

FK Ex 4 - Musterlösung 08/09/2015

1 Rydberg-Atome

Wird in einem freien Atom ein Elektron in einen Zustand mit sehr kleiner Bindungsenergie gebracht, so nimmt die Wellenfunktion einen sehr großen Raum ein und die Struktur des restlichen Atoms spielt fast keine Rolle mehr. Man spricht dann von Rydberg-Zuständen.

- (a) Zur Anregung der Rydberg-Zustände von Wasserstoff-Atomen werden zwei Laser benutzt. Ein Laser hat die feste Frequenz zur Photonenenergie $E = 11.5$ eV, der andere Laser ist durchstimmbar. Welche Wellenlängen muss man an diesem einstellen, um die Zustände mit $n = 20, 30, 40, 50, 100$ anzuregen?
- (b) Wie groß sind die Radien und die Bindungsenergien dieser Zustände?
- (c) Welche Änderung dieser Werte erwarten Sie qualitativ für Natrium-Atome, insbesondere für die Entartung der Drehimpuls-Unterstufen?

Lösung:

- (a) Im Rydberg-Atom sind die Bedingungen für das Bohrsche Korrespondenzprinzip gut erfüllt. D.h., dass für große Quantenzahlen n und Prozesse, bei denen nur kleine Energieänderungen E_n auftreten, die quantenmechanische Beschreibung in die klassische übergeht. Aus der Bohrschen Beschreibung für das Wasserstoffatom ist bekannt, dass für die Anregung im Niveau i zu f die Energie

$$E_{Anr} = E_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

erforderlich ist. Für die Anregung steht die Energie

$$E_{Anr} = E_{Laser1} + E_{Laser2} = \frac{hc}{\lambda_1} + \frac{hc}{\lambda_2}$$

zur Verfügung. Somit muss die Wellenlänge des zweiten Lasers

$$\lambda_2 = \frac{2\pi\hbar c}{E_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) - E_{Laser1}}$$

betragen. Mit $\hbar c = 197.327$ MeV fm, $E_H = -13.60$ eV, $n_i = 1$ (Grundzustand) und $E_{Laser1} = 11.50$ eV erhält man folgende Werte: $\lambda_2(n = 20) = 600.1$ nm,

n_f	r_n (10^{-10} m)	E_n meV
20	212	-34.0
30	476	-15.1
40	846	-8.5
50	1323	-5.4
100	5290	-1.4

$$\lambda_2(n = 30) = 594.7 \text{ nm}, \lambda_2(n = 40) = 592.8 \text{ nm}, \lambda_2(n = 50) = 591.9 \text{ nm}, \\ \lambda_2(n = 100) = 590.8 \text{ nm}$$

(b) Der Radius der Elektronenbahnen nach dem Bohrschen Atommodell ist:

$$r_n = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = n^2 \cdot a_B$$

$$a_B = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Die Bindungsenergie ist mit

$$E_n = \frac{E_H}{n^2}$$

gegeben.

(c) Das Leuchtelektron bewegt sich im elektrischen Felder der Kernladung $+Z \cdot e$, das durch die $Z - 1$ inneren Elektronen weitgehend abgeschirmt ist. Bei großer Entfernung r vom Kern ist die auf das Leuchtelektron wirkende Kernladung bis auf eine Ladungseinheit durch die inneren Elektronen kompensiert. Je näher das Elektron an den Kern gelangt, umso mehr unterliegt es der unabgeschirmten Wirkung der Kernladung. Für das effektive Potential $V(r)$ gilt nicht mehr die Proportionalität zu r^{-1} , welche verantwortlich für die l -Entartung war. Im Sommerfeldschen Bild der so genannten Tauchbahnen erfährt ein Elektron mit unterschiedlichem Bahndrehimpuls l , d. h. unterschiedlicher Bahnform, unterschiedliche Abschirmung. Im Natrium ist die l -Entartung von vornherein aufgehoben.

2 Kugelpotential

Gegeben sei ein kugelförmiger Potentialtopf mit $V(r) = 0$ für $r < r_0$ und $V(r) = \infty$ für $r > r_0$.

