

Atom & Molekülphysik

FSU Jena - WS 2008/2009

Serie 10 - Lösungen

Stilianos Louca

1. Februar 2009

Aufgabe 01

Das durch ein Elektronen erzeugte Magnetfeld \mathbf{B} ergibt sich in 1. Näherung über dessen magnetisches Moment \mathbf{m} gemäß

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{3\mathbf{r} \cdot (\mathbf{r}\mathbf{m}) - r^2\mathbf{m}}{r^5} + \frac{2\mu_0}{3}\mathbf{m}\delta(\mathbf{r})$$

wobei sich \mathbf{r} auf das Elektron bezieht. Im Zustand ns besitzt das Elektron keinen Bahndrehimpuls, so dass sich dessen magnetisches Moment ergibt durch

$$\mathbf{m} = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \mathbf{s}$$

Mit dem Spin

$$\mathbf{s} = m_s \hbar \cdot \mathbf{e}_z$$

ergibt sich das Magnetfeld im Kern durch

$$\mathbf{B}_{\text{Kern}} = \langle \mathbf{B}(-\mathbf{r}) \rangle_{nlm_l} = m_s \cdot \frac{\mu_0}{4\pi} \mu_B g_s \left\langle \frac{r^2 \mathbf{e}_z - 3\mathbf{r} \cdot (\mathbf{r}\mathbf{e}_z)}{r^5} - \frac{8\pi}{3} \delta(-\mathbf{r}) \mathbf{e}_z \right\rangle_{nlm_l}$$

$$= m_s \cdot \frac{\mu_0}{4\pi} \mu_B g_s \left[\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \mathbf{e}_z - 3 \underbrace{\left\langle \frac{z}{r^5} \mathbf{r} \right\rangle}_{\left\langle \frac{z^2}{r^5} \right\rangle \mathbf{e}_z} - \frac{8\pi}{3} \underbrace{\langle \delta(-\mathbf{r}) \rangle}_{|\Psi_{nlm_l}(0)|^2} \mathbf{e}_z \right]$$

wegen
Symmetrie
von Ψ_{nlm}

$$= m_s \cdot \frac{\mu_0}{4\pi} \mu_B g_s \left\langle \frac{1}{r^3} - 3 \frac{\cos^2 \vartheta}{r^3} \right\rangle \mathbf{e}_z - m_s \cdot \frac{2\mu_0}{3} \mu_B g_s |\Psi_{nlm_l}(0)|^2 \mathbf{e}_z$$

$$\stackrel{l=m_l=0}{=} -m_s \cdot \frac{\mu_0}{2} \mu_B g_s \cdot \int_0^\infty \frac{|\Psi_{n00}(\mathbf{r})|^2}{r} \underbrace{\int_0^\pi (1 - 3 \cos^2 \vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta}_0 \, dr \, \mathbf{e}_z - m_s \cdot \frac{2\mu_0}{3} \mu_B g_s |\Psi_{nlm_l}(0)|^2 \mathbf{e}_z$$

als

$$\boxed{\mathbf{B}_{\text{Kern}} = -m_s \cdot \frac{2\mu_0}{3} \mu_B g_s |\Psi_{n00}(0)|^2 \mathbf{e}_z}$$

Speziell für

$$\Psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\Psi_{200}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\Psi_{300}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

ist

$$\mathbf{B}_{\text{Kern}}^{100} = -m_s \cdot \frac{2\mu_0}{3\pi a_0^3} \mu_B g_s \mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{B}_{\text{Kern}}^{200} = -m_s \cdot \frac{\mu_0}{12\pi a_0^3} \mu_B g_s \mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{B}_{\text{Kern}}^{300} = -m_s \cdot \frac{2\mu_0}{81\pi a_0^3} \mu_B g_s \mathbf{e}_z$$

Die Kopplungsenergie der Proton- und Elektron-Spins, ergibt sich als

$$E_{\text{SI}}^{n00} = -g_k \frac{\mu_K}{\hbar} \mathbf{I} \cdot \mathbf{B}_{\text{Kern}}^{n00} = m_s m_I \cdot \frac{2\mu_0}{3} \mu_B \mu_K g_s g_k |\Psi_{n00}(0)|^2$$

mit dem Kern-Magneton μ_K und dessen Landé-Faktor g_k . Speziell für das H-Atom, das heißt $g_k = g_p \approx 5.58$ und $m_I = \pm \frac{1}{2}$, ergeben sich die Kopplungsenergien gemäß

$$E_{\text{SI}}^{100,\text{par/ant}} = \pm \frac{\mu_0}{6\pi a_0^3} \mu_B \mu_K g_s g_k$$

$$E_{\text{SI}}^{200,\text{par/ant}} = \pm \frac{\mu_0}{48\pi a_0^3} \mu_B \mu_K g_s g_k$$

$$E_{\text{SI}}^{300,\text{par/ant}} = \pm \frac{\mu_0}{162\pi a_0^3} \mu_B \mu_K g_s g_k$$

