

Probeklausur Musterlösung

Aufgabe 1

Gegeben sei eine 1-dimensionale Potentialstufe

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

- (a) Ein Teilchen der Masse m bewege sich mit definierter Energie $E = 2V_0$ in positive x -Richtung auf die Stufe zu. Geben Sie die Lösung $\varphi(x)$ der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für $-\infty < x < \infty$ an, die diesen Zustand des Teilchens beschreibt.
- (b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit wird das Teilchen an der Stufe reflektiert?

Lösung:

- (a) Der Ansatz für die linke Halbachse ist

$$\varphi_I(x) = A \exp[ikx] + B \exp[-ikx]$$

Einsetzen in die zeitunabhängige Schrödingergleichung ergibt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)(A \exp[ikx] + B \exp[-ikx]) = E(A \exp[ikx] + B \exp[-ikx])$$

also

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

bzw.

$$k(E) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

Der Ansatz für die rechte Halbachse ist

$$\varphi_{II}(x) = C \exp[ik'x]$$

muss die Schrödinger Gleichung mit konstantem Potential V_0 erfüllen, also

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(-k'^2) + V_0 \right) C \exp[ik'x] = EC \exp[ik'x]$$

also

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - V_0$$

bzw.

$$k'(E) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}$$

Stetigkeit von $\varphi(x)$:

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \leftarrow A + B = C$$

Stetigkeit von $\varphi'(x)$:

$$\varphi'_I(x) = \varphi'_{II}(x) \leftarrow ikA - ikB = ik'C$$

Elimination von C liefert B:

$$B = \frac{k - k'}{k + k'} A$$

und darauf folgt C:

$$C = \frac{2k}{k + k'} A$$

Also insgesamt:

$$\varphi_I(x) = A \left(\exp[ikx] + \frac{k - k'}{k + k'} \exp[-ikx] \right)$$

$$\varphi_{II}(x) = A \frac{2k}{k + k'} \exp[-ik'x]$$

mit

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{4mV_0} =$$

und

$$k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

(b) Die Wahrscheinlichkeit für Reflektion ist

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k - k'|}{|k + k'|} = 0.066$$

| n_1 | n_2 | $\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}$ |
|-------|----------|-------------------------------------|
| 1 | ≥ 2 | ≥ 0.75 |
| 2 | ≥ 3 | ≥ 0.139 |
| 3 | ≥ 4 | ≥ 0.0486 |

Aufgabe 2

Im Spektrum des Wasserstoffs tritt eine Linie mit der Wellenlänge $\lambda = 1874$ nm auf.

- Welche Hauptquantenzahlen n_1 und n_2 entspricht dieser atomare Übergang?
- Treten zusammen mit diesem Übergang weitere Übergänge auf? Wenn ja, warum und bei welchen Wellenlängen? Wenn nein, warum nicht? Wie heißen die entsprechenden Wellenlängenbereiche?
- Das Trägheitsmoment einer Schallplatte¹ beträgt etwa $10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$. Berechnen Sie den Drehimpuls $L = T\omega$ bei den bekannten 33 (U/min). Wie groß ist etwa die Drehimpulsquantenzahl l ? Interpretieren Sie diese Zahl.
- Wie groß ist der Winkel θ zwischen \mathbf{L} und der z -Achse (Richtung des Magnetfelds) bei $l = 1, 4$ und 50 ? Fertigen Sie eine Skizze an. Interpretieren Sie diese Quantenzahlen. Diskutieren Sie den Fall $\theta = 0$.

Lösung:

- Relevante Gleichung ist

$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1}$$

und für die Energieniveaus

$$E_n = -Ry^* \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

Es folgt mit den Angaben

$$\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} = \frac{c}{\lambda Ry^*} \approx 0.0486$$

Man löst durch Ausprobieren Man findet also, dass es sich um einen Übergang von der vierten in die dritte Schale handelt.

