Physik IV – Atome und Moleküle; Sommer 2009
Prof. Thomas Müller, Universität Karlsruhe
Dr. Frank Hartmann, Universität Karlsruhe

Lösungen 7;
Übungen (16.06 Dienstag/ 18.06. Donnerstag)

1. Ein paar Fragen bezüglich des Wasserstoffatoms zum **'frei'** in den Übungen vorzutragen, bzw. an die Tafel zu skizzieren!

   (a) Warum kann man Abhängigkeiten $r,\ \phi,\ \Theta$ separieren?
   Lösung:
   Potential nur von r abhängig, daher Trennung von r zu $\Phi,\ \Theta$ möglich. Separation von Φ und Θ möglich, da Potential isotrop!

   (b) Erklären Sie die Quantenzahlen n,l,m! Wie lauten die Abhängigkeiten?
   Lösung:
   $n = 1, 2, 3, ...$ Hauptquantenzahl (Energie) Variable des Radialanteils
   $l = 0, 1, ..., n-1$ Drehimpulsquantenzahl; Drehimplus: $|L| = \sqrt{(l+1)l} \cdot \hbar$
   $m_l = -l, -l+1, ..., 0, ..., +l$ magnetische Quantenzahl
   Die Drehimpulsquantenzahl l misst hierbei den Bahndrehimpuls des Elektrons, und die magnetische Quantenzahl m seine Projektion auf eine beliebige Richtung, die im Allgemeinen als z bezeichnet wird (z steht dabei fr die z-Achse) oder schlicht gesagt die räumliche Orientierung des Elektronen-Bahndrehimpuls.

   (c) Was bedeutet 'Entartung'? Gibt es bei n=1 Entartung?
   Lösung: Zu einem Energiewert gibt es mehrere Zustände. Z.B. Beim Wasserstoffatom gibt es $k = n^2$ Zustände gleicher Energie. Man sagt der Energiewert E_n ist k-fach entartet. $1^2 = 1$ daher ist der Energiezustand für n=1 nicht entartet. Die Entartung gibt es be allen a/r-Potentialen. Sie wird unter Berücksichtung weiterer Effekte, z.B. relativistische Effekte, Elektronenspin, Kernpotential aufgehoben (siehe spätere Vorlesung)

   (d) Zeichnen Sie das Termschema bis n=4!
   Lösung:

2. Radial-Eigenfunktionen des 1s-Zustandes des Wasserstoffatoms Schrödingergleicheiung

   (a) $\Psi(r) = ae^{-\frac{r}{r_1}}$
   Radialteil der Schrödingergleichung:
   $[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}]R(r) = E \cdot R(r)$
   s-Zustand: $l = 0$:
   $[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}]ae^{-\frac{r}{r_1}} =$

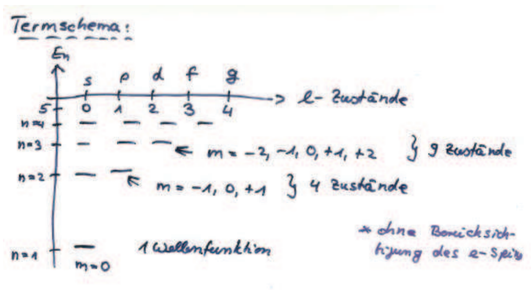

Abbildung 1: *Einfaches Termschema*

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{-1}{r_1})-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}]ae^{-\frac{r}{r_1}}=$$
$$[-\frac{\hbar^2}{2m}[-\frac{2}{r}\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_1^2}]-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}]ae^{-\frac{r}{r_1}}=E\cdot ae^{-\frac{r}{r_1}}$$
$$(\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{r_1}-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0})+(\frac{\hbar^2}{2emr_1^2}-E)r=0$$
$$E=-\frac{\hbar^2}{2mr_1^2}=\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}\text{ mit } r_1=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m}$$

(b) $W(1)dr = |\Psi|^2 4\pi r^2 dr$ mit $4\pi r^2$ = Fläche der Kugelschale mit Radius r
$W(1)dr = 4\pi r^2 a^2 e^{-\frac{2r}{r_1}} dr$
$W(1) = 4\pi r^2 a^2 e^{-\frac{2r}{r_1}}$

(c) $\frac{dW(r)}{dr} = 0 \Rightarrow 2r - r^2\frac{2}{r_1} = 0 \Rightarrow r = r_1$

(d)

