

Experimentalphysik IV (PEP4)

Dozent. Prof. S. Jochim

Übung 8

Abgabe am Dienstag, den 10.6.2014, 11:00 Uhr

Aufgabe 1: Relation von Symmetrie und Energie der Zweielektronen-Wellenfunktion (5P)

Elektronen sind Fermionen für die die Gesamtwellenfunktion Ψ antisymmetrisch bezüglich Vertauschung zweier Elektronen sein muss. Ψ kann als Produkt der Ortswellenfunktion $\psi(\vec{r})$ und Spinwellenfunktion χ dargestellt werden. Bei zwei Elektronen gilt:

$$\Psi(1,2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot \chi(1,2).$$

- a) Was muss für die Symmetrie der Orts- und Spinwellenfunktion gelten?
- b) Zur Ortswellenfunktion:
 1. Geben Sie, wenn möglich, die symmetrische und antisymmetrische Ortswellenfunktionen an für den Fall, dass beide Elektronen im selben Orbital sind ($\psi_a(\vec{r}_1), \psi_a(\vec{r}_2)$), bzw. in unterschiedlichen Orbitalen sind ($\psi_a(\vec{r}_1), \psi_b(\vec{r}_2)$).
 2. Die Energie der Zustände aus zwei Elektronen ohne Berücksichtigung ihrer Abstoßung sei E_{aa} bzw. E_{ab} . Zeichnen Sie ein Energieschema wie es aus der Energiekorrektur dieser Energien durch die e^-e^- -Wechselwirkung folgt. Wie interpretieren Sie die unterschiedlichen Energien für die symmetrische und die antisymmetrische Ortswellenfunktionen?
Hinweis: wie in der Vorlesung gezeigt sei die Energiekorrektur durch das „direkte Integral“ J , und durch das „Austauschintegral“ K .
- c) Zur Spinfunktion: Unser System besteht aus zwei Spins mit den Eigenzuständen des Gesamtspins $|S, M_S\rangle$ mit $S = 0, 1$ und $M_S = -S, \dots, S$.
Stellen Sie diese Zustände in der Basis der Einzelspinzustände dar.
Ordnen Sie die Spinzustände den entsprechenden Ortsfunktionen und den Energieniveaus im Energieschema zu.
- d) Bei der $1s2p$ -Konfiguration des Heliumatoms gibt es einen Zustand der mit 1P_1 und weitere, die mit 3P_0 , 3P_1 und 3P_2 bezeichnet werden. Was bedeuten diese Bezeichnungen?

Lösung:

- a) Das Produkt muss antisymmetrisch sein. Daraus folgt Ortsfunktion symmetrisch und Spinfunktion antisymmetrisch oder umgekehrt.

b)

→ Geg.: $\psi_a(1), \psi_b(2)$

Symmetr. $\Psi_{\text{sym}} = \psi_a(1) \cdot \psi_a(2)$ antisymmetrisch nicht möglich.

→ Geg. $\psi_a(1), \psi_b(2)$

Symmetrisch: $\Psi_{\text{sym}}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2))$

Antisym.: $\Psi_{\text{anti}}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(1) \psi_b(2) - \psi_b(1) \psi_a(2))$

Energiekorrektur

Beide Elektronen im selben Orbital: Zum Austauschintegral $\Delta E = J_{aa}$

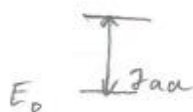
Elektronen in unterschiedlichen Orbitalen:

$$\Delta E_{\text{sym}} = J_{ab} + K$$

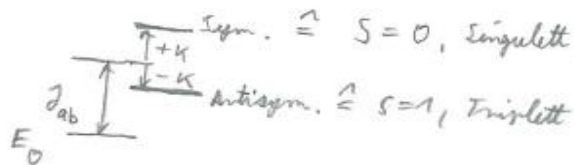
$$\Delta E_{\text{antisym}} = J_{ab} - K$$

Direktes und Austauschintegral, hier wie auch in der Literatur J und K genannt, wurden in Vorlesung 12 eingeführt.

Energielevels



$$\psi_a(1), \psi_a(2)$$



$$\psi_a(1), \psi_b(2)$$

- c) $|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle]$. Dies ist ein „Singulett“, d.h. eine antisymmetrische Funktion.

$$|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \text{ und } |1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle.$$

Dies ist ein „Triplett“ aus drei symmetrischen Funktionen.

