

# FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK 4

## 2011

### Übung 4 - Musterlösung

#### 1. Übergänge im Wasserstoffatom (\*\*)

Ein Wasserstoffatom befindet sich im angeregten Zustand  $2p$  und geht durch spontane Emission eines Photons in den Grundzustand  $1s$  über.

- a) Berechnen Sie den Einsteinkoeffizienten für diesen Übergang für den Fall eines linear polarisierten Photons.

Hinweise:  $\Psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$ ,

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}}re^{-r/(2a_0)},$$

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta,$$

$$\int_0^\infty dr r^n e^{-\alpha r} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

- b) Die mittlere Lebensdauer des  $2p$ -Zustands beträgt  $\tau = 1.6$  ns. Berechnen Sie die natürliche Breite für die Lyman- $\alpha$ -Linie ( $2p \rightarrow 1s$ ) und vergleichen Sie diese mit der Doppler-Breite bei Zimmertemperatur.
- c) Vergleichen Sie die sich aus b) ergebenden Breiten der Lyman- $\alpha$ -Linie ( $2p \rightarrow 1s$ ) mit der Hyperfeinstrukturaufspaltung (HFS) des Wasserstoffgrundzustandes, die durch die Wellenlänge  $\lambda = 21.1$  cm zwischen den beiden  $F$ -Zuständen charakterisiert ist. Welche Temperatur muss erreicht werden, damit die HFS von einem idealen Spektrometer aufgelöst werden kann?  
Hinweis: Vernachlässigen Sie hierbei die Hyperfeinstruktur der  $2p$  Energieniveaus
- d) Wie groß sind Übergangswahrscheinlichkeit und natürliche Linienbreite des Übergangs  $3s \rightarrow 2p$  im Wasserstoffatom, wenn die Lebensdauer der Zustände  $\tau(3s) = 23$  ns und  $\tau(2p) = 2.1$   $\mu$ s betragen?

#### Lösung

- a) Die Übergangswahrscheinlichkeit ist gemäß der Vorlesung gegeben durch

$$A_{ik} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{ik}^3}{\varepsilon_0 c^3 h} |\mathcal{M}_{ik}|^2.$$

Der  $2p$ -Zustand besitzt drei entartete  $m$ -Komponenten ( $m = 0, \pm 1$ ), da es sich jedoch laut Aufgabenstellung hier um ein linear polarisiertes Photon handelt, können wir uns auf  $m = 0$  beschränken.

Zunächst berechnen wir die einzelnen Komponenten des Matrixelements

$$|\mathcal{M}_{ik}|^2 = (\mathcal{M}_{ik})_x^2 + (\mathcal{M}_{ik})_y^2 + (\mathcal{M}_{ik})_z^2$$

mit Hilfe von Kugelkoordinaten. Man erhält

$$(\mathcal{M}_{ik})_x = \int_0^\infty dr r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \sin \varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi)}_{=0} = 0$$

$$(\mathcal{M}_{ik})_y = \int_0^\infty dr r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi)}_{=0} = 0$$

$$\begin{aligned} (\mathcal{M}_{ik})_z &= \int_0^\infty dr r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \cos \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}a_0^4} \underbrace{\int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{3}{2}\frac{r}{a_0}}}_{=4!(2a_0/3)^5} \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \cos^2 \vartheta}_{=2/3} = \frac{2^{15/2}}{3^5} a_0 \end{aligned}$$

Wir benötigen nun nur noch die Kreisfrequenz  $\omega_{ik}$  des emittierten Photons, welche sich mit Hilfe der Balmerformel für  $n = 1$  und  $m = 2$

$$E = \hbar\omega = \text{Ry}^* \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \frac{3}{4} \text{Ry}^* \Rightarrow \omega = 2\pi \cdot 2.47 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

berechnen lässt (Feinstruktur etc. kann hier vernachlässigt werden). Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir letztendlich

$$A_{ik} = \frac{2^9}{3^8} \frac{e^2 a_0^2}{\pi \epsilon_0 \hbar^4 c^3} \text{Ry}^{*3} = 6.25 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}.$$

