

# Atom & Molekülphysik

FSU Jena - SS 2007

Klausur - Lösungen

Stilianos Louca

4. Februar 2009

## Aufgabe 01

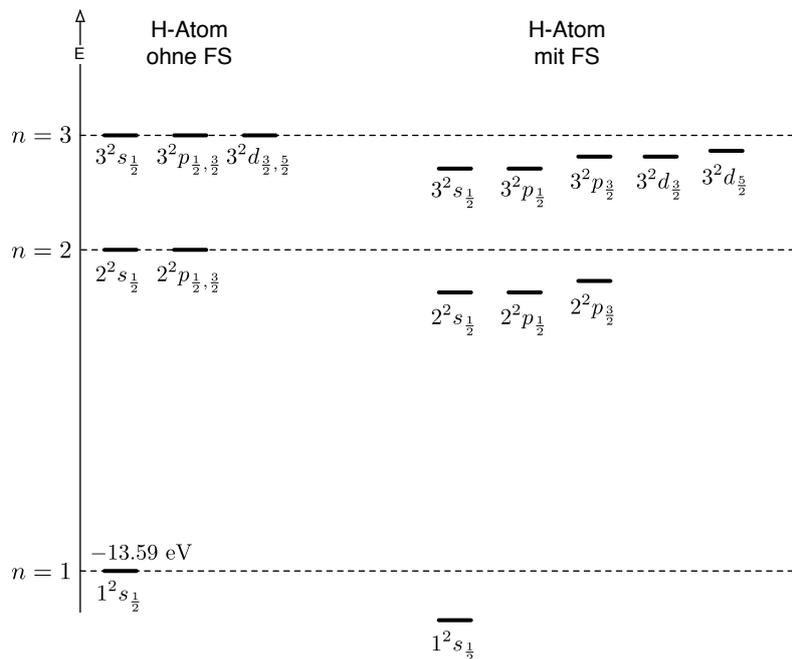
a) Die Energieniveaus des H-Atoms ohne FS-Aufspaltung sind gegeben durch

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

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

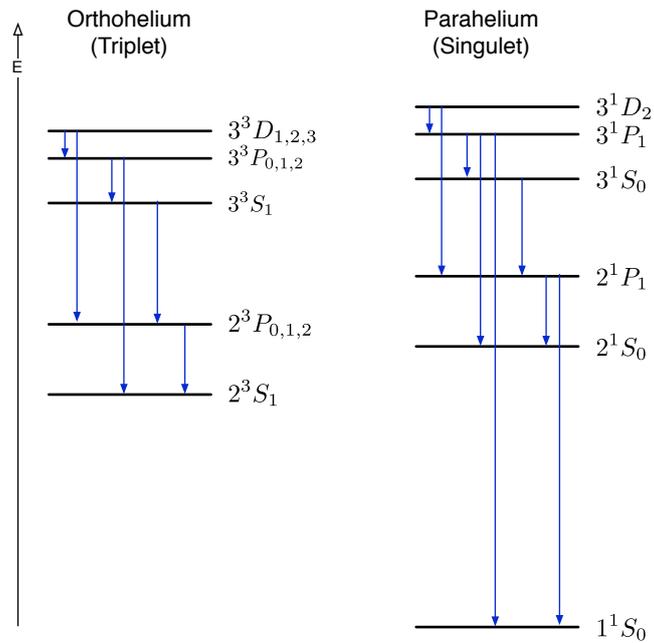
$$E_n^{H,FS} = E_n^H + E_n^H \cdot \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right)$$

mit der Feinstrukturkonstante  $\alpha$ .



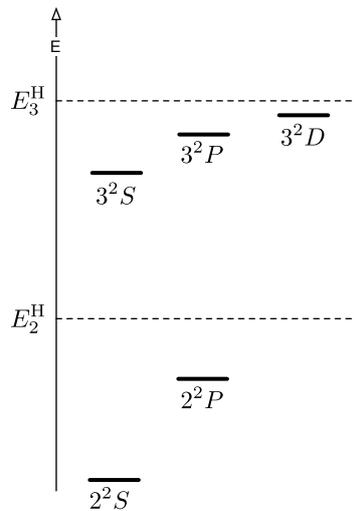
**Abbildung 1:** Termschema des H-Atoms ohne und mit Feinstruktur.

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

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

mit  $J = 0 \mapsto J = 0$  und  $(\Delta J, \Delta M_J) = (0, 0)$  prinzipiell verboten. Insbesondere können also keine Übergänge zwischen Ortho- und Paraheliumzuständen stattfinden. Die erlaubten Dipolübergänge (14 insgesamt) sind in **Abbildung 2** illustriert.