(a) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion

$$\psi(r, t) = a \cdot \frac{\sin kr}{kr}$$

eine Lösung der Schrödingergleichung dieses Systems ist. Bestimmen Sie die Werte für k und E in diesem System.

(b) Wie groß ist der Drehimpuls des Teilchens?

Lösung:

(a) Die Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten lautet

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2 f} \cdot E \cdot \psi = 0$$

Für die angegebene Funktion ist offensichtlich

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = 0.$$

Die r -abhängigen Anteile ergeben nach etwas Rechnung:

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = -k^2 \frac{\sin kr}{kr} = -k^2 \psi$$

Damit ist die Energie offensichtlich

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

Die Wellenfunktion muss bei $r = r_0$ verschwinden. Das funktioniert nur für $k_n = \frac{n\pi}{r_0}$. Damit ist $E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mr_0^2}$.

(b) Der Drehimpuls des Teilchens ist in jedem Fall 0, da die Wellenfunktion offensichtlich nicht winkelabhängig ist (vgl. hierzu den Zusammenhang des Laplaceoperators in Kugelkoordinaten mit dem Drehimpulsoperator).

3 Wasserstoffatom

Zeigen Sie, dass die Grundzustands-Wasserstoff-Wellenfunktion

$$\psi_{100}(r, \phi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right]$$

eine Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + U(r)\psi = E\psi$$

mit

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

ist und bestimmen Sie den Ausdruck für E_{100} .

Lösung:

Da der Grundzustand rotationssymmetrisch ist, ist es nicht nötig in der Schrödinger-Gleichung die Ableitung nach den Winkeln zu betrachten. Definiere $C = 1/\sqrt{\pi}(Z/a_0)^{3/2}$ und $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$. Dann gilt:

$$\frac{\partial \psi_{100}}{\partial r} = C \frac{\partial}{\partial r} \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right] = C \frac{Z}{a_0} \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right]$$

Multiplizieren beider Seiten mit r^2 und erhalte nach Differentiation nach r :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_{100}}{\partial r} \right) = -C \frac{Z}{a_0} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right] = \left[-\frac{2Zr}{a_0} + r^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 \right] C \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right]$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung liefert das

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[-\frac{2Zr}{a_0} + r^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 \right] C \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right] - \frac{kZe^2}{r} C \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right] = EC \exp \left[-\frac{Zr}{a_0} \right]$$

Auflösen nach E und Einsetzen von a_0 ergibt:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[-\frac{2Zr}{a_0} + r^2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 \right] - \frac{kZe^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$$

4 Spin-Bahn-Kopplung

Ein Elektron sei in einem Zustand mit Bahndrehimpuls \mathbf{L} und Spinvektor \mathbf{S} . Diese koppeln zu einem Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} .

- Wie ergeben sich die verschiedenen Vektoren auseinander?
- Welche möglichen Gesamtlängen haben die Vektoren? Was sind ihre möglichen Komponenten in einer gemeinsam ausgezeichneten Richtung? Verwenden Sie hierzu die nötigen Quantenzahlen. Welche Werte können diese im Wasserstoffatom annehmen?

- (c) Berechnen Sie für die Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 1$ und die Spinquantenzahl $s = 1/2$ die Vektorlängen. Berechnen Sie den Winkel zwischen \mathbf{L} und \mathbf{S}

Lösung:

(a) $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$

(b)

$$|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

$$|\mathbf{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$$

$$|\mathbf{J}| = \hbar\sqrt{j(j+1)}$$

$$L_z = m_l\hbar$$

$$S_z = m_s\hbar$$

$$J_z = m_j\hbar$$

Im Wasserstoffatom gilt

$$l = 0, 1, n - 1; \quad m_l = -l, \dots, +l$$

$$s = 1/2; \quad m_s = \pm 1/2$$

$$j = \begin{cases} l \pm 1/2, & l > 0 \\ 1/2, & l = 0 \end{cases} \quad m_j = -j, \dots, +j$$

