

Atom & Molekülphysik

FSU Jena - SS 2006

Klausur - Lösungen

Stilianos Louca

1. Februar 2009

Aufgabe 01

a) Die Energieniveaus des H-Atoms ohne FS-Aufspaltung sind gegeben durch

$$E_n^H = \frac{E_1^H}{n^2}, \quad E_1^H \approx -13.59 \text{ eV}$$

Mit Feinstruktur ergibt sich für den Zustand (n, j) die Energie

$$E_n^{H,FS} = E_n^H + E_n^H \cdot \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right)$$

mit der Feinstrukturkonstante α .

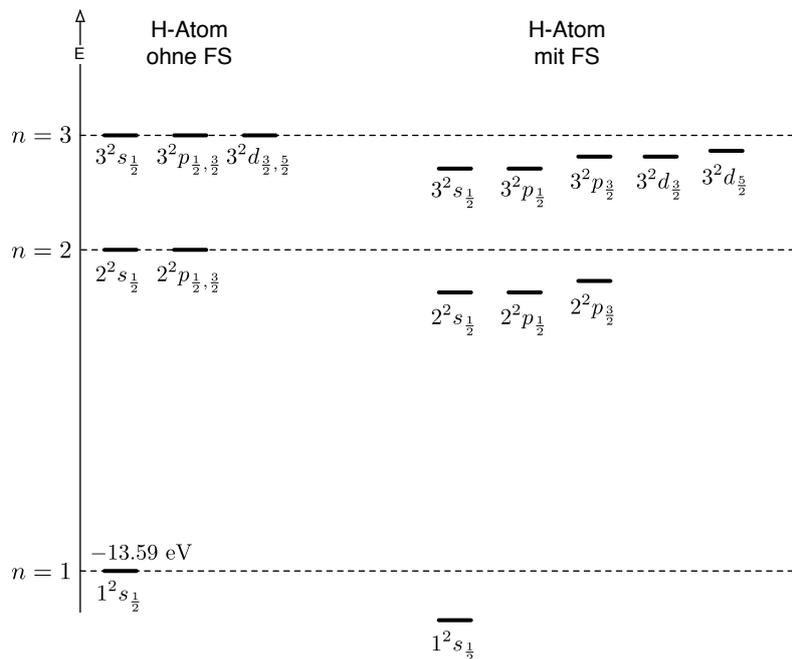


Abbildung 1: Termschema des H-Atoms ohne und mit Feinstruktur.

b) Der Gesamtspin S des He-Atoms kann die Werte $S = 0$ (Parahelium, Singulett) oder $S = 1$ (Orthohelium, Triplett) annehmen. Betrachtet man das eine Elektron im Grundzustand $1s$ und das andere Elektron im erregten Zustand (n, l) so ergibt sich der Bahndrehimpuls zu $L = l$ und der Gesamtdrehimpuls zu $J = |L - S|, \dots, L + S$.

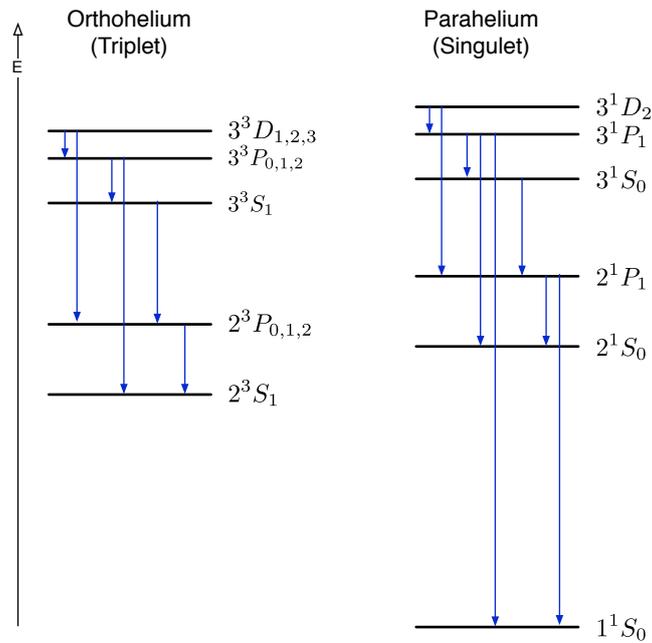


Abbildung 2: Termschema des He-Atoms ohne Feinstruktur mit erlaubten Dipolübergängen.

Beim Li hebt sich die l -Entartung auf, da Elektronen mit unterschiedlichen Bahndrehimpulsen eine unterschiedliche radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung aufweisen und somit ein anderes *effektives* Potential spüren.

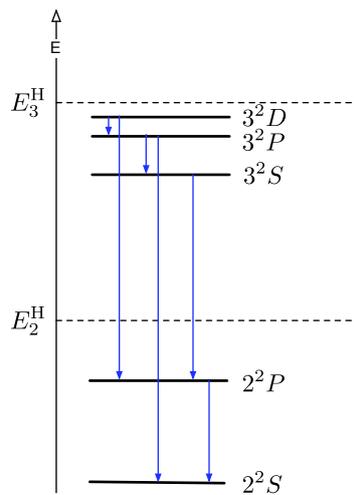


Abbildung 3: Termschema des Li-Atoms ohne Feinstruktur.

c) Die Auswahlregeln für Dipolübergänge lauten

$$\Delta L = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta S = 0, \Delta M_J = 0, \pm 1$$

mit $J = 0 \mapsto J = 0$ und $(\Delta J, \Delta M_J) = (0, 0)$ prinzipiell verboten. Insbesondere können also beim He keine Übergänge zwischen Ortho- und Paraheliumzustände stattfinden. Die erlaubten Dipolübergänge (insgesamt 14 für He, 6 für Li) sind in Abbildung 2 und 3 illustriert.

