

FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK 4 2009

Übung 4 - Musterlösung

1 Boltzonen, Bosonen, Fermionen

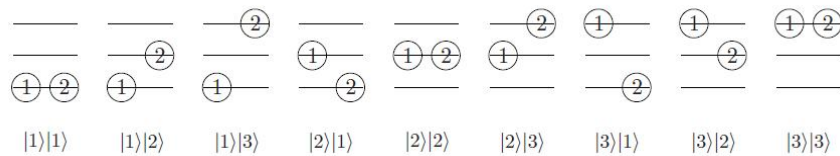
Stellen Sie die verschiedenen Möglichkeiten dar, $N = 2$ Teilchen auf $Z = 3$ Zustände zu verteilen. Unterscheiden Sie dabei

- (a) gleichartige, unterscheidbare klassische Teilchen („Boltzonen“)
- (b) identische Bosonen
- (c) identische Fermionen

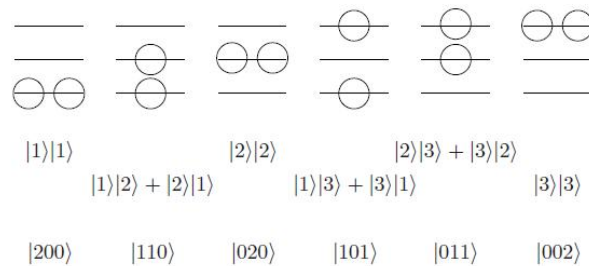
Wie viele Möglichkeiten gibt es allgemein, N klassische Teilchen / Bosonen / Fermionen auf Z Zustände zu verteilen?

Lösung:

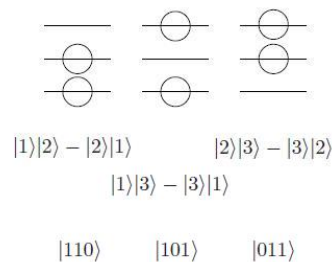
- (a) 2 klassische Teilchen in 3 Zuständen:



- (b) 2 identische Bosonen



(c) 2 identische Fermionen



Allgemeiner Fall. System aus N Teilchen, die jeweils Z 1-Teilchenzustände annehmen können. Dann ist die Anzahl d der Zustände des Gesamtsystems:

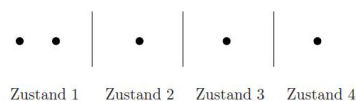
- *klassisch*: $d = Z^N$. Denn jedes der N Teilchen kann Z Zustände annehmen, und jede dieser Kombinationen entspricht 1 – 1 einem Zustand des Gesamtsystems
- *fermionisch*: Die möglichen Zustände des Gesamtsystems entsprechen hier 1 – 1 den Möglichkeiten, Z Zustände an N Teilchen zu vergeben, wobei keine Wiederholungen auftreten dürfen und auf die Reihenfolge keine Rücksicht genommen wird. Die Bedingung, dass keine Wiederholungen auftreten dürfen, lässt nur

$$Z(Z - 1)\dots(Z - N + 1)$$

statt Z^N Möglichkeiten zu. Wegen der Bedingung, dass keine Rücksicht auf die Reihenfolge genommen wird, muss das auch noch durch die Zahl aller möglichen Permutationen dieser Faktoren dividiert werden, also durch $N!$. Insgesamt also

$$d = \frac{Z(Z - 1)\dots(Z - N + 1)}{N!} = \frac{Z!}{(Z - N)!N!} = \binom{Z}{N}$$

- *bosonisch*: Man betrachte als Beispiel den Fall $N = 5$, $Z = 4$. Eine bestimmte Konfiguration, die 5 ununterscheidbaren Teilchen mit Wiederholungen auf die 4 Zustände zu verteilen, sieht dann beispielsweise folgendermaßen aus:



Dabei markieren die Striche die „Zustandsgrenzen“. Wären die Teilchen und die Zustandsgrenzen unterscheidbar, dann entspräche jeder möglichen Konfiguration 1 – 1 eine Permutation *aller dargestellten Objekte*, also sowohl der Punkte als auch der Striche. Da es sich um N Teilchen und um $Z - 1$ Striche handelt, haben wir insgesamt $N + Z - 1$ Objekte, und daher $(N + Z - 1)!$ Möglichkeiten, diese anzuordnen. Nun sind aber die Zustandsgrenzen ununterscheidbar, daher muss durch die Anzahl $(Z - 1)!$ der möglichen Permutationen der Zustandsgrenzen dividiert werden. Auch die Teilchen sind ununterscheidbar, daher muss dies nochmal durch die Anzahl $N!$ der möglichen

