

Lösung Probeklausur

1 Kurzfragen

1. Wie ist der Erwartungswert eines Operators definiert? Was bedeutet er?
2. Bestimme die spektroskopischen Symbole für den Grundzustand des Elements Tantal mit der Elektronenkonfiguration $(\text{Xe})4f^{14}5d^36s^2$ sowie für die angeregte Konfiguration $(\text{Xe})4f^{14}5d^5$.
3. Können die Übergänge ${}^3P_2 \rightarrow {}^3P_0$ und ${}^8S_{7/2} \rightarrow {}^6P_{7/2}$ stattfinden (Begründung!)?
4. Ist der Bohrsche Radius für ein (fiktives) Atom aus einem Proton und einem Kaon-Antiteilchen K^- ($m_{K^-} \approx 1000m_e$) größer oder kleiner als der des Wasserstoffatoms?
5. Erkläre, was beim Auger-Prozess passiert. Wie heißt ein dazu vergleichbarer Prozess für Valenzelektronen?
6. Welche Bedingung nahm Bohr bei der Entwicklung des Atommodells an?
7. Was ist der Darwin-Term?
8. Gibt es ein H_2 Molekül, bei dem beide Atome im Grundzustand sind? Warum oder warum nicht?

Lösung

1. Der Erwartungswert eines Operators \hat{A} zur Funktion ψ ist definiert als

$$\langle A \rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi^* \hat{A} \psi.$$

$\langle A \rangle$ ist der Mittelwert der dem Operator \hat{A} zugeordneten Observablen A , also der Wert, den man im Mittel messen wird.

2. Nach den Hundschen Regeln ist im Grundzustand $S = \frac{3}{2}$, $L = 3$ und damit $J = \frac{3}{2}$. Also ist das spektroskopische Symbol ${}^4F_{3/2}$.
In der angeregten Konfiguration ist $S = \frac{5}{2}$, $L = 0$ und $J = \frac{5}{2}$, womit sich das spektroskopische Symbol ${}^6S_{5/2}$ ergibt.
3. Der Übergang ${}^3P_2 \rightarrow {}^3P_0$ ist verboten wegen $\Delta J = 2$.
Der Übergang ${}^8S_{7/2} \rightarrow {}^6P_{7/2}$ kann wegen $\Delta S \neq 0$ nicht stattfinden.
4. Der Bohrsche Radius für dieses Atom ist $r_{n,K^-} = a_0 \frac{n^2}{Z} \frac{m_e}{\mu_{p,K^-}}$. Wegen der größeren Masse des Kaon-Antiteilchens ist auch die reduzierte Masse μ_{p,K^-} größer und damit der Bohrsche Radius des betrachteten Atoms kleiner als der des Wasserstoffatoms.

5. Beim Auger-Prozess wird ein Elektron aus einer inneren Schale herausgeschlagen (beispielsweise durch Anregung mit Röntgen- oder γ -Strahlung). Das entstandene Loch wird mit einem Elektron aus einer darüber liegenden Schale aufgefüllt. Dabei wird Energie frei. Wird diese Energie an ein drittes Elektron in einer weiter außen liegenden Schale abgegeben und dieses dadurch ionisiert, spricht man vom Auger-Prozess. Ein dazu ähnlicher Prozess, bei der das zuerst angeregte Elektron ein Valenzelektron ist, heißt Autoionisation.
6.
 1. Elektronen bewegen sich auf Kreisbahnen.
 2. Die Bewegung ist strahlungsfrei. (Kraftansatz)
 3. Der Elektronen bewegen sich als stehende Welle, d.h. $2\pi r = n\lambda$.
7. Der Darwin-Term ist ein relativistischer Korrekturterm im Hamiltonoperator. Er beschreibt die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Kern, der sich in einem kleinen Volumen bewegt. Diese Bewegung nennt man auch Zitterbewegung.
8. Nein, das würde das Pauli-Prinzip verletzen. Wären beide Atome im Grundzustand, würden sie durch dieselben Quantenzahlen beschrieben werden. Eine Molekülbindung würde zu einer räumlichen Überlappung der Elektronenorbitale führen. Das Pauli-Prinzip verbietet aber Fermionen, im selben Zustand am selben Ort zu sein.