Aufgabe 02

Die Gesamtaufspaltung beim Zeeman-Effekt ist gegeben durch

$$\Delta E_{\text{ges}} = 2M_J^{\text{max}} \mu_B B = 2J \mu_B B$$

Mit einer Aufspaltung von $\Delta E_{\text{ges}} \approx 2.786 \times 10^{-23} \text{ J}$ ergibt sich $J = 3$. Wegen $S = 0$ ist auch $L = J = 3$, das heißt das Termsymbol des Zustandes lautet 1F_3 .

Aufgabe 03

- a) Insofern mit den Pauli-Regeln verträglich, gelten bei Elektronenkonfigurationen von Atomen folgende Gesetzmäßigkeiten:
- Voll besetzte Schalen (gekennzeichnet durch Hauptquantenzahl n) bzw. voll besetzte Unterschalen (gekennzeichnet durch n und Bahndrehimpulsquantenzahl p) haben (im Kalkül der LS -Kopplung) einen Gesamtbahndrehimpuls $L = 0$ und Gesamtspin $S = 0$. Insbesondere verschwindet auch deren Gesamtdrehimpuls J .
 - Konfigurationen minimalster Energie das heißt am stärksten gebundene Zustände, besitzen eine maximale Spinquantenzahl S .
 - Konfigurationen minimalster Energie besitzen bei gleichem Spin eine maximale Bahndrehimpulsquantenzahl.
 - Bei höchstens halb-vollen Schalen ist der am stärksten gebundener Zustand, bei festem S und L , der mit der kleinsten Gesamtdrehimpulsquantenzahl J . Bei mehr als halb-vollen Schalen ist es genau umgekehrt.
- b) Unter LS -Kopplung koppeln die Spins der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtspin $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ mit den möglichen Eigenwerten $|s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2$. Analog koppeln die Bahndrehimpulse zu einem Gesamtbahndrehimpuls L , der die Eigenwerte $|l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2$ annehmen kann. Der Gesamtdrehimpuls J des Systems kann dann jeweils die Werte $|L - S|, \dots, L + S$ annehmen. Da sich die Hauptquantenzahlen der beiden Elektronen stets unterscheiden, können alle Elektronenkonfigurationen als symmetrische oder antisymmetrische Ortswellenfunktionen geschrieben werden, so dass auch wirklich alle Zustände angenommen werden können.

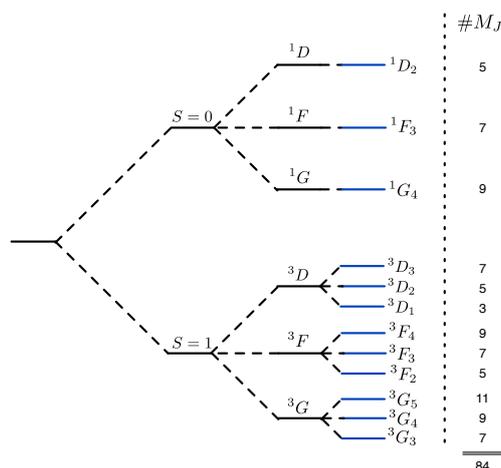


Abbildung 4: Zu Aufgabe 03: Mögliche Zustände bei LS -Kopplung eines 2-Elektronensystems. Insgesamt mögliche Anzahl an Zuständen: 84

Aufgabe 04

Es seien Ψ_{100}^1 und Ψ_{100}^2 jeweils die Grundzustände des ^3H und des ^3He Atoms. Die entsprechende Wahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$W = \left\| P_{\Psi_{100}^2} \Psi_{100}^1 \right\|^2 = \left| \langle \Psi_{100}^2, \Psi_{100}^1 \rangle \right|^2$$

mit dem Projektor $P_{\Psi_{100}^2}$ in den Unterraum $\text{span } \Psi_{100}^2$. Mit

$$\langle \Psi_{100}^{Z_2}, \Psi_{100}^{Z_1} \rangle = \frac{(Z_1 Z_2)^{\frac{3}{2}}}{\pi a_0^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-Z_2 \frac{r}{a_0}} e^{-Z_1 \frac{r}{a_0}} d^3x = \frac{4}{a_0^3} (Z_1 Z_2)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty r^2 e^{-Z_2 \frac{r}{a_0}} e^{-Z_1 \frac{r}{a_0}} dr = 8 \frac{(Z_1 Z_2)^{\frac{3}{2}}}{(Z_1 + Z_2)^3}$$

ergibt sich eine Wahrscheinlichkeit von

$$W = 64 \frac{(Z_1 Z_2)^3}{(Z_1 + Z_2)^6} \stackrel{\substack{Z_1=1 \\ Z_2=2}}{\approx} 0.702$$