

Kurzfragensammlung Experimentalphysik 4

Thomas Maier, Carsten Rohr

Stand: 26. März 2024

(Bei Fehlern bitte Mail an uebung-exphys@nat.tum.de.)

Inhaltsverzeichnis

1	Grundlagen	8
1.1	Bohrsche Postulate	8
1.2	Bohrsches Atommodell vs. klassische Elektrodynamik	8
1.3	Elektronengeschwindigkeit auf der ersten Bohrschen Bahn	8
1.4	Dispersionsrelation für Materiewellen 1	8
1.5	Dispersionsrelation für Materiewellen 2	8
1.6	Dispersionsrelation für Materiewellen 3	9
1.7	Lineare Operatoren in der Quantenmechanik	9
1.8	Definition Hamilton-Operator	9
1.9	Verschwindender Kommutator zweier Operatoren	9
1.10	Mittlere quadratische Schwankung Messwert	9
1.11	Varianz des Energie-Erwartungswertes im Eigenzustand	10
1.12	Wellenfunktion Ortsunschärfe	10
1.13	Integral Betragsquadrat	10
1.14	Zustandsfunktion eines Systems von zwei Quantenteilchen	10
1.15	Definition stationärer Zustand	10
1.16	Zeittranslationsinvarianz	10
1.17	Erwartungswert einer Observablen	11
1.18	Definition Impulsoperator	11
1.19	Korrespondenzprinzip	11
1.20	Drittes Prinzip der Quantenmechanik	11
1.21	Parität in der Quantenmechanik	11
1.22	Eigenschaften bei Nicht-Lösen der stationären Schrödingergleichung	12
1.23	Zeitableitung Wellenfunktion stationärer Zustand	12
1.24	Wellenfunktion bei Messung	12
1.25	Bohrsches Atommodell und quantenmechanisches Atommodell	12
1.26	Bohrsches Atommodell - Widersprüche zu übergeordneten Theorien	12
1.27	Energieunschärfe stationärer Zustände	13
1.28	Diskrete Eigenwerte als Lösung der Schrödingergleichung	13
1.29	Problematische Wellenfunktion	13
2	Potentiale	14
2.1	Gebundene vs. freie Zustände	14

2.2	Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit einem Potential	14
2.3	Diskrete Energien in unendlich tiefen Potentialtopf	14
2.4	Räumlicher Verlauf Wellenfunktion	14
2.5	Schrödingergleichung für kugelsymmetrisches Potential	14
2.6	Nullpunktenergie harmonischer Oszillator	15
2.7	Entartete Zustände	15
2.8	Anschlussbedingungen Wellenfunktion	15
2.9	Tunneleffekt	15
2.10	Klassisch nicht erklärbarer Effekt Potentialstufe	16
2.11	Reflexion eines Teilchens an einer Wand	16
2.12	Nullpunktenergie in unendlich hohem Potentialtopf	16
2.13	Schrödingergleichung homogenes elektrisches Feld	17
3	Schrödingergleichung Wasserstoffatom	17
3.1	Energie Grundzustand Wasserstoffatom	17
3.2	Darwin-Term	17
3.3	Nullstellen Radialteil Wellenfunktion	17
3.4	Kugelsymmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilung Elektron	17
3.5	Radiale Lösung der Schrödingergleichung vs. Bohr	18
3.6	Eigenwertgleichungen Kugelflächenfunktionen	18
4	Drehimpuls und Spin	18
4.1	Stern-Gerlach-Experiment 1	18
4.2	Stern-Gerlach-Experiment 2	18
4.3	Stern-Gerlach-Experiment 3	19
4.4	Stern-Gerlach-Experiment 4	19
4.5	Stern-Gerlach-Experiment 5	19
4.6	Magnetische Quantenzahl bei Eielektron-Atomen	19
4.7	Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Orbitalen	19
4.8	Form des p-Orbitals	19
4.9	Landé-Faktor	20
4.10	Landé-Faktoren g_s vs g_l	20
4.11	Larmor-Frequenz	20
4.12	Quantenzahlen Wasserstoffatom	20
4.13	Winkel zwischen L und L_z	21
4.14	Bosonen und Fermionen	21
4.15	Magnetisches Moment nicht parallel zu korrespondierendem Vektor	21
4.16	Experimentelle Befunde für Elektronenspin	21
4.17	Prinzip der Elektronenspinresonanz	22
4.18	Anzahl Möglichkeiten Magnetquantenzahl	22
4.19	Quantenzahlen für $n = 3$	22
4.20	Beschreibung Drehimpuls klassisch vs. quantenmechanisch	22
4.21	Gyromagnetisches Verhältnis	22
4.22	Winkel zwischen \vec{L} und der z -Achse in der Quantenmechanik	23
4.23	Experimentelle Hinweise auf Elektronenspin	23
4.24	Definition Spin-Matrizen	23
4.25	Kommutatoreigenschaften Drehimpulsoperator	23
4.26	Vektormodell Spin-Bahn-Kopplung	23
4.27	Ursache Spin-Bahn-Kopplung	24

4.28	Effekt Spin-Bahn-Kopplung	24
5	Emission Wasserstoff	24
5.1	Feinstruktur im Emissionsspektrum von Wasserstoff	24
5.2	Typische Serien des Wasserstoffatoms	24
5.3	Relativistische Korrektur Energieniveau	25
5.4	Balmer-Absorptionslinien von Sternen	25
5.5	Kernspin Wasserstoffatom	25
5.6	Vektorielle Beziehung zwischen magnetischen Spins von Elektron und Kern . . .	25
5.7	Ursachen für Unterschied zwischen Linienspektrum von Wasserstoff und Bohrschem Atommodell	26
5.8	Energieverschiebung im Wasserstoffatom	26
5.9	Ursache Hyperfeinstrukturaufspaltung Wasserstoffatom	26
5.10	Termschema Wasserstoff ja oder nein?	27
6	Exotische Atome	27
6.1	Definition exotische Atome	27
6.2	Bindungsenergie Positronium	27
7	Zeeman-Effekt	27
7.1	Normaler Zeeman-Effekt	27
7.2	Energieaufspaltung Hyperfeinstruktur	28
7.3	Feinstruktur und Hauptquantenzahl	28
7.4	Feinstruktur und Gesamtdrehimpulsquantenzahl	28
7.5	Spin-Bahn-Kopplung und Kernladungszahl	28
7.6	Spektrallinien anomaler Zeeman-Effekt	28
7.7	Intervallregel Hyperfeinstruktur	29
7.8	Lamb-Effekt	29
7.9	Zitterbewegung Lamb-Verschiebung	29
7.10	Anomaler Zeeman-Effekt vs. Paschen-Back-Effekt	29
7.11	Energieniveaus Wasserstoffatom berechnet vs. experimentell	30
7.12	Entstehung normaler vs. anomaler Zeeman-Effekt	30
7.13	Graphischer Unterschied normaler vs. anomaler Zeeman-Effekt	30
7.14	Absenkung der Feinstruktur für $l > 0$	30
7.15	Anzahl Spektrallinien Paschen-Back-Effekt	31
7.16	Energieaufspaltung Spin-Bahn Kopplung leichte vs schwere Atome	31
7.17	Alle Korrekturen	31
7.18	Quantitatives Verhältnis ΔE_{HFS} und ΔE_{LS}	31
7.19	Ursache Verhältnis Aufspaltung durch Hyperfeinstruktur und Spin-Bahn-Kopplung	31
7.20	Linearer vs. quadratischer Stark-Effekt	32
7.21	Ursache linearer Stark-Effekt	32
7.22	Lamb-Verschiebung	32
7.23	Niveauschemata Zeeman-Effekt vs. quadratischer Stark-Effekt	32
7.24	Spinquantenzahl Hyperfeinniveaus	32
7.25	Entkopplung bei kleinerem Magnetfeld	33
7.26	Darwin-Term Orbitale	33
7.27	Entscheidung normaler oder anomaler Zeeman-Effekt	33
7.28	L und S keine gute Quantenzahlen bei LS-Kopplung	33
8	Komplexere Atome	33

8.1	Problem Schrödingergleichung bei Mehrelektronensystemen	33
8.2	Definition Pauli-Prinzip	34
8.3	Pauli-Prinzip Elektronenanzahl	34
8.4	Zwei Fermionen in abgeschlossenem System	34
8.5	Pauli-Verbot und Austauschverhalten von Bosonen und Fermionen	34
8.6	Unterschiedliche Spin-Projektionen	35
8.7	Hundsche Regeln	35
8.8	Anwendung Hundscher Regeln und Pauli-Prinzip	35
8.9	Gesamtwellenfunktion Atom	35
8.10	Eigenschaften Singulett-Zustand	36
8.11	Eigenschaften Triplett-Zustand	36
8.12	Spin-Multiplizität des Triplett-Zustandes	36
8.13	Energie im Singulett- und Triplett-Zustand 1	36
8.14	Elektronenkonfiguration Sauerstoff	36
8.15	Drehimpulse von Edelgasen	37
8.16	Anzahl Elektronen in Orbital 1	37
8.17	Anzahl Elektronen in Orbital 2	37
8.18	Anzahl Elektronen in beliebiger Schale	37
8.19	Elektronenzustände Eielektronensystem	38
8.20	Nicht-erlaubte LS-Kopplungen	38
8.21	Unterschied zwischen $\vec{L} - \vec{S}$ -Kopplung und $\vec{j} - \vec{j}$ -Kopplung	38
8.22	Spektrallinienaufspaltung unbekanntes Atom	38
8.23	Unterschiedliche Bezeichnungen der Quantenzahlen	38
8.24	Elektron-Elektron-Wechselwirkung innerhalb eines Atoms	39
8.25	Magnetische Quantenzahl bei Mehrelektronen-Atomen	39
8.26	Hartree-Verfahren 1	39
8.27	Para- vs. Ortho-Helium	39
8.28	Niedrigster Energiezustand Ortho-Helium	40
8.29	Gesamtenergie eines Mehrelektronenatoms	40
8.30	Spektroskopische Notation Atome im Grundzustand	40
8.31	Ionisierungsenergie im PSE 1	40
8.32	Atomvolumina und Ionisierungsenergien von Alkali- und Edelgasatomen	41
8.33	Aufhebung der l -Entartung Alkali-Atome	41
8.34	Näherungen beim Helium-Atom	41
8.35	Singulett- und Triplett-Zustände beim Helium-Atom	41
8.36	Atomgrößen H-Atom vs. He^+ -Ion	42
8.37	Autoionisation	42
8.38	Zwei unterschiedliche Helium-Sorten?	42
8.39	Verteilung der Elektronen eines Atoms	42
8.40	Quantenzahlen spektroskopische Notation	42
8.41	Rydberg-Atom	43
8.42	Termschema Natrium vs Helium	43
8.43	Ionisierungsenergie Natrium vs. Chlor	43
8.44	Spektralanalyse schwerer vs leichter Atome	43
8.45	Auswahlregeln optische Dipolübergänge	44
8.46	Chemisches Verhalten eines Elements	44
8.47	Definition effektives Kernpotential	44

9 Übergänge 44

9.1	Definition Halbwertsbreite	44
9.2	Termwert eines Energieniveaus	44
9.3	Verbotener Übergang 1	45
9.4	Verbotener Übergang 2	45
9.5	Polarisation von Licht bei Übergang 1	45
9.6	Leuchtelektronen	45
9.7	Dopplerverbreiterung von Spektrallinien	45
9.8	Experimentelle Verringerung Dopplerbreite	46
9.9	Ursache unterschiedliche Intensitäten von Spektrallinien	46
9.10	Auswahlregeln 1	46
9.11	Auswahlregeln 2	47
9.12	Möglichkeiten für Übergänge zwischen Energieniveaus	47
9.13	Monochromatische Spektrallinien bei atomaren Übergängen	47
9.14	Spektrallinienbreite	47
9.15	Möglichkeiten der Atomanregung	47
9.16	Ursache spontane Emission	48
9.17	Induzierte Emission	48
9.18	Energieeinheiten Spektroskopie	48
9.19	Emissionslinien leuchtende Essiggurke	49
9.20	Atomspektrum und Bohrsches Atommodell	49
9.21	Parität Wellenfunktion Strahlungsübergang	49
9.22	Spektrallinienbreite im sichtbaren Bereich	50
9.23	Tesa-Streifen im Vakuum	50
9.24	Druckverbreiterung	50
9.25	Dopplerfreie Sättigungsspektroskopie	50
9.26	Arten der Verbreiterung	50
9.27	Spontaner Übergang in tieferen Energiezustand	51
9.28	Ursache für natürliche Linienbreite von Spektrallinien	51
9.29	Auswahlregel elektrische Dipolübergänge - Parität	51
9.30	Verkürzung von natürlichen Lebensdauern	51
9.31	Bestimmung von Übergangswahrscheinlichkeiten und Matrixelementen	51
9.32	Verstärkung von induzierter Emission	52
9.33	Spektroskopie in Astrophysik	52
9.34	Metastabile Zustände	52
9.35	Absorptionskanten	52
9.36	K_{α} -Übergang	52
9.37	Stoßverbreiterung	53
9.38	Methode zur Auflösung von Spektrallinien	53
9.39	Übergänge eines Mehrelektronensystems 1	53
9.40	Übergänge eines Mehrelektronensystem 2	53
9.41	Natrium-Doppellinie	54
10	Röntgenkanten	54
10.1	Erster Physik-Nobelpreis	54
10.2	Veränderung Röntgenspektrum bei höherer Beschleunigungsspannung	54
10.3	Röntgenröhren	54
10.4	Beschreibung Spektrum einer Röntgenröhre	54
10.5	Absorption von Röntgenstrahlung	55
10.6	Streuung Röntgenstrahlung vs. sichtbares Licht	55

10.7	Entstehung von Röntgenstrahlung	55
10.8	Auger-Effekt	55
10.9	Konkurrierender Effekt Röntgenstrahlung	56
10.10	Anwendungen von Röntgenstrahlen	56
10.11	Photonenenergie charakteristische Röntgenstrahlung	57
10.12	Absorption von Röntgenstrahlung in Materie	57
11	Moleküle	57
11.1	Bindungen zwischen Molekülen	57
11.2	Freiheitsgrade dreiatomiges gewinkeltes Molekül	57
11.3	Größenverhältnis Rotations- und Vibrationsfrequenz	58
11.4	Kraft zwischen benachbarten Edelgasatomen	58
11.5	Rotationsenergie Zentrifugalaufweitung	58
11.6	Bindung H_2 -Molekül	58
11.7	Adiabatische Näherung beim H_2^+ -Molekül	59
11.8	Dynamik zweiatomiger Moleküle	59
11.9	Molekülorbital- vs. Heitler-London-Näherung	59
11.10	Heitler-London- vs. LCAO-Näherung	59
11.11	Kovalente vs. ionische Molekülbindung	59
11.12	Ionische Bindung 2	60
11.13	Kovalente Bindung	60
11.14	Ursache Van-der-Waals-Wechselwirkung	60
11.15	LCAO-Näherung 1	60
11.16	Potentialkurve (meta-)stabiler Molekülzustand	60
11.17	Gesamtwellenfunktion von Molekülen	60
11.18	Ansatz für Schwingung zweiatomiger Moleküle	61
11.19	Beschreibung molekularer Wasserstoff	61
11.20	Unterschied Fluoreszenz und Phosphoreszenz	61
11.21	Brownsche Molekularbewegung	61
11.22	Born-Oppenheimer-Näherung	61
11.23	Excimere	62
11.24	Excimere 2	62
11.25	Valenzbindungsnaheerung	62
11.26	Stickstoff - Anregung von Translationen, Rotationen und Vibrationen	62
11.27	Rotierendes Kreuzgitter	62
12	Quantenstatistik	63
12.1	Wahrscheinlichkeitsverteilung Fermionen und Bosonen	63
12.2	Grundannahme der statistischen Thermodynamik	63
12.3	Mittlere Energie im thermischen Gleichgewicht	63
12.4	Besetzungszahl angeregter Zustand	63
12.5	Einstein-Koeffizienten	64
12.6	Besetzung bei Emission im sichtbaren Bereich	64
12.7	Wahrscheinlichkeit Quantenzustand	64
12.8	Fermi-Energie	64
12.9	Quantenkonzentration	64
13	Thermodynamik	65
13.1	Offenes System (ähnlich zu ??)	65

13.2 Geschlossenen System (ähnlich zu ??)	65
13.3 Abgeschlossenes System (ähnlich zu ??)	65
13.4 Annahmen ideales Gas	65
13.5 Innere Energie eines idealen Gases	65
13.6 Makroskopisch messbare Größen eines Gases	66
13.7 Geschwindigkeitsverteilung Gasteilchen	66
13.8 Mittlere Energie von Gasteilchen	66
13.9 Erster Hauptsatz der Thermodynamik	66
13.10 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	66
13.11 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik - Clausiussche Formulierung	67
13.12 Dritter Hauptsatz der Thermodynamik	67
13.13 Nullter Hauptsatz der Thermodynamik	67
13.14 Chemisches Potential	67
13.15 Mechanismen des Wärmeaustausches - Genauer	67
13.16 Gesetz von Boyle-Mariotte	68
13.17 Optische Temperaturmessung	68
13.18 Kochendes Wasser	68
13.19 Gibbsche Phasenregel	68
13.20 Wärmezufuhr bei gleichbleibender innerer Energie	69
13.21 Materialgrößen bei Beschreibung realer Gase	69
13.22 Definition spezifische Wärmekapazität	69
13.23 Thermische Zustandsgleichung idealer Gase	69
13.24 Adiabatische Zustandsänderung	69
13.25 Möglichkeiten der Temperaturmessverfahren	70
13.26 Treibhauseffekt	70
13.27 Funktionsweise Bimetall-Thermometer	70
13.28 Nützliche Effekte zur Temperaturmessung	70
13.29 Definition Entropie	71

1 Grundlagen

1.1 Bohrsche Postulate

Nennen Sie eines der drei Bohrschen Postulate.