- (c) Mit den angegebenen Zahlen ergibt sich

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{2}\hbar$$

$$|\mathbf{S}| = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

$$|\mathbf{J}| = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar \quad \text{fr } j = \frac{3}{2}, \quad \frac{\sqrt{3}}{2} \quad \text{fr } j = \frac{1}{2}$$

Der Winkel ergibt sich wie immer mit

$$\cos \alpha = \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{|\mathbf{L}||\mathbf{S}|}$$

Den Ausdruck $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ kann man mittels

$$(\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L}\mathbf{S} + \mathbf{S}^2$$

also

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{\hbar^2}{2}(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))$$

Eingesetzt erhält man insgesamt

$$\cos \alpha = \frac{1}{2} \frac{(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))}{\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)}} = \begin{cases} 0.408 \\ -0.816 \end{cases}$$

5 Hyperfeinstruktur

Schätzen Sie zunächst das Verhältnis der Energien der Hyperfeinaufspaltung zur Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung $\frac{\Delta E_{HFS}}{\Delta E_{LS}}$ ab. Betrachten Sie dann den Grundzustand des Deuteriums, der in zwei HF-Niveaus $F = 1/2$ und $F = 3/2$ aufgespalten ist. Welchen Wert muss die Spinquantenzahl I des Deuterons haben und was bedeutet das insbesondere für die Orientierung der Spins des Protons und Neutrons? In welche Hyperfeinzustände spaltet dann das $p_{3/2}$ -Niveau auf?

Lösung:

Bei der HFS, wie in der Vorlesung besprochen, wechselwirkt das Magnetfeld, das vom Gesamtdrehimpuls in der Hülle verursacht wird, mit dem Kernspin. Bei der L-S-Kopplung hingegen wechselwirkt der Spin des Elektrons mit dem Bahndrehimpuls. Es gilt also:

$$\Delta E_{LS} = g_s \mu_B \left(\frac{\mathbf{S}}{\hbar} \cdot \mathbf{B}_L \right)$$

$$\Delta E_{HFS} = g_I \mu_K \left(\frac{\mathbf{I}}{\hbar} \cdot \mathbf{B}_J \right)$$

S , L , J und I sind in der Größenordnung \hbar ; das gilt dann auch für die B_i 's. Die Landé-Faktoren liegen in der Größenordnung 1. Der Hauptunterschied rührt daher von

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

Also ist $\frac{\Delta E_{HFS}}{\Delta E_{LS}} \approx \frac{1}{2000}$.

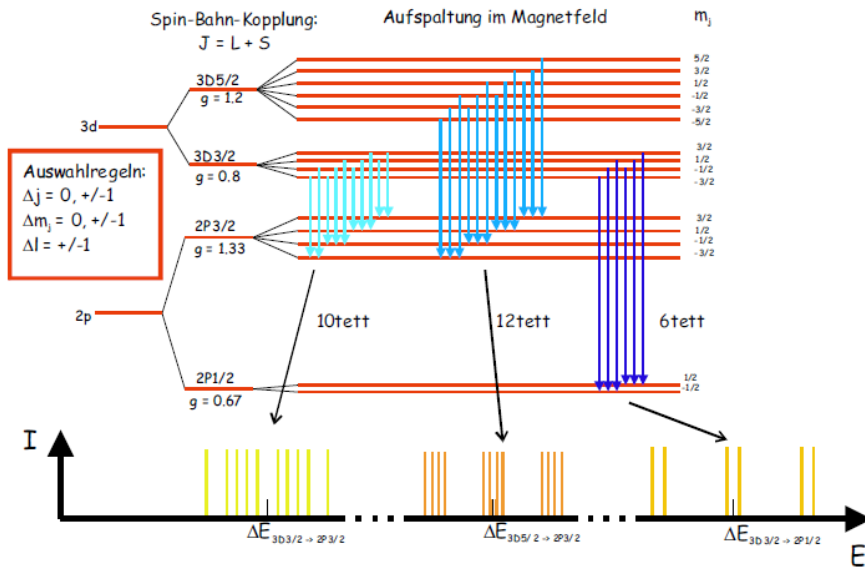
Die Grundzustandskonfiguration ist identisch zu der des Wasserstoffatoms. Also: $L = 0$, $S = J = \frac{1}{2}$. I muss 1 sein, da I und J insgesamt zu F koppeln. Die Spins von Proton und Neutron stehen damit parallel im Deuterium. Das $p_{3/2}$ -Niveau spaltet mit $j = 3/2$ ($l = 1, s = 1/2$) in $f = 1/2, 3/2, 5/2$ auf.