Permutationen der Teilchen dividiert werden. Insgesamt ergibt sich:

$$d = \frac{(N + Z - 1)!}{(Z - 1)!N!} = \binom{Z + N - 1}{N}$$

2 Elektronenpotential

Wie sieht das Potential für das zweite Elektron im *He*-Atom aus, wenn das erste Elektron durch eine *1s*-Wellenfunktion beschrieben werden kann, d.h. die Wechselwirkung zwischen beiden Elektronen nur summarisch berücksichtigt wird?

Lösung: Das Potential für das zweite Elektron im *He*-Atom ist:

$$\phi(\vec{r}_2) = -\frac{Z \cdot e}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{|\psi_{1s}(r_1)|^2}{r_{12}} d\tau$$

wobei ψ_{1s} die Wellenfunktion des ersten Elektrons ist.

$$\begin{aligned} r_{12}^2 &= r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta \\ \Rightarrow r_{12} dr_{12} &= r_1 r_2 \sin \theta d\theta \\ d\tau &= r_1^2 dr_1 \sin \theta d\theta d\phi \\ \psi_{1s} &= \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi} \cdot a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-Z \frac{r_1}{a_0}} \quad \text{mit } Z = 2 \end{aligned}$$

Einsetzen liefert für das Integral

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{|\psi_{1s}|^2}{r_{12}} r_1^2 \sin \theta dr_1 d\theta d\phi \\ &= \frac{Z^3 \pi}{\pi a_0^3} \left[\int_{r_1=0}^{r_2} \frac{e^{-Z \cdot 2 \frac{r_1}{a_0}} r_1^2}{r_1 r_2} dr_1 \int_{r_{12}=r_2-r_1}^{r_2+r_1} dr_{12} \right. \\ &\quad \left. + \int_{r_1=r_2}^{\infty} \frac{e^{-Z \cdot 2 \frac{r_1}{a_0}} r_1}{r_2} dr_1 \int_{r_{12}=r_1-r_2}^{r_1+r_2} dr_{12} \right] \end{aligned}$$

weil für $\theta = 0$ gilt:

$$r_{12} = \begin{cases} r_2 - r_1 & \text{für } r_1 < r_2 \\ r_1 - r_2 & \text{für } r_2 < r_1 \end{cases}$$

für $\theta = \pi$ folgt $r_{12} = r_1 + r_2$. Ausführen der Integration ergibt mit $r_1 = r_2$ das gesamte Potential:

$$\phi(r) = -\frac{(Z-1)e}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{a_0} + \frac{1}{r} \right) e^{-2Z \frac{r}{a_0}}$$

mit $Z = 2$ für das *He*-Atom.

3 Einsteinium und exotische Atome

Berechnen Sie für ein fast vollständig ionisiertes Einsteiniumion (${}^{254}_{99}\text{Es}^{98+}$) den Bahnradius und die Gesamtenergie im Grundzustand mit verschiedenen gebundenen Teilchen in der Hülle ($a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e}$):

- (a) ein Elektron
- (b) ein Myon $m_\mu \approx 207m_e$
- (c) ein Anti-Proton
- (d) Berechnen sie für alle drei Fälle die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im $1s$ -Zustand innerhalb des Kern-Volumens. Verwenden Sie $R_{10}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2}} e^{-\frac{\alpha}{2}r}$ mit $\alpha = \frac{2Z}{a_0}$. Interpretieren Sie das Ergebnis.