Aufgabe 02

Mit Hilfe der Slater-Regel ergibt sich für ein Elektron im n -ten Energieniveau eines Atoms der Ordnungszahl Z , mit der Abschirmkonstante S_n die Energie

$$E_n^Z = E_1^{\text{H}} \cdot \frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2} = E_1^{\text{H}} \cdot \frac{(Z - S_n)^2}{n^2}$$

mit der Grundzustandsenergie $E_1^{\text{H}} \approx -13.598$ eV des Wasserstoffatoms. Die kinetische Energie eines $n_1 n_2 n_3$ Auger-Elektrons ist unter Vernachlässigung der Austrittsarbeit näherungsweise gegeben durch

$$T_{n_1 n_2 n_3} = E_{n_3} + E_{n_2} - E_{n_1} = E_1^{\text{H}} \cdot \left[\frac{(Z - S_{n_3})^2}{n_3^2} + \frac{(Z - S_{n_2})^2}{n_2^2} - \frac{(Z - S_{n_1})^2}{n_1^2} \right]$$

so dass sich dessen Geschwindigkeit ergibt gemäß

$$v_{n_1 n_2 n_3}^Z = c \cdot \sqrt{1 - \frac{m_e^2 c^4}{(T + m_e c^2)^2}}$$

Speziell für Silber ($Z_{\text{Ag}} = 47$) ergibt sich für ein KLL-Auger-Elektron die Geschwindigkeit

$$v_{\text{KLL}}^{\text{Ag}} \approx 7.775 \times 10^7 \text{ m s}^{-1}$$

Die K_α -Strahlung von Silber entspricht einer Energie von

$$E_{K_\alpha}^{\text{Ag}} = E_L^{\text{Ag}} - E_K^{\text{Ag}} \approx 2.344 \times 10^4 \text{ eV}$$

so dass für, durch diese Strahlung herausgelöste, Elektronen des Molybdän-Atoms ($Z_{\text{Mo}} = 42$) folgende Geschwindigkeiten ergeben:

$$v_K^{\text{Mo}} \approx 1.432 \times 10^7 \text{ m s}^{-1}$$

$$v_L^{\text{Mo}} \approx 8.027 \times 10^7 \text{ m s}^{-1}$$

$$v_M^{\text{Mo}} \approx 8.580 \times 10^7 \text{ m s}^{-1}$$

Die Geschwindigkeit v der Elektronen kann zum Beispiel durch einen mit Kollimator ausgestatteten Massenspektrograph-ähnlichen Aufbau gemessen werden: Sie ergibt sich über den Bahnradius R im Magnetfeld B gemäß

$$v = \frac{eB}{m_e} \cdot R$$

Eine weitere Möglichkeit bietet die Gaskammer.

Aufgabe 03

Nach der LCAO ergibt sich die Wellenfunktion des, zwischen den beiden Protonen geteilten, Elektrons als Überlagerung von atomaren Wellenfunktionen. Aus Symmetrieüberlegungen ergeben sich aus Linearkombination des Atom-Grundzustands

$$\Psi_{100}^{\text{H}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

zwei mögliche Molekülorbitale: ein symmetrisches und ein antisymmetrisches:

$$\Psi_{\text{s/a}} = \frac{1}{\sqrt{2 \pm 2S_{12}}} \cdot [\Psi_{100}^{\text{H},1} \pm \Psi_{100}^{\text{H},2}]$$

$$\Psi_{100}^{\text{H},i}(\mathbf{r}) := \Psi_{100}^{\text{H}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

mit der Normierungskonstante

$$S_{12} := \Re \langle \Psi^{\text{H},1}, \Psi^{\text{H},2} \rangle$$

und den, als fest angenommenen, Proton-Positionen $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Der Verlauf der beiden MO entlang der Proton-Verbindungsachse (z -Achse) ist qualitativ in Abbildung 1 illustriert.

