Nachklausur zur Experimentalphysik 4

Prof. Dr. L. Fabbietti, Dr. B. Ketzer Sommersemester 2013 26. September 2013

Zugelassene Hilfsmittel:

- 1 beidseitig hand- oder computerbeschriebenes DIN A4 Blatt
- 1 nichtprogrammierbarer Taschenrechner

Bearbeitungszeit 90 Minuten.

Aufgabe 1 (3 Punkte)

Zeigen Sie, dass, wenn $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

sind, dann ist auch deren Summe $\psi_3(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$ eine Lösung. Geben Sie zusätzlich an unter welcher Bedingung im Allgemeinen das Superpositionsprinzip bei Differentialgleichungen gilt.

Lösung

Durch Addition der zeitabhängigen Schrödingergleichungen für ψ_1 und ψ_2 erhält man

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} \right] + U(x) [\psi_1(x) + \psi_2(x)] = E[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

[1]

Nun, da $\frac{\partial \psi_3}{\partial x} = \frac{\partial \psi_1(x)}{\partial x} + \frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x}$ und $\frac{\partial^2 \psi_3(x)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2}$ erhält man durch Einsetzung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi_3(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi_3(x) = E\psi_3(x)$$

was nachweist, dass hier das Superpositionsprinzip Gültigkeit hat.

[1]

Das Superpositionsprinzip gilt wenn die Differentialgleichung in diesem Fall linear und homogen in ψ ist.

[1]

Aufgabe 2 (3 Punkte)

Was gibt der Bohrsche Radius a_0 in der Wahrscheinlichkeitsfunktion des Grundzustandes des Wasserstoffatomes an? Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Elektron im Grundzustand eines Wasserstoffatoms im Bereich $0 < r < a_0$ befindet. Hierbei ist $\psi_{1,0,0}(r)$ gegeben durch

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Lösung

Der Bohrsche Radius ist der maximale Wert (nicht der Erwartungswert) der Wahrscheinlichkeit im Wasserstoffgrundzustand.

[1]

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Elektron im Grundzustand eines Wasserstoffatoms sich in der Region $0 < r < a_0$ befindet, ist

$$\int_0^{a_0} 4\pi r^2 \psi_{1,0,0}^2(r) \, \mathrm{d}r$$

wobei

$$\psi_{1,0,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Nach Quadrieren und Einsetzen erhält man, dass die Wahrscheinlichkeit gleich

$$\int_0^{a_0} 4\pi r^2 \left(\frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \right) dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^{a_0} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

$$= -e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(\frac{2r^2}{a_0^2} + \frac{2r}{a_0} + 1 \right) \Big|_0^{a_0}$$

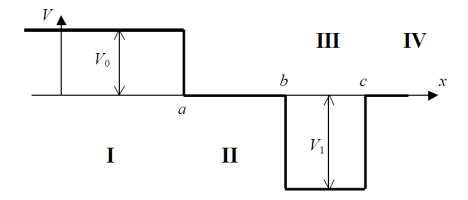
$$= 1 - 5e^{-2} \approx 0,323$$

[2]

Aufgabe 3 (7 Punkte)

Betrachten Sie die abgebildete stückweise konstante Potentiallandschaft. In dieser Potentiallandschaft befindet sich ein von rechts einlaufendes Teilchen der Masse m und einer Energie $0 < E < V_0$

- (a) Ohne die Schrödingergleichung zu lösen, geben Sie die Ansätze für die Wellenfunkttionen für die verschiedenen Regionen I-IV an und verwenden Sie dabei \hbar, m, V_0, V_1 und E.
- (b) Stellen Sie die Anschlussbedingungen für x = c auf.
- (c) Nehmen Sie jetzt an, dass sich die Energie des Teilchens so ändert, dass gebundenen Zustände im Bereich III existieren. Stellen Sie wie in Aufgabe a) die Lösungen für die vier Regionen auf. (Stellen Sie keine Stetigkeitsbedingungen auf).



(d) Zeichnen Sie den qualitativen Unterschied für den ersten angeregten Zustand, für den Fall, dass das Teilchen i) nur sehr schwach in der Potentialsenke gebunden ist und der ii) sehr stark in der Potentialsenke gebunden ist.

