

Experimentalphysik IV (PEP4)

Dozent. Prof. S. Jochim

Übung 3

Abgabe am Montag, den 5.5.2014 vor der Vorlesung

Aufgabe 1: Wasserstoff-Wellenfunktion (4P)

- Skizzieren Sie den Radialanteil für den 1s-Zustand im Wasserstoff ($n = 1, l = 0$). Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in diesem Zustand im Abstand r vom Kern zu finden? Wie lautet das Ergebnis für den 2s- und 2p-Zustand ($n = 2, l = 0, 1$).
- Berechnen Sie den Radius maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $P_{\max}$ und den Erwartungswert $\langle r \rangle$.
- Diskutieren Sie den Unterschied zwischen der maximalen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $P_{\max}$ und dem Erwartungswert der radialen Koordinate $\langle r \rangle$. Vergleichen Sie die Ergebnisse für $\langle r \rangle$ und $P_{\max}$ mit dem Bohrschen Atommodell (siehe z.B. Demtröder 3, S.108, 4. Auflage).

Lösung: a)

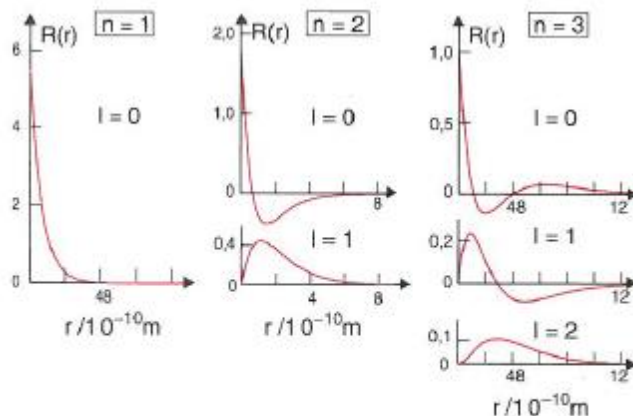


Abb. 5.3. Die Radialfunktionen $R_{n,l}(r)$ des Wasserstoffatoms für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2, 3$. Die Ordinate ist in Einheiten von $10^8 \text{ m}^{-3/2}$ aufgetragen

Bild 1 (Aus Demtröder 3)

