

MODERNE EXPERIMENTALPHYSIK I
KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

Atome und Moleküle
KLAUSUR 2012
Lösung

10. August 2013

Revision r131.

Ralf Farkas

ralf.farkas@student.kit.edu

— & —

Anna-Sophie Frick

anna-sophie.frick@student.kit.edu

Einige Größen und Formeln:

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ eV s} \approx 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \approx 4 \cdot 10^{-15} \text{ eV s} \quad (1)$$

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s} \quad (2)$$

$$\mu_B = 5,5788 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T} \quad (3)$$

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (4)$$

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 10 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad (5)$$

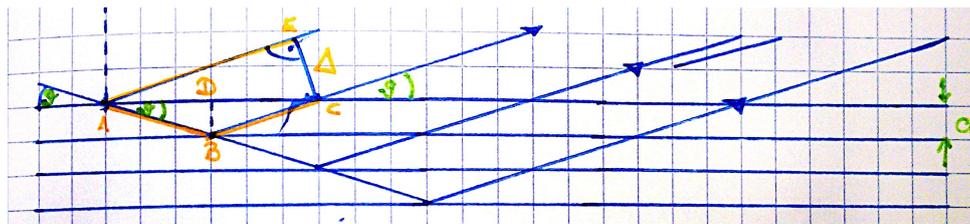
$$\sqrt{16} = 4 \quad (6)$$

$$2\pi \approx 6 \quad (7)$$

Aufgabe 1 – Bragg-Reflexion

Aufgabenstellung Skizzieren Sie die Bragg-Reflexion. Geben Sie den Zusammenhang zwischen Braggwinkel und Abstand der Netzebenen (Formel) an.

4P



Die Braggformel ist

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad , \quad (1.1)$$

Wobei d der Abstand der Netzebenen/Gitterebenen, λ die Wellenlänge der Röntgenstrahlung, n die Beugungsordnung und θ den Braggwinkel bezeichnet.

Aufgabe 2 – Teilchen-Welle-Dualismus

Aufgabenstellung Nennen Sie je einen Versuch, mit dem zweifelsfrei der Wellen- bzw. Teilchencharakter von Licht nachgewiesen werden kann. Beschreiben Sie stichwortartig die Versuche (1-3 Zeilen).

4P

Eine Auswahl:

Wellencharakter

- Allgemein: Beugung, Interferenz, Polarisation
- YOUNG: Doppelspaltexperiment
 - klassische Teilchen, klassische Wellen und Quantenobjekte werden auf einen Doppelspalt gelenkt → entsteht ein Beugungsmuster?

Teilchencharakter (= Photonen)

- Photoeffekt

- Zinkplatte wird negativ geladen (Elektronenüberschuss). Treffen Photonen (Licht) auf die Platte (und ist die Energie der Photonen groß genug) wird diese entladen, dh. Elektronen verlassen die Platte. Bei einer positiv geladenen Platte funktioniert dieser Versuch nicht.
- Der Photoeffekt beschreibt das Freisetzen elektrisch geladener Teilchen aus einem Material, wenn dieses von elektromagnetischer Strahlung (z.B. Licht) getroffen wird.
- Photonen haben viel Energie $\hat{=}$ hochfrequentiges Licht $\hat{=}$ kurzwelliges Licht
- EINSTEIN:

$$E_{\text{kin, max}} = h \cdot f - W_A \quad (2.1)$$

mit Austrittsarbeit W_A , Frequenz f in Hz und Plancksches Wirkungsquantum h (= Geradensteigung bei E_{kin} über f).

- Comptoneffekt / COMPTON-Streuung

- Röntgenstrahlung trifft auf freie Elektronen. Die Röntgenphotonen werden dann gestreut und das Elektron in seiner Richtung abgelenkt.
- Die Wellenlänge λ' des gestreuten Photonen hängt vom Streuwinkel ab. Es gilt

$$\lambda' > \lambda \quad (2.2)$$

- Comptonwellenlänge

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e \cdot c} \quad (2.3)$$

- THOMSON-Streuung

- Grenzfall der COMPTON-Streuung für kleine Photonenenergien.
- Es findet kein Impulsübertrag vom Photon auf das Elektron statt.