- b) Der Zusammenhang zwischen der natürlichen Breite der Lyman- $\alpha$ -Linie und der Lebensdauer  $\tau$  des  $2p$ -Zustandes ist gegeben durch

$$\Delta\nu_{\text{nat}} = \frac{1}{2\pi\tau} = 100 \text{ MHz.}$$

Für die Doppler-Verbreiterung ergibt sich gemäß der Formel aus der Vorlesung bei  $T = 293 \text{ K}$  und der Frequenz  $\nu_0$  die in a) berechnet wurde

$$\Delta\nu_{\text{D}} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8 \ln 2 k_{\text{B}} T}{m_{\text{H}}}} = 30.1 \text{ GHz} \approx 300 \cdot \Delta\nu_{\text{nat}}.$$

- c) Beim Übergang  $2p \rightarrow 1s$ , können wir bei hinreichend guter Auflösung zwei Linien erkennen, jeweils für  $F = 0$  und  $F = 1$  der HFS des  $1s$  Energieniveaus. Damit die HFS aufgelöst werden kann, muss die Doppler-Verbreiterung kleiner sein als der Abstand zwischen den beiden Linien.

$$\frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8 \ln 2 k_B T}{m_H}} \leq \Delta\nu \quad \Rightarrow \quad T \leq \frac{m_H c^2}{8 \ln 2 k_B} \left( \frac{\Delta\nu}{\nu_0} \right)^2 = 0.66 \text{ K.}$$

- d) Der  $3s$ -Zustand kann nur in den  $2p$ -Zustand zerfallen. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$A_{ik} = \frac{1}{\tau(3s)} = 4.3 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}.$$

Die natürliche Linienbreite ist

$$\Delta\nu_{\text{nat}} = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{1}{\tau(3s)} + \frac{1}{\tau(2p)} \right) = 7 \text{ MHz.}$$

## 2. Einsteinium und exotische Atome (\*\*)

- a) Berechnen Sie für ein fast vollständig ionisiertes Einsteinium-Ion ( ${}^{254}_{99}\text{Es}^{98+}$ ) den Bahnradius und die Gesamtenergie im Grundzustand mit verschiedenen gebundenen Teilchen in der Hülle:

- i) Elektron
- ii) Myon ( $m_\mu \approx 207m_e$ )
- iii) Anti-Proton

- b) Berechnen Sie für alle drei Fälle die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im  $1s$ -Zustand innerhalb des Kernvolumens ( $R_K \approx 1.21 \text{ fm} \cdot A^{1/3}$ ).

Hinweise:  $R_{10}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2}} e^{-\frac{\alpha r}{2}}$  mit  $\alpha = 2Z/r_B$  (Bahnradius  $r_B$ ),

$$\int_0^R dr r^2 e^{-\alpha r} = -e^{-\alpha R} \left( \frac{R^2}{\alpha} + \frac{2R}{\alpha^2} + \frac{2}{\alpha^3} \right) + \frac{2}{\alpha^3}.$$

## Lösung

- a) Mit den Relationen

$$r_n = \frac{n^2}{Z} \cdot a_0 \quad \text{mit} \quad a_0 \approx 0.5 \text{ \AA},$$

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \text{Ry}^* \quad \text{mit} \quad \text{Ry}^* \approx 13.6 \text{ eV}$$

aus der Verlosung erhält man für  $n = 1$  und  $Z = 99$  für die verschiedenen Teilchen folgende Ergebnisse:

i) Elektron

$$\begin{aligned} a_0^e &= a_0, & \text{Ry}^{*e} &= \text{Ry}^*, \\ r_1^e(^{254}_{99}\text{Es}^{98+}) &= \frac{n^2}{Z} a_0 = 5.35 \cdot 10^{-13} \text{ m}, \\ E_1^e(^{254}_{99}\text{Es}^{98+}) &= -\frac{Z^2}{n^2} \text{Ry}^* = -133 \text{ keV}. \end{aligned}$$