Lösung

(a) Die Wellenfunktionen in den Regionen I, II, III und IV sind:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ge^{\kappa x} & \text{für Region I und } \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V_0 - E \\ Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} & \text{für Region II und } \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx} & \text{für Region III und } \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = E + V_1 \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{für Region IV und } \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \end{cases}$$

[2]

(b) Stetigkeit für $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ an x = c gibt

$$Ce^{iqc} + De^{-iqc} = Ae^{ikc} + Be^{-ikc}$$
$$iq(-Ce^{iqc} + De^{-iqc}) = ik(-Ae^{ikc} + Be^{-ikc})$$

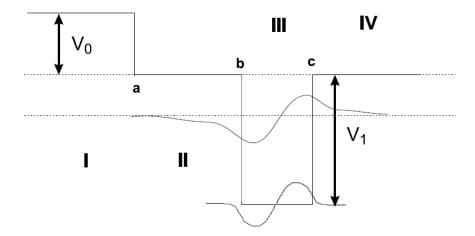
[2]

(c) Wenn gebundene Zustände in Region III existieren muss die Energie des Teilchens $V_1 < E_2 < 0$ sein. Die dazugehörigen Wellenfunktionen sind:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ge^{\kappa'x} & \text{für Region I und } \frac{\hbar^2 \kappa'^2}{2m} = V_0 - E_2 \\ Ee^{-\kappa x} + Fe^{\kappa x} & \text{für Region II und } \frac{\hbar^2 \kappa'^2}{2m} = E_2 \\ Ce^{iq'x} + De^{-iq'x} & \text{für Region III und } \frac{\hbar^2 q'^2}{2m} = V_1 - E_2 \\ Ae^{-\kappa x} & \text{für Region IV und } \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = E_2 \end{cases}$$

[2]

(d) [1]



Aufgabe 4 (11 Punkte)

Die Wellenlängen der beiden Natrium-D-Linien, die den Übergängen zwischen den Niveaus $^23P_{1/2}$ und $^23S_{1/2}$ (D1-Linie), sowie zwischen $^23P_{3/2}$ und $^23S_{1/2}$ (D2-Linie) entsprechen, betragen 589,593nm für die D1-Linie und 588,996nm für die D2-Linie.

- (a) Warum ist in Mehrelektronenatomen die l-Entartung der Zustände aufgehoben?
- (b) In einem schwachen Magnetfeld spalten die Niveaus aufgrund des anomalen Zeeman-Effekts auf. Berechnen Sie den jeweiligen Landé-Faktor, skizzieren Sie die Aufspaltung und beschriften Sie die einzelnen Unterniveaus mit der entsprechenden Quantenzahl (die Skizze muss nicht maßstabsgetreu sein, aber etwaige Unterschiede/Gemeinsamkeiten in der Größe der Aufspaltung sollten qualitativ erkennbar sein).
- (c) Bei welchem minimalen Magnetfeld würden sich die Zeeman-aufgespaltenen Komponenten der P-Zustände überschneiden, vorausgesetzt, dass die Spin-Bahn-Kopplung erhalten bliebe?
- (d) Skizzieren Sie nun die Aufspaltung der Zustände in einem Magnetfeld, das so stark ist, dass die Spin-Bahn-Kopplung aufgebrochen ist und beschriften Sie wiederum die einzelnen Unterniveaus mit der entsprechenden Quantenzahl (ebenfalls nicht maßstabsgetreu, aber wieder sollten Unterschiede/Gemeinsamkeiten in der Aufspaltung qualitativ erkennbar sein).
- (e) Zeichnen Sie in das Schema aus der zweiten und vierten Teilaufgabe die möglichen optischen Dipolübergänge ein und charakterisieren Sie die Linien anhand der Polarisation der emittierten Strahlung. Wie viele unterschiedliche Linien erhält man im Spektrum im schwachen/starken Magnetfeld?

Lösung

(a) Die l-Entartung ist eine Besonderheit des Coulombpotenzials und gilt somit für $V(r) \propto 1/r$. In Mehrelektronenatomen befindet sich das jeweilige Elektron in einem effektiven Potenzial, das aus der Wechselwirkung mit den anderen Elektronen und dem Kern resultiert. Sehr weit entfernt vom Kern gilt für z.B. Alkaliatome $V(r) \propto 1/r$, sehr nahe am Kern ist hingegen

 $V(r) \propto Z/r$. Das mittlere, effektive Potenzial ist dann kein Coulombpotenzial mehr (vgl. Abbildung 1) und die Unterschalen besitzen nicht mehr die gleiche Energie.