Lösung

Drei Möglichkeiten:

- In einem Atom bewegt sich ein Elektron nach den Gesetzen der klassischen Mechanik auf diskreten Kreisbahnen mit den Energien E_n
- Die Bewegung des Elektrons erfolgt strahlungslos. Beim Übergang des Elektrons von einem stationären Zustand mit Energie E_a in einen stationären Zustand niedrigerer Energie E_e wird ein Photon der Frequenz $\nu = \frac{E_a - E_e}{h}$ emittiert.
- Der Drehimpuls eines Elektrons in einem stationären Zustand nimmt nur diskrete Werte $mvr = \frac{nh}{2\pi}$ an, wobei n eine natürliche Zahl ist.

1.2 Bohrsches Atommodell vs. klassische Elektrodynamik

Inwieweit steht das Bohrsche Atommodell im Konflikt mit der klassischen Elektrodynamik?

Lösung

Nach Bohr bewegen sich die Elektronen im Atom auf festen Bahnen. Nach der klassischen Elektrodynamik müssten die Elektronen aufgrund der Beschleunigung Strahlung abgeben und ihren Radius damit ändern, was ein Konflikt mit der Realität darstellt.

1.3 Elektronengeschwindigkeit auf der ersten Bohrschen Bahn

Wie hoch ist die klassische Elektronengeschwindigkeit auf der ersten Bohrschen Bahn in Einheiten der Lichtgeschwindigkeit?

Lösung

Sie ist gleich der Sommerfeldschen Feinstrukturkonstanten $\alpha = 1/137$.

1.4 Dispersionsrelation für Materiewellen 1

Zu welcher Gleichung ist die Dispersionsrelation für Materiewellen äquivalent?

Lösung

Die Dispersionsrelation für Materiewellen ist äquivalent zur Schrödingergleichung.

1.5 Dispersionsrelation für Materiewellen 2

Aus welchen Beziehungen erhält man die Dispersionsrelation für Materiewellen?

Lösung

Aus der Energie-Impuls-Beziehung zusammen mit den De-Broglie-Beziehungen erhält man die Dispersionsrelation für Materiewellen.

1.6 Dispersionsrelation für Materiewellen 3

Wie lautet die Dispersionsrelation für Materiewellen?

Lösung

$$\omega = \frac{h}{2\pi} \frac{k^2}{2m} \quad (1)$$

1.7 Lineare Operatoren in der Quantenmechanik

Warum sind die linearen Operatoren in der Quantenmechanik hermitesch, d.h. es gilt $A^\dagger = A$?

Lösung

Physikalische Messgrößen sind reellwertig, daher muss gefordert werden, dass alle Eigenwerte eines Operators reell sind. Das ist genau dann erfüllt, wenn der Operator hermitesch ist.

1.8 Definition Hamilton-Operator

Wie ist der Hamilton-Operator im Allgemeinen definiert?

Lösung

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{x}}) \quad (2)$$

1.9 Verschwindender Kommutator zweier Operatoren

Was bedeutet es, wenn der Kommutator zweier Operatoren Null ist?

Lösung

Wenn der Kommutator zweier Operatoren Null ist, haben sie die gleichen Eigenfunktionen. Dann sind sie gleichzeitig messbar.

1.10 Mittlere quadratische Schwankung Messwert

Was kann man über die mittlere quadratische Schwankung eines Messwertes sagen, wenn die Wellenfunktion eine Eigenfunktion zum zugehörigen Operator ist?

Lösung

In einem solchen Fall ist die mittlere quadratische Schwankung Null. Die Größe ist zeitlich konstant und man misst abgesehen vom Messfehler immer den gleichen Wert.

1.11 Varianz des Energie-Erwartungswertes im Eigenzustand

Wie groß ist die Varianz des Erwartungswertes der Energie im Eigenzustand?

Lösung

Null.

1.12 Wellenfunktion Ortsunschärfe

Warum läuft eine gaussförmige Wellenfunktion eines Teilchens mit einer geringeren Ortsunschärfe schneller auseinander als die eines Teilchens mit höherer Ortsunschärfe?

Lösung

Nach der Heisenbergschen Unschärferelation folgt aus einer geringeren Ortsunschärfe eine höhere Impulsunschärfe. Da eine höhere Impulsunschärfe auch eine höhere Unschärfe der Teilchengeschwindigkeit bedeutet, wächst die Ortsunschärfe schneller mit der Zeit an.

1.13 Integral Betragsquadrat

Sei ψ die Wellenfunktion eines Elektrons. Welchen Wert hat das Integral des Betragsquadrats von ψ über den ganzen Raum, und wieso?

Lösung

Das Integral hat den Wert 1, damit das Elektron mit hundertprozentiger Wahrscheinlichkeit aufgefunden werden kann.

1.14 Zustandsfunktion eines Systems von zwei Quantenteilchen

Wie vereinfacht sich die Zustandsfunktion $\psi(r_1, r_2)$, die ein System von zwei Quantenteilchen beschreibt, wenn diese nicht wechselwirken?

Lösung

$$\psi(r_1, r_2) = \psi(r_1) \cdot \psi(r_2) \quad (3)$$

1.15 Definition stationärer Zustand

Was ist ein stationärer Zustand?

Lösung

Ein Zustand, dessen Erwartungswert sich nicht mit der Zeit ändert.

1.16 Zeittranslationsinvarianz

Wann ist ein System zeittranslationsinvariant?

Lösung

Wenn der Hamilton-Operator nicht explizit von der Zeit abhängt, dann ist kein Zeitpunkt gegenüber einem anderen ausgezeichnet. Das physikalische System verhält sich dann zu jedem Zeitpunkt gleichartig; es ist zeittranslationsinvariant.

1.17 Erwartungswert einer Observablen

Wie berechnet man ganz allgemein den Erwartungswert einer Observablen A ?

Lösung

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \cdot \hat{A} \cdot \psi dV \quad (4)$$

1.18 Definition Impulsoperator

Wie ist der Impulsoperator allgemein definiert?

Lösung

$$-i\hbar \cdot \nabla$$

1.19 Korrespondenzprinzip

Was besagt das Korrespondenzprinzip?

Lösung

Die quantenmechanischen Aussagen müssen im Grenzfall großer Quantenzahlen mit der klassischen Theorie übereinstimmen.

1.20 Drittes Prinzip der Quantenmechanik

Was ist das 3. Prinzip der Quantenmechanik?

Lösung

Eine Observable befindet sich nach einer Messung immer in einem Eigenzustand des jeweiligen Operators, nämlich in dem zum gemessenen Wert zugehörigen Eigenzustand.

1.21 Parität in der Quantenmechanik

Was versteht man unter Parität in der Quantenmechanik?

Lösung

Die Parität einer Wellenfunktion charakterisiert ihr Verhalten bei Spiegelung am Koordinatenursprung.

1.22 Eigenschaften bei Nicht-Lösen der stationären Schrödingergleichung

Nennen Sie zwei Eigenschaften, die physikalische Zustände haben, wenn sie die stationäre Schrödingergleichung nicht lösen.

Lösung

- zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte
- mehrere zulässige Energiemesswerte
- Energieunschärfe

1.23 Zeitableitung Wellenfunktion stationärer Zustand

Warum verschwindet für ein Teilchen in einem stationären Zustand die Zeitableitung der Wellenfunktion nicht?

Lösung

Nur die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung, also das Betragsquadrat der Wellenfunktion, ist konstant, die Wellenfunktion selbst bleibt zeitabhängig.

1.24 Wellenfunktion bei Messung

Was passiert mit der Wellenfunktion, wenn eine Messung durchgeführt wird?

Lösung

Die Wellenfunktion kollabiert. Das bedeutet, dass durch die Messung die Superposition möglicher Zustände zu einem Zustand zusammenfällt, welcher gemessen wird.

1.25 Bohrsches Atommodell und quantenmechanisches Atommodell

Begründen Sie ob das Bohrsche Atommodell und das quantenmechanische Atommodell mit der Heisenbergschen Unschärferelation in Einklang zu bringen sind.

Lösung

Im Bohrschen Atommodell bewegen sich die Elektronen in definierten Kreisbahnen um den Kern. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation ist dies nicht zulässig.

Im quantenmechanischen Atommodell bewegen sich die Elektronen in Orbitalen. Sie haben keine definierten Bahnen, sondern Räume, in denen sie sich mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit aufhalten. Dies ist nach der Heisenbergschen Unschärferelation erlaubt.

1.26 Bohrsches Atommodell - Widersprüche zu übergeordneten Theorien

Nennen Sie zwei Widersprüche des Bohrschen Atommodells zu übergeordneten Theorien.

Lösung

- klassische E-Dynamik: beschleunigte Ladungen wie im Bohrschen Atommodell strahlen Energie ab und müssten letztlich in den Kern stürzen. Widerspruch zur Existenz stabiler Atome.
- Quantenmechanik: Definierte Kreisbahnen widersprechen der Unschärferelation.
- Drehimpuls bei Bohr um \hbar falsch. Elektron im $n=1$ Zustand hat bei Bohr Drehimpuls $1\hbar$, in der Realität $0\hbar$.

1.27 Energieunschärfe stationärer Zustände

Zeigen Sie, dass die Energieunschärfe stationärer Zustände ($H\psi = E\psi$) gleich 0 ist.

Lösung

$$\begin{aligned}\langle H \rangle^2 &= EW(H)^2 = \left(\int dx \psi^* H \psi \right)^2 = \left(\int dx \psi^* E \psi \right)^2 = E^2 \\ \langle H^2 \rangle &= EW(H^2) = \int dx \psi^* H^2 \psi = \int dx \psi^* E \psi = E^2 \\ \Rightarrow \Delta H &= 0\end{aligned}$$

1.28 Diskrete Eigenwerte als Lösung der Schrödingergleichung

Wann bekommt man diskrete Eigenwerte als Lösung der Schrödingergleichung? Nennen Sie ein Beispiel für ein System mit diskreten Eigenwerten.

Lösung

Die Quantisierung der Energie folgt aus der Bedingung, dass die Wellenfunktion $\phi(x)$ normierbar und überall beschränkt ist. Zustände kommt dies, wenn zwei Umkehrpunkte existieren (vgl. Potentialtopf). Dann müssen die Wellenfunktionen stetig an die exponentiell abklingende Funktion anschließen.

Beispiele: Potentialtöpfe, harmonischer Oszillator, Wasserstoff-Atom

1.29 Problematische Wellenfunktion

Ein freies Teilchen kann nach der Schrödingergleichung durch eine Wellenfunktion der Form $A \exp(i(kx - \omega t))$ beschrieben werden. Wieso ist diese Lösung problematisch? Wie lässt sich diese Problematik beheben?

Lösung

Die Wellenfunktion lässt sich nicht normieren und ist räumlich unendlich ausgedehnt. Damit kann kein lokalisiertes Teilchen beschrieben werden. Durch die Konstruktion von Wellenpaketen, d.h. (unendliche) Linearkombinationen von Wellen der Form $\exp(i(kx - \omega t))$ kann das Problem behoben werden.

2 Potentiale

2.1 Gebundene vs. freie Zustände

Wie unterscheiden sich Aufenthaltswahrscheinlichkeit und Energiewerte bei gebundenen und freien Zuständen?

Lösung

- Gebunden: Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist beschränkt, Energiewerte sind gequantelt.
- Frei: Elektron kann sich im ganzen Raum aufhalten, Energiewerte sind kontinuierlich.

2.2 Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit einem Potential

Schreiben Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit einem Potential auf.

Lösung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r, t)$$

2.3 Diskrete Energien in unendlich tiefen Potentialtopf

Wieso haben Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf nur diskrete Energien?

Lösung

Weil die Wellenfunktion aufgrund der Randbedingungen eine stehende Welle ist. Daher treten nur diskrete Schwingungsfrequenzen und damit auch nur diskrete Energien auf.

2.4 Räumlicher Verlauf Wellenfunktion

Welche Bedingungen gelten für die Wellenfunktion im räumlichen Verlauf?

Lösung

Die Wellenfunktion muss immer stetig sein. Die Ableitung der Wellenfunktion ist bei einem endlichen Potential stetig. Beim Übergang zu einem unendlichen Potential weist die Ableitung der Wellenfunktion einen Sprung auf.

2.5 Schrödingergleichung für kugelsymmetrisches Potential

Sind alle Lösungen der Schrödingergleichung mit einem kugelsymmetrischen Potential auch kugelsymmetrisch?

Lösung

Nein. Die Lösungen sind proportional zu den Kugelflächenfunktionen, welche in den meisten Fällen keine kugelsymmetrische Aufenthaltswahrscheinlichkeit liefern.

2.6 Nullpunktenergie harmonischer Oszillator

Weshalb ist die Nullpunktenergie des harmonischen Oszillators nicht verschwindend?

Lösung

Die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (5)$$

Die niedrigste Energie beträgt für $n = 0$ also

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (6)$$

und ist somit ungleich Null.

2.7 Entartete Zustände

Welche Zustände werden als entartet bezeichnet?

Lösung

Wenn zwei Zustände unterschiedliche Wellenfunktionen, aber gleiche Energien besitzen, werden sie als entartet bezeichnet.

Alternativ:

Man spricht von Entartung, wenn zu einer Observablen zwei oder mehr Zustände denselben Eigenwert besitzen.

2.8 Anschlussbedingungen Wellenfunktion

Welche Anschlussbedingungen gelten für eine Wellenfunktion an der Grenze zwischen zwei Gebieten?

Lösung

Die Ableitung der Wellenfunktion aus Gebiet 1 muss an der Übergangsstelle gleich der Ableitung der Wellenfunktion aus Gebiet 2 sein; gleichzeitig müssen die Funktionen selbst den gleichen Wert annehmen, um Stetigkeit zu bewahren.

2.9 Tunneleffekt

Welchen Phänomen bezeichnet der Tunneleffekt? Nennen Sie zwei Beispiele, bei denen dieser Effekt auftritt.

Lösung

Der Tunneleffekt beschreibt die Eigenschaft von Quantenteilchen, eine Potentialbarriere von endlicher Höhe auch dann überwinden zu können, wenn ihre Energie geringer als die Höhe der Barriere ist.

Beispiele:

- α -Zerfall
- Fusionprozesse in der Sonne
- Rastertunnelmikroskop
- Ein-Elektron-Tunneln zwischen zwei Supraleitern
- Chemische Reaktionen
- Oxidschicht auf Steckern in der Steckdose

2.10 Klassisch nicht erklärbarer Effekt Potentialstufe

Welcher mit dem klassischen Teilchenmodell nicht erklärbare Effekt tritt bei Quantenteilchen mit kinetischer Energie E auf, die aus einem potentialfreien Gebiet auf eine Potentialstufe der Höhe $V > E$ treffen?

Lösung

Bevor sie wieder umkehren, können die Teilchen mit einer von 0 verschiedenen Wahrscheinlichkeiten in den Potentialbereich $V > E$ eindringen, obwohl ihre Energie $E < V$ dazu im klassischen Teilchenmodell nicht ausreicht.

2.11 Reflexion eines Teilchens an einer Wand

Was ändert sich bei der Reflexion eines Teilchens an einer Wand beim Übergang von der klassischen Physik zur Quantenmechanik?

Lösung

Das quantenmechanische Teilchen wird zwar wie das klassische reflektiert, hat aber auch in der Wand eine exponentiell abklingende Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

2.12 Nullpunktsenergie in unendlich hohem Potentialtopf

Wie lautet die Nullpunktsenergie eines Teilchens im unendlich hohen Potentialtopf und wodurch wird sie bedingt?

Lösung

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Die Nullpunktsenergie wird durch die Ortsbeschränkung $\Delta x = a$ für das Teilchen bedingt. Je größer a (Breite des Potentialtopfs), desto kleiner die Energie.

2.13 Schrödingergleichung homogenes elektrisches Feld

Man betrachte eine Elektronenröhre, in der Elektronen in einem homogenen elektrischen Feld der Stärke E_0 von einer Kathode zu einer Anode beschleunigt werden. Wie lautet die stationäre Schrödingergleichung für die Elektronen und mithilfe welcher Funktionen wird sie gelöst?

Lösung

Die Schrödingergleichung lautet:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + (E - x \cdot E_0) \psi(x) = 0$$

Sie wird mithilfe der Airy-Funktionen gelöst.

3 Schrödingergleichung Wasserstoffatom

3.1 Energie Grundzustand Wasserstoffatom

Was ist die Energie des Elektrons im Grundzustand des H-Atoms? Wie lässt sich daraus auf die Ionisierungsenergie dieses Elektrons schließen?