Lösung:

- (a) Elektron

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0$$
$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_R, \quad E_\infty = E_R = 13.6\text{eV}$$

für $n = 1, Z = 99$:

$$r_1(\text{Es}) = 5.35 \cdot 10^{-13}\text{m}$$
$$E_1(\text{Es}) = 133\text{keV}$$

- (b) Myon $m_\mu \approx 207m_e$

$$a_0^\mu = \frac{1}{207} a_0 \rightarrow r_1^\mu(\text{Es}) = 2.58 \cdot 10^{-15}\text{m}$$
$$E_R^\mu = 207 \cdot E_R \rightarrow E_1^\mu(\text{Es}) = 27\text{MeV}$$

- (c) Anti-Proton

$$r_1^{p^-} = \frac{m_e}{m_p} \frac{a_0}{Z} = 2.9 \cdot 10^{-16}\text{m}$$
$$E_1^{p^-}(\text{Es}) = -\frac{m_{p^-}}{m_e} \cdot E_R \cdot \frac{Z^2}{n^2} = 0.24\text{GeV}$$

(d) Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit erhält man durch Integration bis zum Kernrand

$$\begin{aligned}
 P_{10}(R) &= \int_0^R r^2 |R_{10}(r)|^2 dr = \\
 &= \frac{\alpha^3}{2} \int_0^R r^2 e^{-\alpha r} dr = \\
 &= \frac{\alpha^3}{2} \left[-e^{-\alpha R} \left(\frac{R^2}{\alpha} + \frac{2R}{\alpha^2} + \frac{2}{\alpha^3} \right) + \frac{2}{\alpha^3} \right] \\
 &= 1 - e^{-\alpha R} \left(\frac{\alpha^2 R^2}{2} + \alpha R + 1 \right)
 \end{aligned}$$

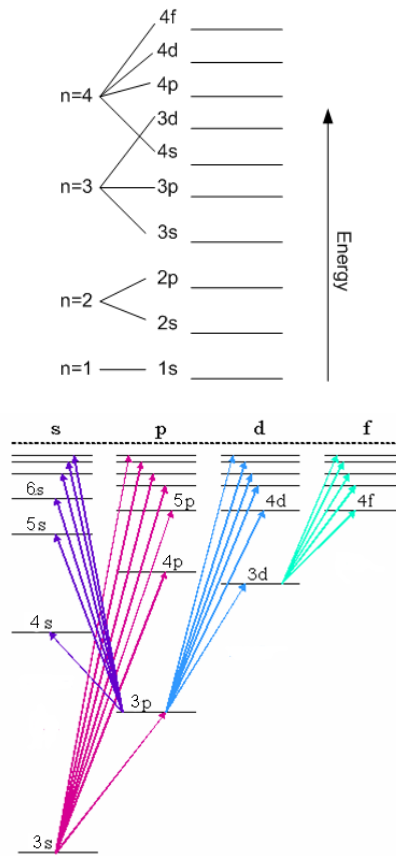
Der Kernradius berechnet sich zu $R = a_0 \cdot \sqrt[3]{A} = 3.3 \cdot 10^{-9} m$ Man sieht sehr schnell für alle drei Teilchen:

$$P_{10}(R) = 1$$

Das Teilchen befindet sich immer innerhalb des Kernradius.

4 Atome und Energien

- (a) Zeichnen Sie ein *allgemeines* Energieniveauschema bis zur vierten Hauptquanten.
- (b) Zeichnen Sie das Termschema des Natrium Atoms. Vernachlässigen Sie mögliche Feinstrukturaufspaltungen und beschriften Sie die einzelnen Energieniveaus ($n^{2S+1}L_J$) bis zu einer vernünftigen Höhe :-)
- (c) Warum hat das Na-Atom ein Termschema, aber z.B. Helium derer zwei?



Lösung:

- (a) (Siehe Bild)
- (b) (Siehe Bild)
- (c) Dies ist bedingt durch die unterschiedliche Spin-Kopplung der ungepaarten Elektronen. Beim Helium ist dort ein Gesamtspin $S = 1$ und $S = 0$ möglich, dies führt zum Ortho- und Parahelium. Beim Natrium ist der Gesamtspin $S = \frac{1}{2}$, da nur ein Elektron in der Valenzschale ist. Damit gibt es keine unterschiedlichen Spin-Kopplungen und keine verschiedenen Termschemas.

5 Mehrelektronenatome

- (a) Im Zentralfeldmodell hängt die Energie eines stationären Zustands des Atoms nur von den Quantenzahlen n und l der Elektronen ab. Dabei kommt es nicht darauf an, welches Elektron welche Quantenzahlen hat, sondern nur darauf wieviele Elektronen einen bestimmten Satz von Quantenzahlen haben. Dies wird durch die Elektronenkonfiguration ausgedrückt. Interpretieren Sie die folgenden Elektronenkonfigurationen neutraler Atome. Um welches Atom handelt es sich jeweils?

$$1s^2, \quad 1s^2 2s^2 2p^3, \quad 1s^2 2s^2 2p^4 3s, \quad 4f^{13}$$

Geben Sie die Energien der zugehörigen stationären Zustände als Linearkombinationen der 1-Teilchen-Energien $E_n l$ an.

