

FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK 4

Übung 3

1 Helium I

Zeigen Sie, dass sich für den Grundzustand von Helium

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_{100}(r_1)\Psi_{100}(r_2)$$

mit $\Psi_{100} = Ae^{-\frac{Zr}{a}}$ (A: Normierungskonstante) eine Gesamtenergie von

$$E_1 = -108,8\text{eV} = -2Z^2 \cdot 13,6\text{eV} = -2Z^2 E_{H1}$$

ergibt, bzw. dass $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ die Schrödingergleichung mit

$$\hat{H} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_1}^2 - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right\} + \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_2}^2 - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right\}$$

und $E = E_1$ löst ($a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$).

(Hinweis: $\nabla^2(f(r, \vartheta, \Phi)) = \Delta(f(r, \vartheta, \Phi)) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial f}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin\vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \Phi^2}$)

Lösung:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\Psi &= E\Psi = A^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_1}^2 - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_2}^2 - \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_2} \right) (e^{-\frac{Z}{a}(r_1+r_2)}) \\
&= A^2 e^{-\frac{Z}{a}(r_1+r_2)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(-\frac{2Z}{ar_1} + \frac{Z^2}{a^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(-\frac{2Z}{ar_2} + \frac{Z^2}{a^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right) \\
&= \Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{Z^2}{a^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{Z^2}{a^2} \right) = \Psi \left(-2Z^2 \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \right) \\
&= \Psi(-2Z^2 \cdot 13,6eV) \rightarrow E = -Z^2 \cdot 13,6eV
\end{aligned}$$

2 Helium II

- a) Die folgende Abbildung zeigt einen Ausschnitt aus dem Termschema des Heliumatoms für die niedrigsten Energieniveaus. Beschriften Sie die Energieniveaus vollständig mit den entsprechenden spektroskopischen Symbolen (Feinstrukturaufspaltung wird vernachlässigt) und benennen sie die beiden Heliumsysteme.
- b) Erläutern Sie den Unterschied zwischen dem Triplett- und dem Singulett-System des Heliumatoms. Welches der beiden Systeme weist für $L \neq 0$ Feinstrukturaufspaltung auf?
- c) Warum gibt es keinen 1^3S_1 -Zustand, wenn sich beide Elektronen im 1s-Orbital befinden?
- d) Warum werden die Übergänge $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0$ und $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0$ nicht beobachtet?

Lösung:

a) Siehe Vorlesung

b) Der Unterschied zwischen den zwei Systemen besteht im Zustand der Spins der Elektronen. Im Triplettssystem herrscht die symmetrische ($S = 1$), im Singulett die antisymmetrische ($S = 0$) Stellung.

Feinstrukturaufspaltung erhält man im Singulettssystem **nicht**, da hier $S = 0$ gilt, der Gesamtdrehimpuls dann $J = L$ ist und nicht aufspaltet, im Triplettssystem spielt die LS-Kopplung jedoch sehr wohl eine Rolle. Für jedes $L \geq 1$ ergibt sich hier eine dreifache Aufspaltung.

c) Beide Elektronen sind äquivalent (also in der selben Unterschale). Sind sie dies jedoch, so wäre die Kombination von $L = 0$ (symmetrisch) und $S = 1$ (symmetrisch) nicht möglich, da sich insgesamt eine symmetrische Wellenfunktion ergeben würde.

d) Ersterer wird nicht beobachtet, weil Übergänge von $J = 0 \rightarrow J = 0$ verboten sind. Letzterer, weil $\Delta S = 0$ gilt.

3 Entartung und Grundzustand

Geben Sie zu folgenden Atomen in deren Grundzustandskonfiguration den Grad der Entartung, sowie den Spektralterm des jeweiligen Grundzustandes an:

B, N, F, Mg, Al, K, Fe, Cr (= (Ar)(4s)(3d)⁵).

Lösung:

Für den Entartungsgrad wird hier der Buchstabe D verwendet. Man berechnet ihn, indem man abzählt, wieviele Möglichkeiten es für die Elektronen gibt, die nicht vollen Orbitale zu besetzen.