2 Teilchen in einem Kastenpotential

- a) Gib für ein eindimensionales Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden ($V = 0$ für $0 < x < a$ und $V = \infty$ sonst) die stationäre Schrödingergleichung an. Welche Wellenfunktionen ψ_n lösen diese Schrödingergleichung und was sind die Energieeigenwerte E_n ?
- b) Nun soll der Potentialtopf zweidimensional sein mit $a_x = a_y = a$. Gib die Energieeigenwerte in Abhängigkeit der Quantenzahlen n_x und n_y an.
- c) Nimm an, dass der zweidimensionale Potentialtopf aus **b)** die Kantenlänge $a = 10$ nm und die Tiefe $E_{pot} = -1$ eV hat. Wie viele gebundene Energiezustände gibt es in diesem Kasten für ein Elektron?

Hinweis: Benutze zum Ausrechnen die Formeln für einen unendlich hohen Potentialtopf.

Lösung

- a) Die stationäre Schrödingergleichung für das gegebene Potential ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi$$

$$\Rightarrow -\frac{d^2}{dx^2} \psi - k^2 \psi = 0,$$

mit $k = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Diese Gleichung wird gelöst von Wellenfunktionen der Form

$$\psi_n = 2iA \sin \frac{n\pi}{a} x.$$

Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2.$$

- b) Die Energieeigenwerte für den Fall des zweidimensionalen Kastenpotentials sind gegeben durch

$$E(n_x, n_y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (n_x^2 + n_y^2)$$

- c) Für gebundene Zustände im Potential muss gelten:

$$E(n_x, n_y) \leq E_{max} = E_{pot}$$

Setzt man als Masse die Elektronenmasse $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg und $a = 10^{-8}$ m ein, erhält man aus obiger Bedingung

$$\begin{aligned} (n_x^2 + n_y^2) &\leq 2.66 \cdot 10^2 \\ \Rightarrow n_x, n_y &\leq 16 \end{aligned}$$

Im Quadranten $n_x > 0, n_y > 0$ gibt es ungefähr $\pi/4 \cdot 2.66 \cdot 10^2 = 2.08 \cdot 10^2$ Zustände, die dieser Bedingung genügen. Davon sind einige energetisch entartet. Dies sind alle die, für die $n_x^2 + n_y^2$ den gleichen Wert hat, z.B. $n_x = n_y = 5$ und $n_x = 1, n_y = 7$ und $n_x = 7, n_y = 1$.

3 Thorium-Quelle

Thorium-229 ist ein α -Strahler mit einer Teilchenenergie von 4.85 MeV. Zehn Prozent der von 5 g ^{229}Th emittierten α -Teilchen werden zu einem punktförmigen parallelen Strahl gebündelt und auf eine 4 μm dicke Goldfolie ($Z_{Au} = 79$) gelenkt. Ein Detektor mit einer kreisförmigen Öffnung ($r = 15$ mm) befindet sich in 2 m Abstand vom Auftreffpunkt des α -Strahls unter einem Winkel von 60° zur Strahlachse.

- a) Erkläre in ein bis zwei Sätzen den Begriff differentieller Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$.
- b) Die Luminosität L ist das Produkt aus Strahlfluss Φ und Anzahl der Targetteilchen im Strahlquerschnitt. Berechne die Luminosität L des oben beschriebenen Aufbaus.
- c) Wie groß ist die Zählrate im Detektor? Verwende zur Berechnung eine Luminosität von $L = 10^{30} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

Hinweise: Der Ausdruck für die Aktivität eines radioaktiven Stoffes kann aus dem exponentiellen Zerfallsgesetz ($N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$ mit $\lambda = \ln 2/t_{1/2}$) hergeleitet werden. Die Zählrate \dot{N} setzt sich aus der Luminosität L , dem Wirkungsquerschnitt σ und dem abgedeckten Raumwinkel $\Delta\Omega$ zusammen: $\dot{N} = L \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \Delta\Omega$. Der Streuquerschnitt kann auf der gesamten Detektoroberfläche als konstant angenommen werden.