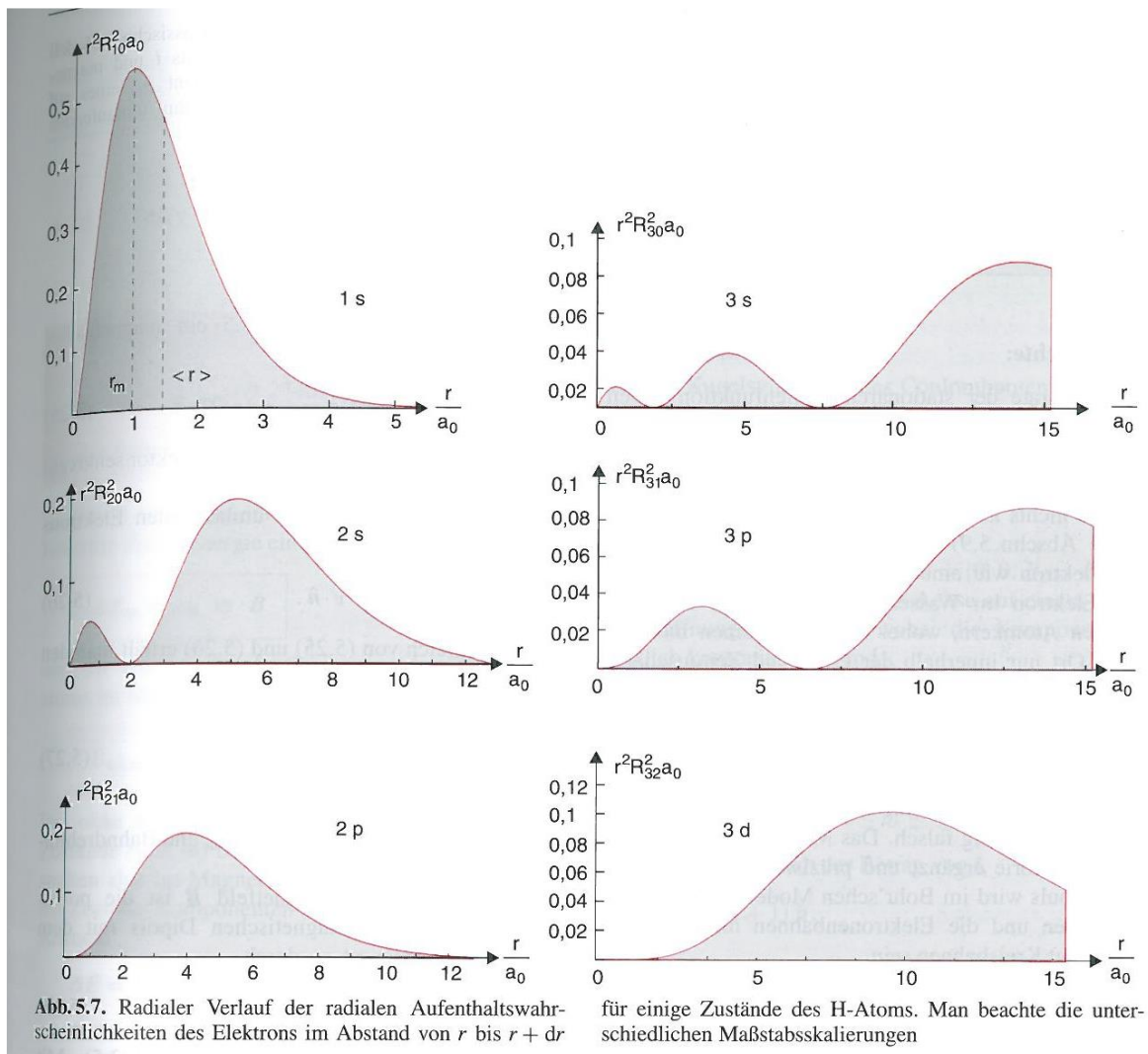


Bild 2. (Aus Demtröder 3).

a)

Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit lautet $w(r)dr = |4\pi r^2 R_{nl}^2|$

Mit: $\rho(n) = \frac{Zr}{na_0}$, siehe Skript

$$R_{10}^2 \propto (e^{-\rho(1)})^2, \rho(1) = \frac{Zr}{1a_0}$$

$$R_{20}^2 \propto (e^{-\rho(2)} (1 - \rho(2)))^2, \rho(2) = \frac{Zr}{2a_0}$$

$$R_{21}^2 \propto (e^{-\rho(2)} \rho(2))^2, \rho(2) = \frac{Zr}{2a_0}$$

Normierung

$$\int_0^\infty dr 4\pi r^2 R_{10}^2 = \frac{a_0^3 \pi}{Z^3}, \text{ d.h. } w_{10}(r) dr = \frac{4e^{-\frac{2rZ}{a_0}} r^2 Z^3}{a_0^3}$$

$$\int_0^\infty dr 4\pi r^2 R_{20}^2 = \frac{8a_0^3 \pi}{Z^3}, \text{ d.h. } w_{20}(r) dr = \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r^2 Z^3 \left(1 - \frac{rZ}{2a_0}\right)^2}{2a_0^3}$$

$$\int_0^\infty dr 4\pi r^2 R_{21}^2 = \frac{24a_0^3 \pi}{Z^3}, \text{ d.h. } w_{21}(r) dr = \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r^4 Z^5}{24a_0^5}$$

b)

maximale Wahrscheinlichkeitsdichte für $\frac{d}{dr} w(r) = 0$

$$\frac{d}{dr} w_{10}(r) = 0 = \frac{8e^{-\frac{2rZ}{a_0}} r Z^3}{a_0^3} - \frac{8e^{-\frac{2rZ}{a_0}} r^2 Z^4}{a_0^4}, \text{ daraus folgt } \{ r = \frac{a_0}{Z}, r = 0 \}. \text{ Für } Z = 1 \rightarrow r = a_0$$