## Aufgabe 02

- a) Bei genügend schwachem Magnetfeld  $B$  ist die entsprechende Aufspaltung viel geringer als die Feinstrukturaufspaltung, und gegeben durch die Korrektur

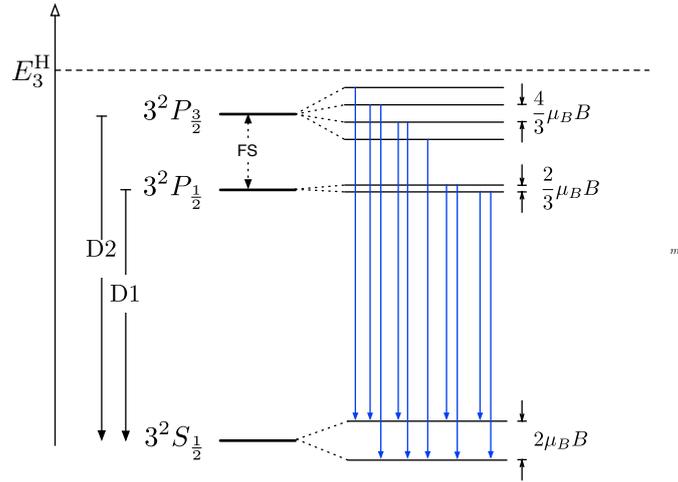
$$\Delta E^{\text{Zeeman}} = g_j \mu_B m_j B$$

mit dem Lande-Faktor

$$g_j = \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

Für die Niveaus  $3^2S_{\frac{1}{2}}$ ,  $3^2P_{\frac{1}{2}}$  und  $3^2P_{\frac{3}{2}}$  ist jeweils  $g_{S_{\frac{1}{2}}} = 2$ ,  $g_{P_{\frac{1}{2}}} = \frac{2}{3}$  und  $g_{P_{\frac{3}{2}}} = \frac{4}{3}$ . Die Dipolübergangs-Auswahlregeln lauten

$$\Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1, \Delta m_j = 0, \pm 1$$



**Abbildung 4:** Aufspaltung der Energieniveaus von Na beim Zeeman-Effekt mit erlaubten Dipol-Übergängen.

- b) Der energetische Abstand der beiden Zustände  $\left(3^2P_{\frac{3}{2}}, m_j = -\frac{3}{2}\right)$  und  $\left(3^2P_{\frac{1}{2}}, m_j = \frac{1}{2}\right)$  ist gegeben durch

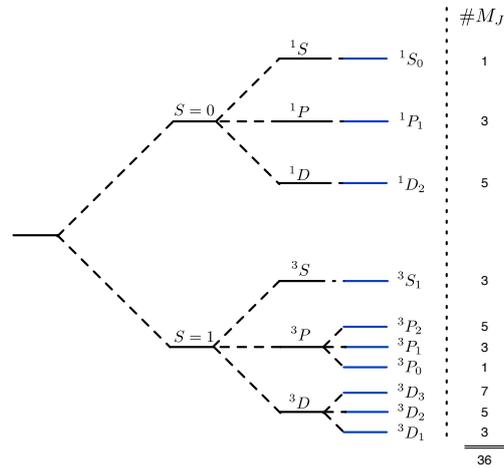
$$\Delta E = \Delta E_{\text{FS}} - \frac{1}{2} g_{P_{\frac{1}{2}}} \mu_B B - \frac{3}{2} g_{P_{\frac{3}{2}}} \mu_B B = \Delta E_{\text{FS}} - \frac{7}{3} \mu_B B$$

Aus der Forderung  $\Delta E \stackrel{!}{=} \frac{9}{10} \Delta E_{\text{FS}}$  ergibt sich eine Magnetfeldstärke

$$B = \frac{3}{70} \frac{\Delta E_{\text{FS}}}{\mu_B} \approx 1.38 \text{ T}$$

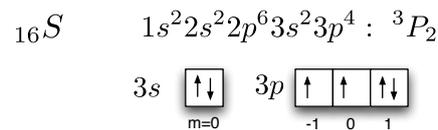
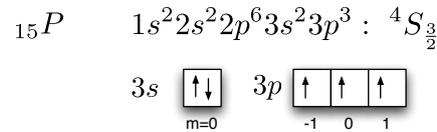
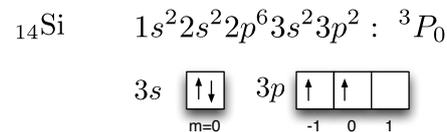
## Aufgabe 03

- a) 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  $n \neq n'$  ist, können alle so entstehenden Ortswellenfunktionen symmetrische oder antisymmetrische Form annehmen, so dass auch wirklich alle Zustände angenommen werden können.



**Abbildung 5:** Zu Aufgabe 03: Mögliche Zustände bei LS-Kopplung eines 2-Elektronensystems.

b) In Abbildung 6 sind jeweils Elektronenkonfiguration, Schalen-Besetzungen in Pauli-Schreibweise und Termsymbol des Grundzustands für Si, P, S dargestellt.