¹Schwarze Scheibe, die man noch vor den so genannten Compact Discs (CDs) verwendet hat.

| n_1 | n_2 | λ in nm |
|-------|-------|-----------------|
| 2 | 3 | 656 |
| 1 | 2 | 121 |
| 1 | 3 | 102 |

- (b) Damit ist klar, dass weitere Übergänge stattfinden müssen, denn der Endzustand ist ja nicht der Grundzustand. Die Wellenlängen sind nun trivial auszurechnen:

$$\lambda = \frac{c}{Ry^*} \frac{1}{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}}$$

Es folgt die Tabelle Die Übergänge von 4 auf 1 und 2 treten nicht wirklich gemeinsam mit dem Übergang 4 auf 3 auf. Die beiden Übergänge bei 100 nm sind im ultravioletten Bereich. Der andere ist sichtbar. Der Übergang der Aufgabenstellung liegt im infraroten Bereich. Für die Bezeichnungen gibt es insgesamt einen weiteren Punkt.

- (c) $\omega = 2\pi \cdot \frac{33.3}{60} \approx 3.49$. Daher $L = T\omega \approx 3.49 \cdot 10^{-3} \text{kgm}^2/\text{s}$. Der Zusammenhang zwischen L und l ist durch $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ gegeben. Daher erhält man $l = 3.31 \cdot 10^{31}$. Die Zahl ist exorbitant groß, also klassischer Grenzfall.
- (d) Die Quantenzahl m_l läuft von $-l$ bis $+l$ und bezeichnet die z -Komponente von \mathbf{L} in Einheiten von \hbar . Der Winkel θ zwischen z -Achse und \mathbf{L} ergibt sich also aus der Gleichung

$$\cos \theta = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Das Minimum des Winkels entspricht einem Maximum des Kosinus. Dies wird erreicht für $m = l$. Man erhält für $l = 1$ den Minimalwinkel $\theta 45^\circ$, für $l = 4$ den Minimalwinkel $\theta = 26.6^\circ$ und für $l = 50$ den Minimalwinkel $\theta = 8.05^\circ$. Für große Quantenzahlen geht man in den klassischen Limes. Der Fall $\theta = 0$ ist nur klassisch möglich. Quantenmechanisch geht das nicht, denn dann wären die x und y -Komponente gleichzeitig unendlich scharf bestimmt, was nicht mit der Unschärferelation vereinbar ist.

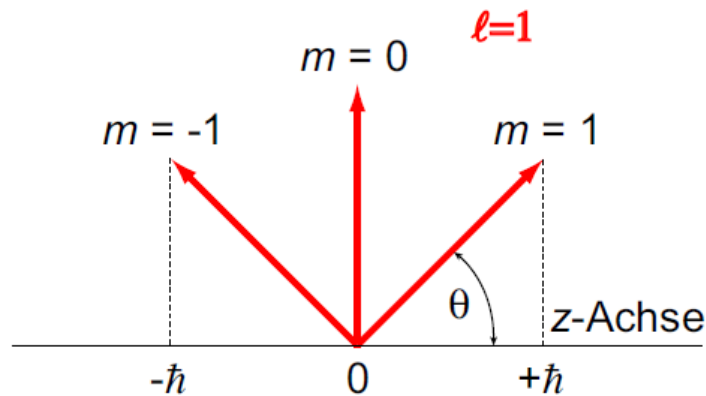


Abbildung 1

Aufgabe 3

- Beschreiben Sie ein Zweielektronensystem bestehend aus zwei p -Elektronen (np und $n'p$, mit $n \neq n'$ verschiedene Hauptquantenzahlen) in LS -Kopplung. Skizzieren Sie dazu qualitativ die energetische Lage aller möglichen Terme und benennen Sie die Terme. Geben Sie die Zahl der möglichen magnetischen Unterzustände an.
- Geben Sie die Elektronenkonfiguration von ${}_{14}\text{Si}$, ${}_{15}\text{P}$, ${}_{16}\text{S}$ im Grundzustand an. Skizzieren Sie dabei die Besetzung der Unterschalen. Geben Sie das Termsymbol für den Grundzustand an.
- Was unterscheidet die in Teilaufgabe 2 erhaltenen ${}_{14}\text{Si}$ Grundzustandskonfiguration von dem Ergebnis von Teilaufgabe 1.

