Physik IV – Atome und Moleküle

Sommer 2005, Prof. Wim de Boer, Universität Karlsruhe

Übungsleiter: Frank Hartmann, Forschungszentrum Karlsruhe, Tel.: 07247 82 6330; Email: Frank.Hartmann@cern.ch

LÖSUNGEN Übung 5

1. Spektroskopische Vorbemerkung!
   (a) In Luft ist die entsprechende Wellenlänge etwas kleiner! Brechnungsindex! $\lambda_{LUFT} = \lambda_{vac}/n$
   (b) Frequenz ist vom Medium unabhängig! $\nu = c/\lambda_{vac} = c/(n\lambda_{Luft}[Hz]$
   (c) Wellenzahl $\bar{\nu} = \nu/c = 1/\lambda_{vac} = 1/(n\lambda_{LUFT})[cm^{-1}]$ Ist Mediumsunabhängig, ist n abhängig; c ist Mediumsunabhängig und ν nicht. Energiebabhängigkeit: $E = \bar{\nu}hc$

2. Termschema, Lichtemission, Stösse bei einem hypothetischem Einelektronenatom (bei Teilaufgabe c und d befindet sich das Atom im Grundzustand!).

n	1	2	3	4	5	∞
$E_n(eV)$	-15.6	-5.3	-3.1	-1.4	-0.8	0

   (a) Wie groß ist die Ionisierungsenergie des Atoms?
   L: $E_{Ion} = 15.6eV = E_\infty - E_1$
   (b) Welche Wellenlänge hat ein Photon, das beim Übergang von $n = 3$ nach $n = 1$ emittiert wird?
   L: $\Delta E(3 \to 1) = 15.6 - 3.1 = 12.5eV$
   (c) Welche kinetische Energie E_{kin} hat ein freies Elektron mit der Anfangsenergie von $6eV$ nach einem Stoß mit diesem Atom?
   L: 6eV kann das Atom nicht anregen (mindestens 10.3 eV). Die Energie bleibt bei 6eV
   (d) Wie groß sind die möglichen Werte von E_0 bei einer Anfangsenergie von $12eV$ des freien Elektrons?
   L: E verliert 10.3 eV, es bleiben exakt 1.7eV übrig (oder das e macht einen inelastischen Stoß, dann ist $E_{kin} = 12eV$)

3. **Ausser dem Energiesatz müsste auch der Impulssatz erfüllt sein.** Das Photon hat die Energie $W = h\nu$ und den Impuls $p = h/\lambda = W/C$, wie jedes hochrelativistische Teilchen. Es kann also keinen Photonen-Atom-Stoss geben, bei dem die ganze Photonenenergie in kinetische Energie des Atoms überginge (keinen elastischen Stoss), denn dazu müsste das Atom ebenfalls genau mit c weiterfliegen, wozu die Photonenergie nicht reicht. Nun möge eine Anregungsenergie W' etwas tiefer als W liegen, die Differenz $W - W'$ soll in kinetische Energie übergehen: $W - W' = \frac{1}{2}mv^2$. Gleichzeitig lautet der Impulssatz $W/c = mv$. Es folgt $W - W' = \frac{1}{2}\frac{W^2}{mc^2}$. Da mc^2 die Ruheenergie des Atoms, einige GeV beträgt, erlaubt dies bei optischen Übergängen (einige eV) nur relative Abweichungen von etwa 10^{-9} von der scharfen Übergangsenergie. Übrigens entspricht dies genau der Doppler-Verstimmung: $W - W' = h(\nu - \nu') = h\nu'\frac{v}{c} = \frac{W^2}{mc^2}$. Es ist hier wie oft schwer, Ursache und Wirkung zu trennen,

weil es sich bewegt, oder bewegt es sich, weil as absorbiert hat? Wohl aber kann das Atom dem Photon enen Teil von dessen Energie entziehen, der gerade einem Übergang entspricht, Das Photon fliegt dann mit veränderter Frequenz weiter: Raman-Effekt.

4. Absorptions-Balmerlinien sind ziemlich schwer zu erzeugen. Warum? Unter welchen Bedingungen gelingt das doch?
   A: Eine Balmer-Absorptionslinie entspricht einem Übergang eines Elektrons von n=2 in einen höheren Zustan. Das setzt voraus, dass es genügend viele Atome gibt, die bereits im Zustand n=2 angeregt sind, wenn ein weiteres Photon sie überrascht. Die Gleichgewichtsbesetztung des Zustandes n=2 ist $n^* = n_0 c^{-\frac{W}{kT}}$, wobei W=10eV der ersten Lyman-Linie entspricht. Bei Zimmertemperatur ist $kT = \frac{1}{4}eV$, es ist also bestimmt kein einziges Atom im Gleichgewicht balmer-absorptionsfähig. Selbst in der Sonnenphotosphäre ist die relative Besetzung nur $e^{-20} \approx 10^{-9}$. Je heisser der Stern ist, desdo stärker werden i.allg. die Balmer Absortionslinien. Auch ein Laserstrahl kann genügend ATome in den Zustand n=2 schaffen, um Balmer Absorptions zu ermöglichen.