Singulett: Spinwellenfunktion ist antisym. $\Rightarrow$ Ortswellenfunktion ist symmetrisch. Die räumliche Wellenfunktion bleibt für $r_1 = r_2$ endlich.

Triplet: Die Ortswellenfunktion ist antisymmetrisch, d.h. sie muß für $r_1 = r_2$ verschwinden. Daraus folgt eine kleinere mittlere positive Coulombenergie aus der Abstoßung der beiden Elektronen.

c) $S=1$ Spinzustände sind symmetrisch und damit der antisymmetrischen Ortswellenfunktion zuzuordnen.

$$\Psi(1,2) = \Psi_{\text{sym.}} \cdot |S=1, m_S\rangle$$

$S=0$ antisymmetrisch und den symmetrischen Ortswellenfkt. zuzuordnen.

$$\Psi(1,2) = \Psi_{\text{anti.}} \cdot |S=0, 0\rangle$$

d) Normallaten $(2S+1)L_J$ mit

$$\begin{aligned}\vec{S} &= \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \\ \vec{L} &= \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \\ \vec{J} &= \vec{S} + \vec{L}\end{aligned}$$

1S_0 : Singulett mit $S=0$
 $L=0$
 $J=0$

3S_1 : Triplet mit $S=1$
 $L=0$
 $J=1$

Aufgabe 2: Termschema des Natrium Atoms (3P)

a) Bestimmen Sie die Energien des Valenzelektrons für den Grundzustand ($n = 3$) und den angeregten Zustand ($n = 4$). Die Energieniveaus des Valenzelektrons im Na-Atom lassen sich in guter Näherung durch den Ausdruck

$$E_n = \frac{-R_\infty}{[n - \Delta_{n,l}]^2}$$

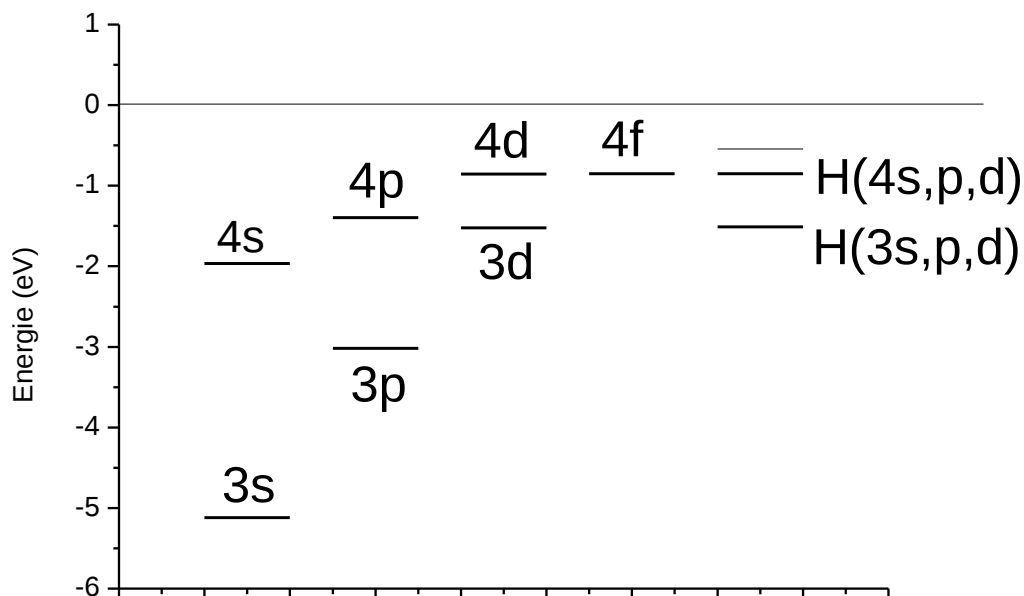
beschreiben (R_∞ : Rydbergkonstante). Für den Quantendefekt $\Delta_{n,l}$ wurde $\Delta_{n,l} \approx 1.37$ ($l = 0$), 0.88 ($l = 1$), 0.01 ($l = 2$), 0.0 ($l = 3$) unabhängig von n (bei der angegebenen Genauigkeit) gemessen.

b) Zeichnen Sie das Energieschema ($n = 3, 4$ und alle möglichen l) und vergleichen Sie mit den Energien des Wasserstoffatoms für $n = 3$ und $n = 4$. Wie erklären Sie die Unterschiede?