Lösung:

- Unter LS -Kopplung koppeln die Spins der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtspin $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ mit den möglichen Eigenwerten $|s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2$. Analog koppeln die Bahndrehimpulse zu einem Gesamtbahndrehimpuls L , der die Eigenwerte $|l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$ annehmen kann. Da $n \neq n'$ ist, können alle so entstehenden Ortswellenfunktionen symmetrische oder antisymmetrische Form annehmen, so dass wirklich alle Zustände angenommen werden können.

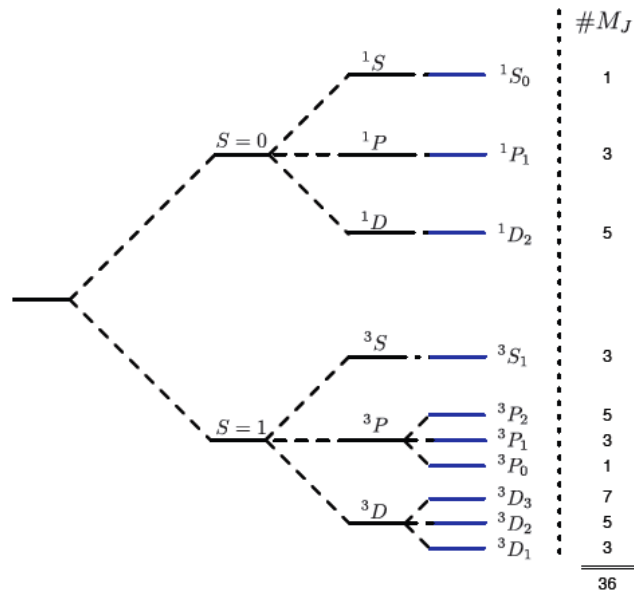


Abbildung 2

- (b) In der Abbildung sind jeweils Elektronenkonfigurationen, Schalenbesetzung in Pauli-Schreibweise und Termsymbol des Grundzustandes für die drei gegebenen Atome dargestellt.

