Übungen zu Atom- und Quantenphysik (SS 2019)

Krüger/Weinheimer

Blatt 13: Ausgabe: 27.06.2019, Abgabe: 04.07.2019

Aufgabe 55: Elektron im Magnetfeld [11 Punkte, schriftlich]

Ein Elektron mit der Ladung $Q = -e$ befinde sich in einem Magnetfeld, das durch ein Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}) = (-y\,B,\,0,\,0)$ beschrieben wird.

a) [2P] Geben Sie den Hamiltonoperator des Systems in Ortsdarstellung an.

b) [2P] Benutzen Sie zur Lösung der stationären Schrödingergleichung den folgenden Produktansatz:

$$\varphi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\,k_x\,x}\,\mathrm{e}^{i\,k_z\,z}\,f(y)\;.$$

Geben Sie die resultierende Differentialgleichung für $f(y)$ an.

c) [4P] Bestimmen Sie die Eigenwerte und die normierten Eigenfunktionen des Hamiltonoperators durch Vergleich mit dem in Aufgabe 32 behandelten verschobenen harmonischen Oszillator. Normieren Sie dabei $\varphi(\vec{r})$ in x- und in z-Richtung jeweils auf Intervalle der Länge L.

d) [3P] Geben Sie für den energetisch tiefsten Zustand die Energie und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an. Wie groß ist der Entartungsgrad dieses Zustandes?

Aufgabe 56: Aufhebung der l-Entartung [12 Punkte, mündlich]

Ein Elektron befinde sich unter dem Einfluss des Potentials

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\,\pi\,\epsilon_0}\,\frac{1}{r} + \frac{\beta\,\hbar^2}{2\,m\,r^2}\;,$$

wobei β eine kleine positive reelle Zahl ist. Analog zur Behandlung eines Elektrons im Coulombpotential ist es zweckmäßig, die radiale Wellenfunktion $g(\rho) = u(\rho\cdot a_B)$ in der Form

$$g(\rho) = e^{-\lambda\,\rho}\cdot f(\rho) \qquad \text{mit} \qquad \lambda = \sqrt{-E\,\frac{2\,m\,a_B^2}{\hbar^2}}$$

darzustellen.

a) [4P] Zeigen Sie, dass $f(\rho)$ der Differentialgleichung

$$f''(\rho) - 2\,\lambda\,f'(\rho) + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{\widetilde{l}\,(\widetilde{l}+1)}{\rho^2}\right) f(\rho) = 0$$

genügt, wobei $\widetilde{l}\,(\widetilde{l}+1) = l\,(l+1) + \beta$ ist.

b) [6P] Stellen Sie $f(\rho)$ in der Form

$$f(\rho) = \rho^{\widetilde{l}-l}\sum_{j=l+1}^{\infty} A_j\,\rho^j = \sum_{j=l+1}^{\infty} A_j\,\rho^{j+\widetilde{l}-l}$$

dar und bestimmen Sie aus dem Abbruchkriterium der Reihe die Eigenenergien E in Abhängigkeit von n, $\widetilde{l}$ und l.

c) [2P] Zeigen Sie, dass $\widetilde{l}$ für $\beta \ll l + \frac{1}{2}$ die Form

$$\widetilde{l} = l + \frac{\beta}{2l + 1}$$

hat. Geben Sie für diesen Fall E in Abhängigkeit von n und l an. Stellen Sie für $\beta = 0{,}05$ die Energieniveaus für $n = 1$, 2 und 3 im Vergleich zu denen für das reine Coulombpotential graphisch dar.

Aufgabe 57: Hund'sche Regel **[6 Punkte, mündlich]**

Leichte und mittelschwere Multielektronenatome kann man dadurch gut beschreiben, dass zunächst die Z Elektronenspins s_i zu einem Gesamtelektronenspin S und die Z Bahndrehimpulse l_i zu einem Gesamtbahndrehimpuls L gekoppelt werden. Die Hund'schen Regeln eines Mehrelektronenatoms besagen (bezogen auf eine Unterschale):

- Gefüllte (Unter-)Schalen koppeln zu Spin und Bahndrehimpuls Null.
- Der Zustand mit dem höchst möglichen Gesamtelektronenspin S einer Konfiguration besitzt die niedrigste Energie.
- Für einen gegebenen Gesamtelektronenspin S besitzt der Zustand mit dem größten Bahndrehimpuls L die niedrigste Energie.

a) [2P] Diskutieren Sie die anschaulichen Gründe für diese Regeln.

b) [4P] Was sind die möglichen Gesamtspin- und Gesamtdrehimpulswerte für Kohlenstoff- und Sauerstoff-Atome im Grundzustand? Welche davon sind die jeweils energisch günstigsten nach den Hund'schen Regeln?

Kohlenstoff hat die Konfiguration $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$. Da sowohl die $1s$- als auch die $2s$-Unterschale komplett gefüllt sind und deren Spins und Bahndrehimpulse jeweils zu Null koppeln, müssen nur die beiden $2p$-Elektronen betrachtet werden. Erstellen Sie eine Tabelle aller möglichen $m_{l,1}$-, $m_{l,2}$-, $m_{s,1}$- und $m_{s,2}$-Kombinationen, die das Pauli-Verbot berücksichtigen (keine gleichen Quantenzahlen der beiden ununterscheidbaren Elektronen) und bestimmen Sie die dazugehörigen Gesamtspin- und Gesamtbahndrehimpulsmagnetquantenzahlen m_S und m_L. Daraus können Sie die möglichen Gesamtspins S und Gesamtbahndrehimpulse L ablesen. Müssen Sie für Sauerstoff wirklich alles neu ausrechnen?

Aufgabe 58: Helium-Atom **[4 Punkte, schriftlich]**

Die Ionisierungsenergie des $2s$-Elektrons eines angeregten He-Atom (das andere Elektron befindet sich im $1s$-Grundzustand) beträgt 5,19 eV im Triplett-Zustand, und 4 eV im Singulett-Zustand, jene für das $2p$-Elektron beträgt 4,04 eV im Triplett-Zustand und 3,4 eV im Singulett-Zustand. Berechnen Sie daraus den Wert für die Elektronenabstoßung J und die Austauschwechselwirkung K für die beiden Fälle in denen das angeregte Elektron im $2s$- oder im $2p$-Zustand ist.