ii) Myon ( $m_\mu \approx 207m_e$ )

$$\begin{aligned} a_0^\mu &= \frac{m_e}{m_\mu} a_0, & \text{Ry}^{*\mu} &= \frac{m_\mu}{m_e} \text{Ry}^*, \\ r_1^\mu(^{254}_{99}\text{Es}^{98+}) &= \frac{m_e}{m_\mu} \frac{n^2}{Z} a_0 = 2.58 \cdot 10^{-15} \text{ m}, \\ E_1^\mu(^{254}_{99}\text{Es}^{98+}) &= -\frac{m_\mu}{m_e} \frac{Z^2}{n^2} \text{Ry}^* = -27 \text{ MeV}. \end{aligned}$$

iii) Anti-Proton

$$\begin{aligned} a_0^{p^-} &= \frac{m_e}{m_{p^-}} a_0, & \text{Ry}^{*p^-} &= \frac{m_{p^-}}{m_e} \text{Ry}^*, \\ r_1^{p^-} (^{254}_{99}\text{Es}^{98+}) &= \frac{m_e}{m_{p^-}} \frac{n^2}{Z} a_0 = 2.9 \cdot 10^{-16} \text{ m}, \\ E_1^{p^-} (^{254}_{99}\text{Es}^{98+}) &= -\frac{m_{p^-}}{m_e} \frac{Z^2}{n^2} \text{Ry}^* = -0.24 \text{ GeV}. \end{aligned}$$

b) Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit erhält man durch Integration bis zum Kernrand:

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

Der Kernradius berechnet sich zu  $R = 1.2 \cdot 254^{1/3} \cdot 10^{-15} \text{ m} = 7.6 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ . Mit den in a) berechneten Bahnradien ergeben sich somit für die drei Teilchen folgende Aufenthaltswahrscheinlichkeiten innerhalb des Kerns:

$$P_{10}^e(R) = 0.53, \quad P_{10}^\mu(R) \approx 1, \quad P_{10}^{p^-}(R) \approx 1.$$

Sowohl das Myon als auch das Anti-Proton befinden sich also vollständig im Kern!

### 3. Schwingungs-Rotations-Übergänge von HCl (\*\*)

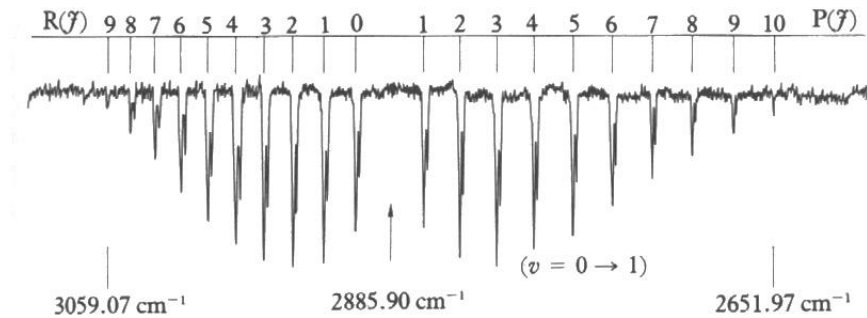
Wir betrachten ein zweiatomiges Molekül und lassen sowohl Schwingung als auch Rotation zu. Die Energie der Schwingungs-Rotationszustände beträgt dann

$$E = E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} = \hbar\omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right) + hcBj(j+1) \text{ mit } \nu = 0, 1, \dots \text{ und } j = 1, 2, \dots$$

Die Schwingungsenergie ist dabei um ein Vielfaches größer als die Rotationsenergie. Im Energiespektrum gehört deshalb zu jedem Schwingungszustand eine Gruppe von Rotationszuständen.