6 Wasserstoffatom im Magnetfeld

Skizzieren Sie die Aufspaltung des $3d$ und des $2p$ - Niveaus im Wasserstoffatom zunächst nach L - S -Kopplung, sowie nach induzieren eines externen Magnetfelds der Größen im (a) Zeeman-Bereich und (b) Paschen-Back-Bereich. Zeichnen Sie alle erlaubten optischen Übergänge ein. Die Auswahlregeln sind $\Delta j = 0, \pm 1$, $\Delta m_j = 0, \pm 1$ und $\Delta l = \pm 1$ bzw. $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m_l = 0, \pm 1$ und $\Delta m_s = 0$.

Lösung:

Zeeman - Bereich



Paschen-Back - Bereich

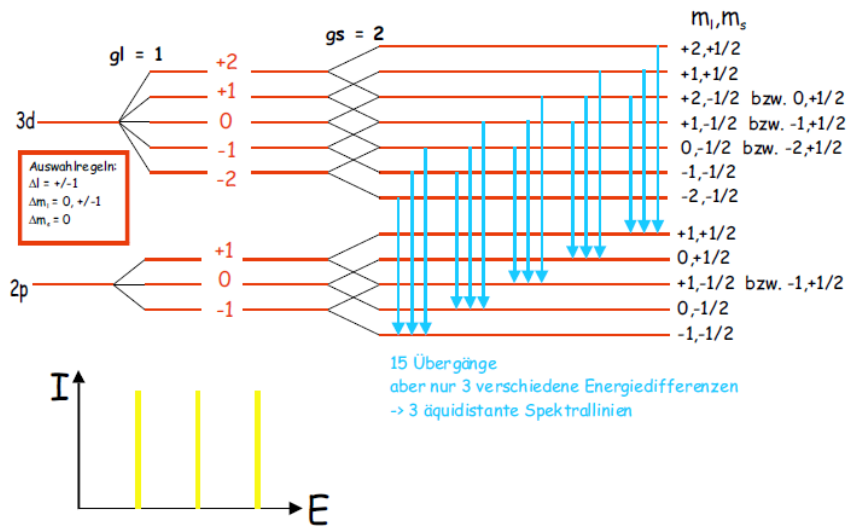


Abbildung 1: Paschen-Back.

7 Hundsche Regeln

Bestimmen Sie mit Hilfe der Hundschen Regeln das spektroskopische Symbol für folgende Grundzustandskonfigurationen:

- (a) Cobalt: $[Ar]3d^74s^2$
- (b) Gold: $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^1$
- (c) Technetium: $[Kr]4d^55s^2$

Lösung

- (a) ${}^4F_{9/2}$
- (b) ${}^2S_{1/2}$
- (c) ${}^6S_{5/2}$

8 Dipolübergänge

Das Dipolmatrixelement ist gegeben durch $\mathcal{M} = \int \psi_f^* \mathbf{p} \psi_i d\tau$. Berechnen Sie dieses Matrixelement für den Übergang 1s nach 2s.

Lösung:

Der Dipoloperator ist $\mathbf{p} = e\mathbf{r}$. Also:

$$\mathcal{M} = e \int \psi_f^* \mathbf{r} \psi_i d\tau$$

Einsetzen der Wellenfunktionen für die angegebenen Zustände liefert:

$$\mathcal{M} = a \int_V \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{3r}{(2a_0)}\right] \mathbf{r} \cdot r^2 \sin\theta d\varphi d\theta dr$$

Explizites Einsetzen des Vektors \mathbf{r} , also $x = r \sin\theta \cos\varphi$, $y = r \sin\theta \sin\varphi$ und $z = r \cos\theta$, ergibt für die Ausführung des Integrals:

$$\mathcal{M}_{ik} = 0$$