5. Zusatzaufgabe: Lösung zur auseinanderfliessenden Welle

(*)

$$\psi(x,t) = N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{k^2}{2\Delta k^2}} e^{i[kx-\omega t]} \, dk$$

$$\psi(x,t=0) = N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2/2\Delta k^2} e^{ikx} \, dk = N e^{-\frac{x^2}{4}\cdot 2\Delta k^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\Delta k^2}\underbrace{\left(k - ix\cdot\Delta k^2\right)^2}_{t'}} dk$$

$$a = \frac{1}{2\Delta k^2} \qquad dt' = dk$$

$$b = -ix$$

$$= N e^{-\frac{x^2}{2}\Delta k^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\Delta k^2} t'^2} \, dt' =$$

$$= N e^{-\frac{x^2}{2}\Delta k^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\frac{1}{\sqrt{2}\Delta k}} = N \sqrt{\pi}\sqrt{2}\,\Delta k \, e^{-\frac{x^2}{2}\Delta k^2}.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,t=0)\psi^*(x,t=0)\, dx = \left[N\sqrt{2\pi}\,\Delta k\right]^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/\Delta k^2} \, dx =$$

$$= \left[N\sqrt{2\pi}\,\Delta k\right]^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta k} = N^2\, 2\pi\, \Delta k \sqrt{\pi} \stackrel{!}{=} 1.$$

$$\underline{\underline{N = \frac{1}{\sqrt{2\Delta k}\;\pi^{3/4}}}}.$$

(s. $|\psi(x,t)|^2$ unten)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, dx = \frac{\cancel{m\Delta k}}{\cancel{\sqrt{\pi(m^2+\hbar^2\Delta k^4 t^2)}}} \frac{\cancel{\sqrt{\pi}}}{\cancel{m\Delta k}} \cancel{\sqrt{(m^2+\hbar^2 t^2\Delta k^4)}} = 1 \quad \forall t.$$

Abbildung 1: *Teil 1*

(*)

$$\psi(x,t) = N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{k^2}{2\Delta k^2}} e^{i\left[kx - \frac{\hbar}{2m} k^2 t\right]} dk =$$

freies Teilchen:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$= N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t\right) k^2 + ikx} dk =$$

$$a = \frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t$$

$$b = -ix$$

$$= N e^{-\frac{x^2}{4} \frac{1}{\frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t\right) \underbrace{\left(k - ix/2 \frac{1}{\frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t}\right)^2}_{\xi}} dk$$

$$d\xi = dk$$

$$= N e^{-\frac{x^2}{4} \frac{1}{\frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t}} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2\Delta k^2} + \frac{\hbar}{2m} t}} -$$

$$\frac{1}{2\Delta k^2} + i\frac{\hbar}{2m} t = \frac{2m + i\hbar\, 2\Delta k^2 t}{4m\,\Delta k^2} = \frac{m + i\hbar\,\Delta k^2 t}{2m\,\Delta k^2}$$

$$= \sqrt{\frac{\cancel{2} m \Delta k^{\cancel{2}} \pi}{m + i\hbar\Delta k^2 t}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\cancel{2\Delta k}}\; \pi^{3/4}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4} \frac{2m\Delta k^2}{m + i\hbar\Delta k^2 t}}$$

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi}\,(m + i\hbar\,\Delta k^2 t)}} \cdot e^{-\frac{x^2 m\,\Delta k^2}{2(m + i\hbar\Delta k^2 t)}}.$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi(x,t)\,\psi^*(x,t) = \frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{1}{m^2 + \hbar^2\Delta k^4 t^2}} \cdot e^{-\frac{x^2 m\Delta k^2}{2}} \cdot e^{-\frac{x^2 m\Delta k^2}{2}\left[\frac{m - i\hbar\Delta k^2 t}{m^2 + \hbar^2\Delta k^4 t^2} + \frac{m + i\hbar\Delta k}{m^2 + \hbar^2\Delta k^4}\right.}$$

$$(e^z)^* = e^{z^*}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{m\Delta k}{\sqrt{\pi(m^2 + \hbar^2\Delta k^4 t^2)}} \cdot e^{\frac{-x^2 m^2\Delta k^2}{m^2 + \hbar^2 t^2 \Delta k^4}}.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist zu jeder Zeit eine Gaußfunktion mit der Breite:

$$\Delta x(t) = \frac{\sqrt{m^2 + \hbar^2\Delta k^4 t^2}}{m\Delta k}.$$

↳ Wellenpaket wird breiter mit der Zeit

(*) Faktor $e^{-k^2/2(\Delta k)^2}$:

- Gauß-Funktion
- Gewichtung für ebene Welle $e^{i(kx - \omega(k)t)}$

Abbildung 2: *Teil 2*