

Blatt 5

Aufgabe 14

$$\left. \begin{array}{l} - \text{Kugelsymmetrie} \\ - \iiint \psi^*(r) \psi(r) d^3r \neq 0 \end{array} \right\} s\text{-Orbital}$$

Anzahl der nicht-trivialen Nullstellen (s. Vorlesung)

$$n - (l+1) \stackrel{!}{=} 4$$

$$\rightarrow n = 5$$

$$\Rightarrow 5s\text{-Orbital}$$

Aufgabe 15

$$n = 4$$

$$l = 0$$

$$l = 1$$

$$l = 2$$

$$l = 3$$

$$m = 0$$

$$m = 0, \pm 1$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$$

Das magnetische Moment $\vec{\mu}_l$ steht antiparallel zum Bahndreh-

impuls: $\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$

Gesucht: $\langle L_z \rangle$ möglichst parallel zur negativen z -Richtung

$$l = 3 ; m_l = -3$$

$$\cos \theta = \frac{|m_l|}{\sqrt{l(l+1)}} = \frac{3}{\sqrt{3 \cdot 4}} \Rightarrow \theta = 30^\circ$$

Aufgabe 16:

a) $\vec{\mu} = -g \mu_B \frac{\vec{J}}{\hbar}$ mit $g=1$ für $\vec{J} = \vec{L}$ Bahndrehimpuls
 $g=2$ für $\vec{J} = \vec{S}$ Spindrehimpuls

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m_e}$$

$\Rightarrow |\vec{\mu}| = \frac{\mu_B}{\hbar} \sqrt{l(l+1)} \hbar$: Bahnmoment

$l=1$: $\vec{\mu} = \mu_B \sqrt{1(1+1)} = \sqrt{2} \mu_B$

b) Einschalten des $\vec{B}$ -Feldes $\Rightarrow \vec{B} \updownarrow \vec{L}_e$ (s. a. o. Aufgabe 15)

Skizzen:

Bei Elektronen sind mag. Moment und Drehimpuls antiparallel

Drehimpulserhaltung: $\vec{L}_e + \vec{L}_{\text{Zylinder}} = \vec{0}$
 $\Rightarrow \vec{L}_{\text{Zylinder}} \parallel \vec{B} \Rightarrow \vec{\omega}_{\text{Zylinder}} \parallel \vec{B}$

$\Rightarrow$

c) $L_e = N_{Fe} \cdot \hbar$; N_{Fe} : Anzahl aller Eisen-Atome.

$L_{Zyl} = I_{Zyl} \cdot \omega$; I_{Zyl} : Trägheitsmoment

$= \frac{1}{2} m R^2 \omega$

$= \frac{1}{2} \frac{N_{Fe}}{N_A} m_{Fe} R^2 \omega \stackrel{!}{=} L_e = N_{Fe} \hbar$

$\Rightarrow \omega = \frac{2 \hbar N_A}{m_{Fe} R^2}$; $f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{2 \hbar \cdot N_A}{2\pi \cdot 55,8 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{mol}} \cdot (5 \cdot 10^{-3} \text{m})^2} = 1,44 \cdot 10^5 \frac{1}{\text{s}}$
 $(\Rightarrow T \approx 10 \text{h}!)$

Aufgabe 17:

Energieaufspaltung beim Zeeman-Effekt: $\Delta E = g \mu_B B_0$ (Spin $\frac{1}{2}$ -System!)