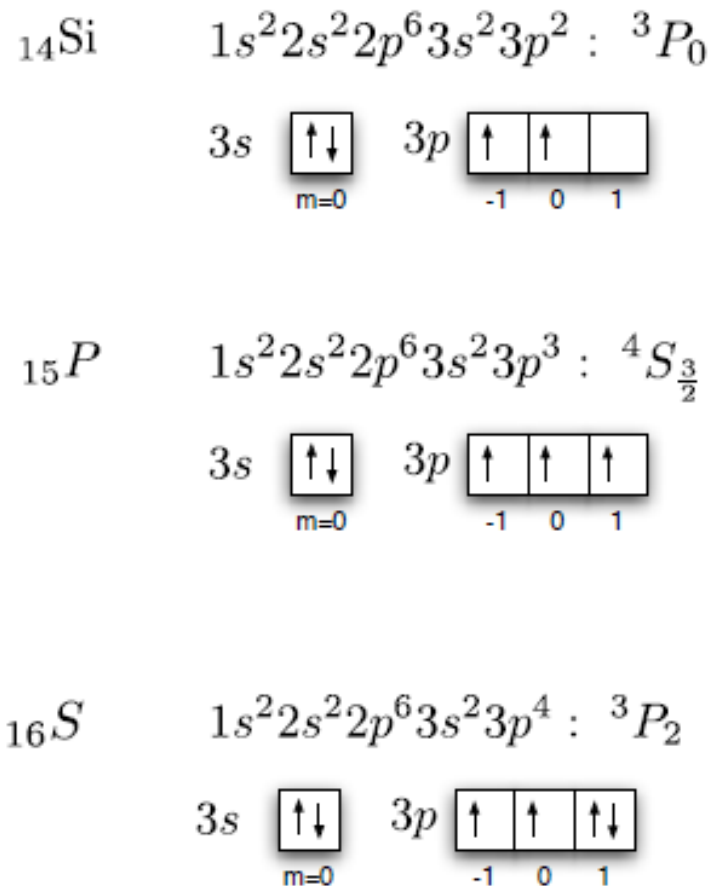


Abbildung 3

- (c) Nach dem Pauli-Prinzip muss die Gesamtwellenfunktion des Systems bezüglich Vertauschung der Elektronen antisymmetrisch sein. Da in Teilaufgabe 1 die Hauptquantenzahlen $n \neq n'$ unterschiedlich sind, kann die Ortswellenfunktion der beiden äußeren Elektronen stets in antisymmetrischer Form geschrieben werden. Insbesondere ist also auch die Konfiguration möglich, bei der beide Elektronen Spinquantenzahl $m_s = 1$ und trotzdem Magnetquantenzahl $m_l = 1$ haben, das heißt $L = 2$ (maximaler Spin und maximaler Bahndrehimpuls: Grundzustand).

Dagegen kann diese Konfiguration unter der gleichen Hauptquantenzahl nicht angenommen werden, da sowohl die Ortswellenfunktion als auch die Spinwellenfunktion symmetrisch wären.

Aufgabe 4

In einem Atomstrahlexperiment ähnlich dem Stern-Gerlach-Experiment wird ein Strahl von $^{23}\text{Na}(^2S_{\frac{1}{2}})$ -Atomen durch ein stark inhomogenes Feld B_1 geschossen (Paschen-Back-Bereich).

Was passiert mit der Kopplung von **I** und **J** zu **F**?

Man beobachtet, dass der Strahl in acht Teilstrahlen aufspaltet. Wie groß ist die Zusatzenergie ΔE_{HFS} ?

Wie groß ist die Kernspinquantenzahl **I** von ^{23}Na ?

Was geschieht eigentlich mit der LS-Kopplung?

In wieviel Teilstrahlen würde der Strahl in einem schwachen inhomogenen Feld aufspalten (Zeeman-Bereich)?

Präzediert **I** im Paschen-Back-Bereich? Wenn ja, um welche Richtung? Wenn nein, warum nicht?

Lösung

Der Kernspin **I** und der Elektronenspin **J** werden durch das starke Feld entkoppelt (1 Punkt).

Die LS-Kopplung ist stärker, weil zwei starke Elektronenmomente beteiligt sind, sie bleibt erhalten (1 Punkt).

Die Zusatzenergie beträgt $\Delta E_{PBE} = g_J \mu_B m_J B + A m_I m_J - g_I \mu_K B m_I$ (1 Punkt). Wir wissen aus der Aufgabestellung, dass $J = \frac{1}{2}$ ist (1 Punkt).

Damit hat man schlicht $(2J + 1)(2I + 1)$ Einstellmöglichkeiten, also $2(2I + 1) = 8$, woraus $I(^{23}\text{Na}) = \frac{3}{2}$ folgt (1 Punkt).

Im Falle schwacher Magnetfelder koppeln **I** und **J** zu **F**. **F** hat $J + I; \dots; |J - I|$ Einstellmöglichkeiten (1 Punkt).

Beim Natrium haben wir drei Niveaus, die eine Hyperfeinaufspaltung erfahren: $^2S_{\frac{1}{2}}, ^2P_{\frac{1}{2}}$ und $^2P_{\frac{3}{2}}$ (1 Punkt).

Diese haben zwei, zwei und vier Einstellmöglichkeiten für **F**, also erhält man ebenfalls wieder 8 Teilstrahlen (1 Punkt). Die Anordnung der Strahlen ist jedoch anders als im Paschen-Back-Bereich (1 Punkt). **I** präzediert um **J**, da in der Regel das Hüllfeld stärker ist als das angelegte äußere Feld. **J** wiederum präzediert um die Magnetfeldrichtung **B**. Dies allerdings sehr viel schneller. Daher präzediert **I** im Endeffekt um die Richtung des äußeren Feldes, aber eben mit anderer Frequenz (2 Punkte).