Lösung

Die Bindungsenergie beträgt 13,6 eV. Um das Elektron zu ionisieren, muss eben diese überwunden werden, die Ionisierungsenergie ist also $E_i = 13,6$ eV.

3.2 Darwin-Term

Was wird durch den Darwin-Term zusätzlich berücksichtigt?

Lösung

Die Zitterbewegung des Elektrons und der damit nicht mehr fest lokalisierte Ort des Elektrons im elektrischen Feld des Kerns.

3.3 Nullstellen Radialteil Wellenfunktion

Wie hängen die Nullstellen des Radialteils der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms von den Quantenzahlen n und l zusammen?

Lösung

Die Anzahl der Nullstellen beträgt

$$z = n - l - 1 \tag{7}$$

3.4 Kugelsymmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilung Elektron

Für welche Drehimpulsquantenzahl l bzw. welchen Zustand eines Einelektronensystems (wie z.B. des Wasserstoffes) ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Elektrons kugelsymmetrisch?

Lösung

Für $l = 0$ bzw. alle s -Zustände.

3.5 Radiale Lösung der Schrödingergleichung vs. Bohr

Inwieweit stehen die radiale Lösung der Schrödingergleichung und das Modell von Bohr für das Einelektronensystem im Konflikt?

Lösung

Die radiale Lösung der Schrödingergleichung für die Nebenquantenzahl l besagt, dass sich ein Elektron auch auf Bahnen durch den Kern bewegen kann. Dies ist im Bohrschen Atommodell verboten.

3.6 Eigenwertgleichungen Kugelflächenfunktionen

Wie lauten die beiden Eigenwertgleichungen, die die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} erfüllen?

Lösung

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 Y_{l,m} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m} \\ \hat{L}_z Y_{l,m} &= \hbar m Y_{l,m}\end{aligned}$$

4 Drehimpuls und Spin

4.1 Stern-Gerlach-Experiment 1

Wieso kann man das Stern-Gerlach-Experiment nicht mit der Quantenzahl l beschreiben?

Lösung

Man kann es nicht mit l beschreiben, das bei $l = 1$ beispielsweise schon drei Linien entstehen müssten,

$$m_l = 2l + 1 \tag{8}$$

und nicht die zwei, die man im Experiment erkennt.

4.2 Stern-Gerlach-Experiment 2

Betrachten Sie drei ideale Stern-Gerlach-Apparate hintereinander. Der erste sei in z -, der zweite in x - und der letzte wieder in z -Richtung ausgerichtet, wobei jeweils die \pm -Komponenten der Spins gekoppelt sind. Wie groß sind die Wahrscheinlichkeiten, S_z^\pm hinten zu messen.

Lösung

Jeweils 50%.

4.3 Stern-Gerlach-Experiment 3

Warum verwendet man für das Stern-Gerlach-Experiment Silberatome und keine Elektronen?

Lösung

Im Fall von Elektronen wäre die Lorentz-Kraft deutlich größer als die Kraft durch das magnetische Moment. Somit wäre das Ergebnis nicht oder nur schwer reproduzierbar.

4.4 Stern-Gerlach-Experiment 4

Warum benötigt man beim Stern-Gerlach-Experiment ein inhomogenes Magnetfeld?

Lösung

Man benötigt ein inhomogenes Magnetfeld, da es sonst keinen Gradienten im Feld gibt und somit auch keine Kraft \vec{F} gibt, die auf Teilchen, Atome wirkt:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V = \vec{\nabla} \left(\vec{\mu}_l \cdot \vec{B} \right) \quad (9)$$

4.5 Stern-Gerlach-Experiment 5

Beschreiben Sie kurz das Stern-Gerlach-Experiment.

Lösung

Beim Stern-Gerlach-Versuch wird ein Strahl aus Silberatomen durch ein inhomogenes Magnetfeld in zwei Komponenten aufgespalten. Diese Aufspaltung entspricht den zwei Einstellungsmöglichkeiten des Elektronenspins bezüglich der durch das B-Feld festgelegten Quantisierungsachse.

4.6 Magnetische Quantenzahl bei Eielektron-Atomen

Warum ist die magnetische Quantenzahl m bei Eielektron-Atomen nur mit einem angelegten äußeren Feld relevant?

Lösung

Ohne äußeres Feld ist die Ausrichtung des Atoms für die Energie des Atoms nicht relevant. Ohne äußeres Feld gibt es keine ausgezeichnete Achse.

4.7 Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Orbitalen

Welches Orbital (s, p, d, \dots) hat die höchste radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei $r = 0$?

Lösung

Ein s -Orbital.

4.8 Form des p-Orbitals

Welche Form weist ein p-Orbital auf?

Lösung

Das p-Orbital liegt hantelförmig vor. Es gibt drei Ausrichtungen: jeweils in x -, y - oder z -Richtung.

4.9 Landé-Faktor

Was besagt der Landé-Faktor?

Lösung

Der Faktor bestimmt, wie effizient der Drehimpuls (bei g_l) bzw. der Spin (bei g_s) ein magnetisches Moment erzeugen kann, bzw. sich in ein magnetisches Moment übersetzt.

4.10 Landé-Faktoren g_s vs g_l

Was ergibt sich aus der Tatsache, dass der Landé-Faktor g_s von g_l abweicht?

Lösung

Der Landé-Faktor $g_s \approx 2$ des Elektrons und der g_l -Faktor $g_l \approx 1$ spielen eine wichtige Rolle bei der Bestimmung des Gesamtdrehimpulses \vec{j} sowie des magnetischen Moments $\vec{\mu}$. Da nun aber $g_l \neq g_s$ gilt, sind die Vektoren \vec{j} und $\vec{\mu}$ im Allgemeinen nicht parallel zueinander. Dies geht auch aus den beiden Gleichungen hervor:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (10)$$

und

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = \frac{q}{2m} (g_l \vec{l} + g_s \vec{s}) \quad (11)$$

4.11 Larmor-Frequenz

Was versteht man unter der Larmor-Frequenz?

Lösung

Darunter versteht man die Frequenz, mit der das magnetische Moment bei einem externen Magnetfeld um die z -Achse präzediert.

4.12 Quantenzahlen Wasserstoffatom

Erläutern Sie anschaulich die Bedeutung zweier der vier Quantenzahlen des Wasserstoffatoms (vernachlässigen Sie Fein- und Hyperfeinstruktur)

Lösung

Ohne Fein- und Hyperfeinstruktur wird das Wasserstoffatom eindeutig beschrieben durch die vier Quantenzahlen n , l , m_l , m_s .

- Die **Hauptquantenzahl** n gibt das Energieniveau des Wasserstoffatoms (gemäß des Bohrschen Atommodells) an.
- Die **Drehimpulsquantenzahl** l charakterisiert die Größe des Bahndrehimpulses.

- Die **Magnetquantenzahl** m_l charakterisiert den Anteil des Bahndrehimpulses entlang der z-Achse.
- Die **Spinquantenzahl** m_s gibt die Orientierung des Spins gegenüber der z-Achse an: Up oder Down.

4.13 Winkel zwischen L und L_z

In welchem Winkel stehen L und L_z zueinander?

Lösung

Der Winkel zwischen L und L_z beträgt

$$\cos \alpha = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \quad (12)$$

4.14 Bosonen und Fermionen

Geben Sie ein Beispiel für ein Boson und für ein Fermion an. Treffen Sie außerdem eine Aussage darüber, ob der Spin jeweils ganz- oder halbzahlig ist.

Lösung

- **Boson:** z.B. Photon, Higgs-Boson; Spin ganzzahlig
- **Fermion:** z.B. Elektron, Myon; Spin halbzahlig

4.15 Magnetisches Moment nicht parallel zu korrespondierendem Vektor

Welches magnetische Moment ist nicht parallel zu seinem korrespondierenden Vektor und warum?

Lösung

Bei der Bildung des Gesamtdrehimpulses $j = l + s$ haben die Momente des Drehimpulses bzw. Spins unterschiedliche Beträge als ihre jeweiligen Vektoren. Deshalb ist das gesamte magnetische Moment μ_j nicht mehr parallel zum Vektor j .

4.16 Experimentelle Befunde für Elektronenspin

Nennen Sie zwei experimentelle Befunde, die auf die Existenz des Elektronenspins hindeuten.

Lösung

Möglichkeiten:

- Stern-Gerlach-Experiment
- Feinstruktur von Atomspektren
- Anomaler Zeeman-Effekt

4.17 Prinzip der Elektronenspinresonanz

Beschreiben Sie kurz das Prinzip der Elektronenspinresonanz.

Lösung

Die Elektronenspinresonanz dient zur Messung der resonanten Mikrowellenabsorption einer Probe mit permanenten magnetischen Moment (ungepaarte Elektronen) in einem äußeren Magnetfeld. Der Absorptionsmechanismus entspricht dem Umlappen des Elektronenspins von einer Einstellung im Magnetfeld in eine andere.

4.18 Anzahl Möglichkeiten Magnetquantenzahl

Wieviele Möglichkeiten gibt es für die Magnetquantenzahl m in Abhängigkeit der anderen Quantenzahlen?

Lösung

Es gibt $2l + 1$ Möglichkeiten für m , also von $-l$ bis $+l$ inklusive $m = 0$.

4.19 Quantenzahlen für $n = 3$

Welche Werte sind bei der Hauptquantenzahl $n = 3$ für die Quantenzahlen l und m_l jeweils möglich?

Lösung

$l = 0, 1, 2$ und $m = -2, 1, 0, 1, 2$

4.20 Beschreibung Drehimpuls klassisch vs. quantenmechanisch

Warum wird der Drehimpuls eines quantenmechanischen Teilchens von zwei Quantenzahlen beschrieben, während der klassische Drehimpuls drei Komponenten zur vollständigen Beschreibung benötigt?

Lösung

Es lassen sich nur der quadrierte Drehimpuls und eine Komponente gleichzeitig messen. Die drei Komponenten kommutieren untereinander nicht.

4.21 Gyromagnetisches Verhältnis

Was beschreibt das gyromagnetische Verhältnis?

Lösung

Das gyromagnetische Verhältnis beschreibt einen Proportionalitätsfaktor zwischen Drehimpuls beziehungsweise Spin und dem dazugehörigen magnetischen Moment eines Teilchens.

4.22 Winkel zwischen \vec{L} und der z -Achse in der Quantenmechanik

Warum kann der Winkel zwischen \vec{L} und der z -Achse quantenmechanisch nie 0° werden?

Lösung

Dieser Fall kann nur klassisch erreicht werden, weil sonst der Drehimpuls in x - und y -Richtung gleichzeitig beliebig genau bestimmbar wären.

4.23 Experimentelle Hinweise auf Elektronenspin

Nennen Sie zwei Experimente, die auf einen (intrinsischen) Elektronenspin deuteten

Lösung

Ergebnisse des Stern-Gerlach-Experiments, (Wasserstoff-)Feinstruktur, anomaler Zeeman-Effekt

4.24 Definition Spin-Matrizen

Geben Sie die drei Spin-Matrizen in ihrer Matrixschreibweise an. Was ergibt sich daraus für s^2 ?

Lösung

Die Pauli-Matrizen sind gegeben als:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Für \hat{s}^2 ergibt sich also folgende Relation:

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4.25 Kommutatoreigenschaften Drehimpulsoperator

Sei \hat{L} der Drehimpulsoperator. Wie lauten die Kommutatoreigenschaften bezüglich \hat{L}^2 und \hat{L}_i sowie \hat{L}_i und \hat{L}_j ($i, j = y, x, z$). Was bedeutet dies physikalisch?

Lösung

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \forall i = (x, y, z) \quad \text{bzw.} \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \cdot \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k.$$

Falls zwei Operatoren kommutieren, hängt die Messung der zugrundeliegenden physikalischen Observablen nicht von der Reihenfolge ab; sie beeinflussen sich nicht gegenseitig. Falls man allerdings an zwei (verschiedenen) Komponenten von L^2 interessiert ist, präpariert jede Messung das System dermaßen, dass das Ergebnis von der Reihenfolge abhängt.

4.26 Vektormodell Spin-Bahn-Kopplung

Erläutern Sie qualitativ, wie es im sogenannten Vektormodell zur Veränderung der Energieniveaus durch die Spin-Bahn-Kopplung kommt.

Lösung

Im Ruhesystem des Elektrons ergibt die Bewegung des Elektrons um den Kern eine Bewegung des Kerns um das Elektron. Diese Bewegung einer Ladung ruft ein Magnetfeld hervor. Durch die Ausrichtung des Spins des Elektrons bezüglich dieses Magnetfeldes erfährt das Elektron eine Zusatzenergie.

4.27 Ursache Spin-Bahn-Kopplung

Wie kommt es zur Spin-Bahn-Kopplung?

Lösung

Das Dipolmoment des Elektrons befindet sich im Feld des Kerns (das Feld ist in 1. Ordnung ein rein magnetisches (nicht relativistisch) Feld im System des Elektrons nach Biot-Savart). Daher ändert sich die potentielle Energie des Dipols mit $-\mu \cdot B$ und da μ mit dem Spin s (nicht mit l , da im System des Elektrons $l = 0$ ist) und B über l ausgedrückt werden kann, folgt, dass E_{pot} von s und l abhängt, was man als Spin-Bahn-Kopplung bezeichnet.

4.28 Effekt Spin-Bahn-Kopplung

Wozu führt die Spin-Bahn-Kopplung eines Elektrons mit dem Atomkern?

Lösung

Sie bewirkt eine Aufspaltung in zwei Spektrallinien für alle Niveaus mit $l \neq 0$ und trägt damit zur Feinstruktur der Atomspektren bei.

5 Emission Wasserstoff

5.1 Feinstruktur im Emissionsspektrum von Wasserstoff

Welche drei Effekte tragen zur Feinstruktur im Emissionsspektrum eines Wasserstoffatoms bei?

Lösung

Die Spin-Bahn-Kopplung des Elektrons, die relativistischen Korrekturen und der Darwin-Term geben alle Energiekorrekturen in der gleichen Größenordnung.

5.2 Typische Serien des Wasserstoffatoms

Nennen Sie zwei typische Serien des Wasserstoffatoms und ordnen Sie diesen grob die jeweiligen Wellenlängenbereiche zu.

Lösung

- **Lyman-Serie:** im UV-Bereich
- **Balmer-Serie:** im Bereich des sichtbaren Lichts
- **Paschen-Serie:** im Infrarot-Bereich

5.3 Relativistische Korrektur Energieniveau

Warum führt die relativistische Korrektur immer zu einer Absenkung der Energieniveaus?

Lösung

Weil der dritte Term in der Taylorentwicklung von

$$\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \quad (13)$$

immer negativ ist:

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \mathcal{O}(x^3) \quad (14)$$

5.4 Balmer-Absorptionslinien von Sternen

Absorptionslinien der Balmer-Serie können im Wasserstoffgas der Atmosphäre von Sternen beobachtet werden. Wozu ist dies hilfreich?

Lösung

Um Absorptionslinien der Balmer-Serie zu beobachten, müssen die Wasserstoffatome bereits in einem angeregten Zustand sein. Dies ist erst bei sehr hohen Temperaturen wahrscheinlich. Daher können bei Beobachtung dieser Linien Rückschlüsse auf die Oberflächentemperatur von Sternen gemacht werden.

5.5 Kernspin Wasserstoffatom

Was ist der Kernspin I des Wasserstoffatoms?

Lösung

$$I = \frac{1}{2}$$

5.6 Vektorielle Beziehung zwischen magnetischen Spins von Elektron und Kern

Nennen und erklären Sie die vektorielle Beziehung zwischen magnetischem Spinmoment $\vec{\mu}_s$ des Spins des Elektrons bzw. dem magnetischen Kernspinmoment $\vec{\mu}_I$ und dem Kernspin.

Lösung

Der Spin eines Elektrons ist gegenüber dessen magnetischen Spinmoment antiparallel, der Kernspin gegenüber dem magnetischen Kernspinmoment parallel ausgerichtet.

Der Unterschied in der Orientierung rührt aus der Proportionalität $\mu \propto \frac{e}{2m}$ und dem negativen Vorzeichen bei der Ladung des Elektrons bzw. dem positiven Zeichen bei der Ladung des Protons.

5.7 Ursachen für Unterschied zwischen Linienspektrum von Wasserstoff und Bohrschem Atommodell

Nennen Sie drei Ursachen für den Unterschied zwischen dem Linienspektrum des Wasserstoffatoms und der entsprechenden Vorhersage des Bohrschen Atommodells.

Lösung

- (a) relativistische Massenzunahme des Elektrons
- (b) Darwin-Term/Delokalisation der Elektronenladung
- (c) Wechselwirkung mit virtuellen Ladungsträgerpaaren
- (d) Spin-Bahn-Kopplung
- (e) Kernspin-Gesamtdrehimpuls-Kopplung

5.8 Energieverschiebung im Wasserstoffatom

Nennen Sie zwei Beispiele für das Zustandekommen der Energieverschiebungen im Wasserstoffatom von den ursprünglichen Energiezuständen, die sich aus der Schrödinger-Gleichung ergeben und erläutern Sie diese kurz.