**Abbildung 6:** Elektronenkonfigurationen von  ${}_{14}\text{Si}$ ,  ${}_{15}\text{P}$ ,  ${}_{16}\text{S}$ , illustriert in Pauli-Schreibweise.

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

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

## Aufgabe 04

Schreiben

$$\langle r \rangle_{200} = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_{200}^* r \Psi_{200} d^3x = \frac{1}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}} \left( 4r^3 + \frac{r^5}{a_0^2} - \frac{4r^4}{a_0} \right) dr = 48a_0$$

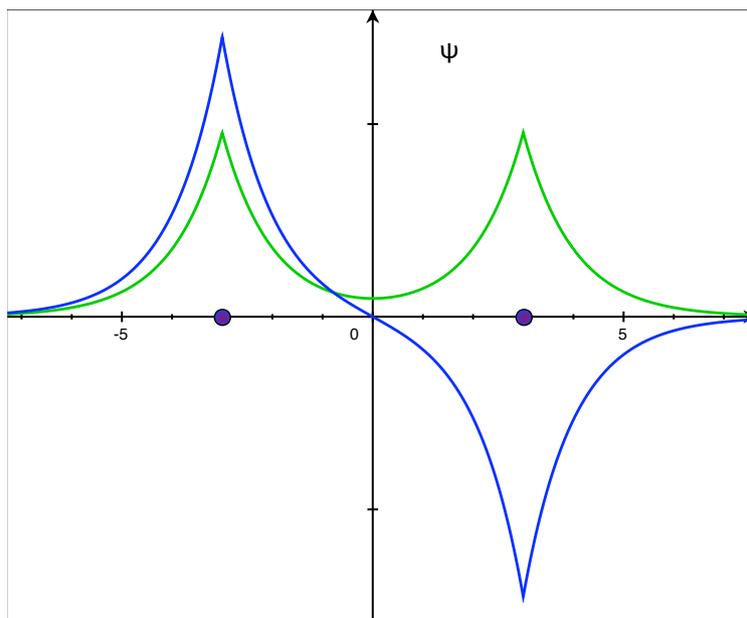
## Aufgabe 05

Im LCAO-Modell wird der Zustands des Moleküls (bei gegebenem Kern-Abstand  $R$ ) beschrieben durch die Superposition zweier, jeweils dem einen oder anderen Atom angehörigen, atomarer Wellenfunktionen beschrieben:

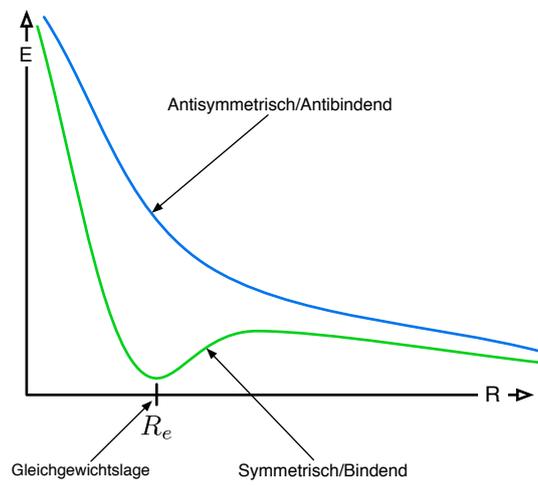
$$\Psi_{s/a}(\mathbf{r}) = \Psi_1^H(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \pm \Psi_2^H(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)$$

Je nach Kernabstand  $R$  und Wellenfunktion (symmetrisch bzw. antisymmetrisch) besitzt das System eine Gesamtenergie  $E(R)$ , deren Verlauf im symmetrischen Fall ein lokales Minimum bei  $R_e$  besitzt und im antisymmetrischen Fall monoton fallend ist ( $\rightarrow$  Molekül kann nicht existieren). So stellt im symmetrischen Fall  $R_e$  einen stabilen Gleichgewichtspunkt dar, die beiden Atome sind dort gebunden! Die Bindung kommt zustande durch:

- Eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons zwischen den beiden Kernen und die somit entstehende Coulomb-Anziehung der beiden Protonen  $\rightarrow$  Verringerung der potentiellen Energie.
- Eine *Verbreiterung* der Elektron-Wellenfunktion im Raum und die damit verbundene Verringerung der kinetischen Energie.



**Abbildung 7:** Verlauf der symmetrischen & antisymmetrischen Elektronen-Wellenfunktion im Grundzustand (das heißt  $\Psi_{A,B} = \Psi_{100}^H$ ) des  $\text{H}_2^+$  Molekül-Ions. Dargestellt ist  $\Psi(0, 0, z)$ .



**Abbildung 8:** Verlauf der Gesamtenergie des  $H_2^+$  Molekülions in Abhängigkeit vom Kernabstand  $R$ .