Aufgabe 5

Wir betrachten nun ein Molekül das nicht rotiert ($J = 0$), aber dafür ist der Abstand R der beiden Atomkerne nicht mehr konstant. Die Kerne können also gegeneinander schwingen. Die Schrödingergleichung für die Radialbewegung lautet:

$$\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left(r^2 \frac{dS}{dR} \right) - E_{Pot}(R) \right] S(R) = E \cdot S(R) \quad (1)$$

Für die potentielle Energie zwischen den Kernen ist das Morse-Potential eine sehr gute Näherung

$$E_{Pot}(R) = E_{diss}(1 - e^{-a(R-R_0)})^2 \quad (2)$$

Da die Lösung der Schrödingergleichung mit Morse-Potential kompliziert ist, wollen wir uns hier auf die harmonische Näherung beschränken.

- Geben Sie die Entwicklung des Morsepotentials bis zur 2. Ordnung an und bringen Sie es auf die Form $E_{Pot}(R) \approx \frac{1}{2}k(R - R_0)^2$
- Geben Sie die Energieeigenwerte für dieses Potential an.
- Berechnen Sie die Anregungsenergien für die harmonischen Energieniveaus für ein H_2 -Molekül ($E_{diss} = 4,75eV, R_0 = 1,44$)

Lösung

- Zunächst wird das Morse-Potential um R_0 entwickelt:

$$E_{Pot}(R) \approx E_{Pot}(R_0) + E'_{Pot}(R_0)(R - R_0) + \frac{1}{2}E''_{Pot}(R_0)(R - R_0)^2 \quad (3)$$

$$= 0 + 0 + \frac{1}{2}2a^2E_{diss}(R - R_0)^2 \quad (4)$$

$$= \frac{1}{2}k(R - R_0)^2 \quad (5)$$

wobei $k = 2a^2E_{diss}$

- Das Potential $E_{Pot}(R) = \frac{1}{2}k(R - R_0)^2$ ist das Potential eines eindimensionalen harmonischen Oszillators. Die zugehörigen Energieeigenwerte lauten:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (6)$$

wobei $\omega = \sqrt{\frac{k}{M}}$ und M die reduzierte Masse ist.

- Die Anregungsenergie entspricht dem Unterschied zwischen zwei Energieniveaus:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \quad (7)$$

Fürs H_2 -Molekül ergibt sich damit:

$$\Delta E = \hbar \sqrt{\frac{2a^2 E_{diss}}{0,5M_H}} = 771 \text{ meV} \quad (8)$$

Die Vibrationsanregungen sind immer noch um eine Größenordnung kleiner als die elektronischen Anregungen, aber deutlich größer als die Rotationsanregungen.

Aufgabe 6

Im folgenden soll der Carnot-Zyklus diskutiert werden. Er besteht aus zwei Prozessen bei denen kein Wärmeaustausch mit der Umgebung stattfindet. Und zweien bei denen die Temperatur durch Wärmeaustausch konstant gehalten wird.

- Zeichnen Sie das p-V-Diagramm.
- Benennen Sie die einzelnen Zustandsänderungen und berechnen Sie jeweils die dem System zugeführte Wärme Q und die am System verrichtete Arbeit W .
- Führen Sie den Wirkungsgrad auf die Zustandsgrößen zurück. Eliminieren Sie anschließend alle Größen, bis der Wirkungsgrad ausschließlich von den Temperaturen abhängt.

Lösung

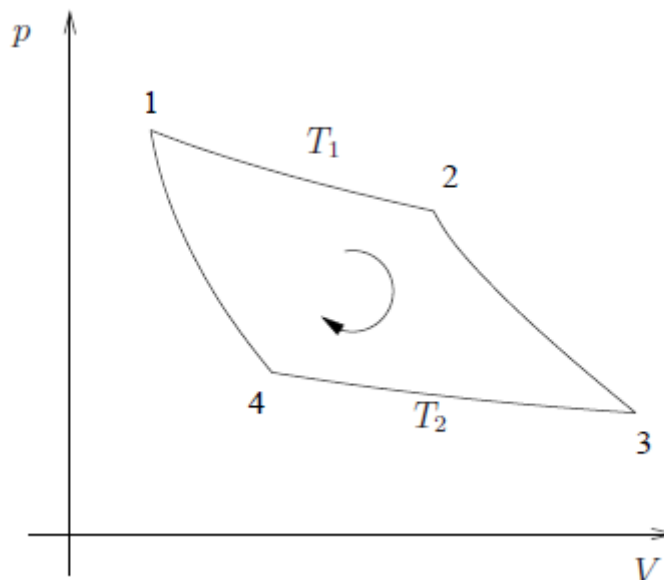


Abbildung 4: p-V-Diagramm des Carnotprozesses

a)