- RAYLEIGH-Streuung

- Verallgemeinerung der THOMSON-Streuung für gebundene Elektronen, Atome oder Moleküle (statt freie Elektronen)
- Verursacht Blau bzw. Rot des Himmels

- Gravitationseffekte des Photons

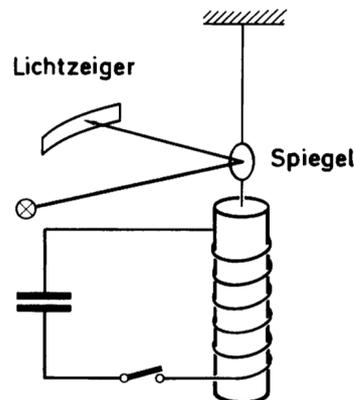
- Plancksche Hohlraumstrahlung

Aufgabe 3 – Einstein-de-Haas-Effekt

Aufgabenstellung Beschreiben Sie kurz den Einstein-de-Haas-Effekt. Welche Größe wird hier bestimmt?

4P

- Eine Eisennadel wird mit Hilfe einer Spule magnetisiert. Ändert man die Magnetisierung der Probe, so ändert sich die Richtung der atomaren Drehimpulse.



- Der Einstein-de-Haas-Effekt wird zum Bestimmen des Verhältnisses von magnetischem Moment zum Gesamtdrehimpuls (Gyromagnetisches Verhältnis) verwendet. Er ist auch ein mikroskopischer Nachweis des Elektronenspin (Es gibt einen mit dem Elektromagneten verbundenen Drehimpuls).

Aufgabe 4 – Zeeman-Effekt

Aufgabenstellung Was versteht man unter dem anomalen Zeeman Effekt?

2P

- Atomarer Magnetismus ist Überlagerung von Spin- und Bahnmagnetismus
- Die am optischen Übergang beteiligten Terme besitzen wegen unterschiedlichem Anteil von Spin- und Bahnmagnetismus unterschiedliche g -Faktoren
 - Aufspaltung der Terme in Grund- und Anregungszustand
 - größere Zahl von Linien im Spektrum
- auch andere g als 1 und 2 sind erlaubt!

Aufgabe 5 – Lamb-Shift

Aufgabenstellung Was versteht man unter Lamb-Shift? Nennen Sie die Größenordnung der Verschiebung (in eV und in MHz).

3P

- Zustände mit gleichem Gesamtdrehimpuls j sind energetisch verschieden.

-
- Allgemein lautet das Ergebnis: Die Niveaus mit gleichen Quantenzahlen n und j , aber verschiedenem l fallen nicht zusammen.
 - Dirac besagt, dass Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl n und gleicher Gesamtdrehimpulsquantenzahl j entartet sind. Der Lamb-Shift bewirkt eine Aufhebung dieser Entartung zwischen den beiden Energieniveaus $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ aufgrund quantenelektrodynamischer Effekte.

Aufgabe 6 – NMR

Aufgabenstellung Erklären Sie NMR inklusive einer Skizze des Aufbaus.

