Aufgabe 1:

In seinem Atommodell gelang es Bohr durch Einführung einer Quantisierungsvorschrift für den Bahndrehimpuls der Elektronen das Spektrum des Wasserstoffatoms zu beschreiben.

- Wie lautet diese Quantisierungsvorschrift? Erläutern Sie die zugrunde liegende physikalische Vorstellung.
- Leiten Sie mit Hilfe der Quantisierungsvorschrift die möglichen Bahnradien des Elektrons im Wasserstoffatom als Funktion elementarer Konstanten ab.
- Wie lautet die quantenmechanische Lösung des Bahndrehimpulses für das Wasserstoffatom? Vergleichen Sie diese mit der Quantisierungsvorschrift des Bohrschen Atommodells.

a) Man stelle sich das Elektron als stehende Welle auf dem Umlaufbahn vor

$\Rightarrow$ nur bei bestimmten Bahnradien ist eine stehende Welle möglich

$\Rightarrow 2\pi r = n \cdot \lambda$ mit $\lambda \hat{=}$ die Bragg'sche Wellenlänge des Elektrons

$$= n \cdot \frac{h}{p}$$

$$= n \cdot \frac{h}{m \cdot v} \quad n \in \mathbb{Z} \quad n > 0$$

b) Ansatz: Kompensation von Coulomb- und Zentripetalkraft

$$\Rightarrow m \cdot \frac{v^2}{r} = \frac{z \cdot e^2}{4\pi \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2} \quad , v = n \cdot \frac{h}{m \cdot 2\pi r} = n \cdot \frac{h}{m r}$$

$$\Rightarrow m \cdot \frac{h^2 n^2}{m^2 r^3} = \frac{z \cdot e^2}{4\pi \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r^2}$$

$$\Leftrightarrow \frac{h^2 n^2}{m} = \frac{z \cdot e^2}{4\pi \epsilon_0} \cdot r$$

$$\Leftrightarrow r_n = \frac{4\pi \epsilon_0 h^2 n^2}{z e^2 m}$$

c) Quantenmechanisch: $L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \hbar$, $\ell = 0 \dots n-1$

Quantisierungsvorschrift: $m \cdot r \cdot v = L = n \cdot \hbar$

$\Rightarrow$ für große n : $L \stackrel{h-1}{=} \sqrt{(n-1)n} \hbar \approx n \hbar$ (etwas kleiner)

$\Rightarrow$ maximaler quantenmechanischer Drehimpuls stimmt in etwa mit dem aus der Quantisierungsvorschrift überein.

Aufgabe 2:

Das Element Natrium hat die Ordnungszahl 11 und besitzt folglich 11 Elektronen.

- Geben Sie die Elektronenkonfiguration des Grundzustands von Na an, indem Sie jedem Elektron ein Orbital und einen Spinzustand zuordnen. Wie lautet der Grundzustand in spektroskopischer Schreibweise?
- Die charakteristische gelbe Farbe des Emissionslichts von Na stammt von den zwei energetisch niedrigsten elektronischen Anregungszuständen, die sehr nahe beieinander liegen (Na-Dublett). Welche beiden Zustände sind das? Welcher Mechanismus ist für die Aufspaltung in ein Dublett verantwortlich?
- Welcher der beiden Zustände ist der energetisch niedrigere? Begründen Sie das mit den Hundschen Regeln.

a) Wende die Hundschen Regeln an: (dabei $\uparrow \hat{=} m_s = \frac{1}{2}$ $\downarrow \hat{=} m_s = -\frac{1}{2}$)

b) Sprünge zwischen den Hauptschalen sind sehr energiereich

11. Elektron ändert Spin in $m_s = -\frac{1}{2}$ ~~$\uparrow$~~ $\downarrow$ (keine Energieänderung)
11. Elektron bekommt $l=1, m_l=1$
11. Elektron bekommt $l=1, m_l=0$

Spektroskopische Schreibweise

Die Aufspaltung der Energien kommt durch die L-S-Kopplung zustande.

Der energetisch niedrigere Zustand ist der mit $l=1$ und $m_l=1$, da dieses Orbital weiter vom Kern entfernt ist und damit nach den Hundschen Regeln zuerst besetzt wird. Nach den Hundschen Regeln soll der Drehimpuls für jede Unterschale maximiert werden, das aber erst nachdem der Spin maximiert wurde und das wieder erst nachdem die vorigen Unterschalen aufgefüllt sind.