[1,5]

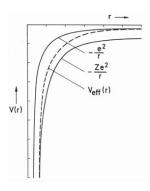


Abbildung 1: Effektives Potenzial im Mehrelektronenatom.

- (b) Abbildung 2 zeigt die Aufspaltung der Zustände im schwachen Magnetfeld. Man beachte
 - Die Aufspaltung ist für ein gegebenes Ausgangsniveau äquidistant.
 - Die Größe der Aufspaltung hängt vom Landé-Faktor ab und beträgt $\Delta E = m_j g_j \mu_B B$

Zustand	g_j
$^{2}3S_{1/2}$	2
$^{2}3P_{1/2}$	2/3
$^{2}3P_{3/2}$	4/3

 $[1,\!5]$

[4]

(c) Der energetische Abstand der P-Zustände beträgt

$$\Delta E = hc \left(\frac{1}{\lambda_{D2}} - \frac{1}{\lambda_{D1}}\right) = 2,13 \mathrm{MeV}$$

[1]

Wenn sich die tiefste bzw. die höchste Linie der beiden P-Zustände überschneiden, gilt außerdem

$$\Delta E = \left(\frac{3}{2}\frac{4}{3} + \frac{1}{2}\frac{2}{3}\right)\mu_B B$$

also $B=15,8{\rm T}.$ Bei dieser Feldstärke erwartet man allerdings, dass die Spin-Bahn-Kopplung aufgebrochen wird und der Paschen-Back-Effekt auftritt.

[1]

(d) Siehe Abbildung 2.

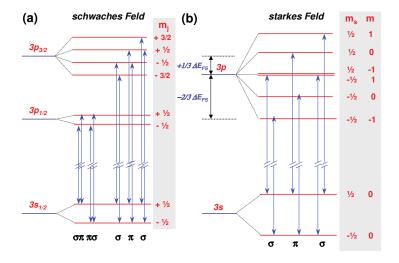


Abbildung 2: Abbildung (a) zeigt die Aufspaltung der Zustände von Natrium im schwachen Magnetfeld (anomaler Zeeman-Effekt). Abbildung (b) zeigt die Aufspaltung im starken Magnetfeld (Paschen-Back-Effekt). Spin und Bahndrehimpuls entkoppeln und richten sich unabhängig voneinander im Magnetfeld aus.

(e) Zu beachten sind die Auswahlregeln für Dipolübergänge

$$\begin{split} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m_j &= 0, \pm 1 \\ \Delta j &= 0, 1 \quad (j = 0 \not\leftrightarrow j = 0) \end{split}$$

Daraus ergeben sich die Übergänge, die in Abbildung 2 eingezeichnet sind. Für $\Delta m_j = \pm 1$ erhält man zirkular (σ) polarisierte Strahlung und für $\Delta m_j = 0$ linear (π) polarisierte Strahlung. Im schwachen Magnetfeld beobachtet man 10 unterschiedliche Linien im Spektrum, im starken Magnetfeld sind es nur drei.

[2]

Aufgabe 5 (7 Punkte)

Die vier Hundschen Regeln sind semiempirische Regeln zur Bestimmung der Elektronenverteilung im Grundzustand eines Mehrelektronenatoms. Geben Sie die vier Hundschen Regeln an und geben Sie eine Erklärung für die jeweilige Regel. Stellen Sie mit Hilfe der Hundschen Regeln die Grundzustandselektronenkonfiguration von Cobalt $\binom{59}{27}$ Co) und dessen Termsymbol dar.

Lösung

• Für Schalen, die voll besetzt sind gilt L = S = J = 0.

Bei vollständig besetzten Schalen müssen alle Quantenzahlen angenommen werden, was bedeutet, dass es zu jedem positive Spin m_s und Bahndrehimpuls m_l auch immer der Gegenwert existiert. Aus diesen Grund sind S und L gleich null und konsequenterweise J auch gleich null.

[1]

• Der Gesamtspin S nimmt den maximalen Wert an, der mit dem Pauli-Prinzip vereinbar ist.