6P

→ siehe Übungsblatt 9, Aufgabe 3

Aufgabe 7 – Röntgenstrahlung

Aufgabenstellung

5P

1. Wie entsteht Röntgenstrahlung? Ist Röntgenstrahlung kontinuierlich oder diskret?
 2. Wie wird Röntgenstrahlung absorbiert?
 3. Was versteht man unter Absorptionskanten?
1. Röntgenstrahlung wird im allgemeinen dadurch erzeugt, dass eine Anode mit schnellen Elektronen beschossen wird. Das Röntgenspektrum hat einen kontinuierlichen Teil (Bremspektrum) und einen diskreten Teil (Charakteristische Strahlung).
 2. Damit Röntgenstrahlung von einem Atom absorbiert werden kann, muss ein Elektron aus einer inneren Schale in einen weniger stark gebundenen Zustand gehoben werden. Da nun die benachbarten Schalen bereits besetzt sind, müssen die freien Zustände für das absorbierende Elektron genutzt werden. Meistens ist deshalb mit der Absorption eine Ionisierung verbunden.
 3. Absorptionskanten treten bei zunehmender Frequenz auf, wo Quantenenergie des Röntgenquantes gerade zum Absorptionsübergang aus tiefen Schalen reicht. = Sprunghaftes Wachsen des Absorptionskoeffizienten.

Aufgabe 8 – Rayleigh, Raman

Aufgabenstellung Was ist der Unterschied zwischen Rayleigh Streuung und Raman Streuung? Was haben sie gemeinsam? Wo wird die Raman Streuung angewendet (Anwendungsbeispiel)?

5P

- Sowohl bei der Rayleigh- als auch bei der Raman-Streuung wird ein Atom oder Molekül durch ein Photon angeregt. Das Photon wird absorbiert und das Molekül emittiert ein anderes Photon.
- Bei der Rayleigh-Streuung (elastische Streuung) besitzt das emittierte Photon die gleiche Energie, Frequenz und Wellenlänge wie das anregende Photon. Bei der Raman-Streuung (unelastische Streuung) hat das emittierte Photon eine vom anregenden Photon verschiedene Energie, meist eine geringere.
- Die Raman-Streuung ist die Grundlage der Raman-Spektroskopie, mit der man diverse Materialeigenschaften wie Kristallinität, Kristallorientierung, Zusammensetzung, Temperatur und Dotierung untersuchen kann.

Aufgabe 9 – l -Entartung

Aufgabenstellung Welche Potentialform hebt die l -Entartung auf?

2P

Die Entartung bezüglich l wird aufgehoben, dh. die Energiestufen werden nun auch l -abhängig, wenn das Potential zwar noch kugelsymmetrisch ist, aber nicht mehr die Form $-\text{const}/r$ hat.

m -Entartung Die m -Entartung lässt sich nur dann aufheben, wenn dem Potential eine nicht-kugelsymmetrische Störung überlagert wird, dh. ein elektrisches oder magnetisches Feld.

Aufgabe 10 – Moleküle

Aufgabenstellung

10P

1. Wie kann man das Absenken der Energieniveaus in einem Molekülorbital qualitativ mit der Unschärferelation erklären?
2. Was versteht man unter einem heteronuklearen Molekül? Können die Atome des Moleküls hierbei unterschiedlich sein? Nennen Sie vier mögliche Bindungsarten.
3. Was versteht man bei einem Wasserstoff-Molekülion unter einer geraden und einer ungeraden Wellenfunktion? Zeichnen Sie die beiden Wellenfunktionen Ψ . Welche ist bindend und warum? Wo ist in diesem Fall die Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit am größten?

4. Man stellt fest, dass das Kohlenstoffatom in der äußeren Elektronenschale zwei s- und zwei p-Elektronen besitzt. Dementsprechend müssten diese Orbitale bei den C-H-Bindungen im Methan (CH_4) zu unterschiedlich Bindungen führen. Tatsächlich stellt man aber fest, dass die vier Bindungen gleichartig und nicht unterscheidbar sind. Erklären Sie das.