Lösung

Folgende Beispiele können genannt werden:

- **Spin-Bahn-Kopplung:** Der Eigenspin des Elektrons interagiert mit dem Bahndrehimpuls gemäß seines Orbitals. Dies erzeugt eine zusätzliche Dipol-Dipol-Energie.
- **Hyperfeinstruktur:** Das Elektron interagiert ähnlich zur Spin-Bahn-Kopplung mit dem Atomkern.
- **Lamb-Shift:** Die Unschärfe der Position des Elektrons verursacht eine Energieverschiebung aufgrund der Magnetfeldinteraktion.
- **Darwin-Term und Relativistische Korrekturen:** Die relativistische Massenzunahme bewirkt eine zusätzliche Energieverschiebung.

5.9 Ursache Hyperfeinstructuraufspaltung Wasserstoffatom

Was ist die Ursache für die Hyperfeinstructuraufspaltung des Wasserstoffs? In wie viele Komponenten spaltet eine Feinstrukturkomponente auf?

Lösung

Die Hyperfeinstruktur ergibt sich unter Berücksichtigung des Kernspins und des damit zusammenhängenden magnetischen Kernmoments. Einerseits wechselwirkt das Kernmoment mit dem durch die Elektronenbewegung erzeugten B-Feld, zum Anderen wechselwirkt das magnetische Moment des Elektrons mit dem Dipolmoment des Kerns.

Es ergibt sich eine Aufspaltung in je 2 Komponenten $j + I$, $j - I$.

5.10 Termschema Wasserstoff ja oder nein?

Woran kann man an einem Termschema, bei dem die Feinstruktur mit eingezeichnet ist, erkennen, ob es sich um das Termschema eines Wasserstoffatoms handelt oder nicht?

Lösung

Beim Wasserstoffatom sind die Energieniveaus, bei denen die Quantenzahlen für j und für n übereinstimmen, energetisch entartet. Dies ist bei Atomen mit mehr als einem Elektron nicht der Fall.

6 Exotische Atome

6.1 Definition exotische Atome

Worum handelt es sich bei exotischen Atomen?

Lösung

Exotische Atome entstehen, wenn ein Elektron durch ein anderes, schwereres und negativ geladenes Teilchen ersetzt wird (z.B. μ^- -Myon, π^- -Meson,...)

Alternativ: Teilchensysteme, die sich anschaulich und mathematisch analog zu einem Atom beschreiben lassen. Es sind jedoch im Gegensatz zu normalen Atomen, entweder der Kern(bestandteile) oder die gebundenen Elektronen durch im Verhalten ähnliche Teilchen ersetzt wurden.

6.2 Bindungsenergie Positronium

Wie ist die Bindungsenergie des Positroniums proportional zur Bindungsenergie des Wasserstoffs?

Lösung

Die Bindungsenergie des Positroniums ist wegen seiner reduzierten Masse $\mu = \frac{m_e}{2}$ halb so groß wie die des Wasserstoffs:

$$E_{\text{Positronium}} = -\frac{-13,6 \text{ eV}}{2} \quad (15)$$

7 Zeeman-Effekt

7.1 Normaler Zeeman-Effekt

Was beschreibt der normale Zeeman-Effekt?

Lösung

Der normale Zeeman-Effekt beschreibt die Aufspaltung einzelner Energieniveaus in $(2l + 1)$ unterschiedliche Niveaus mit verschiedenen magnetischen Quantenzahlen m_l beim Anlegen eines äußeren Magnetfeldes.

7.2 Energieaufspaltung Hyperfeinstruktur

Warum fällt die Energieaufspaltung der Hyperfeinstruktur etwa 2000-fach schwächer aus als bei der Feinstruktur?

Lösung

Das Kernmagneton fällt aufgrund der um einen Faktor 2000 höheren Masse des Protons um einen Faktor 2000 schwächer aus als das magnetische Moment des Elektrons, auf dem die Feinstruktur basiert.

7.3 Feinstruktur und Hauptquantenzahl

Wie verhält sich die Feinstruktur mit zunehmender Hauptquantenzahl n ?

Lösung

Anhand der Spin-Bahn-Kopplung

$$E_n \propto \frac{Z^2}{n^2} \quad (16)$$

erkennt man, dass die Feinstrukturaufspaltung mit wachsendem n abnimmt. E_n ist die Energie des n -ten Energieniveaus.

7.4 Feinstruktur und Gesamtdrehimpulsquantenzahl

Wie verhält sich die Feinstrukturaufspaltung bei steigender Gesamtdrehimpulsquantenzahl j ?

Lösung

Bei steigender Gesamtdrehimpulsquantenzahl j verringert sich der Betrag der Feinstrukturaufspaltung und die Energien nähern sich den Bohr'schen Energieeigenwerten E_n an.

7.5 Spin-Bahn-Kopplung und Kernladungszahl

Wie verhält sich die Spin-Bahn-Kopplung mit zunehmender Kernladungszahl?

Lösung

Die Aufspaltung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung ist

$$\Delta E \propto \frac{Z^4}{n^3 l(l+1)} \quad (17)$$

und nimmt daher mit steigender Kernladungszahl zu.

7.6 Spektrallinien anomaler Zeeman-Effekt

Sind die Spektrallinien beim anomalen Zeeman-Effekt äquidistant aufgespalten? Begründen Sie Ihre Antwort.

Lösung

Beim anomalen Zeeman-Effekt sind die Linien nicht äquidistant aufgespalten. Dies liegt daran, dass

$$\Delta E \propto g_j \neq \text{const.} \quad (18)$$

denn diese hängen von den Quantenzahlen ab und sind deshalb nicht konstant.

7.7 Intervallregel Hyperfeinstruktur

Was besagt die Intervallregel der Hyperfeinstruktur?

Lösung

Der Energieunterschied ΔE_{HFS} ist proportional zum größeren der beiden F-Werte.

7.8 Lamb-Effekt

Für welche Hauptquantenzahlen n und l ist der Lamb-Effekt am größten?

Lösung

Für kleine n und $l = 0$ ist der Lamb-Effekt am größten.

7.9 Zitterbewegung Lamb-Verschiebung

Wodurch entsteht die „Zitterbewegung“, die mit der Lamb-Verschiebung zusammen hängt?

Lösung

Durch kurzzeitige Emission und Absorption eines virtuellen Photons im Rahmen der Unschärferelation ändert sich der Impuls des Elektrons. Diese Änderung verursacht die Zitterbewegung.

7.10 Anomaler Zeeman-Effekt vs. Paschen-Back-Effekt

Wodurch unterscheiden sich der anomale Zeeman-Effekt und der Paschen-Back-Effekt unter Anlegen eines externen Magnetfeldes (mit jeweils drei Eigenschaften).

Lösung

Der **anomale Zeeman-Effekt** tritt bei schwachem externen B-Feld auf, Spin-Bahn-Kopplung bleibt vorhanden, μ_j präzediert um das B-Feld.

Der **Paschen-Back-Effekt** tritt bei starkem externen B-Feld auf, die Spin-Bahn-Kopplung wird aufgebrochen und die beiden magnetischen Momente μ_l und μ_s präzedieren unabhängig voneinander um die Richtung des B-Feldes.

7.11 Energieniveaus Wasserstoffatom berechnet vs. experimentell

Löst man die Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom, so sind seine Energieniveaus (ohne angelegtes Magnetfeld) nur von der Hauptquantenzahl n abhängig. Bei realen Experimenten sieht man aber eine weitergehende Aufspaltung der Energieniveaus. Nennen Sie drei Effekte, die für diese Aufspaltung verantwortlich sind.

Lösung

Mögliche Antworten:

Feinstruktur durch

- Spin-Bahn-Kopplung
- Relativistische Korrekturen der kinetischen Energie des Elektrons

Hyperfeinstruktur durch Kern-Spin-Effekt

Außerdem: Lamb-Shift

7.12 Entstehung normaler vs. anomaler Zeeman-Effekt

Wie unterscheidet sich die Entstehung des normalen und des anomalen Zeeman-Effektes?

Lösung

Beim normalen Zeeman-Effekt wirkt das externe Magnetfeld nur auf den Bahndrehimpuls, da der Gesamtspin des Atoms gleich null ist. Beim anomalen Zeeman-Effekt wirkt das B-Feld auf den gekoppelten Bahndrehimpuls und Spin.

7.13 Graphischer Unterschied normaler vs. anomaler Zeeman-Effekt

Was ist der graphische Unterschied bei der Aufspaltung durch den normalen Zeeman-Effekt im Gegensatz zum anomalen Zeeman-Effekt?

Lösung

- **Normaler Zeeman-Effekt:** gleicher Linienabstand, drei unterscheidbare Übergänge
- **Anomaler Zeeman-Effekt:** unterschiedlicher Linienabstand, viele unterscheidbare Übergänge

7.14 Absenkung der Feinstruktur für $l > 0$

Warum kommt es (für $l > 0$) immer zu einer Absenkung der Feinstruktur (mathematischer Beweis nicht notwendig?)

Lösung

Die relativistische Korrektur ist größer als die Spin-Bahn-Kopplung, sodass es zu einer Energieabsenkung kommt.

7.15 Anzahl Spektrallinien Paschen-Back-Effekt

Wie viele Spektrallinien treten beim Paschen-Back-Effekt auf?

Lösung

Drei.

7.16 Energieaufspaltung Spin-Bahn Kopplung leichte vs schwere Atome

Ist die Energieaufspaltung der Spin-Bahn Kopplung bei leichten oder schweren Atomen leichter zu beobachten? Begründen Sie.

Lösung

Bei schweren Atome. ΔE ist proportional zu Z^4 .

7.17 Alle Korrekturen

Bringen Sie alle Korrekturen der aus der Schrödingergleichung erhaltenen Energieeigenwerte kurz miteinander in Relation (ohne äußeres Magnetfeld).

Lösung

- Die Korrekturen der Spin-Bahn-Kopplung und die relativistische Massenänderung führen zur Feinstruktur
- Die Kopplung von Gesamtdrehimpuls J und Kernspin I führt zur Hyperfeinstruktur
- Die Berücksichtigung des Strahlungsfeldes ergibt den Lamb-Shift.

7.18 Quantitatives Verhältnis ΔE_{HFS} und ΔE_{LS}

Wie groß ist das Verhältnis ΔE_{HFS} und ΔE_{LS} ungefähr?

Lösung

$$\frac{1}{1836}$$

7.19 Ursache Verhältnis Aufspaltung durch Hyperfeinstruktur und Spin-Bahn-Kopplung

Von welchen Größen hängt das Verhältnis der Hyperfeinaufspaltung und derjenigen durch die Spin-Bahn-Kopplung maßgeblich ab? Wie groß ist das Verhältnis ungefähr?

Lösung

Entscheidend ist der Unterschied zwischen dem Kernmagneton (indirekt proportional zur Protonenmasse) und dem Bohrschen Magneton (indirekt proportional zur Elektronenmasse). Aufgrund der Massenunterschiede zwischen Elektron und Proton ist die Hyperfeinaufspaltung somit ca. 2000 mal kleiner als die Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung.

7.20 Linearer vs. quadratischer Stark-Effekt

Worin liegt der Unterschied zwischen dem linearen und dem quadratischen Stark-Effekt? Bei welchen Teilchen tritt er jeweils auf?

Lösung

Bei einem Einelektronenatom in einem elektrischen Feld spalten die Energieterme aufgrund der Wechselwirkung eines elektrischen Dipolmoments mit dem elektrischen Feld auf.

- Beim **linearen Stark-Effekt** handelt es sich um ein permanentes Dipolmoment und die Energieverschiebung ist proportional zur Elektrischen Feldstärke.
- Beim **quadratischen Stark-Effekt** ist das Dipolmoment induziert und die Energieverschiebung ist proportional zum Quadrat der elektrischen Feldstärke.

7.21 Ursache linearer Stark-Effekt

Warum tritt im Einelektronensystem der lineare Starkeffekt auf?

Lösung

Im Einelektronensystem gibt es bereits aufgrund der zwei Ladungen ein Dipolmoment p , wenn der Drehimpuls l ungleich null ist. Durch das E-Feld wird ein gesamtes Dipolmoment induziert $p_G = p + p_{ind} = p + \alpha E$ dabei ist αE klein gegenüber p .

7.22 Lamb-Verschiebung

Worum handelt es sich bei der Lamb-Verschiebung?

Lösung

Bei Berücksichtigung der Wechselwirkung des Elektrons mit seinem Strahlungsfeld (Emission und Absorption virtueller Photonen) verschieben sich die Energieniveaus im Atom geringfügig (Lamb-Shift).

7.23 Niveauschemata Zeeman-Effekt vs. quadratischer Stark-Effekt

Was unterscheidet die Niveauschemata beim Zeemaneffekt und quadratischen Stark-Effekt?

Lösung

Bei beiden Effekten spalten sich die Energieniveaus eines Atoms im elektrischen/magnetischen nach m_j Feld auf. Beim Zeeman Effekt ist die Aufspaltung symmetrisch um das Ausgangsniveau nach oben und unten. Beim quadratischen Stark-Effekt werden die Energieniveaus aufgespalten aber nur energetisch abgesenkt.

7.24 Spinquantenzahl Hyperfeinniveaus

Ein Energieniveau mit $j = \frac{3}{2}$ spaltet in die Hyperfeinniveaus mit $F = 2$ und $F = 1$ auf. Welchen Wert muss die Spinquantenzahl I des Atomkerns haben?

Lösung

Es erfolgt eine Aufspaltung in $F = j + I = \frac{3}{2} + I = 2$ und in $F = j - I = \frac{3}{2} - I = 1$. Daraus folgt der Kernspin $I = \frac{1}{2}$.

7.25 Entkopplung bei kleinerem Magnetfeld

Welche Entkopplung findet im allgemeinen bei kleinerem Magnetfeld statt, die Entkopplung des Elektronenspins vom Elektronenbahndrehimpuls oder die Entkopplung des Hüllendrehimpuls vom Kernspin?

Lösung

Die Entkopplung des Hüllendrehimpuls vom Kernspin, weil bei der Spin-Bahn-Kopplung des Elektrons die zwei stärkeren Elektronenmomente beteiligt sind.

7.26 Darwin-Term Orbitale

Warum sind beim Darwin-Term der Feinstruktur nur s -Orbitale relevant?

Lösung

Es gilt $W_{\text{Darwin}} \propto |\psi(0)|^2$. Da aber die Wellenfunktionen nur für Zustände mit $l = 0$ am Ursprung nicht verschwindet, sind nur die s -Orbitale für den Darwin-Term relevant.

7.27 Entscheidung normaler oder anomaler Zeeman-Effekt

Welche Eigenschaft eines Atoms entscheidet, ob der anomale Zeeman-Effekt auftritt oder der normale?

Lösung

Der Gesamtspin eines Atoms entscheidet welcher Effekt auftritt. Ist der Gesamtspin null, so tritt der normale Zeeman-Effekt auf, bei einem Gesamtspin ungleich null der anomale Zeeman-Effekt.

7.28 L und S keine gute Quantenzahlen bei LS-Kopplung

Warum sind bei der LS-Kopplung L und S keine guten Quantenzahlen mehr?

Lösung

In L und S sind die Eigenwerte entartet, in J ist die Entartung aufgehoben.

8 Komplexere Atome

8.1 Problem Schrödingergleichung bei Mehrelektronensystemen

Welches Problem entsteht bei der Lösung der Schrödingergleichung für Mehrelektronensysteme?

Lösung

Aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Elektronen ist das Gesamtpotential nicht mehr kugelsymmetrisch und die Wellenfunktion lässt sich nicht mehr separieren. Die Schrödingergleichung ist anders als beim Wasserstoffatom somit nicht mehr analytisch lösbar und man benötigt Näherungsverfahren und numerische Methoden.

8.2 Definition Pauli-Prinzip

Was besagt das Pauli-Prinzip?

Lösung

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems mit mehreren Elektronen ist immer antisymmetrisch gegen Vertauschung zweier Elektronen.

Alternativ:

Das Pauli-Prinzip besagt, dass sich in einem Atom alle Elektronen um mindestens eine Quantenzahl n , l , m und m_s voneinander unterscheiden müssen. Dies ist äquivalent dazu, dass die Gesamtwellenfunktion des Elektrons antisymmetrisch sein muss.

Alternativ:

Zwei Fermionen können sich niemals im selben Zustand befinden (Selber Zustand heißt, dass alle Quantenzahlen übereinstimmen bzw. die Wellenfunktionen gleich sind).

8.3 Pauli-Prinzip Elektronenanzahl

Mit wie vielen Elektronen kann jede Elektronenschale maximal nach dem Pauliprinzip besetzt sein?

Lösung

Mit maximal $2n^2$ Elektronen.

8.4 Zwei Fermionen in abgeschlossenem System

Können in einem abgeschlossenen System zwei Fermionen existieren, die einen identischen Satz von Quantenzahlen (n, l, m_l, m_s) besitzen?

Lösung

Nein dies würde gegen das Pauli-Prinzip verstoßen.

8.5 Pauli-Verbot und Austauschverhalten von Bosonen und Fermionen

Was besagt das Pauli Verbot und wie ist dieses mit dem Austauschverhalten von Bosonen und Fermionen verknüpft?