b) Der Carnotprozess besteht aus folgenden Teilschritten

1. → 2: isotherme Expansion
2. → 3: adiabatische Expansion
3. → 4: isotherme Kompression
4. → 1: adiabatische Kompression

Für den ersten Prozess gilt:

$$W_{12} = - \int_{V_1}^{V_2} \frac{nRT_1}{V} dV = -nRT_1 \ln \frac{V_2}{V_1} = nRT_1 \ln \frac{V_1}{V_2} \quad (9)$$

Für die Wärme folgt damit dank $\Delta U = 0$

$$Q_{12} = nRT_1 \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (10)$$

Für den zweiten Prozess gilt:

Da es eine Adiabate ist

$$Q_{23} = 0 \quad (11)$$

Somit ergibt sich für die Arbeit

$$W_{23} = U_3 - U_2 = \frac{3}{2} nR(T_2 - T_1) \quad (12)$$

Für den dritten Prozess gilt:

$$W_{34} = - \int_{V_3}^{V_4} \frac{nRT_2}{V} dV = -nRT_2 \ln \frac{V_4}{V_3} = nRT_2 \ln \frac{V_3}{V_4} \quad (13)$$

Für die Wärme folgt damit dank $\Delta U = 0$

$$Q_{34} = nRT_2 \ln \frac{V_4}{V_3} \quad (14)$$

Für den vierten Prozess gilt:

Da es eine Adiabate ist

$$Q_{41} = 0 \quad (15)$$

Somit ergibt sich für die Arbeit

$$W_{41} = U_4 - U_1 = \frac{3}{2} nR(T_1 - T_2) \quad (16)$$

- c) Der Wirkungsgrad ist definiert als Quotient aus vom System verrichteter Arbeit und dem System zugeführter Wärme. Hier gilt die Wärme aus dem Schritt von 3 nach 4 als abgeführte Wärme und wird somit nicht berücksichtigt.

$$\eta = \frac{-W_{12} - W_{23} - W_{34} - W_{41}}{Q_{12}} \quad (17)$$

Ausgeschrieben ergibt dies:

$$\eta = \frac{nRT_1 \ln \frac{V_2}{V_1} + \frac{3}{2}nR(T_1 - T_2) - nRT_2 \ln \frac{V_3}{V_4} - \frac{3}{2}nR(T_1 - T_2)}{nRT_1 \ln \frac{V_2}{V_1}} \quad (18)$$

Die beiden Terme im Zähler ohne Logarithmus heben sich gegenseitig auf.

$$\eta = \frac{nRT_1 \ln \frac{V_2}{V_1} - nRT_2 \ln \frac{V_3}{V_4}}{nRT_1 \ln \frac{V_2}{V_1}} \quad (19)$$

Aus der Adiabatangleichung

$$TV^{\kappa-1} = \text{const.} \quad (20)$$

folgen nun Zusammenhänge für die Volumina durch die Expansion von 2 auf 3

$$T_1 V_1^{\kappa-1} = T_2 V_3^{\kappa-1} \quad (21)$$

und durch die Kompression von 4 auf 1

$$T_2 V_4^{\kappa-1} = T_1 V_1^{\kappa-1} \quad (22)$$

In Summe ergibt dies

$$\frac{V_3}{V_4} = \frac{V_2}{V_1} \quad (23)$$

Als Wirkungsgrad erhalten wir dann

$$\eta = \frac{T_1 - T_2}{T_1} \quad (24)$$