1. ...
2. Ein Molekül, welches aus verschiedenen Atomen besteht. Dabei gibt es keine räumliche Symmetrie, keine geraden bzw. ungeraden Wellenfunktionen, und ein Auftreten von Ionenbindungen ist möglich.
Bindungen:
 - Kovalenzbindung (symm. Ladungsverteilung)
 - Ionenbindung (verschobene Ladung erzeugt anziehende Kraft zwischen Polen (Dipolmoment))
 - Van-der-Waals-Bindung (Dipolwechselwirkung)
 - (Hybridisierung der Atomorbitale ?)
3.
 - **gerade Wellenfunktion** Superposition der Wellenfunktion φ_a und φ_b
 - Elektronendichte zwischen Kernen
 - bindendes Orbital
 - Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Kernen
 - **ungerade Wellenfunktion** Differenz von φ_a und φ_b
 - keine Elektronendichte zwischen Kernen
 - Lockernder Zustand
 - keine Wahrscheinlichkeit
4. Beim Methan hat man den Effekt der sp^3 -Hybridisierung: Das doppelt besetzte, kugelförmige 2s-Orbital wird mit den hantelförmigen 2p-Orbitalen (2 einfach besetzt, eins unbesetzt) zu vier gleichen, keulenförmigen sp^3 -Hybridorbitalen kombiniert, die mit je einem Elektron besetzt sind. Diese richten sich tetraedisch im Raum aus und bilden mit den 1s-Elektronen des Wasserstoffs gleichartige Atombindungen.

Aufgabe 11 – Wasserstoffatom

Aufgabenstellung Ergänzen Sie im Bild:

1. Aufspaltungen (incl. Feinstruktur) incl. Nomenklatur. (Beispiel: $3p_{3/2}$)
2. Übergangsauswahlregeln
3. Übergänge (zwischen $n = 2$ und $n = 3$). Zeichnen Sie sie ein. Wieviele gibt es?

16P

4. Nennen Sie fünf (haupt-)inneratomare Wechselwirkungen (verantwortlich für Niveaus, Aufspaltung, Verschiebung). Geben Sie typische Größenordnungen für die relativen Niveaushiftungen an.

1.
 - **BOHR 1913:** Bohrsches Atommodell. Energieniveaus sind die Lösungen der Schrödingergleichung ohne Berücksichtigung des Spin.
 - **SOMMERFELD 1916:** Ellipsen statt Kreisbahnen, dadurch Einführung von l .
 - **DIRAC 1927:** Entdeckung der relativistischen Quantenmechanik. Aufspaltung in Feinstrukturen wegen ls -Kopplung. Zusätzliche relativistische Korrekturen, alle Niveaus nach unten verschoben. Stellt l -Entartung wiederher.

2. Übergangsauswahlregeln:

$$\Delta l = \pm 1 \quad (11.1)$$

$$\Delta m_j = 0, \pm 1 \quad (11.2)$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad (11.3)$$

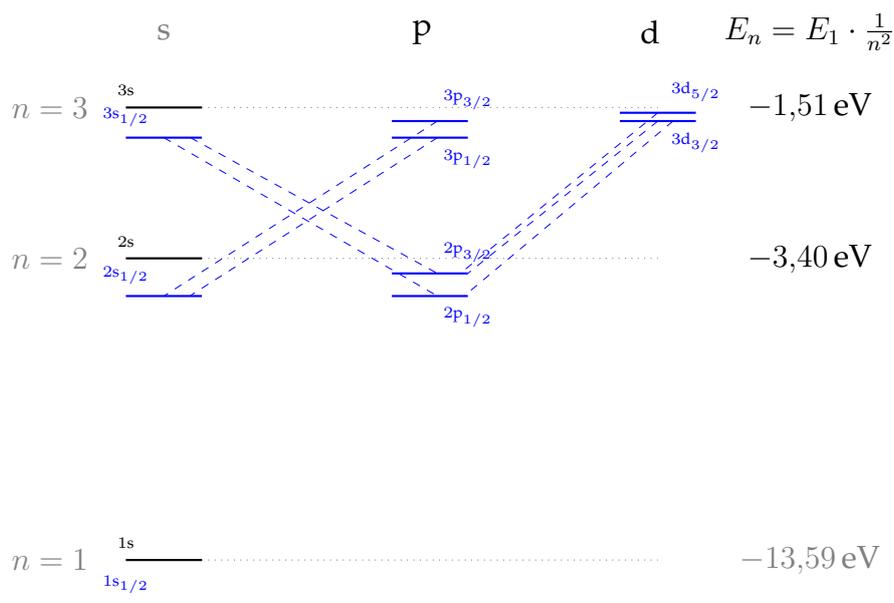
außerdem (trivial):

$$\Delta n \neq 0 \quad (11.4)$$

$$(11.5)$$

Es reicht die Angabe von Δl , Δm_j und Δj .

