man also Mikrowellen verwenden. Nach den Gesetzen der statistischen Thermodynamik verhalten sich die Besetzungszahlen wie $\exp -\Delta W/kt$. Durch Einstrahlung des Wechselfeldes mit der Resonanzfrequenz (363) werden Übergänge induziert. Die Absorption überwiegt bis die Besetzungszahlen gleich sind. Die dem Sender bei Absorption entzogene Energie dient zum Nachweis der Resonanz. Besonders einfach wird dieser Nachweis, wenn man das statische Magnetfeld B_0 mit einem kleinen Wechselfeld (z.B. mit der Frequenz 50 Hz) moduliert. Dann wird nämlich das Absorptionssignal periodisch und kann einfach sichtbar gemacht werden (Abb. 56). Zusätzlich erlaubt das Modulationsfeld, die Verwendung eines Klystrons mit fester Frequenz, was erheblich einfacher und billiger ist.

Die Elektronenspinresonanz läßt sich auch indirekt optisch nachweisen. Die Versuchsanordnung der sog. Doppelresonanz zeigt Abb. 57. Durch die Einstrahlung der σ^+ -Linie auf Natrium-Atome im Magnetfeld werden Übergänge aus dem Grundzustandsterm $1^2S_{1/2}$ mit $J_z = -1/2$ in den Zustand $2^2P_{1/2}$ mit $J_z = +1/2$ erzwungen. Diese gehen optisch durch Ausstrahlung der σ und π -Linien in die beiden Niveaus des Grundzustands über. Die Besetzungszahlen des Niveaus mit $J_z = +1/2$ werden dadurch stark angereichert, da es gegen Übergänge in den tiefer gelegenen Zustand mit $J_z = -1/2$ relativ stabil (metastabil) ist. Diesen Vorgang nennt man optisches Pumpen. Durch Einstrahlen der dem Energieunterschied der beiden Niveaus des Grundzustands entsprechenden Resonanzfrequenz wird nun die Besetzungszahl des Zustands $J_z = -1/2$ erhöht. Dies bewirkt eine erhöhte Absorption der eingestrahnten σ^+ -Linie.

In diamagnetischen Atomen und Verbindungen (Atome mit $J = 0$) kann man analog zur Elektronenspinresonanz Übergänge zwischen verschiedenen Niveaus der Einstellungen des Kernspins in einem äußeren Magnetfeld nachweisen. Die zur Aufspaltung

$$\Delta W_K = g_I \mu_K B_0 I_z \quad (364)$$

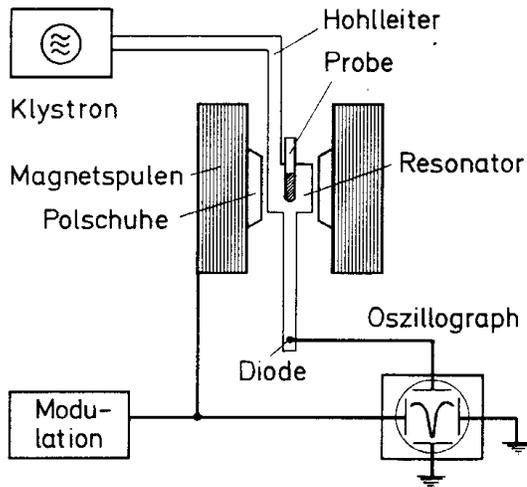


Abbildung 56: Schematische Darstellung des Versuchs. Die Spannung an den Spulen des Modulationsfeldes wird an die x -Ablenkung und das Signal der Diode an die y - Ablenkung eines Oszillographen gelegt. Im Falle der Resonanz nimmt das Signal in der Diode ab, da dem Feld Energie entzogen wird. Aus Haken Wolf, Atomphysik

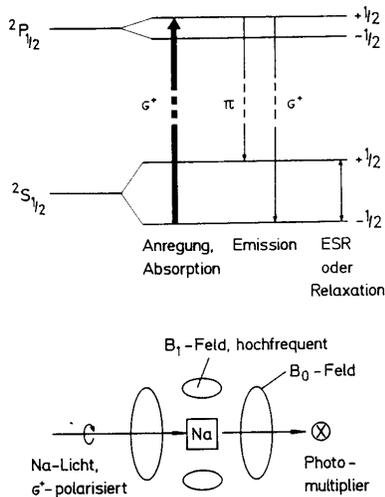


Abbildung 57: Nachweis der Elektronenspinresonanz durch einen viel höherenergetischen optischen Übergang. Gleichzeitig zeigt die Figur ein Beispiel für das sog. optische Pumpen. Aus Haken Wolf, Atomphysik

gehörigen Frequenzen liegen nun wegen des kleinen Werts von μ_K im Mhz Bereich und man kann daher einfache Spulen mit einem Magnetfeld senkrecht zur Richtung des Feldes B_0 verwenden. Die magnetischen Momente

$$\mu_K = g_I \mu_K \frac{I}{\hbar} \quad (365)$$

und damit die die Anomaliefaktoren g_I sind gut bekannt. Es gibt zwei sehr wichtige Anwendungen der Kernspinresonanz:

Chemische Strukturuntersuchungen Die Elektronenhülle diamagnetischer Moleküle bewirkt eine von der Molekülstruktur abhängige Abschirmung des Magnetfeldes B_0 . Dies gibt eine sog. chemische Verschiebung der Resonanzfrequenz von typisch 10^{-6} . Durch Messen der Resonanzfrequenz von Protonen kann man damit die Anzahl von OH-, CH₂- oder CH₃-Gruppen in einer Verbindung analysieren.

Computer Tomographie Auch Wasser gehört zu den diamagnetischen Molekülen. Es ist im Körper besonders häufig. Die räumliche Verteilung der Protonen des H₂O in einer Gewebeprobe kann gemessen werden, wenn diese sich in einem inhomogenen Magnetfeld befindet, dessen räumliche Gestalt genau bekannt ist. Aus der Intensität der zu den verschiedenen Magnetfeldstärken gehörigen Resonanzlinien kann die räumliche Verteilung der Protonen (im H₂O) berechnet werden. Die Details dieser Rekonstruktion sind kompliziert und die CT-Verfahren sind ein Musterbeispiel für die Zusammenarbeit von Physikern, Mathematikern und Informatikern in einem fortgeschrittenen Feld der Technik.