- (b) Die Elektronenkonfiguration eines Heliumatoms sei $1s2p$. Wieviele linear unabhängige stationäre Zustände gehören zu diesem Energieniveau? *Anleitung:* Zählen Sie die Zustände ab, indem Sie davon ausgehen, dass diese Produkte der 1-Teilchen-stationären Zustände $\varphi_{nlm m_s}(x)$ sind, wobei für jedes Elektron ein Faktor auftritt. Die Werte der n_i und l_i sind durch die Elektronenkonfiguration festgelegt, während m_i alle zu l_i gehörenden Werte und m_{s_i} wie üblich nur $\pm\frac{1}{2}$ annehmen kann. (Antwort: 12)
- (c) Es sei nun ein Lithiumatom mit der Elektronenkonfiguration $2p^2 2d$ gegeben. Wieviele (linear unabhängige) stationäre Zustände gehören zu diesem Energieniveau? Gehen Sie so vor wie in Teil (b), wobei aber zu berücksichtigen ist, dass im Produkt keine Faktoren mit identischen Quantenzahlen auftreten dürfen (Pauli-Prinzip) und Zustände, die sich nur durch eine Permutation von Faktoren unterscheiden, als einer gezählt werden.
- (d) Wie groß ist die Entartung des Grundzustandes von Kohlenstoff, wie groß die des Grundzustandes von Magnesium?
- (e) Die Entartung der stationären Zustände zu einer Elektronenkonfiguration wird aufgehoben, wenn z.B. Spin-Bahn-Kopplung (Feinstrukturaufspaltung) existiert. Die Niveaus, in die eine gegebene Elektronenkonfiguration aufspaltet, haben definierte Gesamtdrehimpulse $\mathbf{S}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{J}^2$ und werden durch die sog. spektroskopischen Symbole $^{2S+1}L_J$ bezeichnet. Für eine Konfiguration der Form $\dots n_1 l_1 n_2 l_2$ (wobei \dots für vollständig besetzte Orbitale steht) sind die möglichen Werte von L, S, J gegeben durch

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2 \quad , \quad S = 0, 1 \quad , \quad J = |L - S|, \dots, L + S$$

Das Niveau zu einem bestimmten Symbol ist dabei noch $2J + 1$ -fach entartet. In welche Niveaus zerfällt die Konfiguration $1s2p$ von Helium? Bestimmen Sie die Dimensionen der zugehörigen Räume und vergleichen Sie das Resultat mit dem Ergebnis von Teil (b).

- (f) In welche Niveaus zerfällt die Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^3 p$ von Kohlenstoff? Welche Dimension hat also diese Konfiguration?
- (g) Wie lautet die Konfiguration des ersten angeregten Zustandes von Magnesium? Wie groß ist seine Energie, ausgedrückt durch die 1 Elektronenenergien der Zentralfeldnäherung? In welche spektroskopische Niveaus $^{2S+1}L_J$ zerfällt die Konfiguration des ersten angeregten Zustandes? Welche Dimension hat folglich der Raum des ersten angeregten Zustandes?

Lösung:

- (a) • $1s^2$: Zwei Elektronen im Zustand mit $n = 1, l = 0$. Helium. Die Energie ist $E = 2E_{10}$.
- $1s^2 2s^2 2p^3$: Zwei Elektronen im Zustand mit $n = 1, l = 0$, zwei Elektronen im Zustand mit $n = 2, l = 0$, drei Elektronen im Zustand mit $n = 2, l = 1$: Stickstoff. Die Energie ist $E = 2E_{10} + 2E_{20} + 2E_{21}$.
- $1s^2 2s^2 2p^4 3s$: Zwei Elektronen im Zustand mit $n = 1, l = 0$, zwei Elektronen im Zustand mit $n = 2, l = 0$, vier Elektronen im Zustand mit $n = 2, l = 1$, ein Elektron im Zustand mit $n = 3, l = 0$. Fluor (angeregt). Die Energie ist $E = 2E_{10} + 2E_{20} + 4E_{21} + E_{30}$.