Lösung

- a) Der differentielle Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma(E, \theta)}{d\Omega}$ beschreibt die Winkelabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts σ .
- b) Der Strahlfluss entspricht 10 % der Aktivität $A(t)$ der Quelle zum Zeitpunkt $t = 0$. Man bestimmt diese über die negative Ableitung des Zerfallsgesetzes:

$$A(t) = -\frac{d}{dt} N(t) = \lambda N_0 e^{-\lambda t}$$

Hierbei ist N_0 die Anzahl der Thorium-Kerne in der Quelle, N_A die Avogadrokonstante, m_Q die Masse der Thoriumquelle und M_Q deren Molmasse:

$$N_0 = N_A \cdot \frac{m_Q}{M_Q} = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \cdot \frac{5 \text{ g}}{229 \text{ g/mol}} = 1.315 \cdot 10^{22}$$

Damit ergibt sich

$$A(0) = \lambda N_0 = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} N_0 = \frac{\ln 2}{7880 \text{ a}} \cdot 1.315 \cdot 10^{22} = 3.665 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$$

Die Anzahl N_T der Targetteilchen ergibt sich aus der Dicke d_T , Dichte ρ_T und Molmasse M_T des Targets zu

$$N_T = N_A \cdot \frac{\rho_T}{M_T} \cdot d_T = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \cdot \frac{19.32 \text{ g/cm}^3}{229.0 \text{ g/mol}} \cdot 4 \cdot 10^{-4} \text{ cm} = 2.033 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2}$$

Damit ergibt sich eine Luminosität von

$$L = 0.1 \cdot A(0) \cdot N_T = 0.1 \cdot 3.665 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \cdot 2.033 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2} = 7.45 \cdot 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-2}.$$

- c) Die in einem Detektor (Fläche A , Abstand R) gemessene Zählrate \dot{N} hängt von der Energie E , dem Winkel θ zwischen Strahlachse und gestreutem Strahl und dem vom Detektor überdeckten Raumwinkel $\Delta\Omega$ ab:

$$\dot{N}(E, \theta, \Delta\Omega) = L \cdot \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\Omega} \Delta\Omega$$

Der Wirkungsquerschnitt der Reaktion ist der Rutherford'sche Streuquerschnitt unter 60° . Mit $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z_\alpha Z_{Au} e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \\ &= \left(1.44 \text{ MeV} \cdot \text{fm} \frac{2 \cdot 79}{4 \cdot 4.85 \text{ MeV}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{60^\circ}{2}} \\ &= 2.2 \cdot 10^3 \text{ fm}^2. \end{aligned}$$

Der Bruchteil des Raumwinkels, der vom Detektor überdeckt wird, ist

$$\Delta\Omega = \frac{r^2 \pi}{4R^2 \pi} = \frac{(0.015 \text{ m})^2}{4(2.0 \text{ m})^2} = 1.41 \cdot 10^{-5}.$$

Zusammen ergibt sich damit eine Streurrate im Detektor von

$$\begin{aligned} \dot{N}(E, \theta, \Delta\Omega) &= L \cdot \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\Omega} \cdot \Delta\Omega \\ &= 10^{30} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \cdot 2.2 \cdot 10^3 \text{ fm}^2 \cdot 1.41 \cdot 10^{-5} \\ &= 310 \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

4 Positronium

Das Positronium ist ein wasserstoffähnliches exotisches Atom, das aus einem e^+ und einem e^- besteht, die einen kurzlebigen gebundenen Zustand bilden können. Beide Leptonen kreisen (im gebundenen Zustand) um den gemeinsamen Schwerpunkt, der sich in der Mitte zwischen den beiden befindet.

- a) Berechne die (klassischen) Energieniveaus und die Radien der Bohrschen Bahnen des Positroniums als Funktion der Hauptquantenzahl n und vergleiche diese mit denen des Wasserstoffs.

- b) Im Positronium koppeln beide Spins zum Gesamtspin \mathbf{S} und dann mit dem Bahndrehimpuls \mathbf{L} zum Gesamtdrehimpuls \mathbf{F} . Im Wasserstoffatom dagegen koppeln \mathbf{s} und \mathbf{l} zu \mathbf{j} , und \mathbf{j} koppelt dann zusammen mit dem Kernspin \mathbf{I} zu \mathbf{F} . Trotzdem können wir die Hyperfeinaufspaltung der Energiezustände des Positroniums aus dem für das Wasserstoffatom hergeleiteten Ausdruck berechnen. Warum?
- c) Welche spektroskopischen Niveaus des Positroniums gibt es für $n = 1$ und $n = 2$? Verwende der Einfachheit halber immer $n_2 = 1$.
- d) Die Energieabstände zwischen welchen spektroskopischen Niveaus berechnet man, wenn man die Hyperfeinstrukturaufspaltung des Positroniums bestimmt, d.h. welche Niveaus werden durch die Hyperfeinwechselwirkung im Positronium aufgespalten?
- e) Berechne nun die Hyperfeinaufspaltung des Grundzustands im Wasserstoff und die entsprechende Hyperfeinaufspaltung des Positroniums. Um welche Größenordnung unterscheiden sich die beiden?
Hinweis: Im Grundzustand ist $\Delta E_{HFS}^H = \frac{2}{3} g_s g_I \frac{\alpha^4 \mu^3 c^2}{m_e m_k n^3} \frac{F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)}{2}$.
- f) Skizziere nun das Termschema von Positronium für die Zustände mit $n = 1$ und $n = 2$. Trage die zuvor berechnete Hyperfeinaufspaltung des Positroniums in die Skizze ein.