(Bohr'scher Radius)

$$\frac{d}{dr} w_{20}(r) = 0 = -\frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r^2 Z^4 \left(1 - \frac{rZ}{2a_0}\right)}{2a_0^4} + \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r Z^3 \left(1 - \frac{rZ}{2a_0}\right)^2}{a_0^3} - \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r^2 Z^4 \left(1 - \frac{rZ}{2a_0}\right)^2}{2a_0^4}, \text{ daraus folgt } \{r = 0, r = \frac{2a_0}{Z}, r = \frac{3a_0 \pm \sqrt{5}a_0}{Z}\}$$

$$\frac{d}{dr} w_{21}(r) = 0 = \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r^3 Z^5}{6a_0^5} - \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}} r^4 Z^6}{24a_0^6}, \text{ daraus folgt } \{r = 0, r = \frac{4a_0}{Z}\}$$

Aber der Erwartungswert lautet:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{10} &= \int_0^\infty dr w_{10}(r) r = \int_0^\infty dr r \frac{4e^{-\frac{2rZ}{a_0}} r^2 Z^3}{a_0^3} \\ &= \left[-\frac{e^{-\frac{2rZ}{a_0}} (3a_0^3 + 6a_0^2 r Z + 6a_0 r^2 Z^2 + 4r^3 Z^3)}{2a_0^2 Z} \right]_0^\infty = \frac{3a_0}{2Z} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle r \rangle_{20} &= \int_0^\infty dr w_{20}(r)r = \int_0^\infty dr r \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}r^2Z^3(1-\frac{rZ}{2a_0})^2}}{2a_0^3} \\ &= \left[\frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}Z^3}(-a_0^2r^4 - \frac{48a_0^6}{Z^4} - \frac{48a_0^5r}{Z^3} - \frac{24a_0^4r^2}{Z^2} - \frac{8a_0^3r^3}{Z} - a_0r^5Z)}{8a_0^5} \right]_0^\infty = \frac{6a_0}{Z}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle r \rangle_{21} &= \int_0^\infty dr w_{21}(r)r = \int_0^\infty dr r \frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}r^4Z^5}}{24a_0^5} \\ &= \left[-\frac{e^{-\frac{rZ}{a_0}}(120a_0^5 + 120a_0^4rZ + 60a_0^3r^2Z^2 + 20a_0^2r^3Z^3 + 5a_0r^4Z^4 + r^5Z^5)}{24a_0^4Z} \right]_0^\infty = \frac{5a_0}{Z}\end{aligned}$$

- c) Während der Abstand der **maximalen** Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit dem Bohrschen Radius übereinstimmt ist der Erwartungswert $\langle r \rangle$ größer. Dies liegt an der Form des Verlaufs der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit (siehe Bild 2). Für den Erwartungswert $\langle r \rangle$ gilt, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb $\langle r \rangle$ gleich derjenigen außerhalb $\langle r \rangle$ sein muss. D.h. in Bild 2 müssen die Flächen unterhalb der Kurve links und rechts von $\langle r \rangle$ gleich sein.

Aufgabe 2: Kreisbahnen im Wasserstoffatom (4P).

Für die Bahndrehimpulsquantenzahl der Wasserstoffzustände mit maximalem Drehimpuls gilt $\ell = n - 1$. Der radiale Anteil der Wellenfunktion für diese Zustände ist gegeben durch

$$R_{n,\ell=n-1} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+1} (2n)!}} \cdot e^{-\frac{r}{n \cdot a_0}} \cdot r^{n-1}$$

- Bestimmen Sie die Erwartungswerte $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$ und die relative Unschärfe des Bahnradius $\Delta r/r$ (mit $\Delta r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2$). Wie entwickelt sich die relative Unschärfe des Bahnradius für $n \rightarrow \infty$?
- Berechnen Sie den Bahnradius und die Unschärfe für $n = 50$, $l = 49$ und vergleichen Sie diese Zahlen mit den Vorhersagen des Bohrschen Atommodells.