Lösung

Das Pauli Verbot besagt, dass in einem abgeschlossenen System keine zwei Fermionen mit identischem Satz an Quantenzahlen existieren können. Dies ist durch den antisymmetrischen Austausch von Fermionen begründet:

$$\psi(r_1, r_2) = -\psi(r_2, r_1) \Rightarrow \psi(r_1, r_2) = 0$$

Bosonen hingegen haben einen symmetrischen Austausch:

$$\psi(r_1, r_2) = +\psi(r_2, r_1) \Rightarrow \psi(r_1, r_2) = 2C\psi_a^2$$

8.6 Unterschiedliche Spin-Projektionen

Warum müssen zwei Elektronen eines Atoms mit denselben Quantenzahlen (n, l, m_l) eine unterschiedliche Projektion des Spins besitzen ($m_{s1} = +\frac{1}{2}$ und $m_{s2} = -\frac{1}{2}$)?

Lösung

Nach dem Pauli-Prinzip ist die Ortsfunktion des Zustandes symmetrisch und die Spinfunktion muss daher antisymmetrisch sein. Dies bedeutet, dass die Projektionen m_{s1} und m_{s2} sich im Vorzeichen unterscheiden müssen.

8.7 Hundsche Regeln

Wie lauten die Hundschen Regeln?

Lösung

- (a) Für abgeschlossene Schalen und Unterschalen gilt $L = S = J = 0$.
- (b) In offenen Schalen liegen die Zustände mit maximalem S energetisch am tiefsten.
- (c) Für Terme mit maximalem S liegen die Terme mit maximalem L energetisch am tiefsten.
- (d) Für nicht mehr als halb gefüllte Schalen gilt: $J = |L - S|$, für mehr als halb gefüllte Schalen ist $J = L + S$ (im Grundzustand).

8.8 Anwendung Hundscher Regeln und Pauli-Prinzip

Wann finden die Hund'schen Regeln und das Pauli-Prinzip Anwendung?

Lösung

Die Hund'schen Regeln gelten nur beim Grundzustand. Das Pauli-Prinzip muss jedoch immer bei der Besetzung der Orbitale und bei spektroskopischen Schreibweisen berücksichtigt werden.

8.9 Gesamtwellenfunktion Atom

Welche Bedingung muss die Gesamtwellenfunktion im Atom erfüllen?

Lösung

Die Gesamtwellenfunktion im Atom muss antisymmetrisch sein. Also muss für eine symmetrische Ortswellenfunktion die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein und umgekehrt.

8.10 Eigenschaften Singulett-Zustand

Was sind die Eigenschaften die Singulett-Zustands?

Lösung

- Gesamtspin $S = 0$ (Spins antiparallel)
- Spektrallinien nicht aufgespalten
- Ortswellenfunktion ist symmetrisch
- Gerade Elektronenanzahl

8.11 Eigenschaften Triplett-Zustand

Was sind die Eigenschaften des Triplett-Zustandes?

Lösung

- Gesamtspin $S = 1$
- Spektrallinien spalten nach j auf
- Ortswellenfunktion ist antisymmetrisch

8.12 Spin-Multiplizität des Triplett-Zustandes

Welche ist die Spin-Multiplizität des Triplett-Zustandes?

Lösung

Dadurch, dass der Gesamtspin $S = 1$ beträgt, ist die Multiplizität gleich $2S + 1 = 3$.

8.13 Energie im Singulett- und Triplett-Zustand 1

Erklären Sie, warum die Energie im Singulett-Zustand höher ist als im Triplett-Zustand für zwei Elektronen.

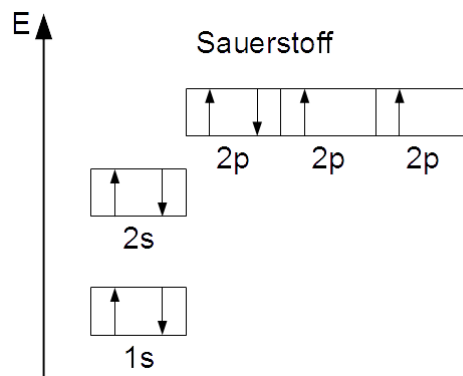
Lösung

Durch die symmetrische Ortswellenfunktion im Singulett-Zustand ist der mittlere Abstand der Elektronen kleiner als im Triplett-Zustand. Dadurch ist die Coulomb-Abstoßung, die die größte Abweichung bewirkt, im Singulett-Zustand größer.

8.14 Elektronenkonfiguration Sauerstoff

Zeichnen Sie die Elektronenkonfiguration von Sauerstoff ($Z = 8$).

Lösung



8.15 Drehimpulse von Edelgasen

Welche Aussage kann über Edelgase im Bezug auf Spin, Bahndrehimpuls und Gesamtdrehimpuls gemacht werden?

Lösung

$$L = S = J = 0.$$

8.16 Anzahl Elektronen in Orbital 1

Geben Sie die Anzahl der Elektronen in einem f-Orbital für alle Fälle an, wenn der Gesamtbahndrehimpuls $L=3$ und der Gesamtspin $S=3$ beträgt.

Lösung

Fall 1: 6 Elektronen

Fall 2: 8 Elektronen

8.17 Anzahl Elektronen in Orbital 2

Ein d-Orbital ist genau zur Hälfte besetzt. Wie viele Elektronen befinden sich dann im d-Orbital?

Lösung

Fünf.

8.18 Anzahl Elektronen in beliebiger Schale

Wie viele Elektronen passen in eine x -Schale ($x \in (s, p, d, f, \dots)$)?

Lösung

$$2 \cdot (2l + 1) \tag{19}$$

8.19 Elektronenzustände Eielektronensystem

Wie viele Elektronenzustände existieren zu jeder Hauptquantenzahl n in einem Eielektronensystem?

Lösung

Es existieren genau $2n^2$ mögliche Elektronenzustände.

8.20 Nicht-erlaubte LS-Kopplungen

Wenn man zwei Elektronen in zwei verschiedene n -Schalen legt, welche LS-Kopplungen sind dann nicht erlaubt?

Lösung

Alle LS-Kopplungen sind erlaubt, da man zwei unterschiedliche n gewählt hat und dadurch die Wellenfunktion immer antisymmetrisch ist.

8.21 Unterschied zwischen $\vec{L} - \vec{S}$ -Kopplung und $\vec{j} - \vec{j}$ -Kopplung

Erklären Sie den Unterschied zwischen $\vec{L} - \vec{S}$ -Kopplung und $\vec{j} - \vec{j}$ -Kopplung.

Lösung

$\vec{L} - \vec{S}$ -Kopplung:

Gesamtdrehimpuls $L = \sum_i \vec{l}_i$ und Gesamtspin $\sum_i \vec{s}_i$ koppeln zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$; vor allem bei leichten Atomen.

$\vec{j} - \vec{j}$ -Kopplung:

Gesamtdrehimpulse $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ der einzelnen Elektronen koppeln zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$; vor allem bei schweren Atomen.

8.22 Spektrallinienaufspaltung unbekanntes Atom

Sie beobachten das Spektrum eines Ihnen unbekannten Atoms. Nachdem Sie ein äußeres Magnetfeld zugeschaltet haben, beobachten Sie eine Aufspaltung jeder Spektrallinie in eine ungerade Anzahl Komponenten. Was können Sie daraus über das beobachtete Atom schließen?

Lösung

Das Atom muss in einem Singulett-Zustand vorliegen, d.h. sein Gesamtspin $S = s_1 + \dots + s_n$ muss Null sein.

8.23 Unterschiedliche Bezeichnungen der Quantenzahlen

Was ist der Unterschied zwischen den Quantenzahlen, die mit kleinen Buchstaben bezeichnet werden und denen, die mit großen Buchstaben bezeichnet werden?

Lösung

Quantenzahlen mit großen Buchstaben beschreiben den Zustand des gesamten Atoms, kleine Quantenzahlen den Zustand eines Elektrons.

(Für Wasserstoff gleichwertig, da es nur ein Elektron besitzt).

8.24 Elektron-Elektron-Wechselwirkung innerhalb eines Atoms

Weshalb darf die Elektron-Elektron-Wechselwirkung innerhalb eines Atoms nicht vernachlässigt werden?

Lösung

Bei einem Mehrelektronensystem schirmt ein Elektron je nach Näher zum Kern einen Teil der Kernladung ab und die anderen Elektronen „erspüren“ lediglich eine reduzierte effektive Kernladung. Diese hat hohe Auswirkungen auf die Energieniveaus und ist deswegen nicht zu vernachlässigen.

8.25 Magnetische Quantenzahl bei Mehrelektronen-Atomen

Warum ist die magnetische Quantenzahl m bei Mehrelektronen-Atomen auch ohne angelegtes äußeres Feld relevant?

Lösung

Bei Mehrelektronen-Atomen ist ab dem zweiten Elektron die Ausrichtung relativ zum B-Feld des ersten Elektrons relevant und wird durch m beschrieben.

8.26 Hartree-Verfahren 1

Man kann Mehrelektronenatome näherungsweise mit dem Hartree-Verfahren berechnen. Erklären Sie dieses Verfahren kurz.

Lösung

Bei Hartree-Verfahren bewegt sich jeweils ein Elektron im gemittelten kugelsymmetrischen Potential des Kerns und aller anderen Elektronen. Die Vielelektronen-Wellenfunktion $\psi(r_1, \dots, r_Z)$ wird durch eine antisymmetrische Linearkombination von Produkten von Eielektronenfunktionen (Slater-Determinante) angenähert.

8.27 Para- vs. Ortho-Helium

Erklären Sie den Unterschied zwischen Para- und Ortho-Helium.

Lösung

Beim Para-Helium ist der Spin beider Elektronen entgegengesetzt. Es ergibt sich ein Gesamtspin von 0 (Singulett-Zustand). Die Spins beider Elektronen des Ortho-Heliums sind jedoch gleich ausgerichtet. Der Gesamtspin ist also 1 (Triplett-Zustand).

8.28 Niedrigster Energiezustand Ortho-Helium

Wieso hat der niedrigste Energiezustand beim Ortho-Helium nicht die Hauptquantenzahl $n = 1$?

Lösung

In diesem Fall wären die Hauptquantenzahl, der Spin und der Drehimpuls beider Elektronen gleich, was dem Pauli-Prinzip widerspricht. Der niedrigste Energiezustand des Ortho-Heliums ist somit bei $n = 2$.

8.29 Gesamtenergie eines Mehrelektronenatoms

Erläutern Sie anschaulich, wie sich durch Wechselwirkung der Elektronen die Gesamtenergie eines Mehrelektronenatoms erhöht (weniger negativ wird).

Lösung

Zwei Möglichkeiten:

- (a) Die Elektronen stoßen sich gegenseitig ab und wirken damit der Anziehungskraft des Kerns entgegen
- (b) Die inneren Elektronen schirmen den Kern ab. Die äußeren Elektronen spüren deshalb nur noch eine reduzierte, effektive Kernladung.

8.30 Spektroskopische Notation Atome im Grundzustand

Wie lautet die spektroskopische Notation für Atome im Grundzustand, die nur voll besetzte Schalen besitzen?

Lösung

1S_0

8.31 Ionisierungsenergie im PSE 1

Wie verhält sich die Ionisierungsenergie innerhalb einer Gruppe und innerhalb einer Periode?

Lösung

Sie steigt von links nach rechts innerhalb einer Periode an und nimmt von oben nach unten innerhalb einer Gruppe ab.

8.32 Atomvolumina und Ionisierungsenergien von Alkali- und Edelgasatomen

Welche Atomvolumina und Ionisierungsenergien weisen Alkali- und Edelgasatome auf?

Lösung

Alkali-Atome haben von allen Atomen derselben Reihe im Periodensystem die kleinste Ionisierungsenergie und das größte Atomvolumen, Edelgasatome die größte Ionisierungsenergie und das kleinste Volumen.

8.33 Aufhebung der l -Entartung Alkali-Atome

Warum kommt es bei Alkali-Atomen im Vergleich zu Wasserstoff zu einer Aufhebung der l -Entartung?

Lösung

Aufgrund von Abschirmungseffekten durch die Elektronenhülle, was zu einem effektiven, teilabgeschirmten Potential führt.

Alternativ:

Das Coulombsche $1/r$ -Potential ist der Grund für die l -Entartung im Bohr'schen Atommodell. Innere Schalen $Z - 1$ Elektronen - schirmen das eine Valenzelektron der Alkali-Atome ab, sodass das effektive Potential nicht mehr mit $1/r$ geht. Die Entartung in l ist aufgehoben.

8.34 Näherungen beim Helium-Atom

Welche Näherungen kann man zur analytischen Lösung des Helium-Atoms nutzen?

Lösung

- Die Vernachlässigung der Elektronenabstoßung (Zentralfeldmodell)
- Näherung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung mittels Störungsrechnung
- Die Abschirmung der Kernladung durch ein Elektron \rightarrow Bewegung in einem effektiven Potential

8.35 Singulett- und Triplett-Zustände beim Helium-Atom

Warum liegen die Triplett-Zustände des Helium-Atoms im Allgemeinen energetisch niedriger als die entsprechenden Singulett-Zustände?

Lösung

Triplett-Zustände werden durch antisymmetrische Wellenfunktionen beschrieben. Der mittlere Relativabstand zweier Elektronen, die durch eine solche antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben werden, ist größer, als der Relativabstand bei einer symmetrischen Ortswellenfunktion, wie sie im Singulett-Zustand vorliegt. Die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen, die einen positiven Beitrag zur potentiellen Energie liefert, fällt also geringer aus und die Triplett-Zustände sind entsprechend im Vergleich zu den entsprechenden Singulett-Zuständen abgesenkt.

8.36 Atomgrößen H-Atom vs. He^+ -Ion

Welches Atom ist im Grundzustand größer, ein H-Atom oder ein He^+ -Ion?

Lösung

Der Radius der innersten Elektronenbahn ($n = 1$) ist beim He^+ -Ion mit $Z = 2$ nur halb so groß wie beim H-Atom mit $Z = 1$.

8.37 Autoionisation

Was versteht man unter Autoionisation?

Lösung

Sind zwei Elektronen in einem Atom angeregt, so kann eines der beiden seine Energie auf das Andere übertragen und es somit anregen. Dies ist der Vorgang der Autoionisation. Er ist nur möglich, wenn die Gesamtanregungsenergie oberhalb der Ionisationsenergie eines einfach angeregten Elektrons liegt.

Alternativ: Die Autoionisation findet für angeregte Atome genau dann statt, wenn die Energie eines oder mehrerer Elektronen auf ein Elektron übertragen wird. Wenn die Energie dieses Elektron nun höher als die Ionisierungsenergie liegt, so wird das Atom ionisiert.

8.38 Zwei unterschiedliche Helium-Sorten?

Erklären Sie, weshalb man ursprünglich von zwei verschiedenen Helium-Sorten ausging.

Lösung

Angeregte Zustände des Heliums können sowohl als Singulett-, als auch als Triplett-Zustände auftreten, wobei ein Übergang zwischen den beiden Systemen aufgrund der Auswahlregel $\Delta S = 0$ verboten ist. Da die beiden separaten Linienspektren sehr unterschiedlich sind, ging man ursprünglich von zwei verschiedenen Helium-Sorten aus. (Para-Helium - Singulett-System und Ortho-Helium - Triplett-System).

8.39 Verteilung der Elektronen eines Atoms

Wie geschieht die Verteilung der Elektronen eines Atoms im stabilen Grundzustand auf die verschiedenen Energiezustände?

Lösung

Das Pauli-Prinzip muss erfüllt sein und die Gesamtenergie aller Elektronen für den Grundzustand jedes Atoms muss minimal werden.

8.40 Quantenzahlen spektroskopische Notation

Geben Sie den Wert aller Quantenzahlen an, die sich aus der Schreibweise $3^2p_{1/2}$ herauslesen lassen.

Lösung

$$n = 3, s = \frac{1}{2}, l = 1, j = \frac{1}{2} (\Rightarrow m_s = -\frac{1}{2})$$

8.41 Rydberg-Atom

Erläutern Sie kurz, was ein Rydberg-Zustand/Rydberg-Atom ist. Nennen Sie eine Besonderheit dieser Atome.

Lösung

Ein Elektron in einem Atom wird so angeregt, dass es sich bei einer großen Hauptquantenzahl n befindet.

Besonderheiten:

- Wellenfunktion nimmt großen Raum ein
- Elektron bewegt sich in guter Näherung auf Kreisbahn (für große l) und kann daher als klassisches Teilchen behandelt werden (erfüllt Korrespondenzprinzip).
- Relativ lange Lebensdauer
- Elektron besitzt kleine Bindungsenergie, sodass eine kleine Störung für Ionisation ausreicht.

8.42 Termschema Natrium vs Helium

Wieso kann bei Natrium nur ein einzelnes Termschema beobachtet werden, bei Helium jedoch zwei Termschemata?

Lösung

Helium besitzt zwei Elektronen. Der Spin bei Helium kann folglich entweder $S = 0$ oder $S = 1$ sein \rightarrow Aufspaltung in Singlett- und Triplett-Zustand

Natrium besitzt in seiner äußersten Schale nur ein Elektron. Damit gilt Spin $1/2$ und es existiert kein Triplettzustand.

8.43 Ionisierungsenergie Natrium vs. Chlor

Wieso ist die Ionisierungsenergie von Natrium ($Z=11$) kleiner als die von Chlor ($Z=17$)?

Lösung

Zunehmende Kernladungszahl \rightarrow stärkere Anziehung der Elektronen an Kern. Zwar nimmt die Elektronenanzahl von Natrium zu Chlor zu, jedoch befinden sich die Elektronen in der gleichen (äußersten) Schale (in diesem Fall dritte Schale).