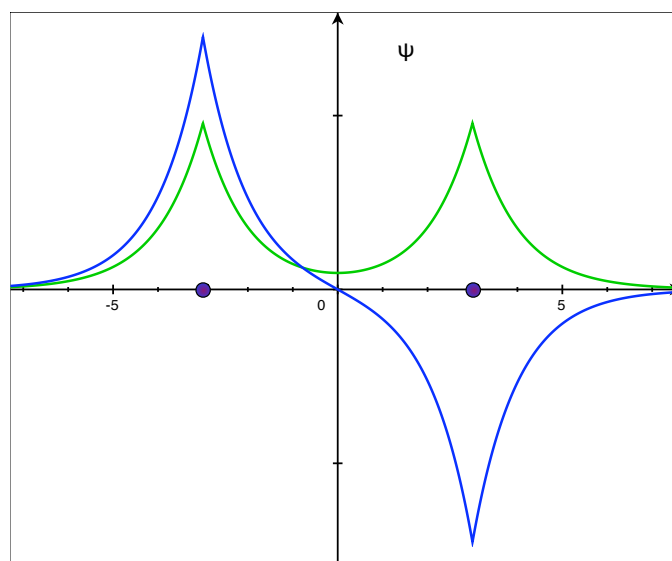


Abbildung 1: Qualitative Darstellung des symmetrischen und antisymmetrischen MO für das H_2^+ Ion. Atom-Abstand betrug $6a_0$, dargestellt ist $\Psi(0, 0, z)$.

Die Bindung (Anziehung) der beiden Protonen kommt nun **bei der symmetrischen Wellenfunktion** durch die nicht-verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons zwischen den Protonen zustande, wodurch sich ein Gleichgewichtsabstand (erniedrigte potentielle Energie) zwischen den beiden Protonen ergibt. Die Gesamtenergie der Zustände ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
 E_{s/a} &= \langle \mathcal{H}_{12} \rangle_{s/a} = \frac{1}{2 \pm 2S_{12}} \langle \Psi^{H,1} \pm \Psi^{H,2}, (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2) (\Psi^{H,1} \pm \Psi^{H,2}) \rangle \\
 &= \frac{1}{2 \pm 2S_{12}} \cdot \left\{ \underbrace{\langle \Psi^{H,1}, \mathcal{H}_1 \Psi^{H,1} \rangle + \langle \Psi^{H,2}, \mathcal{H}_2 \Psi^{H,2} \rangle}_{(E_1^H + E_2^H)(1 \pm 2S_{12})} \pm 2\Re \underbrace{\langle \Psi^{H,2}, \mathcal{H}_1 \Psi^{H,1} \rangle}_{E_1^H \langle \Psi^{H,2}, \Psi^{H,1} \rangle} \pm 2\Re \underbrace{\langle \Psi^{H,1}, \mathcal{H}_2 \Psi^{H,2} \rangle}_{E_2^H \langle \Psi^{H,1}, \Psi^{H,2} \rangle} \right\} \\
 &+ \frac{1}{2 \pm 2S_{12}} \cdot \left\{ \langle \Psi^{H,1}, \mathcal{H}_2 \Psi^{H,1} \rangle + \langle \Psi^{H,2}, \mathcal{H}_1 \Psi^{H,2} \rangle \right\} \\
 &= \frac{1 \pm S_{12}}{2 \pm 2S_{12}} (E_1^H + E_2^H) + \frac{1}{2 \pm 2S_{12}} \cdot \left\{ \langle \Psi^{H,1}, \mathcal{H}_2 \Psi^{H,1} \rangle + \langle \Psi^{H,2}, \mathcal{H}_1 \Psi^{H,2} \rangle \right\}
 \end{aligned}$$

und hängt im allgemeinen von den $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ bzw dem Kernabstand ab! Man kann zeigen, dass die Energie beim asymmetrischen Zustand streng monoton mit dem Kernabstand fällt, der Zustand ist also antibindend da die Kerne ins ∞ streben. Anders als beim symmetrischen Zustand: hier existiert tatsächlich ein lokales Minimum der Energie, in dessen Bereich die Protonen einem bindenden Zustand unterliegen.

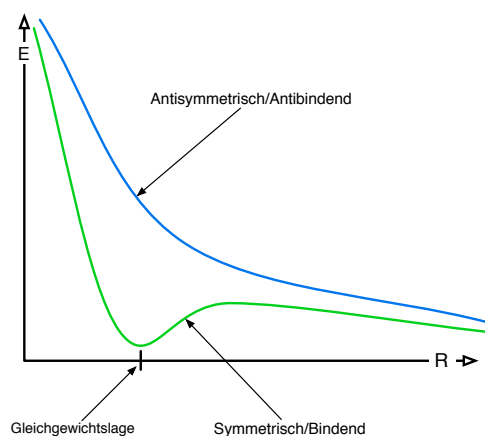


Abbildung 2: Qualitative Darstellung der Zustandsenergie im Bindenden bzw. Antibindenden Zustand im H_2^+ Ion.