Lösung

- a) Ein Positron hat als Antiteilchen des Elektrons die gleiche Masse wie ein Elektron und eine positive Ladung. Die reduzierte Masse des Positroniums ist damit

$$\mu_{e^+e^-} = \frac{m_{e^+} m_{e^-}}{m_{e^+} + m_{e^-}} = \frac{1}{2} m_e$$

(Im Vergleich dazu ist $\mu_H \approx m_e$.) Damit erhält man für die Energiezustände

$$E_n^{e^+e^-} = -\frac{Z^2 e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \frac{\mu_{e^+e^-}}{n^2} = -\frac{Z^2 \alpha^2 \mu_{e^+e^-} c^2}{2n^2} = \frac{1}{2} E_n^H$$

und für den Bohrschen Radius

$$r_n^{e^+e^-} = 4\pi \epsilon_0 \frac{\hbar^2}{Ze^2} \frac{n^2}{\mu_{e^+e^-}} = \frac{\hbar c n^2}{Z \alpha \mu_{e^+e^-} c^2} = 2r_n^H.$$

- b) Die Definition des Gesamtdrehimpulses für Wasserstoff ist

$$\mathbf{F}_H = \mathbf{j} + \mathbf{I} = \mathbf{l} + \mathbf{s} + \mathbf{I}. \quad (1)$$

Betrachtet man nun das Positronium in einem Bezugssystem, in dem das Positron ruht, dann gilt $\mathbf{L} = \mathbf{l}$ und $\mathbf{I} = \mathbf{s}_{e^+}$. Folglich ist

$$\mathbf{F}_H = \mathbf{l} + \mathbf{s} + \mathbf{I} = \mathbf{L} + \underbrace{\mathbf{s}_{e^-} + \mathbf{s}_{e^+}}_{=\mathbf{S}} = \mathbf{F}_{e^+e^-},$$

also sind die beiden Definitionen von \mathbf{F} identisch.

Setzt man nun noch $g_I \rightarrow g_s = 2$, $m_k \rightarrow m_e$ und $\mu \rightarrow \frac{m_e}{2}$ wie oben berechnet, dann lässt sich die Hyperfeinaufspaltung im Positronium analog zum Wasserstoff berechnen.

- c) Die Spins des Elektrons und des Positrons können antiparallel ausgerichtet sein (also $S = 0$, dann gibt es die folgenden Zustände:

$$\begin{aligned} 1^1S_0 & \quad (n_1 = n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^1S_0 & \quad (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^1P_1 & \quad (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = 0, \pm 1, m_{l,2} = 0) \end{aligned}$$

Sind die Spins von Elektron und Positron parallel ausgerichtet, dann ist $S = 1$ und man erhält die folgenden Zustände:

$$\begin{aligned} 1^3S_1 & \quad (n_1 = n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^3S_1 & \quad (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = l_2 = 0, m_{l,1} = m_{l,2} = 0) \\ 2^3P_0 & \quad (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = -1, m_{l,2} = 0) \\ 2^3P_1 & \quad (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = 0, m_{l,2} = 0) \\ 2^3P_2 & \quad (n_1 = 2, n_2 = 1, l_1 = 1, l_2 = 0, m_{l,1} = 1, m_{l,2} = 0), \end{aligned}$$

wobei die letzten drei Zustände die Spin-Bahn aufgespaltenen Zustände von 2^3P sind.
Bemerkungen:

- Der spektroskopische Zustand 2^3S_1 lässt sich z.B. auch aus $n_1 = 2, n_2 = 2, l_1 = l_2 = 1, m_{l,1} = 1, m_{l,2} = -1$ konstruieren. Oben wurde der Einfachheit halber immer $n_2 = 1$ zur Konstruktion verwendet.
 - Man verwendet hier die spektroskopische Notation - obwohl man ja eigentlich ein Positron und ein Elektron beschreibt - da ihre Drehimpulse L - S -koppeln. Das mag auf den ersten Blick seltsam erscheinen, da wir ja ein Wasserstoff-ähnliches System vorliegen haben, aber wenn man dieses System im Bezug auf den gemeinsamen (klassischen) Schwerpunkt betrachtet, dann ist es einem Zweielektronensystem strukturell näher als dem Wasserstoffatom. Wichtig ist, dass wir es hier mit unterscheidbaren Teilchen zu tun haben, das Pauliverbot also nicht gilt!
- d) Die Hyperfeinaufspaltung im Wasserstoff ergibt sich aus der parallelen bzw. antiparallelen Ausrichtung von \mathbf{j} und \mathbf{I} . Dies entspricht im Positronium der parallelen bzw. antiparallelen Ausrichtung von \mathbf{s}_{e^-} und \mathbf{s}_{s^+} , d.h. die Hyperfeinwechselwirkung bewirkt im Positronium eine energetische Aufspaltung zwischen Zuständen mit gleichen räumlichen Quantenzahlen und Spinunterschied $\Delta S = 1$.
- e) Die Formel für die Hyperfeinverschiebung des Wasserstoffgrundzustands war in der Angabe gegeben:

$$\Delta E_{HFS}^H = \frac{2}{3} g_s g_I \frac{\alpha^4 \mu^3 c^2}{m_e m_k n^3} \frac{F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)}{2}$$

Damit kann man sofort mit $n = 1, j = I = \frac{1}{2}, g_I = 5.58, \alpha \approx \frac{1}{137}, \mu \approx m_e$ und $m_k = 1836.15 m_e$ die Hyperfeinaufspaltung berechnen:

$$\Delta E_{HFS} = \Delta E_{HFS}^H |_{F=1} - \Delta E_{HFS}^H |_{F=0} = \frac{1}{3} g_s g_I \frac{\alpha^4 \mu^3 c^2}{m_e m_k n^3} \left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{3}{2} \right) \right) = 5.87 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$$

Für die Aufspaltung des untersten Positronium-Hyperfeinniveaus, was der Energiedifferenz zwischen 1^1S_0 und 1^3S_1 entspricht, verwenden wir die Formel wie oben mit den Ersetzungen $g_I \rightarrow g_s = 2, m_k \rightarrow m_e$ und $\mu \rightarrow \frac{m_e}{2}$; wir müssen weiterhin $n = 1, j = I = \frac{1}{2}$ verwenden. Dann entspricht $\Delta E_{HFS}^H |_{F=1}$ der Verschiebung von 1^3S_1 und

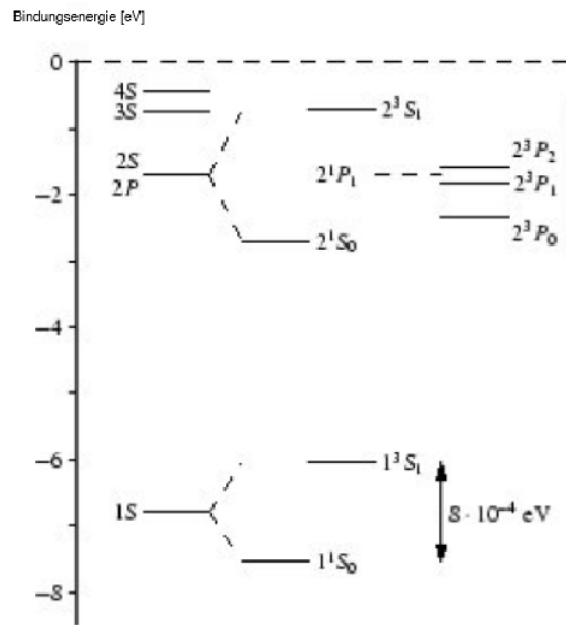
$\Delta E_{HFS}^H |_{F=0}$ der Verschiebung von 1^1S_0 (zur Argumentation dazu siehe **b**)). Man erhält also.

$$\begin{aligned}\Delta E_{HFS}^{e^+e^-} &= \Delta E_{HFS}^{e^+e^-} |_{F=1} - \Delta E_{HFS}^{e^+e^-} |_{F=0} = \frac{1}{3} g_s^2 \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2^3 n^3} \left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{3}{2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{3} \alpha^4 m_e c^2 = 4.83 \cdot 10^{-4} \text{ eV}\end{aligned}$$

Anmerkung: Der tatsächliche experimentelle Wert ist $\Delta E_{HFS}^{e^+e^-} = 8.5 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$. Dabei kommt eine zusätzliche Verschiebung des 1^3S_1 -Niveaus zum tragen, welche aus einem virtuellen $e^+e^- \rightarrow \gamma \rightarrow e^+e^-$ -Prozess resultiert und in der Quantenelektrodynamik berechnet werden kann.