Je größer der Spin, desto antisymmetrischer ist die Ortswellenfunktion. Daraus resultiert eine geringere Coulombwechselwirkung, da die Ortswellenfunktion bei $r \to 0$ verschwindet oder einzeln besetzte Orbitale sind schlechter gegen den Kern abgeschirmt und deshalb ist die Kern-Elektron Anziehung größer und das gesamte Atom kontraiert, was zu einer höheren Wechselwirkung führt.

[1,5]

• Bei unterschiedlichen Konfigurationen mit gleichem Spin S, ist die Konfiguration mit dem höchsten Gesamtbahndrehimpuls L am energetisch günstigsten.

Bei höherem Bahndrehimplus sind die Elektronen weiter vom Kern und damit auch voneinander entfernt. Das resultiert in einer geringeren Coulombwechselwirkung.

[1,5]

• J ist J = |L - S| wenn die Unterschale weniger als halb oder halb besetzt ist. Bei mehr als halb besetzter Schale ist J = L + S.

Das Magnetfeld der Bahnbewegung richtet bei weniger als halbvoll besetzen Schalen den Spin antiparallel aus. Bei mehr als halbvoll besetzten Schalen bewegen sich *Löcher* um den Kern und reagieren wegen ihrer umgekehrten Ladung mit einer Ausrichtung parallel zum Bahndrehimpuls.

[1,5]

Cobalt hat die Elektronenkonfiguration $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^7$. Daraus folgt das Termsymbol $^4F_{9/2}$.

[1,5]

Aufgabe 6 (4 Punkte)

Berechnen und vergleichen Sie sie Absorptionsfrequenzen der drei Wasserstoff-Isotope Protium (1 H), Deuterium (2 H) und Tritium (3 H) der Lyman- α -Linie des Übergangs $1S \rightarrow 2P$.

Lösung

Die Frequenzen ν sind gegeben durch $h\nu=\mathrm{Ry}^*(^1/_1-^1/_4)=^3/4\mathrm{Ry}^*.$ Die Rydbergkonstante $\mathrm{Ry}^*=\frac{1}{8}e^4\varepsilon_0^{-2}h^{-2}\mu$ mit

$$\mu = \frac{m_K m_e}{m_K + m_e}$$

[1,5]

hängt von der reduzierten Masse μ ab. Für das H-Atom ist

$$\mu = m_e \frac{1}{1 + \frac{1}{1836}} = m_e \cdot 0,999456$$

Für Deuterium ergibt sich

$$\mu = m_e \frac{1}{1 + \frac{1}{3672}} = m_e \cdot 0,999728$$

Für Tritium ist $\mu=m_e\cdot 0,999818.$

[1]

Die Frequenzen der Lyman- α -Linien sind

$$\overline{\nu}(^{1}\text{H}) = 82258, 2\text{cm}^{-1} = \nu = 2,466039 \cdot 10^{15} \text{s}^{-1}$$

 $\overline{\nu}(^{2}\text{H}) = 1,00027 \cdot \overline{\nu}(^{1}\text{H}) = 82280, 6\text{cm}^{-1}$

Die Differenz $\overline{\nu}(^{1}\text{H}) - \overline{\nu}(^{2}\text{H})$ ist $\Delta \nu = 22, 4\text{cm}^{-1}$ $\overline{\nu}(^{3}\text{H}) = 1,00036 \cdot \overline{\nu}(^{1}\text{H}) = 82288, 0\text{cm}^{-1}.$

[1,5]

[1]

Aufgabe 7 (4 Punkte)

Wie groß sind Übergangswahrscheinlichkeit und natürliche Linienbreite des Übergangs $3S \rightarrow 2P$ im Wasserstoffatom, wenn die Lebensdauern der Zustände $\tau(3S) = 23$ ns und $\tau(2P) = 2,1$ ns betragen? Man vergleiche dies mit der Dopplerbreite dieses Übergangs bei T = 300K.

