

Toepassingen van de Quantumfysica
"Typical" Exam problems

He Groundstate

Consider a He atom in the groundstate

- a) the binding energy of both electrons together is 78.9 eV. Determine the effective nuclear charge "seen" by each of the electrons. Use the fact that the binding energy of the 1s-electron in hydrogen is 13.6 eV
- b) what is the minimum energy, necessary to singly ionize the He atom?
- c) consider now the case that both electrons are in the $n=2$ shell: what are the configurations of the possible 2-electron states
- d) which of the configurations is most strongly bound? Give arguments for your answer!
- e) give the possible terms and states for each of the configurations;
- f) in a schematic drawing give the relative positions of all states for which the l -quantum numbers of both electrons are identical

O⁶⁺(4s²) and O⁶⁺(4s4p)

Consider an oxygen nucleus, O⁸⁺, with two electrons, which are both in the 4s-orbital. Assume in the first place that both electrons are completely independent from each other and both 'see' the complete nuclear charge 8+.

- a) Calculate the complete binding energy (in eV) of both electrons together. Use the fact that the binding energy of the 1s-elektron in hydrogen is 13.6 eV.
- b) One of the electrons decays to the 2s orbital. How much energy is gained by this process?
- c) If this energy is transferred to the other electron: is that electron still in a bound state? If not: what will be its kinetic energy?
- d) In reality the two electrons are not independent from each other and therefore let us now take into account that they 'feel' each others presence. How does the energy, calculated in a) change?
- e) Assume now that one of the electrons is in a 4s- and the other one in a 4p-orbital. Give reasons, why the total binding energy of this 4s4p-configuration should be larger, smaller or equal to that of the 4s² configuration discussed above in d).
- f) Consider again the 4s4p-configuration: the electrons can form a triplet or a singlet state. Which of these two has the largest binding energy - and why?

Zeeman en Paschen Back effect

In een atoombundel experiment dat soortgelijk is met een Stern Gerlach experiment wordt een bundel van $^{23}\text{Na}(^2\text{S}_{1/2})$ atomen door een sterk, inhomogeen magneetveld B_1 gestuurd (de wisselwerking met het magnetisch veld, d.w.z. het produkt $\mu_B B_1$ van Bohr magneton en veldsterkte, is veel groter dan de hyperfijnstructuur splitsing E_{HFS} van de Na niveaus). Het blijkt dat de bundel wordt opgesplitst in 8 componenten.

- a) leid hieruit af welke kernspin de kern van ^{23}Na heeft
- b) in hoeveel componenten zal de bundel in een zwak inhomogeen veld worden gesplitst?
($\mu_B B_1 \ll E_{\text{HFS}}$)

- c) maak een schets van de energienivos als functie van B voor het zwakke en het sterke veld.
 d) duid aan welke quantum getallen bij de verschillende nivos behoren.

Afremmen van een atoombundel door fotonen

Veronderstel dat een bundel natrium atomen met beginsnelheid $v_0=1000$ m/s wisselwerkt met een uit de tegenovergestelde richting komende laserbundel. Bij elke absorptie van een laserfoton wordt een impuls $kh/2\pi$ overgedragen van de laserbundel naar een atoom, met k het golfgetal van het laserlicht ($\lambda=589.0$ nm). Het 3s-elektron van het natrium atoom gaat hierbij naar de 3p-toestand, die een levensduur heeft van 16.1 ns. Omdat bij de spontane emissie vanuit de aangeslagen toestand geen netto impulsoverdracht plaats vindt (t.g.v. van foton emissie in willekeurige richtingen), is de netto impulsoverdracht ten gevolge van een groot aantal absorptie-emissie cycli gemiddeld $kh/2\pi$ per cyclus. De atomen worden hiedoor afgeremd. De massa van een natriumatoom is $M=23$ amu ($1 \text{ amu} = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$),

- a) Na hoeveel absorptie-emissie cycli is de bundel tot $v=0$ m/s afgeremd? Hoe lang is de remtijd, veronderstellend dat een absorptie-emissie cyclus gemiddeld 16 ns duurt?
 b) Hoeveel keer "g" is de vertraging ("g" = 9.81 m/s^2 = zwaartekrachts-versnelling)
 c) Hoe lang is de remweg?