Die Hyperfeinaufspaltung des Wasserstoffs und des Positroniums unterscheiden sich um zwei Größenordnungen. Die Hyperfeinaufspaltung im Positronium ist damit von der gleichen Größenordnung wie die Feinstruktur.

- f) Die folgende Grafik zeigt das Termschema des Positroniums bis $n = 2$, die zuvor berechnete Hyperfeinaufspaltung ist eingezeichnet. Die Feinstrukturaufspaltung der 2^3P -Zustände ließe sich analog zum Wasserstoff berechnen.



5 Wasserstoffatom

Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle 1/r \rangle$, $\langle r \rangle$ und $\langle r^2 \rangle$ für den $2s$ Zustand im Wasserstoffatom.

Hinweis:

$$\begin{aligned}\Psi_{2s}(r) &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/(2a_0)} \\ \int_0^\infty x^k e^{-\eta x} dx &= k! \eta^{-(k+1)}\end{aligned}$$

Lösung

Der Erwartungswert einer Größe O ist gegeben durch

$$\langle O \rangle = \int \Psi^* O \Psi dV \quad (2)$$

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \langle r^n \rangle &= \int \Psi^* r^n \Psi dV \\ &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi^* r^n \Psi dV r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= 4\pi \int_0^\infty \Psi^* r^{n+2} \Psi dr \\ &= \frac{4\pi}{32\pi a_0^3} \int_0^\infty e^{-r/a_0} r^{n+2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 dr \\ &= \frac{a_0^n}{8} \int_0^\infty e^{-x} x^{n+2} (4 - 4x + x^2) dx \quad \text{mit } x = r/a_0 \\ &= \frac{a_0^n}{8} \left[4 \int_0^\infty e^{-x} x^{n+2} dx - 4 \int_0^\infty e^{-x} x^{n+3} dx + \int_0^\infty e^{-x} x^{n+4} dx \right] \\ &= \frac{a_0^n}{8} [4(n+2)! - 4(n+3)! + (n+4)!] \\ &= \frac{(n+2)! a_0^n}{2} \left[1 - (n+3) + \frac{(n+3)(n+4)}{4} \right] \\ &= \frac{(n+2)! a_0^n}{2} \left[-(n+2) + \frac{(n+3)(n+4)}{4} \right] \end{aligned}$$

$$\langle 1/r \rangle = \frac{a_0^{-1}}{2} \left[-1 + \frac{6}{4} \right] = \frac{1}{4a_0}$$

$$\langle r \rangle = 3a_0[-3 + 5] = 6a_0$$

$$\langle r^2 \rangle = 12a_0^2 \left[-4 + \frac{30}{4} \right] = 42a_0^2$$

6 Hyperfeinaufspaltung

Welches Magnetfeld entspricht bei der Hyperfeinaufspaltung des Grundzustands im Wasserstoffatom dem 'Grenzfall', bei dem die beiden Energieabstände der Hyperfein- und dessen Zeemanaufspaltungen gleich groß wären? Gehen sie bei ihren Berechnungen davon aus, dass der g-Faktor des Protons 5.58 ist. (Hinweis: Für die Berechnung der Kopplungskonstante benötigen sie das mittlere vom Elektron erzeugte Magnetfeld. Dieses ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit des felderzeugenden Elektrons am Kernort.)

Wieso wären? Könnte man das erzeugte Magnetfeld für einen $2p_{3/2}$ -Zustand genauso wie für den Grundzustand berechnen?