- a) Skizzieren Sie das Energieniveauschema für  $\nu = 1, 2$  und  $j = 0, 1, 2, 3$  und zeichnen Sie die Absorptionsübergänge zwischen den Schwingungs-Rotations-Zuständen ein. Die Auswahlregeln für diese Übergänge sind

$$\begin{aligned} \Delta\nu &= \pm 1, \\ \Delta j &= \pm 1. \end{aligned}$$

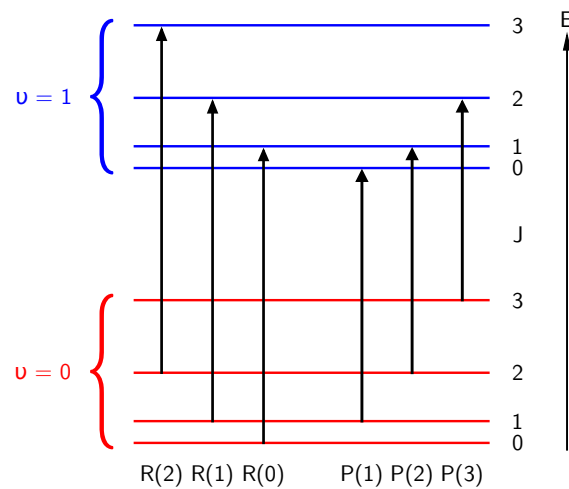


**Abb. 1:** Infrarottransmissionsspektrum von HCl.

- b) Abb. 1 zeigt das Infrarottransmissionsspektrum von Salzsäuredampf (HCl). Wie man erkennt zerfällt es in zwei Teile, einen sogenannten P-Zweig und einen R-Zweig. Ordnen Sie die Peaks im Transmissionsspektrum den Übergängen in ihrem Energieniveauschema gemäß der angegebenen Nomenklatur zu (R(0), R(1),..., P(1), P(2),...). Was charakterisiert P-Übergänge/R-Übergänge? Warum ergibt sich im Spektrum eine Lücke? Welchem Übergang würde das entsprechen? Wie groß ist demnach die Energie des ersten angeregten Vibrationszustandes?
- c) Berechnen Sie den mittleren Kernabstand  $R$  des HCl-Moleküls.  
Hinweis:  $m_{\text{Cl}} = 5.89 \cdot 10^{-26}$  kg,  $m_{\text{H}} = 1.67 \cdot 10^{-27}$  kg
- d) Bei genauer Betrachtung fällt auf, dass die Absorptions-Peaks eine Substruktur (Doppelpeak) haben. Wie erklären Sie diese Tatsache?

**Lösung:**

a) Erlaubte Absorptionsübergänge:



b) Aus dem Vergleich von Termschema und Transmissionsspektrum erhält man:

- \* Im P-Zweig nimmt die Absorptionsenergie mit sinkendem  $j$ , im R-Zweig mit steigendem  $j$  zu.
- \* Im P-Zweig gilt  $\Delta j = -1$ , im R-Zweig  $\Delta j = +1$ .
- \* Der Übergang  $j = 0 \rightarrow j = 0$  ist verboten. Deshalb fehlt im Spektrum diese Linie.
- \* Die Energie  $E = hc \cdot \bar{x}$  des fehlenden Übergangs entspräche genau der Differenz  $\Delta E = \hbar\omega$  zwischen Schwingungsgrundzustand und erstem angeregten Zustand.

Die Energie des ersten angeregten Zustands beträgt

$$E_{\text{vib}}^{(1)} = \frac{3}{2}\hbar\omega = hc\bar{x} = 0.54 \text{ eV.}$$

c) Der Kernabstand kann aus dem Energieintervall zwischen den Rotationspeaks bestimmt werden. Zwischen  $x_1 = 3059 \text{ cm}^{-1}$  und  $x_2 = 2652 \text{ cm}^{-1}$  befinden sich 19 (näherungsweise) äquidistante Linien (inklusive des fehlenden Mittelpeaks). Der mittlere Abstand ist dann

$$\Delta x = \frac{x_1 - x_2}{20} = 20.4 \text{ cm}^{-1}.$$

Für die Energie beim Übergang zweier benachbarter Niveaus gilt

$$\Delta E = [E(\nu, j) - E(\nu - 1, j - 1)] - [E(\nu, j - 1) - E(\nu - 1, j - 2)] = 2hcB = hc\Delta x.$$