8.44 Spektralanalyse schwerer vs leichter Atome

Warum ist die Analyse der Spektren schwerer Atome schwieriger als die leichter?

Lösung

Mehrfachanregungen; Anregungsprozesse, bei denen mehrere Elektronen beteiligt sind und ihren Zustand im Atom ändern. Das passiert vor allem bei starker gegenseitiger Wechselwirkung der Elektronen, also bei schweren Atomen.

8.45 Auswahlregeln optische Dipolübergänge

Die Auswahlregeln der optischen Dipolübergänge lassen sich ganz allgemein aus den Symmetrieeigenschaften der H-Atomwellenfunktionen ableiten. Ordnen Sie den l - und m_l -Auswahlregeln die richtigen Symmetrieeigenschaften zu.

Lösung

l -Parität, m_l -Rotationsinvarianz

8.46 Chemisches Verhalten eines Elements

Welche Elektronen in der Hülle eines Atoms beeinflussen das chemische Verhalten eines Elements?

Lösung

Die Valenz- bzw. Leuchtelektronen. D.h. die Elektronen die in der äußersten Schale sind.

8.47 Definition effektives Kernpotential

Was versteht man unter dem Begriff „effektives Kernpotential“ und welche Phänomene im Schalenmodell des Atoms lassen sich damit erklären?

Lösung

Das effektive Kernpotential beschreibt das Potential, welches auf ein Hüllenelektron unter Einfluss des Atomkerns und weiterer Hüllenelektronen wirkt. Damit lassen sich zum Beispiel Absenkungen der Energieniveaus des äußersten Elektrons von Alkalimetallen erklären im Verhältnis zur Niveauverteilung, wie sie im Wasserstoffatom zu erwarten wäre.

9 Übergänge

9.1 Definition Halbwertsbreite

Wie ist die Halbwertsbreite definiert?

Lösung

Besitzt eine Funktion ein Maximum, so ist die Halbwertsbreite die Differenz zwischen den beiden Werten auf der x-Achse, für die die Funktion auf die Hälfte des Maximums abgesunken ist.

9.2 Termwert eines Energieniveaus

Was ist der Termwert T eines Energieniveaus und wozu ist er nützlich?

Lösung

Der Termwert T berechnet sich mit

$$T = \frac{E_n}{hc} \quad (20)$$

Mit ihm lässt sich die Wellenlänge der Übergangsspektrallinie zwischen zwei Energieniveaus E_i und E_k berechnen:

$$\lambda_{ik} = (T_i - T_k)^{-1} \quad (21)$$

9.3 Verbotener Übergang 1

Erklären Sie, warum der Übergang $J = 0 \Rightarrow J = 0$ nicht möglich ist.

Lösung

Es gilt $\Delta L = \pm 1$ und $\Delta S = 0$. Es soll $J = L + S = 0$ gelten. Dafür müsste der Spin aber flippen, was jedoch verboten ist.

9.4 Verbotener Übergang 2

Wann nennt man einen Übergang „dipol-verboten“?

Lösung

Falls das Übergangsdipolmoment Null ist.

9.5 Polarisation von Licht bei Übergang 1

Welche Polarisation weist Licht bei einem Atomübergang mit $m_i - m_j = -1, 0, 1$ auf?

Lösung

- Für $m_i - m_j = 0$: Linear polarisiertes Licht
- Für $m_i - m_j = -1, 1$: Zirkular polarisiertes Licht

9.6 Leuchtelektronen

Warum nennt man anregbare Elektronen Leuchtelektronen?

Lösung

Bei Übergängen zwischen zwei Zuständen eines äußeren, schwach gebundenen Elektrons liegt die Energiedifferenz im Bereich weniger eV. Die emittierte Strahlung liegt daher zwischen dem infraroten und dem ultravioletten Spektralbereich, oft im sichtbaren Gebiet, weshalb diese als Leuchtelektronen bezeichnet werden.

9.7 Dopplerverbreiterung von Spektrallinien

Wie kommt es zur Dopplerverbreiterung von Spektrallinien?

Lösung

Durch thermische Bewegungen der Atome bewegen sich diese „mal auf den Beobachter zu“ und „mal weg von ihm“. Dadurch kommt es zum optischen Dopplereffekt.

Alternativ:

Abstrahlende Atome bewegen sich während der Lichtemission mit einer Geschwindigkeit. Wegen dieser wird die Spektrallinie um den Doppler-Effekt verschoben.

Alternativ:

Die emittierenden bzw. absorbierenden Atome bewegen sich aufgrund ihrer thermischen Energie, sodass statistisch verteilte Dopplerverschiebungen der emittierten bzw. absorbierten Lichtfrequenzen auftreten, die insgesamt zu einer Linienverbreiterung (Dopplerverbreiterung) führen.

9.8 Experimentelle Verringerung Dopplerbreite

Wie lässt sich die Dopplerbreite experimentell verringern?

Lösung

Da

$$\Delta\omega_{\text{Doppler}} = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{8k_B T \ln 2}{m}}, \quad (22)$$

verringert sich die Dopplerverbreiterung durch Absenken der Temperatur. So haben die Atome eine geringere Geschwindigkeit.

Alternativ:

$$\delta_{\nu_D} = 7.16 \cdot 10^{-7} \nu_{ik} \cdot \sqrt{\frac{T}{M}} \propto \sqrt{T} \quad (23)$$

Die Dopplerverbreiterung lässt sich somit durch Absenken der Temperatur reduzieren (da dann die mittlere Geschwindigkeit der Atome sinkt).

9.9 Ursache unterschiedliche Intensitäten von Spektrallinien

Warum haben Spektrallinien im Allgemeinen unterschiedliche Intensitäten?

Lösung

Weil die Übergänge im Atom unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten haben.

9.10 Auswahlregeln 1

Woher kommt die Auswahlregel $\Delta l = \pm 1$?

Lösung

Ein Elektron, welches von einem auf das andere Orbital springt, muss Energie in Form eines Photons emittieren. Dieses besitzt einen Drehimpuls. Wegen des Drehimpulserhaltungssatzes muss sich deswegen auch der Drehimpuls des Elektrons ändern, allerdings nur um ± 1 , da das Photon auch nur einen Drehimpuls besitzt.

9.11 Auswahlregeln 2

Wie lauten die Auswahlregeln für j , m und l bei Elektronenübergängen?

Lösung

$$\Delta j = 0 \pm 1, \quad \Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1 \quad (24)$$

jedoch ist der Übergang von $j = 0$ auf $j = 0$ nicht erlaubt.

9.12 Möglichkeiten für Übergänge zwischen Energieniveaus

Geben Sie die drei Formen von Übergängen zwischen Energieniveaus jeweils mit kurzer Beschreibung an.

Lösung

- **Stimulierte Absorption:** Einfallende Lichtquanten, deren Energie genau die Differenz zweier Niveaus ist, werden von einem Elektron absorbiert.
- **Spontane Emission:** Ein Elektron befindet sich auf einem angeregten Zustand, der mit dem Vakuumfeld wechselwirkt und zu einem unbesetzten niedrigeren Niveau übergeht.
- **Stimulierte Emission:** Ein Elektron befindet sich in einem angeregten Zustand. Durch ein einfallendes Photon, dessen Energie genau der Differenz zu einem niedrigeren Niveau entspricht, wird ein kohärentes Photon vom Elektron emittiert.

9.13 Monochromatische Spektrallinien bei atomaren Übergängen

Weshalb kommen bei atomaren Übergängen keine (vollkommen) monochromatischen Spektrallinien vor?

Lösung

Die Spektrallinien sind nicht monochromatisch, da die Lebensdauer des angeregten Zustands endlich ist. Durch die Heisenbergsche Unschärferelation ist somit auch die Energieunschärfe endlich und damit gibt es eine Frequenzbreite der Linie.

9.14 Spektrallinienbreite

Welche drei Effekte tragen zur Breite der Spektrallinien bei und welche hat typischerweise den höchsten Einfluss?

Lösung

Es gibt die natürliche Breite, die nur durch Eigenschaften des Zerfalls zustande kommt, die Doppler-Verbreiterung und die Stoßverbreiterung. Die Doppler-Verbreiterung, die auf der relativen Bewegung der Atome zum Beobachter beruht, leistet die größte Unschärfe (ungefähr 100 mal größer als die natürliche Breite).

9.15 Möglichkeiten der Atomanregung

Wie können Atome angeregt werden? Geben Sie zwei Möglichkeiten an.

Lösung

- optische Anregung (mit Photonen)
- mechanische Anregung (Stöße mit Elektronen)
- thermische Anregung (Anregung durch Stöße der Atome untereinander wegen ihrer thermischen Bewegung)

9.16 Ursache spontane Emission

Wodurch wird spontane Emission verursacht?

Lösung

Die spontane Emission wird durch Wechselwirkungsprozesse mit virtuellen Photonen im Vakuumfeld („Vakuumfluktuationen“) ausgelöst. Diese sind rein statistisch; der Zeitpunkt der Emission kann also nicht vorausgesagt werden. Das Phänomen kann nur mithilfe der Quantenelektrodynamik vollständig beschrieben werden.

9.17 Induzierte Emission

Was versteht man unter induzierter Emission?

Lösung

Ein angeregtes Atom wird durch ein Photon, welches genau der Energiedifferenz des angeregten Zustandes zu seiner Energie im Grundzustand besitzt, dazu gebracht in den Grundzustand zurückzufallen. Dadurch kann das Elektron in den niedrigeren Zustand zurückfallen und im Gegenzug emittiert das Atom ein zum einfallenden Photon kohärentes zweites Photon.

9.18 Energieeinheiten Spektroskopie

Geben Sie zwei in der Spektroskopie üblichen Energieeinheiten an, sowie ihren Zusammenhang zueinander.

Lösung

Mögliche Energieeinheiten:

- Wellenlänge λ in m
- Wellenzahl $\bar{\nu}$ in cm^{-1}
- Frequenz ν in Hz
- Energie $E = h\nu$ in eV

Sie besitzen den Zusammenhang:

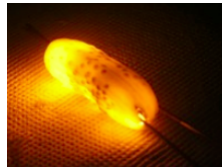
$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu} \quad (25)$$

9.19 Emissionslinien leuchtende Essiggurke

Wie viele Emissionslinien wurden bei dem Versuch mit der leuchtenden Essiggurke beobachtet und warum?

Lösung

Es konnte die Natrium-D-Linien beobachtet werden, welche bei genauerer Betrachtung aus zwei einzelnen Linien besteht. Dieses Duplett kommt dadurch zustande, dass sowohl der Übergang ${}^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$ als auch der Übergang ${}^2P_{\frac{3}{2}} \rightarrow {}^2S_{\frac{1}{2}}$ stattfinden kann.



9.20 Atomspektrum und Bohrsches Atommodell

Nennen Sie drei Eigenschaften eines Atomspektrums, die nicht mithilfe des Bohr'schen Atommodells erklärt werden können.

Lösung

Mögliche Antworten:

- Linienbreite
- Intensität der Spektrallinien
- Feinstruktur
- Hyperfeinstruktur
- Relativistische Korrektur
- Lamb-Shift

9.21 Parität Wellenfunktion Strahlungsübergang

Wie muss die Parität der Wellenfunktion sein, damit ein Strahlungsübergang möglich ist? (Tipp: Erwartungswert des Ortes)

Lösung

Der Erwartungswert des Ortes in Ortsdarstellung ist folgendermaßen definiert: Dies bedeutet, dass das Integral für Wellenfunktionen mit gleicher Parität ungerade ist und somit gleich Null. Deshalb müssen die Wellenfunktionen unterschiedliche Parität haben, damit es einen Strahlungsübergang geben kann.

9.22 Spektrallinienbreite im sichtbaren Bereich

Dominiert im sichtbaren Bereich die Dopplerverbreiterung oder die natürliche Linienbreite einer Spektrallinie?

Lösung

Im sichtbaren Bereich übertrifft die Dopplerverbreiterung die natürliche um etwa zwei Größenordnungen.

9.23 Tesa-Streifen im Vakuum

Was passiert, wenn man einen Tesa-Streifen im Vakuum sehr schnell abrollt?

Lösung

Elektromagnetische Strahlung - teilweise auch im Röntgenbereich - wird emittiert (Tribolumineszenz)

9.24 Druckverbreiterung

Wie lässt sich die Druckverbreiterung verstehen?

Lösung

Zusätzlich zur Abregung durch spontane Photonenemission gibt es eine bestimmte Wahrscheinlichkeit, dass angeregte Atomniveaus durch Stöße zwischen verschiedenen Atomen in niedrigere Energieniveaus übergehen. Dies führt zu einer Verkürzung der effektiven Lebensdauer und gemäß der Unschärferelation somit zu einer Linienverbreiterung.

9.25 Dopplerfreie Sättigungsspektroskopie

Beschreiben Sie kurz das Prinzip der dopplerfreien Sättigungsspektroskopie.

Lösung

Ein Laserstrahl wird durch einen Strahlteiler in einen Pumpstrahl (sättigt das untersuchte Medium) und einen die Zelle entgegengesetzt durchlaufenen Teststrahl aufgespalten. Eine Anregung durch den Pumpstrahl und gleichzeitige stimulierte Emission durch den Teststrahl ist genau dann möglich, wenn die Geschwindigkeit der Atome entlang der Achse Null ist. Man beobachtet somit eine schmale Linie in der Mitte des Absorptionsspektrums, welche lediglich eine natürliche Linienbreite aufweist, da wegen der nicht vorhandenen Geschwindigkeit der betroffenen Atome die Dopplerverbreiterung vermieden wird.

9.26 Arten der Verbreiterung

Welche Verbreiterungsarten gibt es im Allgemeinen? Nennen Sie je ein Beispiel.

Lösung

- **Homogene Verbreiterung:** z.B. Linienverbreiterung durch Gitterschwingungen im Kristallgitter
- **Inhomogene Verbreiterung:** z.B. Atome im Kristallgitter auf verschiedenen Gitterplätzen, Dopplerverbreiterung

9.27 Spontaner Übergang in tieferen Energiezustand

Wie heißt der Effekt, wenn ein Atom in einem angeregten Zustand E_i von selbst (spontan) durch Emission eines Photons in einen tieferen Energiezustand E_j übergeht?

Lösung

Fluoreszenz.

9.28 Ursache für natürliche Linienbreite von Spektrallinien

Erklären Sie kurz die Ursache für die natürliche Linienbreite von Spektrallinien.

Lösung

Die angeregten Energieniveaus eines Atoms haben aufgrund ihrer endlichen Lebensdauer gemäß der Heisenbergschen Unschärferelation eine endliche Energiebreite, welche bei Übergängen zu einer entsprechenden Frequenzbreite (natürliche Linienbreite) führt.

9.29 Auswahlregel elektrische Dipolübergänge - Parität

Wie hängt die Parität mit den Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge zusammen?

Lösung

Die Auswahlregeln ergeben sich prinzipiell aus der Forderung des Nichtverschwindens der Übergangsmatrixelemente. Die Übergangsmatrixelemente eines ungeraden Operators $\hat{W}(\vec{r}) = -\hat{W}(-\vec{r})$ wie des elektrischen Dipoloperators $-e\vec{r}$ können nur dann von Null verschieden sein, wenn die betrachteten Zustände unterschiedliche Parität aufweisen.

9.30 Verkürzung von natürlichen Lebensdauern

Nennen Sie einen Deaktivierungsprozess, durch den natürliche Lebensdauern verkürzt werden.

Lösung

Ein Beispiel ist der inelastische Stoß zwischen Atomen, wodurch angeregte Atome (alternativ zur spontanen/natürlichen Photonenemission) in Zustände niedrigerer Energie übergehen.

9.31 Bestimmung von Übergangswahrscheinlichkeiten und Matrixelementen

Wie lassen sich Übergangswahrscheinlichkeiten und Matrixelemente bestimmen?

Lösung

Aufgrund des Zusammenhangs $\tau_i = \frac{1}{A_i}$ zwischen mittlerer Lebensdauer τ_i und Einsteinkoeffizient A_i eines Zustandes mit Energie E_i erlaubt das Messen von Lebensdauern die Bestimmung von Übergangswahrscheinlichkeiten und damit von Matrixelementen.

9.32 Verstärkung von induzierter Emission

Wie wird die induzierte Emission wesentlich stärker als die spontane Emission?

Lösung

Das Verhältnis von induzierter zu spontaner Emission in einer Mode des Strahlungsfeldes ist gleich der Anzahl der Photonen in dieser Mode. Damit mit induzierte Emission nun wesentlich stärker als die spontane wird, müssen nichtthermische Felder erzeugt werden, bei denen die Photonenanzahl auf wenige Moden konzentriert ist.

9.33 Spektroskopie in Astrophysik

Warum ist die Spektroskopie für die Astrophysik von Bedeutung?

Lösung

Die Bestandteile von Planeten und weiterer Körper im Universum können durch die Absorptions- und Emissionsspektren bestimmt werden.

9.34 Metastabile Zustände

Was sind metastabile Zustände und wie können Sie entstehen?

Lösung

Durch Anregung eines Atoms durch Stöße können angeregte Zustände erreicht werden, die sich im Spin vom Grundzustand unterscheiden. Dabei können die Elektronen nicht durch Emission eines Photons in den Grundzustand übergehen, da kein Spinflip bei Emission / Absorption eines Photons möglich ist.