Hinweis: $\int e^{-\frac{bx}{n}} x^m dx = -\left(\frac{n}{b}\right)^{m+1} e^{-\frac{bx}{n}} (m! + x \cdot (\text{Polynom in } x))$

$$a) \langle r \rangle = \frac{1}{\left(\frac{1}{2} n a_0\right)^{2n+1} \cdot (2n)!} \int e^{-\frac{2r}{n a_0}} r^{2n-2} \cdot r^3 dr =$$

$$= c \cdot \int e^{-\frac{2r}{n a_0}} r^{2n+1} dr =$$

$$= \left[-\left(\frac{n a_0}{2}\right)^{2n+2} \cdot c \cdot e^{-\frac{2r}{n a_0}} ((2n+1)! + x \cdot (\text{Polynom in } x)) \right]_0^\infty$$

$$= \frac{1}{\left(\frac{1}{2} n a_0\right)^{2n+1} (2n)!} \left(\frac{1}{2} n a_0\right)^{2n+2} (2n+1)! = \frac{1}{2} n a_0 (2n+1) =$$

$$= \left(n^2 + \frac{n}{2}\right) a_0$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{\left(\frac{1}{2} n a_0\right)^{2n+1} (2n)!} \left(\frac{1}{2} n a_0\right)^{2n+3} (2n+2)! = \underline{\underline{(2n+2)(2n+1) \left(\frac{1}{2} n a_0\right)^2}}$$

$$\Delta r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \left((2n+2)(2n+1) - (2n+1)^2\right) \left(\frac{n a_0}{2}\right)^2 = \underline{\underline{(2n+1) \left(\frac{1}{2} n a_0\right)^2}}$$

$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \rightarrow 0 \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

$$b) \quad n=50 \quad \underline{\underline{\langle r \rangle = 2525 a_0}} \quad \underline{\underline{\Delta r = 251 \cdot a_0}}$$

$$\text{nach Bohr: } r = \frac{n^2}{2} a_0 = 2500 a_0 \quad \text{scharf!}$$

Aufgabe 3: p-Orbitale (4P)

Der Winkelanteil der Wellenfunktionen des Wasserstoffs ist durch die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ gegeben. Da für gegebene Bahndrehimpulsquantenzahl l die m -Zustände im feldfreien Fall entartet sind ist auch jede Überlagerung der Eigenfunktionen eine zeitunabhängige Lösung. Betrachten Sie die beiden Funktionen

$$Y_{1x}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_{11}(\vartheta, \varphi) - Y_{1-1}(\vartheta, \varphi)]$$

$$Y_{1y}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_{11}(\vartheta, \varphi) + Y_{1-1}(\vartheta, \varphi)]$$

- Sie messen $\hat{L}^2$. Welche Werte finden Sie?
- Sie messen $\hat{L}_z$. Welche Werte können Sie mit welcher Wahrscheinlichkeit finden? Was ist der Erwartungswert von $\hat{L}_z$?
- Skizzieren Sie die Winkelabhängigkeit der Funktionen. Schreiben Sie das Ergebnis auch in kartesischen Koordinaten. Vergleichen Sie die Dichteverteilungen mit der für Y_{10} .