Aufgabe 3:

Ein Strahl von Elementarteilchen der Ladung $-e$, Masse m und Spin $s = \frac{1}{2}$ wird zur Bestimmung ihres g -Faktors entlang der $(-x)$ -Achse durch einen schmalen Spalt S_1 in einen Halbraum geleitet, in dem ein zeitlich konstantes, homogenes Magnetfeld B in z -Richtung anliegt (vgl. Abbildung). Das magnetische Moment $\vec{\mu}$ der Teilchen zeigt vor dem Eintritt einheitlich in y -Richtung, d.h. $\varphi = 0$. Nach Durchlaufen eines Halbkreises tritt der Strahl durch den Spalt S_2 wieder aus dem Halbraum heraus.

- Leiten Sie einen Ausdruck für die Verweilzeit T_H eines Elementarteilchens im linken Halbraum ab.
- Wie groß sind das magnetische Moment $\vec{\mu}$ eines Teilchens sowie dessen Präzessionsfrequenz im Magnetfeld B als Funktion der gegebenen Größen? (Herleitung nicht erforderlich)
- Bestimmen Sie mit Hilfe von (a) und (b) den Drehwinkel φ , um den sich das magnetische Moment nach Austritt aus dem Spalt S_2 bzgl. seiner ursprünglichen Richtung geändert hat.

a) Das Elektron wird auf eine Kreisbahn mit Radius $r = \frac{d}{2}$ gezwungen, durch die Lorentzkraft $\vec{v} \perp \vec{B}$

$$m \frac{v^2}{r} = e \cdot v \cdot B \quad \checkmark \Rightarrow v = \frac{e \cdot B \cdot r}{m}$$

$$\Rightarrow \frac{\pi r}{T_H} = \frac{e B r}{m} \quad \Leftrightarrow \boxed{T_H = \frac{\pi m}{e B}} \quad \checkmark$$

$$v = \frac{2\pi r}{T_H} \cdot \frac{1}{4} = \frac{\pi r}{T_H}$$

b) $|\vec{\mu}| = \cancel{\frac{e \hbar}{2m} g s} = \cancel{\frac{e \hbar}{2m} g s} = \sqrt{s(s+1)} g_s \mu_B = \frac{3}{4} g_s \mu_B$

mit $\mu_B = \frac{e \hbar}{2m}$ (hier gehen x, y , und z -Komponente von μ ein)

Präzessionsfrequenz: $\Delta E = \hbar \Omega = g_s \mu_B \cdot B$

$$\Rightarrow \Omega = \frac{1}{\hbar} g_s \mu_B \cdot B \quad (\text{hier geht nur die } z\text{-Komponente von } \mu \text{ ein})$$

c) $\varphi = \Omega \cdot T_H = \frac{\pi m}{e B} \cdot \frac{1}{\hbar} g_s \frac{e \hbar}{2m} B = \frac{\pi}{2} \cdot g_s \quad \checkmark$

mit $g_s \approx 2 \Rightarrow \varphi \approx \pi \Rightarrow$ halbe Umdrehung

Aufgabe 4:

Ein Elektron sei in einem eindimensionalen Kasten der Breite L mit unendlich hohen Potentialwänden bei $x = 0$ und L eingesperrt.

- Nennen Sie die möglichen Energien E_n des Elektrons im Kastenpotential sowie die zugehörigen *vollständigen* zeitabhängigen Wellenfunktionen $\psi_n(x, t)$. (Herleitung ist nicht erforderlich)
- Eine weitere unendlich hohe Potentialwand mit einer im Vergleich zu L vernachlässigbaren Breite wird bei $x = L/2$ eingefügt und erzeugt so zwei neue gleichartige Kastenpotentiale (1) und (2). Bestimmen Sie die Energieniveaus $E_a^{(1)}$ und $E_b^{(2)}$ sowie die Eigenfunktionen $\psi_a^{(1)}(x, t)$ und $\psi_b^{(2)}(x, t)$ dieser Systeme und vergleichen Sie diese mit denen des ursprünglichen Potentials.
- Wir nehmen an, dass die Wellenfunktion $\Phi(x, t)$ eines ursprünglich im Zustand $n = 2$ befindlichen Elektrons durch das Einschleiben der Wand nicht geändert wird. Drücken Sie unter dieser Voraussetzung $\Phi(x, t)$ durch die neuen Eigenzustände aus. Zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeit, das Elektron bei einer Messung im Potential (1) zu finden, gerade $\frac{1}{2}$ ist. Wie ändert sich die Gesamtwellenfunktion $\Phi(x, t)$ durch die Messung?