B: (He)(2s)²(2p) $D = \binom{6}{1} = 6$ $L = 1$ $S = \frac{1}{2}$; Schale weniger als halbvoll $\rightarrow J = \frac{1}{2}$
und somit ergibt sich ${}^2P_{1/2}$

N: (He)(2s)²(2p)³ $D = \binom{6}{3} = 20$ $L = |1 + 0 - 1| = 0$ $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$; Schale genau halbvoll $\rightarrow J = \frac{3}{2}$, also ${}^4S_{3/2}$

F: (He)(2s)²(2p)⁵ $D = \binom{6}{5} = 6$ $L = |1 + 0 - 1 + 1 + 0| = 1$ $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$;
Schale mehr als halbvoll $\rightarrow J = L + S = \frac{3}{2}$, also ${}^2P_{3/2}$

Mg: (Ne)(3s)² $D = \binom{2}{2} = 1$ $L = 0$ $S = 0 \rightarrow J = 0$, also 1S_0

Al: (Ne)(3s)²(3p) $D = \binom{6}{1} = 6$ $L = 1$ $S = \frac{1}{2}$; Schale weniger als halbvoll $\rightarrow J = |L - S| = \frac{1}{2}$, also ${}^2P_{1/2}$

K: (Ar)(4s) $D = \binom{2}{1} = 2$ $L = 0$ $S = \frac{1}{2} \rightarrow J = \frac{1}{2}$, also ${}^2S_{1/2}$

Fe: (Ar)(4s)²(3d)⁶ $D = \binom{10}{6} = 210$ $L = |2 + 1 + 0 - 1 - 2 + 2| = 2$ $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 2$; Schale mehr als halbvoll $\rightarrow J = L + S = 4$, also 5D_4

Cr: (Ar)(4s)(3d)⁵ $D = \binom{2}{1} \cdot \binom{10}{5} = 504$ $L = 0 + |2 + 1 + 0 - 1 - 2| = 0$ $S = 3$; Schale genau halbvoll $\rightarrow J = |L - S| = 3$, also 7S_3

4 Spektralterme

a) Welche Spektralterme sind für die Grundzustandskonfiguration folgender Atome möglich: Si, Al? Welche für die Konfigurationen Be: (He)(2s)(2p); Ca: (Ar)(4s)(3d)?

b) In welche Spektralterme und Multipletts zerfällt die Konfiguration (1s)²(2s)²(2p)(3p)

von Kohlenstoff? Welche Dimension hat also diese Konfiguration?

Lösung:

a) Si: $(Ne)(3s)^2(3p)^2$ $l_1 = 1; l_2 = 1 \rightarrow L = 0, 1, 2$ $s_1 = \frac{1}{2}; s_2 = \frac{1}{2} \rightarrow S = 0, 1$. Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion schließt Kombinationen $(L = 0, 2; S = 1)$ und $(L = 1; S = 0)$ aus, es bleiben: $(L = 0, 2; S = 0)$ und $(L = 1; S = 1)$. Also: $^1S_0, ^1D_2, ^3P_{0,1,2}$.

Al: $(Ne)(3s)^2(3p)$ $L = 1$ $S = \frac{1}{2} \rightarrow J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Es folgt: $^2P_{1/2,3/2}$.

Be: $(He)(2s)(2p)$ $l_1 = 0; l_2 = 1 \rightarrow L = 1$ $S = 0, 1$. Es folgt für J: $J = 1$ bzw. $J = 0, 1, 2$ und somit: $^1P_1, ^3P_{0,1,2}$.

Ca: $(Ar)(4s)(3d)$ $l_1 = 0; l_2 = 2 \rightarrow L = 2$ $S = 0, 1$. Es folgt für J: $J = 2$ bzw. $J = 1, 2, 3$ und somit: $^1D_2, ^3D_{1,2,3}$.

b) C: $(He)(2s)^2(2p)(3p)$ $l_1 = 1; l_2 = 1 \rightarrow L = 0, 1, 2$ $S = 0, 1$. Es folgt für J: $J = 0, J = 1, J = 2, J = 1, J = 0, 1, 2$ bzw. $J = 1, 2, 3$. Also: $^1S_0, ^1P_1, ^1D_2, ^3S_1, ^3P_{0,1,2}, ^3D_{1,2,3}$. Die Dimension entspricht dem Entartungsgrad, wenn man es sich also einfach machen will, rechnet man: $D = \binom{6}{1} \cdot \binom{6}{1} = 36$. Andererseits ist jeder genannte spektroskopische Term $(2J + 1)$ -fach entartet. Alle Zustände aufsummieren ergibt dann: $D = 1 + 3 + 5 + 3 + 1 + 3 + 5 + 3 + 5 + 7 = 36$.