3. Es gibt insgesamt 7 Übergänge.
4.
 - Coulomb-Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron: Führt zu Energieniveaus
 - Spin-Bahn-Kopplung und relativistische Korrekturen \rightarrow Feinstruktur $\sim 10^{-5}$ eV
 - Lamb-Shift $\sim 10^{-6}$ eV
 - Hyperfeinstruktur $\sim 10^{-7}$ eV



Bohr: schwarz

Sommerfeld

Dirac: blau

Aufgabe 12 – Gesamtdrehimpuls

Aufgabenstellung Zwei Elektronen bilden den Gesamtspin $S = 1$ und einen Bahndrehimpuls $L = 2$.

4P

1. Welche möglichen Werte hat der Gesamtdrehimpuls? (Skizze)
2. Welche Winkel bilden S und L für $J = 2$? (Zahl nicht verlangt, nur Formel)

1. Wegen

$$|S - L| \leq J \leq S + L \quad (12.1)$$

folgt

$$J = 1, 2, 3 \quad (12.2)$$

2. Durch Umformen des Cosinussatzes:

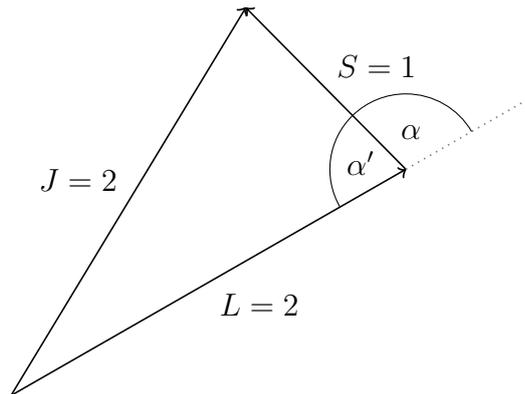
$$|\vec{J}|^2 = J^2 = S^2 + L^2 - 2SL \cos \alpha' \quad (12.3)$$

erhält man

$$\alpha' = \arccos\left(-\frac{J^2 - S^2 - L^2}{2SL}\right) = \arccos\left(\frac{1}{4}\right) = 75,52^\circ \quad (12.4)$$

und damit für den gesuchten Winkel α :

$$\alpha = 180^\circ - \alpha' = 104,48^\circ \quad (12.5)$$



Aufgabe 13 – Wellenlänge Elektron

Aufgabenstellung Welche Wellenlänge haben Elektronen, die mit einer Potentialdifferenz von $U = 0,5 \text{ V}$ beschleunigt wurden? (Zahlenwerte gefragt)

4P

Aus der deBroglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (13.1)$$

folgt mit dem Impuls p

$$p = mv \quad , \quad (13.2)$$

der kinetischen Energie

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 \quad (13.3)$$

und der Energie durch das elektrische Feld

$$E = eU \quad (13.4)$$

folgt der Zusammenhang

$$\lambda = \frac{h}{m\sqrt{\frac{2E_{\text{kin}}}{m}}} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \quad (13.5)$$

Aufgabe 14 – Hypothetisches Einelektron-Atom

Aufgabenstellung Nehmen Sie ein hypothetisches rein kugelsymmetrisches Einelektron-Atom an. Der Übergang in diesem Atom von $n = 4$ nach $n = 1$ emittiert ein Photon der Energie $15,0 \text{ eV}$.