Lösung:

a)

n	l	E_n (eV)
3	0	-5.1209
3	1	-3.0273
3	2	-1.5219
4	0	-1.9670
4	1	-1.3977
4	2	-0.8546
4	3	-0.8504



Die Natrium Elektronenhülle besteht aus einem aufgefüllten Rumpf $1s^2 2s^2 2p^6$ und einem Valenzelektron. Dieses sieht die Kernladung 1 für große Hauptquantenzahl und großen Drehimpuls. Für kleine n und l taucht die Wellenfunktion des Valenzelektrons in den Rumpf ein. Die Abschirmung ist dann nicht vollständig und eine erhöhte Bindungsenergie folgt. Dies spiegelt sich in einem höheren Quantendefekt wieder.

Aufgabe 3: Clebsch-Gordan Koeffizienten (4P)

Für ein Zweiteilchensystem werden die Gesamtdrehimpulszustände $|J, M_J\rangle$ in der Darstellung der Basiszustände $|j_1, m_{j1}, j_2, m_{j2}\rangle$ gesucht.

Geben Sie die Eigenfunktionen für alle möglichen Gesamtdrehimpulse J für folgende Fälle an: $j_1 = 1/2, j_2 = 1/2$ und $j_1 = 1, j_2 = 1$.

Die notwendigen Tabellen für Clebsch-Gordan Koeffizienten finden Sie z.B. unter http://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_Clebsch-Gordan_coefficients

Lösung:

a)

$$j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow J = 0, 1$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{matrix} \uparrow & \uparrow \\ j_1 & m_{j1} & j_2 & m_{j2} \end{matrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$j_1=1/2, j_2=1/2$

$m=1 \quad j=$

	1
1/2, 1/2	1

$m_1, m_2=$

$m=0 \quad j=$

	1	0
1/2, -1/2	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$
-1/2, 1/2	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$

$m_1, m_2=$

$$j_1=1, j_2=1 \quad J = 0, 1, 2$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{matrix} \uparrow & \uparrow \\ m_{j1} & m_{j2} \end{matrix} \left| 1, -1 \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| -1, 1 \right\rangle$$

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |0, 1\rangle$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle + 0 |0, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left| -1, 1 \right\rangle$$

$$|1, -1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| -1, 0 \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |0, -1\rangle$$

$j_1=1, j_2=1$

$m=2 \quad j=$

	2
1, 1	1

$m_1, m_2=$

$m=1 \quad j=$

	2	1
1, 0	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$
0, 1	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$

$m_1, m_2=$

$m=0 \quad j=$

	2	1	0
1, -1	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$
0, 0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$
-1, 1	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$

$m_1, m_2=$

$$|2,2\rangle = |1,1\rangle$$

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |0,1\rangle$$

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |1,-1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |1,1\rangle$$

$$|2,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |-1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |0,-1\rangle$$

$$|2,-2\rangle = |-1,-1\rangle$$

$$\mathbf{j}_1 = 2, \mathbf{j}_2 = 2$$

		$j_2 =$				
		4	3	2	1	0
$m_1, m_2 =$	2, 2	$\sqrt{\frac{1}{70}}$	$\sqrt{\frac{1}{10}}$	$\sqrt{\frac{2}{7}}$	$\sqrt{\frac{2}{5}}$	$\sqrt{\frac{1}{5}}$
	1, 1	$\sqrt{\frac{8}{35}}$	$\sqrt{\frac{2}{5}}$	$\sqrt{\frac{1}{14}}$	$-\sqrt{\frac{1}{10}}$	$-\sqrt{\frac{1}{5}}$
	0, 0	$\sqrt{\frac{18}{35}}$	0	$-\sqrt{\frac{2}{7}}$	0	$\sqrt{\frac{1}{5}}$
	-1, 1	$\sqrt{\frac{8}{35}}$	$-\sqrt{\frac{2}{5}}$	$\sqrt{\frac{1}{14}}$	$\sqrt{\frac{1}{10}}$	$-\sqrt{\frac{1}{5}}$
	-2, 2	$\sqrt{\frac{1}{70}}$	$-\sqrt{\frac{1}{10}}$	$\sqrt{\frac{2}{7}}$	$-\sqrt{\frac{2}{5}}$	$\sqrt{\frac{1}{5}}$