a)

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Quantisierungsbedingung:

$$\sin(k \cdot L) = 0 \Rightarrow k_n = \frac{n \cdot \pi}{L}, n \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2}{L^2}$$

$n \in \mathbb{Z}, n > 0$

~~negative~~ Energien sind hier physikalisch nicht sinnvoll.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

$$\Rightarrow \psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \cdot e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-i \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{n^2}{L^2} t} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), 0 \leq x \leq L$$

b) Das Problem ist identisch

$$(1) E_a = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{a^2}{L^2} = 2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{a^2}{L^2}$$

$$(2) E_b = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{b^2}{L^2}$$

Aufgabe 5:

Zwei entgegengesetzt geladene Teilchen seien mit einem harmonischen Potential aneinander gebunden. Die möglichen stationären Eigenzustände des Gesamtsystems sind dann gegeben durch die Wellenfunktionen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

$$\psi_n(x) = e^{-x^2} \cdot H_n(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

mit der verallgemeinerten dimensionslosen Abstandskoordinate x , der Quantenzahl n und den Hermiteschen Polynomen $H_n(x)$. Zeigen Sie in allgemeiner Form, dass die Auswahlregel für Dipolübergänge aus einem Zustand mit Quantenzahl $n > 0$ gegeben ist durch $\Delta n = \pm 1$.

Hinweis: Für die Hermiteschen Polynome gilt die Rekursionsformel

$$x H_n(x) = n H_{n-1}(x) + \frac{1}{2} H_{n+1}(x)$$

Damit ein Übergang stattfinden kann, muss das Dipolmatrixelement nicht verschwinden.

$$\begin{aligned} d_{nm} &= -e \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \cdot x \cdot \psi_n \, dx = -e \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) \cdot x \cdot e^{-x^2} H_n(x) \, dx \\ &= -e \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x) e^{-x^2} \left(n H_{n-1}(x) + \frac{1}{2} H_{n+1}(x) \right) \, dx \\ &= -e \left(\underbrace{n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_{n-1}(x) \, dx}_{(1)} + \frac{1}{2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_{n+1}(x) \, dx}_{(2)} \right) \end{aligned}$$

Wegen der Orthogonalität der Eigenfunktionen verschwindet (1) nur dann nicht, wenn $m = n-1$ und (2) verschwindet nur dann nicht, wenn $m = n+1$ ✓

$$\Rightarrow \Delta n = \frac{1}{2} m - n \frac{1}{2} = \begin{cases} -1 & , \text{ Fall (1)} \\ 1 & , \text{ Fall (2)} \end{cases} \quad \checkmark$$

$$d_{\Delta n=1} = -\frac{e}{2}, \quad d_{\Delta n=-1} = -e \cdot n$$

Fortsetzung von Aufgabe (4)

$$\Phi(x, t) = \xi \psi_1^{(1)}(x, t) + \eta \psi_1^{(2)}(x, t)$$

Aus der Normiertheit folgt: ~~$\xi^2 + \eta^2 = 1$~~

Wenn man sich die Funktionen vorstellt (oder zeichnet)

Dann sieht man $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi_1}$, $\eta = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi_2}$

Damit die Phase noch übereinstimmt, gilt $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$

$$\rightarrow \Phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^{(1)}(x, t) - \psi_1^{(2)}(x, t))$$

Wahrscheinlichkeit:

~~$P = \xi^2 + \eta^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$~~

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1^{(1)}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^{(1)*} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1^{(1)} dx$$

(alle anderen Terme sind wegen der Orthogonalität 0, auch graphisch klar!)

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1^{(1)}|^2 dx = \frac{1}{2}$$

Die Gesamtwellenfunktion bricht zusammen

$$\rightarrow \Phi \rightarrow \Phi'(x, t) = \psi_1^{(1)}(x, t)$$

(9,5)