5 Spektrale Übergänge

a) Betrachten Sie Titan in der Konfiguration $(Ar)(4s)^2(3d)(4p)$. Welche Spektraltermine sind hier möglich? Erstellen sie hiermit ein qualitatives Termschema, indem sie annehmen, dass die Energie mit steigendem L ansteigt. Vernachlässigen sie hierbei die Feinstrukturaufspaltung.

b) Betrachten Sie nun die zwei Energieniveaus mit der höchsten Energie im Triplett-system unter Berücksichtigung der LS-Kopplung und zeichnen Sie dann die möglichen spektralen Übergänge zwischen diesen Niveaus ein.

c) Ein schwaches externes Magnetfeld werde nun hinzu geschaltet. Betrachten sie nun das F-Niveau mit $J = 3$ und das D-Niveau mit $J = 2$ und skizzieren sie deren Aufspaltung im Magnetfeld? Welche Übergänge sind hier erlaubt?

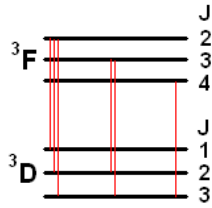


Abbildung 1: Lösung zu Aufgabe 5 b).

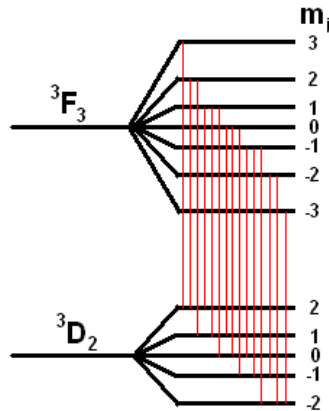


Abbildung 2: Lösung zu Aufgabe 5 c).

Lösung:

a) $(Ar)(4s)^2(3d)(4p) \quad l_1 = 2; l_2 = 1 \rightarrow L = 1, 2, 3 \quad S = 0, 1.$

Es ergeben sich die Terme $^1P, ^1D, ^1F, ^3P, ^3D, ^3F$. Energetisch gesehen ergeben sich folgende Reihenfolgen: $^3F > ^3D > ^3P$ bzw. $^1F > ^1D > ^1P$.

b) Gemeint sind 3F und 3D . Berücksichtigt man die LS-Kopplung, so erhält man für den ersten Term $^3F_{2,3,4}$ und für den zweiten $^3D_{1,2,3}$. Die erlaubten Übergänge sind in Abbildung ?? dargestellt.

c) Die Rede ist von 3F_3 und 3D_2 . Die dazu erlaubten Übergänge sieht man in Abbildung ??.

6 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 $m_\mu \sim 207m_e$
 c) ein Anti-Proton
 d) Berechnen Sie für alle drei Fälle die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im 1s-Zustand innerhalb des Kernvolumens ($R_K \sim 1,2 \cdot (A)^{\frac{1}{3}} fm$). Verwenden Sie $R_{10}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2}} e^{-\frac{\alpha r}{2}}$ mit $\alpha = \frac{2Z}{a_0}$.

Lösung:

- a) Elektron

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} E_R \quad E_\infty = E_R = 13,6 eV$$

für $n=1, Z=99$:

$$r_1(Es) = 5,35 \cdot 10^{-13} m$$

$$E_1(Es) = 133 keV$$

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

$$a_0^\mu = \frac{1}{207} a_0 \rightarrow r_1^\mu(Es) = 2,58 \cdot 10^{-15} m$$

$$E_R^\mu = 207 \cdot E_R \rightarrow E_1^\mu(Es) = 27 MeV$$

- c) Anti-Proton

$$r_1^{p^-} = \frac{m_e a_0}{m_p Z} = 2,9 \cdot 10^{-16} m$$

$$E_1^{p^-}(Es) = -\frac{m_{p^-}}{m_e} \cdot E_R \cdot \frac{Z^2}{n^2} = 0,24 GeV$$

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 $R = 1,2(254)^{1/3} \cdot 10^{-15} m = 7,6 \cdot 10^{-15} m$. Für die drei Teilchen ergibt sich eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb des Kerns von:

$$P_{10}^{Elektron}(R) = 0,53.$$

$$P_{10}^{Myon}(R) \approx 1.$$

$$P_{10}^{Anti-Proton}(R) \approx 1.$$