9.35 Absorptionskanten

Wie entstehen Absorptionskanten?

Lösung

Sobald die Energie der Strahlung ausreicht, Elektronen aus den tieferen Schalen ins Kontinuum anzuregen, nimmt der Absorptionskoeffizient sprunghaft zu.

9.36 K_α -Übergang

Warum ist die Abschirmkonstante beim K_α -Übergang ungefähr gleich 1?

Lösung

Beim K_α -Übergang befindet sich im $1s$ -Orbital ein Elektron. Da dieses Elektron sich nahe am Kern befindet, wirkt es so, als wäre die Kernladung um 1 vermindert.

9.37 Stoßverbreiterung

Warum beobachtet man bei der Stoßverbreiterung zusätzlich eine Verschiebung der Spektrallinie?

Lösung

Durch Stöße zwischen den Atomen werden die Orbitale in den einzelnen Atomen deformiert und die Energieniveaus in Abhängigkeit vom Atomabstand verschoben. Die Energiedifferenz der Emissionsniveaus beim mittleren Atomabstand, bei dem das Emissionsmaximum liegt, ist i.A. verschieden von der ursprünglichen im ungestörten Atom.

9.38 Methode zur Auflösung von Spektrallinien

Nennen Sie eine Methode, mit der man Spektrallinien auflösen kann, deren Abstände kleiner sind als ihre Dopplerverbreiterung.

Lösung

Lamb-Retherford-Experiment, dopplerfreie Sättigungsspektroskopie.

9.39 Übergänge eines Mehrelektronensystems 1

Welche Übergänge eines Mehrelektronensystems lassen sich durch die K_γ -Linie und die M_α -Linie beobachten?

Lösung

Die K_γ -Linie entspricht dem Übergang von $n = 4$ nach $n = 1$ und die M_α -Linie entspricht einem Wechsel von $n = 4$ nach $n = 3$.

9.40 Übergänge eines Mehrelektronensystem 2

In einem Mehrelektronenatom wird ein Elektron vom Energieniveau E_1 auf das Niveau E_2 angehoben. Warum entspricht die Veränderung der Gesamtenergie des Atoms nicht der Differenz $E_2 - E_1$?

Lösung

Bei Mehrelektronensystemen muss zusätzlich die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt werden, das heißt, es ändert sich durch die Anregung des einen Elektrons das gesamte, effektive Kernpotenzial, sodass auch die anderen Elektronen eine Energieverschiebung erfahren.

9.41 Natrium-Doppellinie

Die Natrium-Doppellinie entsteht durch den Übergang eines Elektrons von dem 3p in das 3s-Niveau. Wieso ist das 3p und das 3s Niveau nicht entartet?

Lösung

Im Unterschied zum Wasserstoffatom befinden sich beim Natriumatom mehrere Elektronen in der Hülle. Diese schirmen das Coulomb-Potential des Kerns teilweise ab. Das Potential, das auf ein einzelnes Elektron wirkt ist daher nicht mehr coulombförmig und die Energie, die daraus für ein einzelnes Elektron resultiert hängt nun zusätzlich von der Form des jeweiligen Orbitals ab. Da die Quantenzahl l eine Aussage über die Form des Orbitals macht, ist bei Atomen mit mehreren Elektronen die l -Entartung aufgehoben.

10 Röntgenkanten

10.1 Erster Physik-Nobelpreis

Welcher Physiker erhielt als erstes den Nobel-Preis und wofür?

Lösung

Wilhelm Conrad Röntgen für die Entdeckung der X- bzw. Röntgen-Strahlung.

10.2 Veränderung Röntgenspektrum bei höherer Beschleunigungsspannung

Wie verändert sich das Röntgenspektrum qualitativ, wenn man die Beschleunigungsspannung U_B erhöht?

Lösung

Die Grenzfrequenz des kontinuierlichen Spektrums wird erhöht, wodurch dieses verschoben wird. Das charakteristische Spektrum bleibt jedoch gleich.

10.3 Röntgenröhren

Warum werden in Röntgenröhren vorwiegend Kupfer- oder Molybdän-Anoden verwendet?

Lösung

Bei der Erzeugung von Röntgenstrahlen erhitzt sich die Anode stark, sodass ein hitzebeständiges Material benötigt wird.

10.4 Beschreibung Spektrum einer Röntgenröhre

Beschreiben Sie qualitativ die spektrale Verteilung der Röntgenstrahlung einer Röntgenröhre mit Wolfram-Anode. Wie nennt man diese Spektren und wovon hängt die Intensitätsverteilung ab? Besitzt das jeweilige Spektrum eine minimale bzw. maximale Wellenlänge?

Lösung

Das von einer Röntgenröhre emittierte Spektrum besteht aus zwei Anteilen:

- (a) Einem kontinuierlichen Spektrum (**Bremsspektrum**): Es besitzt eine kontinuierliche spektrale Intensitätsverteilung $I(\lambda)$, deren Verlauf von der Energie der Elektronen abhängt und eine kurzwellige Grenze besitzt.
- (b) Einem Linienspektrum, das charakteristisch für das Element ist, aus dem die Anode gefertigt ist und gegenüber dem optischen Spektrum des entsprechenden Elements verblüffend wenige Linien besitzt. Man spricht von dem **Charakteristischen Spektrum**. Auch das charakteristische Spektrum besitzt eine kurzwellige Grenze.

10.5 Absorption von Röntgenstrahlung

Ist Blei ($Z = 82$) oder Aluminium ($Z = 13$) besser für die Absorption von Röntgenstrahlung geeignet?

Lösung

Der Absorptionsquerschnitt ist gegeben durch:

$$\sigma_a = C \cdot Z^4 \cdot \lambda^3 \propto Z^4 \quad (26)$$

Daher schirmt Blei die Röntgenstrahlung stärker ab.

10.6 Streuung Röntgenstrahlung vs. sichtbares Licht

Warum wird Röntgenstrahlung stärker gestreut als sichtbares Licht?

Lösung

Die Streuwahrscheinlichkeit ist $\propto \omega^4$. Da Röntgenstrahlung eine höhere Frequenz hat als sichtbares Licht, wird sie stärker gestreut.

10.7 Entstehung von Röntgenstrahlung

Wie entsteht Röntgenstrahlung?

Lösung

Röntgenstrahlung entsteht beim Abbremsen schneller Elektronen in Materie (Bremsstrahlung) und beim Auffüllen von Löchern in den inneren Schalen der Atomhülle (charakteristische Röntgenstrahlung).

10.8 Auger-Effekt

Erklären Sie kurz den Auger-Effekt.

Lösung

Ein einfallendes Photon schlägt ein Elektron aus einer inneren Schale. Das Photon, das vom nachrückenden Elektron emittiert wird, wird von einem äußeren Elektron verwendet, um sich ebenfalls aus dem Atom zu lösen. Dieses Elektron nennt man Auger-Elektron.

Alternativ:

Ein Photon trifft ein Elektron aus den inneren Schalen, welches ein „Loch“ hinterlässt. In dieses Loch fällt nun ein Elektron aus einer höheren Schale und sendet dabei ein weiteres Photon aus. Dieses Photon wiederum trifft ein anderes Elektron im selben Atom und ionisiert dieses. Dieses Elektron nennt man auch Auger-Elektron.

Alternativ:

Wir ein Elektron aus einer innereren Schale ionisiert, wird das entstandene Loch von äußeren Elektronen aufgefüllt. Im Falle des Auger-Effekts wird die dabei frei werdende Energie auf ein anderes Hüllenelektron übertragen \rightarrow Autoionisation.

10.9 Konkurrierender Effekt Röntgenstrahlung

Was ist der zur Röntgenstrahlung konkurrierende Prozess und für welche Atome tritt er meistens auf?

Lösung

Der Auger-Effekt, der für Atome mit einer Kernladungszahl <30 vorwiegend stattfindet.

10.10 Anwendungen von Röntgenstrahlen

Nennen Sie drei Anwendungsgebiete von Röntgenstrahlen.

Lösung

- medizinische Röntgenbilder
- Röntgen-Computertomographie
- Materialforschung
- Sterilisation von Lebensmitteln
- Röntgenastronomie

Minimale Wellenlänge im Röntgenspektrum

Warum gibt es im Röntgenspektrum eine minimale Wellenlänge?

Lösung

Von den emittierten beschleunigten Elektronen können die hochenergetischsten höchstens eine kinetische Energie von eU erreichen. Die maximal mögliche Energieabgabe in Form von elektromagnetischer Bremsstrahlung entspricht also dieser Energie und wird dann frei wenn eines dieser schnellsten Elektronen auf einmal abgebremst wird. Diese maximale Strahlungsenergie korrespondiert zu einer minimalen Wellenlänge.

10.11 Photonenenergie charakteristische Röntgenstrahlung

Warum sind die emittierten Photonen der charakteristischen Röntgenstrahlung energieärmer als die zu ihrer Erzeugung notwendigen, absorbierten Lichtquanten?

Lösung

Die absorbierten Photonen müssen genug Energie mitbringen, um ein Elektron aus einer inneren Schale ins Kontinuum zu befördern. Die emittierten Photonen hingegen transportieren nur die Energiedifferenz zwischen einer höher und einer tieferliegenden Schale.

10.12 Absorption von Röntgenstrahlung in Materie

Durch welche drei Effekte ist die Absorption von Röntgenstrahlung in Materie zu erklären? Erklären Sie einen der Effekte.

Lösung

- **Photoeffekt:** Beim Photoeffekt wird das einfallende Röntgenquant vom Atom komplett absorbiert und dabei ein Elektron aus einer tiefen Schale ionisiert.
- **Compton-Effekt:** Beim Compton-Effekt stößt das Röntgenquant elastisch mit einem der fast freien Elektronen in der äußeren Schale des Atoms. Hierbei wird nur ein Teil der Energie des Quants auf das Elektron übertragen.
- **Paarbildung:** Ist die Energie eines Röntgenquants größer als die Ruheenergie eines Elektrons und dessen Antiteilchen $E > 2 \cdot 511 \text{ keV}$, kann das Quant ein Elektron-Positron-Paar erzeugen. Die überschüssige Energie des Quants geht in kinetische Energie des Teilchenpaares über.

11 Moleküle

11.1 Bindungen zwischen Molekülen

Welche Bindungstypen zwischen Molekülen gibt es? Nennen Sie zwei.

Lösung

- Kovalente Bindung
- Ionische Bindung
- Van-der-Waals-Bindung
- Wasserstoffbrückenbindung

11.2 Freiheitsgrade dreiatomiges gewinkeltes Molekül

Wie viele Freiheitsgrade hat ein dreiatomiges, gewinkeltes Molekül? Geben Sie die Komponenten an.

Lösung

Das Molekül hat:

- Drei Freiheitsgrade in der Translation des gesamten Moleküls (v_x, v_y, v_z)
- Drei Freiheitsgrade der Rotation (um die x -, y -, z -Achse)
- Drei Freiheitsgrade der Schwingung der Einzelatome relativ zueinander (drei „Eigenschwingungen“)

11.3 Größenverhältnis Rotations- und Vibrationsfrequenz

In welchem Größenverhältnis stehen in einem zweiatomigen Molekül in etwa die Rotations- und die Vibrationsfrequenz?

Lösung

Die Vibrationsfrequenz fällt um etwa einen Faktor 1000 höher aus als die Rotationsfrequenz.

11.4 Kraft zwischen benachbarten Edelgasatomen

Die einzig nennenswerte Kraft zwischen benachbarten Edelgasatomen ist...?

Lösung

Die Van-der-Waals-Kraft.

11.5 Rotationsenergie Zentrifugalaufweitung

Wird die Rotationsenergie (bei gleichem Drehimpuls) bei der Zentrifugalaufweitung (starrer Rotor) kleiner oder größer? Begründen Sie Ihre Antwort kurz.

Lösung

Sie wird kleiner, da das Trägheitsmoment größer wird.

11.6 Bindung H₂-Molekül

Welche zwei Effekte tragen zur bindenden Wirkung des symmetrischen Zustands des H₂-Moleküls bei?

Lösung

- (a) Ein Elektron hat im symmetrischen Molekülzustand „mehr Platz“ zur Verfügung als in einem Atomorbital. Dadurch ist seine Ortsunschärfe größer und folglich seine Impulsunschärfe kleiner, wodurch seine kinetische Energie sinkt.
- (b) Beim symmetrischen Zustand befinden sich die Elektronen mit erhöhter Wahrscheinlichkeit zwischen den Kernen. Dadurch wird die abstoßende Kraft der Kerne aufeinander zum Teil abgeschirmt.

11.7 Adiabatische Näherung beim H_2^+ -Molekül

Warum ist bei der Betrachtung des H_2^+ -Moleküls die adiabatische Näherung (d.h. die Vernachlässigung der Protonenbewegung) zulässig?

Lösung

Auf Protonen und Elektronen wirken annähernd gleiche Kräfte, allerdings ist die Masse (und damit die Trägheit) von Protonen etwa um den Faktor 2000 größer als die der Elektronen. Daher stellen sich die Elektronen nahezu instantan auf vergleichsweise langsame Kernbewegungen ein.

11.8 Dynamik zweiatomiger Moleküle

Welche klassischen Phänomene macht man sich zur Behandlung der Dynamik zweiatomiger Moleküle zunutze?

Lösung

Bei der Behandlung von zweiatomigen Molekülen können Rotationen und Schwingungen zur Analyse des Spektrums verwendet werden.

11.9 Molekülorbital- vs. Heitler-London-Näherung

Was unterscheidet die Molekülorbital- von der Heitler-London-Näherung?

Lösung

Bei der Molekülorbital-Näherung werden die Elektronen einzeln betrachtet. Bei der Heitler-London-Näherung werden beide gleichzeitig betrachtet. Dadurch können bei Letzterer nicht beide Elektronen beim selben Kern sein.

11.10 Heitler-London- vs. LCAO-Näherung

Welcher Fall wird bei der Heitler-London-Näherung ausgeschlossen, sodass diese genauer ist als die LCAO-Näherung?

Lösung

Der Fall, dass sich beide Elektronen gleichzeitig an einem der beiden Kerne befinden ist äußerst unwahrscheinlich. Bei der Heitler-London-Näherung wird dieser Fall weggelassen (die Terme fehlen), während sie bei der LCAO-Näherung mit großem Gewicht eingehen.

11.11 Kovalente vs. ionische Molekülbindung

Welcher Unterschied liegt zwischen einer kovalenten und einer ionischen Molekülbindung vor, wenn der Abstand der Atome gegen Unendlich geht?

Lösung

Bei einer ionischen Bindung liegen für einen unendlichen Abstand zwei Ionen vor. Bei der kovalenten Bindung liegen zwei neutrale Atome vor.

11.12 Ionische Bindung 2

Was bezeichnet eine ionische Bindung?

Lösung

Eine Bindung, bei dem beide Elektronen einem der zwei Atome zugeordnet sind. Außerdem geht das System für $R \rightarrow \infty$ in ein positiv geladenes Ion und ein negativ geladenes Ion über.

11.13 Kovalente Bindung

Was bezeichnet eine kovalente Bindung (Beispiel H_2)?

Lösung

Bindungsarten von Molekülen, bei dem jedem Proton ein Elektron zugeordnet ist, wobei allerdings auch eine Mischung der beiden Elektronenwellenfunktionen auftritt und bei denen für $R \rightarrow \infty$ das System in zwei neutrale Atome getrennt wird, die sich in ihrem jeweiligen 1s-Grundzustand befinden, werden als kovalent bezeichnet.

11.14 Ursache Van-der-Waals-Wechselwirkung

Wodurch kommt die Van-der-Waals-Wechselwirkung zustande?

Lösung

Die Van-der-Waals-Wechselwirkung kommt durch induzierte Dipol-Dipol-Wechselwirkung zustande.

11.15 LCAO-Näherung 1

Was ist die LCAO-Näherung?

Lösung

LCAO steht für „linear combination of atomic orbitals“. Mithilfe dieser Näherung werden molekulare Wellenfunktionen als Linearkombination der atomaren Wellenfunktionen aller am Molekül beteiligten Atome betrachtet.

11.16 Potentialkurve (meta-)stabiler Molekülzustand

Welche Bedingung muss die Potentialkurve für einen (meta-)stabilen Molekülzustand erfüllen?

Lösung

Die Potentialkurve muss ein Minimum vorweisen, damit es zu einer (meta-)stabilen Molekülbindung kommt. (Zumindest für das H_2^+ Molekül-Ion.)

11.17 Gesamtwellenfunktion von Molekülen

Welche Methode/Darstellung wird bei Molekülen verwendet für die Gesamtwellenfunktion?

Lösung

Produktansatz aus Wellenfunktion der Elektronen des starren Moleküls bei festem Kernabstand und Kernwellenfunktion $\psi(\vec{R})$.

11.18 Ansatz für Schwingung zweiatomiger Moleküle

Wieso eignet sich der harmonische Oszillator als Ansatz nicht uneingeschränkt zur Beschreibung der Schwingungen zweiatomiger Moleküle?

Lösung

Wäre ein zweiatomiges Molekül ein harmonischer Oszillator, müsste die Dissoziationsenergie unendlich werden, da das Potential mit steigender Entfernung der beiden Atome quadratisch ansteigt.