- $4f^{13}$: 13 Elektronen im Zustand mit $n = 4, l = 3$. Aluminium. Die Energie ist $E = 13E_{43}$.

(b) Die stationären Zustände zum Energieniveau $1s2p$ sind die Produkte von zwei 1-Teilchen-Zuständen:

$$\varphi_{10m_1m_{s_1}}(\mathbf{x}_1)\varphi_{21m_2m_{s_2}}(\mathbf{x}_2)$$

Hier kann m_1 wegen $l_1 = 0$ nur den Wert $m_1 = 0$ annehmen, m_2 wegen $l_2 = 1$ die Werte $m_2 = 0, \pm 1$. m_{s_1} und m_{s_2} wie immer die Werte $\pm \frac{1}{2}$. Fasst man $m_1m_{s_1}$ als einen Index auf, der 2 Werte annehmen kann und $m_2m_{s_2}$ als einen Index, der $3 \cdot 2 = 6$ Werte annehmen kann, dann ist klar, dass es $2 \cdot 6 = 12$ solcher Produkte gibt.

Insgesamt ist der Raum der Konfiguration $1s2p$ also 12-dimensional, das zugehörige Energieniveau ist 12fach entartet.

(c) Die Konfiguration $2p^23d$ bedeutet $n_1 = n_2 = 2, l_1 = l_2 = 1, n_3 = 3, l_3 = 2$. Die zugehörigen stationären Zustände sind also Produkte von drei 1-Teilchen-Zuständen:

$$\varphi_{21m_1m_{s_1}}(\mathbf{x}_1)\varphi_{21m_2m_{s_2}}(\mathbf{x}_2)\varphi_{32m_3m_{s_3}}(\mathbf{x}_3)$$

Der dritte Faktor ist einfach: Wegen $m_3 = 0, \pm 1, \pm 2$ und $m_{s_3} = \pm \frac{1}{2}$ gibt es für diesen 10 Möglichkeiten. Die ersten beiden Faktoren haben identische nl . Beide können jeweils 6 Werte annehmen (vergleiche Aufgabe b). Diese sind jedoch nicht unabhängig voneinander, daher darf man nicht auf insgesamt $6 \cdot 6 = 36$ Möglichkeiten schließen. Denn um das Pauli-Prinzip zu erfüllen und um Mehrfachzählung zu vermeiden, dürfen die 6 möglichen Werte auf die 2 Indizes $m_1m_{s_1}$ und $m_2m_{s_2}$ nur *ohne Wiederholung* und *ohne Anordnung* verteilt werden. Dafür gibt es 2 aus 6, also 15 Möglichkeiten.

Insgesamt ist der Raum zur Konfiguration $2p^23d$ also $15 \cdot 10 = 150$ -dimensional, das zugehörige Energieniveau ist 150fach entartet.

(d) Der Grundzustand von Kohlenstoff hat die Elektronenkonfiguration $1s^22s^22p^2$. Also:

$$\varphi_{10m_1m_{s_1}}(\mathbf{x}_1)\varphi_{10m_2m_{s_2}}(\mathbf{x}_2) \cdot \varphi_{20m_3m_{s_3}}(\mathbf{x}_3)\varphi_{20m_4m_{s_4}}(\mathbf{x}_4) \cdot \varphi_{21m_5m_{s_5}}(\mathbf{x}_5)\varphi_{21m_6m_{s_6}}(\mathbf{x}_6)$$

Für das Produkt aus den ersten zwei Faktoren (also $1s^2$) gibt es nur eine Möglichkeit, die Indizes zu besetzen. Eigentlich denkt man an 4 Möglichkeiten, wegen Pauli etc. fällt aber aus der 2×2 -Indexmatrix wieder die Diagonale und die untere Hälfte weg, und es bleibt eine einzige erlaubte Kombination übrig. Dasselbe gilt für das $2s^2$ -Produkt. Die Vielfachheit wird also allein durch die letzten beiden Faktoren, also $2p^2$, geliefert. Das Ergebnis aus (c) lautet 15. Damit ist der Grundzustand von Kohlenstoff 15-fach entartet.