In werkelijkheid heeft de laser een smalbandig frequentiespektrum. Omdat de snelheid van de atomen afneemt zullen ze ten gevolge van het Dopplereffect ($\nu = \nu_0 \cdot v/c$, met ν de frekwentie, v de atomaire snelheid en c de lichtsnelheid) al snel uit resonantie raken met de laser. We willen dit compenseren door middel van het Zeeman-effect. Als men linkshandig circulair gepolariseerd laserlicht gebruikt koppelt de grondtoestand aan het $m=1$ niveau van de 3p-toestand. Dit subniveau ondergaat een energieverschuiving in een magnetisch veld (laat spin-effecten buiten beschouwing en bereken alleen de energieverschuiving t.g.v. het baan impulsmoment). Door het magnetisch veld op de juiste manier te veranderen als functie van de plaats blijven de vertragende atomen voortdurend in resonantie met de constante laserfrequentie ν .

- d) Bereken de plaatsafhankelijke snelheid, aannemende dat de laser altijd in resonantie is.
 e) Bereken het plaatsafhankelijke magneet-veld B opdat de vertragende atomen voortdurend in resonantie blijven. Wat is de maximale waarde van het B-veld?

$$\text{Bohr magneton } \mu_B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 \quad h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Atom Deceleration with a Chirped Laser

A monochromatic beam of atoms (i.e. all atoms have the same velocity V_0) is decelerated by a collinear laser beam propagating in opposite direction. For simplicity we assume a pure two-level atom with energy levels E_1 and E_2 (with $E_1 < E_2$).

- a) Explain qualitatively why the atoms can be decelerated in this way; indicate in a schematic drawing which induced and spontaneous transitions may play a role.

- b) Show that the average momentum change of the atoms is given by

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{h}{\mathbf{l}} \frac{N_1 - N_2}{N} B \mathbf{r}$$

with N_1 and N_2 the population of the two states involved, N the total number of atoms, B the relevant Einstein coefficient for stimulated absorption and emission and ρ the spectral energy density of the laser light.

- c) Use the above relation to find a relation between dp/dt , the Einstein A coefficient for spontaneous transitions and the fraction $f=N_2/N$ of the excited atoms, whereby it is assumed that there is a stationary population distribution between N_1 and N_2 .
- d) Due to the deceleration the velocity of the atoms changes as a function of time. To keep the laser in resonance the laser frequency ν_L has therefore to be adjusted in time. Show that the time dependent variation (the "chirp") of ν_L is described by the differential equation

$$\frac{d\nu_L(t)}{dt} = -\frac{h\nu_r}{mc^2} A f \nu_L(t)$$

whereby ν_r is the resonance frequency with the atoms at rest.

- e) How does the laser frequency have to be changed as a function of time in order keep the light resonant with the decelerated atoms?

Laser Stabilisation via Zeeman effect

We want to stabilize the frequency output of a laser such that it is resonant with the Na($3s-3p$) transition at $\lambda = 600$ nm. To that end we take part of the output to irradiate a Na vapour cell. Fluorescence of the vapour takes place as soon as the frequency is somewhere within the Doppler profile of the resonance line.

- a) give an indication how broad the frequency range is, in which fluorescence is observed. Assume a temperature of 300 °K. (atomic mass of Na is 23, proton mass $m_p=1.67 \cdot 10^{-27}$ kg, Boltzman constant $k=1.38 \cdot 10^{-23}$ JK⁻¹)

We want to stabilise the laser with an accuracy of several kHz.

- b) why is that practically impossible by simply observing the fluorescence?

To improve the accuracy we place the vapour cell in a magnetic field and split the laser output into two individual beams, one of which is given right-hand and the other left-hand circular polarization. These two beams are - spatially separated - irradiated into the vapour cell. The frequency-dependent fluorescence of the vapour is measured with photodiodes, e.g. in a direction perpendicular to the laser light. Due to the Zeeman effect these signals exhibit a frequency shift with respect to each other.

- c) sketch qualitatively the two signals as well as their difference as a function of frequency.
- d) For a magnetic field of $B=10^{-2}$ Tesla calculate the frequency shift, assuming that the fluorescence is exclusively due to the D₂ line (the $^2S_{1/2}-^2P_{3/2}$ transition); disregard the influence of the nuclear spin.
($\mu_B=9.27 \cdot 10^{-24}$ Am², $g_j= 1+[j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]/[2 j(j+1)]$, $h=6.6 \cdot 10^{-34}$ Js)
- e) estimate the magnetic field strength necessary to "catch" the laser frequency and to stabilize to the zero-crossing of the difference signal as soon as reasonable

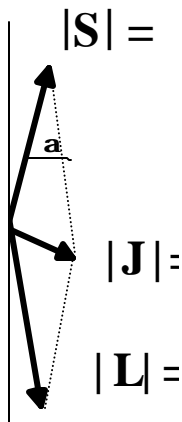
fluorescence occurs.