Lösung:

Handwritten solution for the expectation value of $\hat{L}^2$ for the Y_{1x} orbital:

$$\begin{aligned} Y_{1x}: \langle \hat{L}^2 \rangle &= \frac{1}{2} \int (Y_{11}^* - Y_{1-1}^*) \hat{L}^2 (Y_{11} - Y_{1-1}) d\Omega \\ &= \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \hbar^2 \int \left(\underbrace{Y_{11}^* Y_{11}}_1 - \underbrace{Y_{11}^* Y_{1-1}}_0 - \underbrace{Y_{1-1}^* Y_{11}}_0 + \underbrace{Y_{1-1}^* Y_{1-1}}_1 \right) d\Omega \\ &\quad \text{aus } \int Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ &= \underline{\underline{2\hbar^2}} \end{aligned}$$

Genauso für Y_{1y} . Eine Messung von $\hat{L}^2$ ergibt $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$

b) wir wissen: $\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$. Für die Funktionen sind die möglichen Ergebnisse $\hbar$ und $-\hbar$. Die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten sind $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$ und $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$. Der Erwartungswert ist $\langle \hat{L}_z \rangle = (\hbar) \cdot \frac{1}{2} + (-\hbar) \cdot \frac{1}{2} = 0$

c)

Es sind

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \frac{x \pm iy}{r}$$

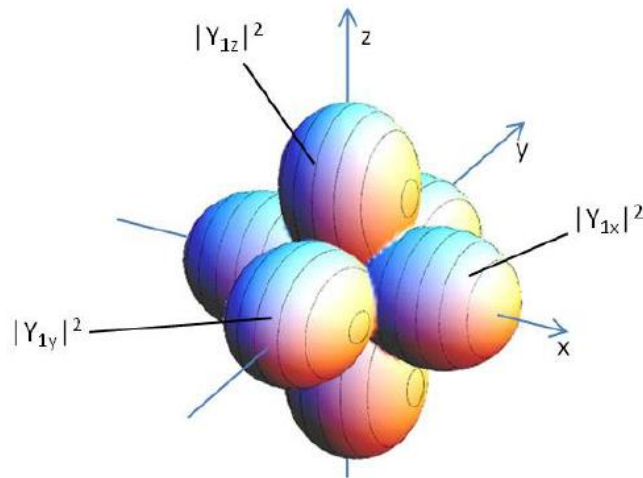
Die in der Aufgabe gegebenen Zustände kann man umformen

$$\begin{aligned} Y_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_1^1 - Y_1^{-1}] &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (-\sin \vartheta e^{i\varphi} - \sin \vartheta e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (2 \cos \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} \end{aligned}$$

und entsprechend

$$\begin{aligned} Y_{1y} = \frac{i}{\sqrt{2}} [Y_1^1 + Y_1^{-1}] &= \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (-\sin \vartheta e^{i\varphi} + \sin \vartheta e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (2i \sin \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} \end{aligned}$$

Mit $Y_{1z} = Y_1^0$ haben Y_{1x} , Y_{1y} und Y_{1z} die gleiche Form und sind entlang der Koordinatenachsen ausgerichtet (siehe Abbildung).



Kurzaufgabe 4 (2P)

Das Emissionsspektrum des Wasserstoffatoms wird mit einem Beugungsgitter (Gitterkonstante $2 \mu\text{m}$) aufgenommen. Eine Linie der Balmer-Serie wird in der zweiten Ordnung unter einem Winkel $\theta = 29^\circ 5'$ beobachtet.

- Welche Quantenzahl hat der angeregte Zustand, von dem der Übergang ausgeht?
- Welche Auflösung (als Strichzahl) muss ein Beugungsgitter mindestens haben, wenn die ersten 30 Spektrallinien der Balmer-Serie des Wasserstoffatoms im Beugungsspektrum erster Ordnung aufgelöst werden sollen?

Lösung

- Beugung am Gitter : $\lambda = \frac{d}{m} \sin \theta$ (m: Beugungsordnung)

Daraus folgt für die Wellenlänge der Balmer-Serie: $\lambda = 486,08 \text{ nm}$

Damit das Ausgangsniveau $n = 4$.

Wegen $\frac{1}{\lambda} = \nu$ (Wellenzahl) $= R(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2})$

- Es müssen die Balmerlinien aus den Zuständen $n = 32$ und $n = 31$ noch getrennt werden können, d.h.

$$\frac{\nu(n=32)}{\nu(n=32) - \nu(n=31)} = 3890 = m \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = m p$$

Also $p = 3890$ Striche mindestens.