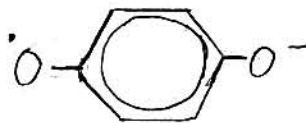
$\Rightarrow$ Resonanzbedingung: $h \nu = g \mu_B B_0$

$$\Rightarrow g = \frac{h \nu}{\mu_B B_0} = \frac{h}{\mu_B} \frac{9,2 \text{ GHz}}{327,74 \text{ mT}} = 2,0056$$

Resonanzbedingung für $\nu = 9,80 \text{ GHz}$ für $g = 2,0056$

$$B_0 = 349,11 \text{ mT}$$

1,4-Benzochinon - Anion:



Aufgabe 18:

a) 2p-Zustand: $n = 2$; $l = 1$, $s = \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow j = l + s = \frac{3}{2} \quad \text{oder} \quad j = l - s = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$$

4-fach entartet

$$\Rightarrow m_j = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

2-fach entartet

b) $W_{LS} = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$ mit $\lambda = \frac{e^2 \mu_0}{8 \pi m_e} \langle r^{-3} \rangle$

[Anmerkung: Faktor $\frac{1}{2}$ wegen Thomas-Korrektur bzw. Thomas-Präzession (J.B. Jackson); da Ruhesystem des e^- kein Inertialsystem]

Berechnung von $\langle r^{-3} \rangle$

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

Kugelflächenfunktionen sind normiert $\Rightarrow$ Integration ergibt 1.

$\Rightarrow$ Berechnung des Radialteils:

$$\langle r^{-3} \rangle = \int r^{-3} R_{n,l}^2(r) r^2 dr$$

$$= \int \frac{1}{r} R_{n\ell}^2(r) dr = \underset{\substack{n=2 \\ \ell=1 \\ z=1}}{\uparrow} \frac{4}{3} \left(\frac{1}{2a_0} \right)^3 \frac{1}{4a_0^2} \underbrace{\int_0^\infty \frac{1}{r} r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} dr}_{= a_0^2 \text{ (s. Bronstein)}}$$

$$= \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{a_0^3} = \frac{1}{24} \left(\frac{1}{a_0} \right)^3$$

Umschreiben von $\vec{L} \cdot \vec{S}$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + 2\vec{L}\vec{S} + \vec{S}^2$$

$$\Rightarrow \vec{L}\vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) = \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))$$

$\Rightarrow$ Insgesamt ergibt sich:

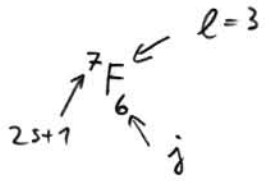
$$W_{LS} = \underbrace{\frac{e^2 \mu_0}{8\pi m_e} \frac{1}{24} \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 \frac{1}{2} \hbar^2}_{= \frac{2\hbar^2}{2}} (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))$$

$$\text{Für } j = \frac{3}{2}: \quad W_{\frac{3}{2}} = \frac{2\hbar^2}{2} \left(\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right) = \frac{2\hbar^2}{2}$$

$$\text{Für } j = \frac{1}{2}: \quad W_{\frac{1}{2}} = \frac{2\hbar^2}{2} \left(\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right) = -2 \frac{2\hbar^2}{2}$$

$$\Rightarrow \Delta E = W_{\frac{3}{2}} - W_{\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} 2\hbar^2 = 7,26 \cdot 10^{-24} \text{ J}$$

Aufgabe 19



$$\begin{aligned} 2s+1 &= 7 \\ \Rightarrow s &= 3 \\ l &= 3 \\ j &= 6 \end{aligned} \left. \vphantom{\begin{aligned} 2s+1 &= 7 \\ \Rightarrow s &= 3 \\ l &= 3 \\ j &= 6 \end{aligned}} \right\} \Rightarrow j = l + s$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = |\vec{L}| \cdot |\vec{S}| \cdot \cos \alpha \quad ; \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - L^2 - S^2)$$

$\uparrow$
s. Aufgabe 18

$$\begin{aligned} \Rightarrow \cos \alpha &= \frac{\frac{1}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))}{\sqrt{s(s+1)} \sqrt{l(l+1)}} \\ &= \frac{1}{2} \frac{6 \cdot 7 - 2 \cdot 3 \cdot 4}{3 \cdot 4} = \frac{3}{4} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \alpha = 41,4^\circ$$