- f) estimate the fieldstrength necessary to bring the absorption of a Na-flame out of absorption resonance for light from a Na discharge lamp.

Fijnstructuursplitsing

We beschouwen een atoom in een toestand die aangeduid wordt door $^4D_{1/2}$.

- geef de quantumgetallen voor het totale baanimpulsmoment L , de totale spin S en het totale impulsmoment J van deze toestand.
- gebruik het vector model en de schets om te zien hoe de vectoren L , S en J t.o.v. elkaar staan. Geef de lengte van deze vectoren aan (in veelvoud van $h/2\pi$).
- bereken de hoek α (c.q. $\cos \alpha$) tussen de vectoren L en S .
- breid de schets uit met de overeenkomstige magnetische momenten \mathbf{m}_S , \mathbf{m}_L en \mathbf{m}_J .
- bereken de waarde van het magnetisch moment μ_J (in veelvoud van het Bohr magneton μ_B), via de vectorsom van \mathbf{m}_L en \mathbf{m}_S
- het blijkt, dat de $^4D_{1/2}$ term in een magneetveld niet is opgesplitst. Leg uit wat dat betekent voor de hoek β tussen de vectoren J en \mathbf{m}_J en voor de tijdelijk gemiddelde waarde van \mathbf{m}_J .



cos-regel: $c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos(a,b)$

Hyperfinestructure of hydrogen.

The spins of electron and proton are vectorial quantities, characterized by quantum numbers $s=1/2$ and $I=1/2$.

- which are the resulting values for the total angular momentum F of the groundstate hydrogen atom?
- give arguments, why states with different F have different energies.
- indicate in a drawing how the energies split and vary when an external magnetic field \mathbf{B} is applied; indicate in this drawing also the quantum numbers which are relevant in case of strong magnetic fields.
- discuss, how one could experimentally obtain an ensemble of atoms in which the H-atoms are in the state with higher energy.

Hyperfine structure of deuterium

We know that H -atoms from the milky way emit radiation with a wavelength of 21 cm due to hyperfine transitions $F=1 \leftrightarrow F=0$ in the electronic groundstate. To see whether there are also D -atoms, one can try to observe the corresponding radiation from D . In order to find out at which wavelength one should look we consider the following: the proton has a nuclear spin $I=1/2$ and a magnetic moment of $\mu_p=2.8 \mu_N$. The hydrogen groundstate is split into two hyperfine levels with an energy separation of 1420 MHz. Deuteron has a nuclear spin of $I=1$ and the g_I -factor is $g_I=0.86$.

- into how many hyperfine levels is the groundstate of the Deuterium atom split?
- what is the energy separation between these levels and to which wavelength does this correspond?
- into how many hyperfine levels is the $3p_{3/2}$ level split? And the $4d_{5/2}$?

The hyperfine- c.q. interval-constant is given by $a=g_I \mu_N B_J [J(J+1)]^{-1/2}$

Magnetic Resonance Imaging (MRI) of the human lung

The human lung can be visualized via MRI when the lung is filled with ^3He and nuclear magnetic resonance transitions are observed, which are induced by radiation of suitable frequencies. Let us consider the physics of this in some more detail: the nucleus of ^3He consists of two protons and one neutron, has a spin of $I=1/2$ and a magnetic moment of $\mu = -2.1 \mu_n$. We first consider a ^3He atom in its electronic ground state $\text{He}(1s^2)^1S$;

- what is the total magnetic moment of the atom (in multiples of the Bohr magneton μ_B)?
- in a magnetic field B the groundstate is split due to the Zeeman effect of the hyperfine states. Which frequency is required to induce transitions between these states in a field of $B = 1$ Tesla?
- What is the difference in population (in %) between the relevant states at room temperature ($T=300$ K)

In order to reach a stronger population difference one can use circularly polarized laser light which induces transitions $\text{He}(1s2s)^3S \rightarrow \text{He}(1s2p)^3P$, whereby the $\text{He}(1s2s)^3S$ atoms are in the first place obtained by electron collisions in a discharge. In order to find the most suitable states of the 3S and the 3P term we look which states are possible:

- what are the possible values of the total electronic angular momentum $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ for various states of the 3S and the 3P terms? (bold face indicates that the quantities are vectors!)
- what are the possible total angular momenta $\mathbf{F}=\mathbf{J}+\mathbf{I}$ of the corresponding hyperfine states?
- What is the most suitable hyperfine transition which should be induced in order to obtain nuclear spin orientation by irradiation with circularly polarized laser light? Make a schematic drawing in which also the magnetic substates are shown and indicate which transitions -induced or spontaneous - will take place

$$\mu_B = 9.3 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 (=J/T) \quad h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad \text{Boltzman constant } k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

Allowed terms and Hund's rules

Consider an atomic state with two electrons in the configuration $(2p^3p)$ and $(2p^2)$. Discuss for these two cases

- what are the possible values for the total orbital angular momentum L ?
- what are the possible values for the total spin S ?
- which terms and states are allowed
- what is their energetic ordering according to Hund's rules?