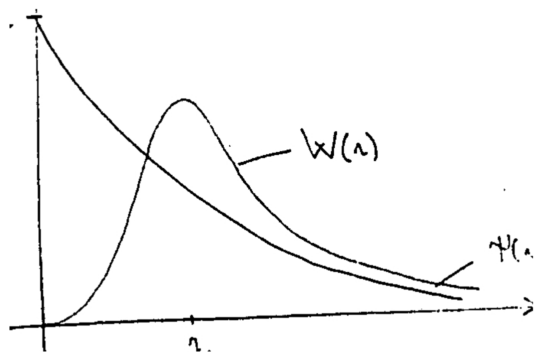

Abbildung 2: *Funktionen*

3. Positronium → H-ähnliches Atom
Unten wird recht ausführlich gerechnet, im Prinzip können die Bohr-Sommerfeldschen Formeln für das H-Atom benutzt werden unter Berücksichtigung der effektiven Masse:
(0) effektive Masse: $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2} = \frac{m_e m_e}{2m_e} = \frac{m_e}{2}$

(1) Bohr-Modell: $E = \frac{1}{2}\mu v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$; $[E = E_{pot} + E_{kin}]$
(2) Kräftegleichgewicht: $\frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$
(3) Quantisierung des Drehimpulses $\mu v r = n\hbar$
(2) $\mu\omega^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$
(3) $\mu\omega r^2 = n\hbar \rightarrow r = \sqrt{\frac{n\hbar}{\mu\omega}}$ (4)
in (2): $\mu\omega^2(\frac{n\hbar}{\mu\omega})^{3/2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \rightarrow \sqrt{\omega} = \frac{e^2\mu^{1/2}}{4\pi\epsilon_0(n\hbar)^{3/2}} \rightarrow \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\mu e^4}{32\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3}\frac{1}{n^3}$
Im Grundzustand n=1: $\mu = \frac{m_e}{2} \rightarrow \frac{\omega}{2\pi} = \frac{m_e e^4}{64\pi^3\epsilon_0^2\hbar^3} = 3.288 \times 10^{15}\frac{1}{s}$
in (4): $r = (\frac{n\hbar}{\mu})^{1/2}\sqrt{\frac{16\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3}{\mu e^4}n^3} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}n^2 = (mit\ n = 1\ und\ \mu = m_e/2)\ \frac{8\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 1.059 \times 10^{-10}m.$

in (1): $E = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{1}{2}\mu(\frac{\mu e^4}{16\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3}\frac{1}{n^2})^2 \times (\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}n^2)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\frac{1}{n^2} = \frac{1}{32}\frac{\mu e^4}{\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{1}{64}\frac{m_e e^4}{\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = -6.80eV$

4. Myon-Atom
   (a) (siehe letzte Aufgabe, gleiche Rechnung)
   $\mu = \frac{m_\mu m_e}{m_\mu + m_e} = \frac{207 m_e m_e}{207 m_e + m_e} = 1.625 \times 10^{-28}kg$
   $E_n = -\frac{1}{32}\frac{Z^2\mu e^4}{\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = -2531\frac{Z^2}{n^2}eV$ (Achtung im Haken-Wolf wurde statt μ nur m_μ eingesetzt, deswegen das abweichende Ergebnis)
   (b) $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Z\mu e^2}n^2 = 2.84 \times 10^{-3}\frac{n^2}{Z}\mathring{A}$
   (c) $h\nu = E_{n=2} - E_{n=1} = -\frac{1}{32}\frac{Z^2\mu e^4}{\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}(1/4 - 1) = 1898Z^2eV$

5. Drehimpulsoperatoren
   (a) $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, \hat{L}^2] &= \\
&= [\hat{L}_z, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_z, \hat{L}_y^2] + [\hat{L}_z, \hat{L}_z^2] \\
&= [L_z, L_x]L_x + L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_y]L_y + L_y[L_z, L_y] \\
&= i\hbar(L_yL_x + L_xL_y - L_xL_y - L_yL_x) = 0
\end{aligned}$$

   (b) Warum Eigenwert $l(l+1)$ und nicht l^2

$$\begin{aligned}
\hat{l}_-\hat{l}_+F_{l,m} &= (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)F_{l,m} \\
&= (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + i\hat{l}_x\hat{l}_y - i\hat{l}_y\hat{l}_x)F_{l,m} \\
&= (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar\hat{l}_z)F_{l,m} \\
&= (\omega^2\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2)F_{l,m}
\end{aligned}$$

   Setze $F_{l,m} = F_{l,m_{max}} = F_{l,l}$
   dann gilt $\hat{l}_+F_{l,m_{max}} = 0$ oder damit $\omega^2 = m_{max}^2 - m_{max} = 0$
   $\omega^2 = m_{max}(m_{max}+1) = l(l+1)$

*Übungsleiter: Frank Hartmann, Forschungszentrum Karlsruhe,
Tel.: +41 (76) 487 4362; Email: Frank.Hartmann@cern.ch*

www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/∼hartmann/atom09