Atom & Molekülphysik

FSU Jena - WS 2008/2009
Serie 03 - Lösungen

Stilianos Louca

19. November 2008

Aufgabe 01

Jeder Zustand wird beschrieben durch die 4 Quantenzahlen (n, l, m, m_s) (Hauptquantenzahl, Drehimpulsquantenzahl, magnetische Quantenzahl, Spinquantenzahl). Dabei gilt stets

$$n \in \mathbb{N}\ ,\ l = 0, 1, .., n-1\ ,\ m = -l, -l+1, ..., l\ ,\ m_s = \pm\frac{1}{2}$$

wobei der entsprechende Energieeigenwert, mit Berücksichtigung der Feinstruktur, gegeben ist durch

$$E_{n,j} = -\underbrace{\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}}_{E\approx 13.598290\text{ eV}} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

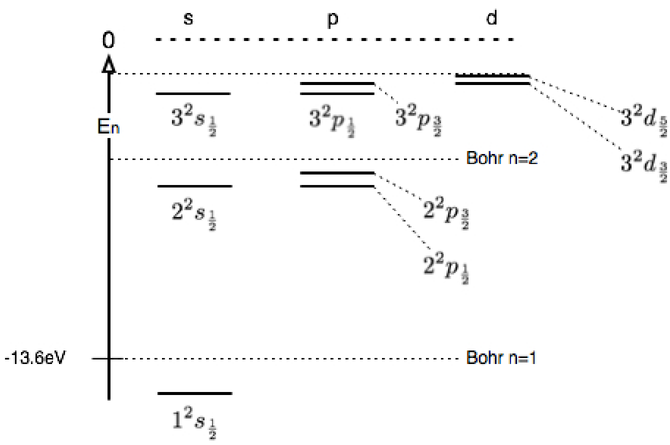
mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl $j = \left|l \pm \frac{1}{2}\right|$. Somit hängt $E_{n,j}$ nur von n und j ab, und der entsprechende Entartungsgrad ergibt sich gemäß

$$g_{nj} = \begin{cases} 2 & : n = 1 \\ 5 & : n > 1, j = \frac{1}{2} \\ 2n-1 & : j = n - \frac{1}{2} \\ 4j+2 & : \frac{1}{2} < j < n - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Speziell ist:

n	**j**	$\mathbf{E_n}$ [eV]
1	1/2	-13.598471
2	1/2	-3.399629
2	3/2	-3.399584
3	1/2	-1.510941
3	3/2	-1.510928
3	5/2	-1.510923

Im folgenden ist das entsprechende Termschema zu sehen.



Bemerke: Ohne Betrachtung der Feinstrukturaufspaltung sind die Energieniveaus gegeben durch

$$E_{nlm} = E_n = \frac{E}{n^2}$$

so dass sich für E_n ein Entartungsgrad von

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$$

ergibt.

Aufgabe 02

a) Für einen Eigenzustand Ψ_{lm} der Impulsoperatoren l^2 und l_z mit $l^2\Psi_{lm} = l(l+1)\hbar^2$ muss gelten

$$l_z\Psi_{lm} = m\hbar \ , \ -l \leq m \leq l$$

Somit ist der *Winkel* α_{lm} des *Drehimpulsvektors* des Zustandes mit der z-Achse gegeben durch

$$\cos\alpha_{lm} = \frac{\langle \Psi_{lm}, l_z\Psi_{lm}\rangle}{\sqrt{\langle \Psi_{lm}, l^2\Psi_{lm}\rangle}} = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \ , \ \alpha \in [0, \pi]$$

Speziell für $l = 2$ ergibt sich

$$\alpha_{lm} \in \left\{ \arccos\sqrt{\frac{2}{3}}, \ \arccos\frac{1}{\sqrt{6}}, \ \frac{\pi}{2}, \pi - \arccos\frac{1}{\sqrt{6}}, \ \pi - \arccos\sqrt{\frac{2}{3}} \right\} \approx \left\{ 0.196\pi, \ 0.366\pi, \ \frac{\pi}{2}, \ 0.634\pi, \ 0.804\pi \right\}$$

Die möglichen Winkel α_{2m} sind in Abbildung 1 illustriert.

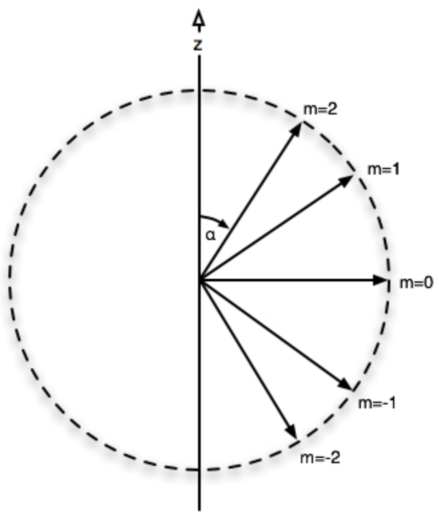


Abbildung 1: Mögliche Einstellwinkel für $l = 2$

b) Mit

$$L = I\omega = \sqrt{\langle \Psi, l^2\Psi\rangle} = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

ergibt sich formal

$$l = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4\left(\frac{I\omega}{\hbar}\right)^2}$$