Perturbation

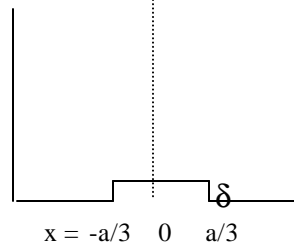
Consider the one-dimensional square 'stepped' potential well given by

$$V(x) = +\infty \quad \text{for } |x| > a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{for } a/3 < |x| < a$$

$$V(x) = \delta \quad \text{for } |x| < a/3$$

where δ is small with respect to the energy of the lowest level



- what are the lowest wavefunctions for the undisturbed potential ($\delta=0$)
- what are the corresponding eigenenergies?
- discuss, why first order perturbation theory is appropriate to determine energies and wavefunctions for the disturbed potential
- from first order perturbation theory find the two lowest energy levels,
- give the general expression for the corresponding new wavefunctions. Are some terms vanishing in these expressions?

Storingstheorie bij ontarding (lineair Stark effect)

De $n=2$ energie toestanden van waterstof zijn in eerste instantie ontard.

- hoeveel (sub-) toestanden zijn dit, en hoe kunnen die worden gecharacteriseerd?
De ontarding wordt opgeheven door toepassing van een elektrisch veld F in z -richting.
- schrijf de nieuwe eigenstoestanden als lineaire combinatie van de oorspronkelijke $n=2$ toestanden
- schrijf de Schrödinger vergelijking op voor dit systeem
- bepaal de nieuwe energie eigenwaardes, i.e. $\langle \psi | H | \psi \rangle$ en discussier, welke matrix elementen verdwijnen

Storingstheorie bij ontarding

De rotatiebeweging van een twee-atomig molecuul wordt in goede benadering beschreven door de Schrödingervergelijking

$$-\frac{\hbar^2}{Mr_0^2} \frac{d^2}{d\Theta^2} \Phi(\Theta) = E\Phi(\Theta)$$

met M de gereduceerde massa en r_0 de onderlinge afstand van de atomen. Veronderstel een oplossing van deze vergelijking die periodiek in de hoekcoördinaat θ is, d.w.z.

$$\phi(\theta+2\pi)=\phi(\theta).$$

a) geef de golffuncties en de energie-eigenwaardes van dit systeem.

Wij nemen nu aan dat het systeem verstoord wordt door een extra potentiaal $a*\cos(2\theta)$

b) hoe ziet de Schrödingervergelijking er nu uit?

c) druk in algemene zin de nieuwe golffuncties uit in de oude golffuncties

d) gebruik storingstheorie bij ontarding om de nieuwe energieën en golffuncties te berekenen, uitgaande van de twee "laagste" ontaarde toestanden ($n=1$). (Als dit gedeelte te reken-intensief en tijdrovend wordt, geef de algemene weg aan en ga eerst verder met andere opgaven!)

Storingsrekening

We beschouwen een ééndimensionele potentiaalput met oneindig hoge wanden en een vlakke bodem, gegeven door $V=0$ voor $|x|<a$ en $V=\infty$ voor $|x|>a$.

a) Geef de golffuncties voor de twee laagste eigentoestanden (u_0 en u_1) voor een deeltje in deze put.

b) Wat zijn de bijbehorende energie-eigenwaardes E_0 en E_1 voor deze twee functies?

We beschouwen nu een storing van de potentiaal die beschreven wordt door $V_p=-A \sin(\pi x/2a)$ voor $|x|<a$, met $A \ll E_0$.

c) Geef de Schrödingervergelijking voor dit geval.

d) Waarom geeft eerste orde storingrekening in deze situatie geen bevredigend resultaat?

e) Om via storingsrekening een oplossing te vinden gaan we nieuwe golffuncties introduceren die een lineaire combinatie van de twee laagste eigenfuncties van de put met vlakke bodem zijn, dus $\Psi = bu_0 + cu_1$. Geef aan hoe je de nieuwe energieën en golffuncties kunt berekenen.

f) Bereken de nieuwe energie-eigenwaardes. Vereenvoudig de uitdrukking voor E door aan te nemen dat $A/(E_1-E_0) \ll 1$.

g) Bereken de nieuwe golffuncties.