Der Grundzustand von Magnesium hat die Elektronenkonfiguration $1s^22s^22p^63s^2$. Wie beim Kohlenstoff gesehen, tragen die s^2 -Anteile einen Faktor 1 zur Vielfachheit bei, es bleibt also der $2p^6$ -Anteil. Wieder sind es aber nicht 6^6 Möglichkeiten, sondern die 6 Werte dürfen nur ohne Wiederholung und ungeordnet auf die 6 Indizes verteilt werden, was

$$\binom{6}{6} = 1$$

Möglichkeiten ergibt. Also ist der Grundzustand von Magnesium nicht entartet.

(e) Die Konfiguration $1s2p$ hat $n_1 = 1, l_1 = 0, n_2 = 2, l_2 = 1$. Gemäß der Angabe ist daher

$L = 1$ und $S = 0, 1$. Daraus und mit den jeweiligen Möglichkeiten für J ergeben sich die folgenden Niveaus ${}^{2S+1}L_J$, in die die Konfiguration aufspaltet:

$$\begin{array}{lll} L = 1, S = 0 \rightarrow & J = 1 \Rightarrow & {}^1P_1 \\ L = 1, S = 1 \rightarrow & J = 0, 1, 2 \Rightarrow & {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \end{array}$$

Die Dimension der Niveaus der einzelnen spektroskopischen Symbole sind ihren J -Werten entsprechend $(2J + 1)$:

$$d({}^1P_1) = 3 \quad , \quad d({}^3P_0) = 1 \quad , \quad d({}^3P_1) = 3 \quad , \quad d({}^3P_2) = 5$$

Zusammengezählt ergibt dies wie in Aufgabe (b) gezeigt 12.

(f) In der Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^3 3p$ ist $l_1 = l_2 = 1$. Gemäß der Angabe ist daher $L = 0, 1, 2$ und $S = 0, 1$. Daraus und mit den jeweiligen Möglichkeiten für J ergeben sich die folgenden Niveaus ${}^{2S+1}L_J$, in die die Konfiguration aufspaltet:

$$\begin{array}{lll} L = 0, S = 0 \rightarrow & J = 0 \Rightarrow & {}^1S_0 \\ L = 0, S = 1 \rightarrow & J = 1 \Rightarrow & {}^3S_1 \\ L = 1, S = 0 \rightarrow & J = 1 \Rightarrow & {}^1S_0 \\ L = 1, S = 1 \rightarrow & J = 0, 1, 2 \Rightarrow & {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \\ L = 2, S = 0 \rightarrow & J = 2 \Rightarrow & {}^1D_2 \\ L = 2, S = 1 \rightarrow & J = 1, 2, 3 \Rightarrow & {}^3D_1, {}^3D_2, {}^3D_3 \end{array}$$

Addiert man die Dimensionen der Niveaus der einzelnen spektroskopischen Symbole entsprechend ihren J -Werten erhält man für die Dimension der Kohlenstoffkonfiguration den Wert 36, also ohne Spin-Bahn-Kopplung einen 36fach entarteten Energiewert.

(g) Die Konfiguration des ersten angeregten Zustandes ist

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p$$

Seine Energie ist

$$E = 2E_{10} + 2E_{20} + 6E_{21} + E_{30} + E_{31}$$

wobei die Indizes für n, l stehen. Die möglichen Werte für L, S, J ergeben sich aus $L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2, S = 0, 1, J = |L - S|, \dots, L + S$ mit $l_1 = 0, l_2 = 1$. L kann daher nur den Wert 1 annehmen und S die Werte 0, 1. Also:

$$\begin{array}{lll} L = 1, S = 0 \rightarrow & J = 1 \Rightarrow & {}^1P_1 \\ L = 1, S = 1 \rightarrow & J = 0, 1, 2 \Rightarrow & {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \end{array}$$

Die Dimensionen der einzelnen spektroskopischen Niveaus sind ihren J -Werten entsprechend

$$d({}^1P_1) = 3, \quad d({}^3P_0) = 1, \quad d({}^3P_1) = 3, \quad d({}^3P_2) = 5$$

Das ergibt zusammen 12 für die Gesamtdimension.

6 Quantum mechanics

„How I need a drink, alcoholic of course, after the heavy chapters involving quantum mechanics“

Was verbirgt sich hinter diesem Satz?

Lösung: Anzahl der Buchstaben: 3,14159265358979.