Lösung

Das 3S-Niveau kann nur in das 2P-Niveau zerfallen. Deshalb ist die Übergangswahrscheinlichkeit für den Übergang 3S \to 2P

$$A_{ik} = \frac{1}{\tau(3S)} = \frac{10^9}{23} s^{-1} = 4, 3 \cdot 10^7 s^{-1}$$

Die natürliche Linienbreite ist

$$\delta\nu_n = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\tau(3S)} + \frac{1}{\tau(2P)} \right)$$

$$= \frac{1}{2\pi} (4, 3 \cdot 10^7 + 4, 76 \cdot 10^8) s^{-1}$$

$$= \frac{5, 19 \cdot 10^8}{2\pi} s^{-1} = 83 \text{MHz}$$

$$\delta\nu_D = 7, 16 \cdot 10^{-7} \cdot \nu_0 \cdot \sqrt{\frac{T}{M}} \cdot \sqrt{\text{Mol/(gK)}}$$

$$= 5, 67 \cdot 10^9 s^{-1} = 5, 67 \text{GHz}$$

denn

$$\begin{split} \nu_0 &= \frac{1}{h} \mathrm{Ry}^* \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = 4,57 \cdot 10^{14} \mathrm{s}^{-1} \\ M &= 1 \mathrm{g/Mol} \\ T &= 300 \mathrm{K} \\ \frac{\delta \nu_n}{\delta \nu_D} &= 0,014 \end{split}$$

Das bedeutet, bei diesem Übergang spielt bei Raumtemperatur die natürliche Linienbreite keine große Rolle.

[1]

Aufgabe 8 (5 Punkte)

Die Linien im reinen Rotationssprektrum des Moleküls $^{35}\text{Cl}^{19}\text{F}$ haben im Schwingungsgrundzustand einen Frequenzabstand $\Delta\nu=1,12\cdot10^{10}\text{Hz}.$

- (a) Wie groß ist der Kernabstand R_0 ?
- (b) Im angeregten Schwingungszustand (v=1) ist $R_0(v=1)=1,005R_0(v=0)$. Wie groß ist der Frequenzabstand $\Delta\nu$ der Linien des Überganges $(v'=1,J'\to J'+1)$ und $(\nu''=0,J''\to J''+1)$?

Lösung

Die Frequenz eines Rotationsübergangs $J \to J+1$ ist $\nu_{\rm rot} = \frac{\hbar(J+1)}{2\pi M R_0^2}$, so dass der Abstand benachbarter Rotationslinien $\Delta\nu_{\rm rot} = \frac{\hbar}{2\pi M R_0^2}$ ist.

[1]

(a) Daraus folgt

$$R_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi M \Delta \nu_{\rm rot}}}.$$

Damit gilt

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} = \frac{35 \cdot 19}{54} \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \text{kg} = 2,04 \cdot 10^{-26} \text{kg}$$

Also $R_0 = 2,702 \cdot 10^{-10} \text{m} = 2,702 \text{Å}.$

[1,5]

(b) Es gilt $\nu_{\rm rot}(J\leftrightarrow J+1)=\frac{\hbar(J+1)}{2\pi MR_0^2}$, sowie $R_0'=1,005R_0$. Der Frequenzabstand zweier Rotationslinien mit J'=J''=J ist dann

[1]

$$\Delta\nu_{\rm rot}(J) = \left(\frac{\hbar}{2\pi M R_0^{2'}} - \frac{\hbar}{2\pi M R_0^2}\right) \cdot (J+1)$$
$$= 0,009925 \cdot \frac{\hbar}{2\pi M R_0^{2'}} \cdot (J+1)$$
$$= 1,11 \cdot 10^8 \cdot (J+1) \text{s}^{-1}$$

[1]

Für J=1 folgt $\Delta\nu_{\rm rot}=222{\rm MHz}.$

[0,5]

Konstanten

$$\begin{split} \hbar &= 1.05 \cdot 10^{-34} \text{Js} & m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{kg} \\ e &= 1.6 \cdot 10^{-19} \text{C} & m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{kg} \\ \epsilon_0 &= 8.85 \cdot 10^{-12} \text{As/Vm} & \alpha = 7.3 \cdot 10^{-3} \\ a_0 &= \frac{4\pi \varepsilon_0}{e^2} \frac{\hbar^2}{m_e} = 5, 3 \cdot 10^{-11} \text{m} & \mu_B = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} = 9, 27 \cdot 10^{-24} \text{JT} \\ R_\infty &= \frac{m_e e^4}{8c \epsilon_0^2 h^3} = 1, 10 \cdot 10^7 \text{m}^{-1} & \int x^2 e^{ax} \, \mathrm{d}x = e^{ax} \left[\frac{x^2}{a} - \frac{2x}{a^2} + \frac{2}{a^3} \right] \end{split}$$