12P

1. Berechnen Sie die Energien $n = 1$ bis $n = 4$.
2. Welche Wellenlänge λ hat das Photon beim Übergang von $n = 4$ nach $n = 1$?
3. Überprüfen Sie die folgende Aussage: „Ein Elektron der Energie $15,3 \text{ eV}$ ist

gerade in der Lage das Atom zu ionisieren.“ (Atom im Grundzustand)

4. Welche kinetische Energie $E_{\text{kin-Ende}}$ hat ein freies Elektron mit der Anfangsenergie von $E_{\text{kin-Anfang}} = 6 \text{ eV}$ nach einem Stoß mit diesem Atom? (Atom im Grundzustand)
5. Wie groß sind die möglichen Werte von $E_{\text{kin-Ende}}$ bei einer Anfangsenergie von $E_{\text{kin-Anfang}} = 13 \text{ eV}$ des freien Elektrons nach einem Stoß? (Atom im Grundzustand)

1. Zunächst wird die Energie der $n = 1$ -Schale berechnet. Mit

$$E_n = E_1 \frac{1}{n^2} \quad (14.1)$$

$$\Rightarrow E_4 = E_1 \frac{1}{16} \quad (14.2)$$

und

$$E_4 = E_1 + \Delta E \quad (14.3)$$

erhält man

$$\frac{1}{16} E_1 = E_1 + \Delta E \quad (14.4)$$

$$\curvearrowleft \left(\frac{1}{16} - 1 \right) E_1 = \Delta E \quad (14.5)$$

$$\curvearrowleft E_1 = \frac{1}{\frac{1}{16} - 1} \Delta E = -16 \text{ eV} \quad (14.6)$$

Damit erhält man

n	1	2	3	4	∞
E_n (eV)	-16	-4	-1,78	-1	0

2. Die Wellenlänge ist

$$\Delta E = h\nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad (14.7)$$

$$\curvearrowleft \lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta E} = 80 \text{ nm} \quad (14.8)$$

3. Zur Ionisierung des Atoms im Grundzustand benötigt man die Energie

$$E_I = E_\infty - E_1 = 16 \text{ eV} \quad (14.9)$$

Da das Elektron $15,3 \text{ eV}$ kinetische Energie besitzt, ist es nicht in der Lage ein Atomelektron komplett vom Kern zu lösen. Die Aussage ist damit falsch.

4. Eine Energie von 6 eV reicht nicht aus, um ein Elektron von $n = 1$ in eine andere Schale zu heben, das Atom wird dadurch nicht angeregt. Das Elektron behält seine Energie und es gilt

$$E_{\text{kin-Ende}} = E_{\text{kin-Anfang}} = 6 \text{ eV} \quad . \quad (14.10)$$

5. 13 eV reichen aus, um ein Elektron auf die zweite Schale zu heben, da $13 \text{ eV} > E_2 - E_1 = 12 \text{ eV}$. Bei einem zentralen Stoß ist:

$$E_{\text{kin-Ende}} = 13 \text{ eV} - 12 \text{ eV} = 1 \text{ eV} \quad , \quad (14.11)$$

Bei einem Streustoß wird das Elektron lediglich abgelenkt, also

$$E_{\text{kin-Ende}} = E_{\text{kin-Anfang}} = 13 \text{ eV} \quad . \quad (14.12)$$

Aufgabe 15 – Radialpotential

Aufgabenstellung Die Radial-Eigenfunktionen des $1s$ -Zustandes des Wasserstoffatoms ist kugelsymmetrisch und hat die Form:

18P

$$\Psi(r) = a e^{-\frac{r}{r_1}} \quad . \quad (15.1)$$

r_1 ist der erste Bohrsche Radius und a eine durch die Normierung festzulegende Konstante.

1. Leiten Sie eine Formel für die Energie dieses Zustandes aus der Schrödinger-Gleichung her.
2. Bestimmen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(r)$ des Elektrons im Abstand r vom Kern.
3. In welchem Abstand ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am größten?
4. Zeichnen Sie die beiden Funktionen $\Psi(r)$ und $W(r)$.

→ Siehe Übungsblatt 7, Aufgabe 5