Speziell für $\omega = 1.11\pi \text{ s}^{-1}, \ I = 1 \times 10^{-3} \text{ Kg m}^2$ ist

$$l \approx 3.3067 \times 10^{31}$$

Aufgabe 03

a) Jeder Zustand wird ohne Beachtung des Spins durch die drei Quantenzahlen (n,l,m) charakterisiert, und entspricht der Eigenfunktion

$$\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

wobei

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+1)!\right]}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \cdot \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad , \; a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

und L_{n-l-1}^{2l+1} bzw. $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ jeweils die zugeordneten Laguerre-Polynome und die Kugelflächenfunktionen sind. Speziell ist

$$\Psi_{10m}(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{\frac{2}{\sqrt{a_0^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}}_{R_{10}(r)} \cdot Y_{0m}(\vartheta,\varphi)$$

$$\Rightarrow \langle \Psi_{10m}, r\Psi_{10m}\rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} r\left|\Psi_{10m}(x)\right|^2 \, dx = \underbrace{\int\limits_{S_2} \left|Y_{10}(\vartheta,\varphi)\right|^2 \, d\vartheta\, d\varphi}_{1} \cdot \int\limits_0^\infty r\left|R_{10}(r)\right|^2 \cdot r^2 \, dr = \frac{4}{a_0^3} \cdot \int\limits_0^\infty e^{-2\frac{r}{a_0}} r^3 \, dr = \frac{3}{2}a_0$$

$$\Psi_{20m}(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{\sqrt{\frac{1}{8a_0^3}}\left(-\frac{r}{a_0}+2\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}}_{R_{20}(r)} \cdot Y_{0m}(\vartheta,\varphi) \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi_{20m}, r\Psi_{20m}\rangle \overset{\text{analog}}{=} \frac{1}{8a_0^3}\int\limits_0^\infty \left(2-\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} r^3 \, dr = 6a_0$$

$$\Psi_{21m}(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{\sqrt{\frac{1}{24a_0^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}}_{R_{21}(r)} \cdot Y_{1m}(\vartheta,\varphi) \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi_{21m}, r\Psi_{21m}\rangle \overset{\text{analog}}{=} \frac{1}{24a_0^5} \cdot \int\limits_0^\infty r^5 e^{-\frac{r}{a_0}} \, dr = 5a_0$$

Anderseits ergibt sich $r_{nl}^{\max}$ durch die Forderung $\frac{d}{dr}\left(r^2\left|R_{nl}\right|^2\right)(r_{nl}^{\max}) \overset{!}{=} 0$ gemäß

$$\Psi_{10m}: \frac{d}{dr}\left(r^2\left|R_{10}\right|^2\right)(r) = \text{const} \cdot \left[r - \frac{r^2}{a_0}\right] \cdot e^{-\frac{2r}{a_0}} \overset{!}{=} 0 \;\Rightarrow\; r_{10m}^{\max} \overset{r_{10m}^{\max}\neq 0}{=} a_0$$

$$\Psi_{20m}: \frac{d}{dr}\left(r^2\left|R_{20}\right|^2\right)(r) = \text{const} \cdot r e^{-\frac{r}{a_0}}\left[-\frac{r^3}{a_0^3} + \frac{8r^2}{a_0^2} - \frac{16r}{a_0} + 8\right]$$

$$= \text{const} \cdot r e^{-\frac{r}{a_0}}\left[\frac{r}{a_0} - (3+\sqrt{5})\right]\left[\frac{r}{a_0} - (3-\sqrt{5})\right]\left[\frac{r}{a_0} - 2\right] \overset{!}{=} 0 \overset{\text{einsetzen}}{\Longrightarrow} r_{20m}^{\max} = (3+\sqrt{5}) \cdot a_0$$

$$\Psi_{21m}: \frac{d}{dr}\left(r^2\left|R_{21}\right|^2\right)(r) = \text{const} \cdot r^3 e^{-\frac{r}{a_0}}\left[4 - \frac{r}{a_0}\right] \overset{r_{21m}^{\max}\neq 0}{\Longrightarrow} r = 4a_0$$

Bemerke:

- Erwartungswert und Wahrscheinlichkeitsmaximum sind im allgemeinen nicht gleich. In den oben betrachteten Fällen gilt sogar stets $r_{nlm}^{\max} \leq \langle r\rangle_{nlm}$.
- Die Wahrscheinlichkeitsmaxima $r_{nl}^{\max}$ entsprechen im Fall $l = n-1$ genau den *Bahnradien* im Bohrschen Atommodell.

b) Schreiben

$$\langle \Psi_{100}, \Psi_{200} \rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \Psi_{100}^*(x)\Psi_{200}(x)\ dx = \int\limits_0^\infty R_{10}^*(r)R_{20}(r)r^2\ dr \cdot \int\limits_{S_2} Y_{00}^*(\vartheta,\varphi)Y_{00}(\vartheta,\varphi)\ d\vartheta\ d\varphi$$

$$\sim \int\limits_0^\infty e^{-\frac{3r}{2a_0}} \left(-\frac{r}{a_0} + 2\right) r^2\ dr = \frac{2}{3} e^{-\frac{3r}{2a_0}} r^3 \bigg|_0^\infty = 0 \ \Leftrightarrow\ \Psi_{100} \perp \Psi_{200}$$