Lösung

Um die Hyperfeinaufspaltung zu bestimmen, kann man die Formel aus Aufgabe 5 benutzen. Hier wird noch einmal kurz erklärt, woher diese Gleichung kommt. Die Hyperfeinaufspaltung lässt sich in erster Näherung berechnen als

$$E_{HFS} = \frac{A_{HFS}}{2} \langle B_j \rangle (F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)) \quad (4)$$

$$A_{HFS} = -\frac{g_P \mu_K}{\sqrt{j(j+1)}} \langle B_j \rangle$$

Dabei ist $\langle B_j \rangle$ das mittlere vom Elektron (oder allgemeiner: von der Elektronenhülle) am Kernort erzeugte Magnetfeld. Dies ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit des felderzeugenden Elektrons am Kernort und lässt sich schreiben als

$$\langle B_j \rangle = \frac{|\vec{j}|}{\hbar} \mu_0 g_j \mu_B \frac{2}{3} |\psi(0)|^2 \quad (5)$$

$$|\psi(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} \quad \text{Für } l, m_l = 0. \quad (6)$$

Wir lösen also die Aufgabe für den Grundzustand und erhalten:

$$\Delta E_{HFS} = \Delta E_{Zeemann} \quad (7)$$

$$\Delta E_{HFS} = E_{HFS, F=1} - E_{HFS, F=0} \quad (8)$$

$$E_{HFS} = A_{HFS} \quad (9)$$

$$= \frac{2}{3} \mu_0 g_j \mu_B g_I \mu_K \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} \quad (10)$$

Mit $n = 1$, $Z = 1$, $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{m}$, $g_j = 2$ und $g_I = g_P = 5.58$ ergibt sich:

$$A_{HFS} = 5.87 \cdot 10^{-6} \text{eV} \quad (11)$$

$$\Delta E_{Zeeman} = g_j \mu_B B_z \quad (12)$$

$$= g_s \mu_B B_z \quad (13)$$

$$B_z = \frac{A_{HFS}}{g_j \mu_B} \quad (14)$$

$$= 0.051 \text{T} \quad (15)$$

In der Zwischensituation $\Delta E_{HFS} = \Delta E_{Zeemann}$ ist keine der Quantenzahlen wirklich erhalten.

Für den $2p_{3/2}$ -Zustand kann das mittlere erzeugte Magnetfeld nicht wie für den Grundzustand berechnet werden. Die p-Elektronen haben nämlich eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit von 0 am Kernort, und nur Effekte höherer Ordnung, die mindestens eine Größenordnung unter dem Fall für s-Elektronen liegen und deren Berechnung den Rahmen der Vorlesung übersteigt, tragen dort zur Hyperfeinaufspaltung bei.

7 Zeemann-Effekt

Der atomare Übergang $7^3S_1 \rightarrow 6^3P_2$ in Quecksilber entspricht einer Wellenlänge von $\lambda = 546.10 \text{ nm}$.

- a) Welcher Zeeman-Effekt liegt vor: der normale oder der anomale?

- b) Berechnen Sie die Lande-Faktoren g_j der beiden Zustände und bestimmen Sie die Aufspaltung des Levels 6^3P_2 Levels, wenn das 7^3S_1 Level mit $\Delta E = 3 \cdot 10^{-5}$ eV aufspaltet.
- c) Skizzieren Sie ein Termschema, dass diese Aufspaltung zeigt und zeichnen Sie die mit der Auswahlregel $\Delta m_j = 0, \pm 1$ erlaubten Übergänge ein.

Lösung

- a) Es liegt der anomale Zeeman-Effekt vor, da neben einem Bahndrehimpuls auch ein nichtverschwindender Spin existiert.
- b) Die Aufspaltung eines Levels auf Grund des anomalen Zeeman-Effekts ist mit

$$E = -\vec{\mu}_B \vec{B} = m_j g_j \mu_B \quad (16)$$

gegeben. Der Lande-Faktor ist dabei definiert durch

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (17)$$

Das Level 7^3S_1 ist im Zustand $j = 1, l = 0, s = 1$. Damit folgt für g_j :

$$g_j(^3S_1) = 2$$

Für das Level 6^3P_2 gilt $j = 2, l = 1, s = 1$ und somit:

$$g_j(^3P_2) = 3/2$$

Für den Energieunterschied zweier benachbarter Level gilt

$$\Delta E = g_j \mu_B B \quad (18)$$

Damit können wir das angelegte Magnetfeld aus der Aufspaltung des 7^3S_1 Levels berechnen:

$$B = \frac{\Delta}{E g_j(^3S_1) \mu_B} = 0.25 \text{T} \quad (19)$$

Für die Größe der Aufspaltung eines 6^3P_2 -Niveaus

$$\Delta E = 2.16 \cdot 10^{-5} \text{eV} \quad (20)$$