Über die Definition der Rotationskonstante  $B = \hbar/(4\pi cI)$  und dem Trägheitsmoment  $I = \mu R^2$ , wobei für reduzierte Masse

$$\mu = \frac{m_{\text{Cl}} \cdot m_{\text{H}}}{m_{\text{Cl}} + m_{\text{H}}} = 1.624 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

gilt, erhält man

$$B = \frac{\hbar}{4\pi c\mu R^2} = \frac{\Delta x}{2} \Rightarrow R = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{c\mu\Delta x}} \approx 1.3 \text{ \AA}.$$

- d) Atomares Chlor kommt in der Natur in zwei Isotopen vor:  $^{35}\text{Cl}$  (75.5%) und  $^{37}\text{Cl}$  (24.5%). Der Massenunterschied führt zu unterschiedlichen Trägheitsmomenten und damit zu verschobenen Absorptionspeaks im Rotationspektrum.

#### 4. Moleküle im interstellaren Medium (\*\*)

In der Radio- und Infrarotastronomie beobachtet man u.a. auch Moleküllinien im interstellaren Medium. Aus diesen Beobachtungen können Rückschlüsse auf die galaktische Verteilung und Häufigkeit der Moleküle sowie auf Sternentstehungsgebiete und -mechanismen gezogen werden.

- a) Kohlenmonoxid  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  emittiert beim Übergang vom ersten angeregten Rotationsniveau ( $J = 1$ ) zum Grundzustand ( $J = 0$ ) eine Linie der Wellenlänge  $\lambda_0 = 2.6 \text{ mm}$ . Berechnen Sie die dazu gehörige Energie und den Abstand der beiden Atome im Molekül.
- b) Berechnen Sie die Energie und Frequenz des gleichen Übergangs auch für das Molekül  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  sowie die relative Frequenzverschiebung.  
Hinweis: Nehmen Sie den gleichen Abstand  $R$  wie bei  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ .

#### Lösung:

- a) Mit der Formel für die Rotationsenergie aus der Vorlesung

$$E_{\text{rot}}(J) = \frac{\hbar^2}{2I} J(J + 1),$$

mit dem Trägheitsmoment  $I = \mu R^2$ , wobei die reduzierte Masse

$$\mu = \frac{12 \text{ u} \cdot 16 \text{ u}}{12 \text{ u} + 16 \text{ u}} \approx 6.86 \text{ u}$$

beträgt, erhält man für die Energie des Übergangs von  $J = 1$  nach  $J = 0$

$$\Delta E_{1 \rightarrow 0} = E_{\text{rot}}(J = 1) - E_{\text{rot}}(J = 0) = 2 \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{hc}{\lambda_0} = E_0.$$

Somit erhält man aus der Rotationskonstanten und dem Trägheitsmoment

$$\frac{\hbar^2}{2I} = \frac{h^2}{4\pi^2 \mu R^2} = \frac{hc}{\lambda_0} \Rightarrow R = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h\lambda_0}{c\mu}} \approx 1.13 \text{ \AA}.$$

b) Beim  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  ändert sich im Vergleich zu  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  nur die reduzierte Molekülmasse

$$\mu_{13} = \frac{13 \text{ u} \cdot 16 \text{ u}}{13 \text{ u} + 16 \text{ u}} \approx 7.17 \text{ u}.$$

Damit ergibt sich für die Energie

$$\Delta E_{13} = \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \Delta E_{12} \approx 4.6 \cdot 10^{-4} \text{ eV},$$

für die Frequenz

$$\nu_{13} = \frac{\Delta E_{13}}{h} \approx 111 \text{ GHz}$$

und für die relative Frequenzverschiebung

$$\frac{\Delta\nu}{\nu_{12}} = \frac{\Delta E}{E_{12}} = 1 - \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \approx 0,04.$$