11.19 Beschreibung molekularer Wasserstoff

Welche zwei Näherungsverfahren eignen sich zur Lösung der nicht-separablen Schrödinger-Gleichung, die bei der Beschreibung des molekularen Wasserstoffs auftritt?

Lösung

Molekülorbital-Näherung, Heitler-London-Näherung

11.20 Unterschied Fluoreszenz und Phosphoreszenz

Was unterscheidet Fluoreszenz von Phosphoreszenz?

Lösung

Bei der Fluoreszenz endet das Leuchten gleichzeitig mit dem Ende der Bestrahlung. Bei der Phosphoreszenz geht das Leuchten über die Bestrahlungsdauer hinaus.

11.21 Brownsche Molekularbewegung

Was beschreibt die Brownsche Molekularbewegung?

Lösung

Die andauernde, ungeordnete Zitterbewegung von suspendierten Teilchen, verursacht durch Stöße zwischen den einzelnen Molekülen.

11.22 Born-Oppenheimer-Näherung

Beschreiben Sie die Born-Oppenheimer-Näherung.

Lösung

Bei einem schwingenden und rotierenden Molekül ist die kinetische Energie der Kernbewegung aufgrund der großen Kernmassen im Allgemeinen klein gegen die elektronische Energie. Dies erlaubt eine Separation der Gesamtwellenfunktion in Produkt aus Kernwellenfunktion und elektronischem Anteil, der den Kernabstand nur noch als Parameter enthält.

11.23 Excimere

Worum handelt es sich bei Excimeren?

Lösung

Anders als im Grundzustand (stabile abgeschlossene Schalen) können Edelgasatome im angeregten Zustand Bindungen eingehen. Die so entstehenden Moleküle werden Excimere genannt (z.B. He_2^* , Ar_2^*)

11.24 Excimere 2

Was sind Excimere? Wie sieht deren Spektrum aus?

Lösung

Excimere sind kurzlebige Teilchen, welche aus zwei oder mehr Atomen oder Molekülen bestehen. Excimere können nur gebildet werden, wenn sich ein Bindungspartner im angeregten Zustand befindet. Das Spektrum ist kontinuierlich.

11.25 Valenzbindungsnaherung

Wie wird die Valenzbindungsnaherung noch genannt?

Lösung

Heitler-London-Näherung

11.26 Stickstoff - Anregung von Translationen, Rotationen und Vibrationen

In einem Gefäß befindet sich Stickstoff (N_2) bei 0K. Die Temperatur wird ganz langsam erhöht. Was bedeutet dies für die Reihenfolge möglicher Anregungen von Translationen, Rotationen und Vibrationen?

Lösung

Da die Rotationen und Vibrationen gequantelt sind, können zuallererst nur Translationen angeregt, bis die Temperatur ausreicht, um Rotationen und Vibrationen anzuregen.

11.27 Rotierendes Kreuzgitter

Warum erzeugt die Bestrahlung eines rotierenden Kreuzgitters das gleiche Beugungsbild wie die Bestrahlung einer Pulverprobe?

Lösung

In der makroskopischen Pulverprobe sind die Ausrichtungen der mikroskopischen Kristallite isotrop verteilt. Dies wird gut durch die Rotation des Kreuzgitters imitiert.

12 Quantenstatistik

12.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung Fermionen und Bosonen

Quantenmechanische Teilchen sind ununterscheidbar. Für ein System mit identischen Teilchen ist die durchschnittliche Anzahl in einem Zustand i beschrieben über Verteilungsfunktionen. Geben Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung für ein System mit identischen Fermionen und für ein System mit identischen Bosonen an.

Lösung

Für Fermionen (Fermi-Dirac-Statistik):

$$n_i(\epsilon_i) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - \mu}{k_b T}\right) + 1} \quad (27)$$

Für Bosonen (Bose-Einstein-Statistik):

$$n_i(\epsilon_i) = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - \mu}{k_b T}\right) - 1} \quad (28)$$

12.2 Grundannahme der statistischen Thermodynamik

Was ist die Grundannahme der statistischen Thermodynamik?

Lösung

Ein abgeschlossenes System wird mit gleicher Wahrscheinlichkeit in jedem der ihr zugänglichen Quantenzuständen vorgefunden, bzw. alle erreichbaren Quantenzustände werden als gleich wahrscheinlich angenommen.

12.3 Mittlere Energie im thermischen Gleichgewicht

Welche Freiheitsgrade tragen zur mittleren Energie im thermischen Gleichgewicht bei?

Lösung

Generell alle möglichen Anregungsformen (die im Hamilton-Operator quadratisch eingehen); Translations-, Rotations-, und Schwingungsfreiheitsgrade.

12.4 Besetzungszahl angeregter Zustand

Welche Besetzungszahl hat ein angeregter Zustand E_i nach der mittleren Lebensdauer noch?

Lösung

$$N_i(t) = N_i(0) \cdot \exp(-A_i t) \rightarrow N_i(\tau_i) = N_i(0) \cdot \exp\left(-\frac{A_i}{A_i}\right) = \frac{N_i(0)}{\exp} \quad (29)$$

12.5 Einstein-Koeffizienten

Was sind die Einstein-Koeffizienten?

Lösung

Proportionalitätsfaktoren zwischen Energiedichte und Wahrscheinlichkeit für Absorption bzw. Emission.

12.6 Besetzung bei Emission im sichtbaren Bereich

In thermischen Strahlungsfeldern bei Temperaturen T kleiner als 1000 K ist die Besetzungszahl n der Photonen pro Mode klein gegenüber 1. Was bedeutet dies für die Emission im sichtbaren Bereich bei Umgebungstemperaturen?

Lösung

Die geringe Besetzung der Moden durch Photonen bewirkt, dass die spontane Emission gegenüber der induzierten Emission stark überwiegt.

12.7 Wahrscheinlichkeit Quantenzustand

Geben Sie die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass ein System sich im Quantenzustand s mit Energie ε_s befindet.

Lösung

Nach Boltzmann:

$$P(\varepsilon_s) = \frac{\exp\left(\frac{-\varepsilon_s}{\tau}\right)}{Z}$$

mit Z der Zustandssumme.

12.8 Fermi-Energie

Was versteht man in der Festkörperphysik unter Fermi-niveau und Fermi-energie?

Lösung

Fermi-niveau ist das chemische Potential, die Fermi-energie ist das chemische Potential bei der Temperatur $\tau = 0$.

12.9 Quantenkonzentration

Was bedeutet „Quantenkonzentration“ anschaulich?

Lösung

Konzentration eines Atoms in einem würfelförmigen Volumen mit Kantenlänge entsprechend der thermischen de-Broglie-Wellenlänge des Atoms.

13 Thermodynamik

13.1 Offenes System (ähnlich zu ??)

Was versteht man unter einem offenen System?

Lösung

Es kann sowohl Energie, als auch Materie mit der Umgebung ausgetauscht werden.

13.2 Geschlossenen System (ähnlich zu ??)

Was versteht man unter einem geschlossenen System?

Lösung

Es ist Energieaustausch, aber kein Teilchenaustausch mit der Umgebung erlaubt. Die Teilchenzahl ist eine Erhaltungsgröße, die Energie nicht.

13.3 Abgeschlossenes System (ähnlich zu ??)

Was versteht man unter einem isolierten/abgeschlossenen System?

Lösung

Ein System, das keine Wechselwirkung mit der Umgebung zulässt; Energie und Teilchenzahl sind deshalb Erhaltungsgrößen.

13.4 Annahmen ideales Gas

Geben Sie die drei Annahmen des idealen Gases an.

Lösung

Ein ideales Gas besitzt die folgenden Eigenschaften:

- (a) Die Teilchen im Gas sind punktförmige Massen
- (b) Ihre Bewegung ist geradlinig und gleichförmig
- (c) Wechselwirkung zwischen den Teilchen findet nur über elastische Stöße statt.

13.5 Innere Energie eines idealen Gases

Wovon hängt die innere Energie eines idealen Gases ab?

Lösung

Nur von der Temperatur T :

$$U = U(T) \quad (30)$$

13.6 Makroskopisch messbare Größen eines Gases

Nennen Sie drei makroskopisch messbare Größen eines Gases.

Lösung

- (a) Temperatur
- (b) Druck
- (c) Volumen

13.7 Geschwindigkeitsverteilung Gasteilchen

Wie sind bei Gasteilchen die Geschwindigkeiten statistisch verteilt?

Lösung

Die Beträge folgen einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung.

13.8 Mittlere Energie von Gasteilchen

Warum tragen die Freiheitsgrade von Schwingungen doppelt zur mittleren Energie eines Gasteilchens bei (anders als bei Rotations-/Translationsfreiheitsgraden)?

Lösung

Bei Schwingungen tritt kinetische und potentielle Energie auf, bei Rotationen und Translationen nur kinetische.

13.9 Erster Hauptsatz der Thermodynamik

Wie lautet der erste Hauptsatz der Thermodynamik?

Lösung

Innere Energie = Arbeit + Wärme

$$\Delta U = \Delta W + \Delta Q \quad (31)$$

13.10 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Nennen Sie eine Formulierung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik.

Lösung

In einem geschlossenen adiabaten System kann die Entropie nicht geringer werden.

Alternativ:

Es gibt keine natürlichen Prozesse, in denen die Gesamtenergie abnimmt. Alle irreversiblen Prozesse in einem abgeschlossenen System sind mit einer Entropievergrößerung verbunden. Nach einer Zustandsänderung muss das System wieder ins Gleichgewicht laufen, wobei die Entropie zunimmt. Für reversible Prozesse gilt $dS = 0$, für irreversible Prozesse ist $dS > 0$.

13.11 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik - Clausiussche Formulierung

Geben Sie die Clausiussche Formulierung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik an.

Lösung

Ein Prozess, bei dem nur Wärmeenergie von einem kälteren auf einen wärmeren Gegenstand übertragen wird, ist unmöglich.

13.12 Dritter Hauptsatz der Thermodynamik

Nennen Sie den dritten Hauptsatz der Thermodynamik.

Lösung

Für $T \Rightarrow 0$ geht auch die Entropie gegen 0.

13.13 Nullter Hauptsatz der Thermodynamik

Geben Sie den Nullten Hauptsatz der Thermodynamik an.

Lösung

Befinden sich zwei Körper im thermischen Gleichgewicht mit einem dritten, so stehen sie auch untereinander im thermischen Gleichgewicht.

13.14 Chemisches Potential

Was versteht man unter einem chemischen Potential?

Lösung

Die freie Energie, die man benötigt, um ein Teilchen aus dem System zu entfernen.

13.15 Mechanismen des Wärmeaustausches - Genauer

Nennen Sie die drei Mechanismen des Wärmeaustausches, erläutern Sie einen genauer und nennen Sie ein passendes Beispiel.

Lösung

- **Konvektion:** Resultat der temperaturabhängigen Dichte, wodurch wärmere Flüssigkeiten aufsteigen und kältere absinken (Materialtransport). Beispiel: Granulation der Sonnenoberfläche, Wolkenformationen
- **Wärmeleitung:** Wärme „fließt“ ohne Materialtransport von der wärmeren zur kälteren Seite eines Materials mit einem Temperaturgradienten. Bei Festkörpern geschieht dies durch Phononen und/oder durch freie Elektronen (Metall) und bei Gasen durch Stöße der Atome. Beispiel: Heizkörper, Stirlingmotor
- **Wärmestrahlung:** Warme Körper liegen mit ihrer Umgebung im thermischen Gleichgewicht durch Abstrahlung elektromagnetischer Wellen. Beispiel: Schwarzer Körper.

13.16 Gesetz von Boyle-Mariotte

Welche Bedingungen gelten für das Gesetz von Boyle-Mariotte?

Lösung

Temperatur T und Stoffmenge n müssen konstant sein.

13.17 Optische Temperaturmessung

Wie kann man optisch die Temperatur messen?

Lösung

Mit der Zuhilfenahme von Wärmebildkameras, Infrarotthermometern oder mit der Fettfleck-Photometrie.

13.18 Kochendes Wasser

Kann Wasser auch bei einer Temperatur von 100°C noch nicht kochen und warum?

Lösung

Ja.

Entweder kann der Umgebungsdruck zu hoch sein oder es befindet sich kein Staubpartikel oder ähnliches in dem Gefäß, wodurch es erst zu dem Kochvorgang kommen könnte.

13.19 Gibbsche Phasenregel

Geben Sie die Gibbsche Phasenregel an und erklären Sie sie.

Lösung

Die Zahl ϕ der benötigten Zustandsvariablen hängt von der Zahl der Komponenten K und der Anzahl der Phasen P ab:

$$\phi = K + 2 - P \quad (32)$$

13.20 Wärmezufuhr bei gleichbleibender innerer Energie

Kann eine bestimmte Gasmenge Wärme aufnehmen, ohne dass sich ihre innere Energie ändert? Wenn ja, nennen Sie ein Beispiel. Wenn nein, begründen Sie ihre Antwort.

Lösung

Ja, wenn die vom System aufgenommene Wärme vollständig in mechanische Arbeit umgesetzt wird. In diesem Fall wird per Saldo weder Energie zugeführt noch aufgenommen, sodass die innere Energie und daher auch die Temperatur des Gases konstant bleiben.

13.21 Materialgrößen bei Beschreibung realer Gase

Welche zwei Materialgrößen sind maßgeblich für die Beschreibung realer Gase und welche Eigenschaften beschreiben sie?

Lösung

- **Kovolumen:** Bei den Gasteilchen handelt es sich nicht um Punktteilchen. Das Kovolumen beschreibt das Eigenvolumen der Gasteilchen.
- **Binnendruck:** Die Gasteilchen wechselwirken untereinander. Der Binnendruck beschreibt diese Wechselwirkung durch Van-der-Waals Kräfte

13.22 Definition spezifische Wärmekapazität

Geben Sie eine kurze Definition der spezifischen Wärmekapazität eines Materials an.

Lösung

Die Wärmekapazität C beschreibt, wie viel (Wärme)-Energie dQ eine Temperaturänderung um dT einer Masse m des Materials entspricht:

$$C = \frac{dQ}{m \cdot dT} \quad (33)$$

13.23 Thermische Zustandsgleichung idealer Gase

Geben Sie die thermische Zustandsgleichung idealer Gase an.

Lösung

$$pV = Nk_bT \quad \text{oder} \quad pV = nRT$$

13.24 Adiabatische Zustandsänderung

Was versteht man unter einer adiabatischen Zustandsänderung?

Lösung

Die adiabatische Zustandsänderung bezeichnet einen thermodynamischen Prozess, der ein System so schnell von einem Zustand auf den nächsten überführt, dass kein Wärmeaustausch mit der Umgebung stattfindet.

13.25 Möglichkeiten der Temperaturmessverfahren

Nennen Sie zwei Beispiele für Temperaturmessverfahren und geben Sie stichpunktartig die Wirkungsweise an.

Lösung

- Gasthermometer: Eingesperartes Gasvolumen übt Druck auf eine Flüssigkeit aus (Höhere Temperatur -> Höherer Druck), Flüssigkeitspegel wird über Temperaturskala ausgewertet.
- Widerstandsthermometer: Widerstand einer Flüssigkeit ist abh. von der Temperatur und steigt annähernd linear an
- Infrarotthermometer: Infrarotstrahlung (Wärmestrahlung) wird ausgewertet um so die Temperatur des Objektes zu bestimmen
- Pyrometrie: Lichtfärbung wird mit der Farbe eines glühenden Drahtes verglichen: Ist der Draht von der Testfarbe nicht mehr unterscheidbar, so ist die Temperatur über die Spannung auswertbar.
- ... Viele weitere Beispiele möglich die nur kurz umrissen werden sollen

13.26 Treibhauseffekt

Beschreiben sie knapp (!) wie der Treibhauseffekt zustande kommt.

Lösung

Die Wärmeabstrahlung der Erde bewirkt in der Atmosphäre eine Anregung der Treibhausgas-moleküle (z.B. CO_2). Da diese in alle Raumrichtungen abstrahlen, wird dadurch ein Teil der Wärmestrahlung zurückgeworfen.

13.27 Funktionsweise Bimetall-Thermometer

Beschreiben sie knapp wie ein Bimetall-Thermometer funktioniert.

Lösung

Ein Bimetall-Thermometer besteht aus zwei unterschiedlichen Metallschichten, welche sich bei Temperaturänderung unterschiedlich stark ausdehnen. Somit kann die Biegebewegung genutzt werden, um mit einer Skala die Temperatur anzuzeigen.

13.28 Nützliche Effekte zur Temperaturmessung

Geben sie drei Effekte an, welche sich Thermometer zu nutze machen und nennen sie jeweils ein Beispiel.

Lösung

- **Verschiedene Ausdehnungskoeffizienten:** Bimetall-, Gasthermometer
- **temperaturabhängiger Widerstand:** Widerstandsthermometer PT100

- **Strahlungsspektrum:** Infrarotthermometer, Fettfleck-Photometer, Pyrometrie, Wärmebildkamera
- **Dichtemessung:** Galileo-Thermometer

13.29 Definition Entropie

Was ist Entropie?

Lösung

Logarithmus der Anzahl der Zustände, die für das System erreichbar sind. $\sigma = \log g$