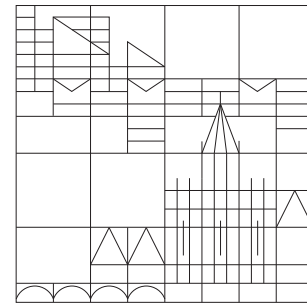


UNIVERSITÄT KONSTANZ  
 Fachbereich Physik  
 Prof. Dr. Georg Maret (Experimentalphysik)  
 Raum P 1009, Tel. (07531)88-4151  
 E-mail: Georg.Maret@uni-konstanz.de  
 Prof. Dr. Matthias Fuchs (Theoretische Physik)  
 Raum P 907, Tel. (07531)88-4678  
 E-mail: Matthias.Fuchs@uni-konstanz.de



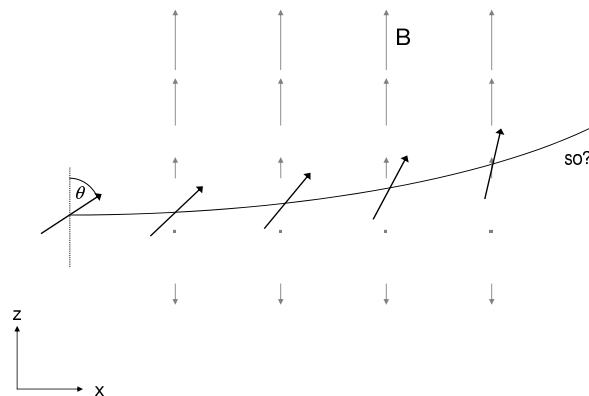
**Übungen zur Physik IV: Integrierter Kurs**  
**Sommersemester 2009**  
 Übungsblatt 11, Ausgabe 08.07.2009  
 Abgabe am 15.07.2009  
 Besprechung in den Übungen am 15. und 17.07.2009

**Aufgabe 54 (E): Stern-Gerlach-Versuch (6 Punkte)**

- a) (3 P.) Ein Strahl von Wasserstoffatomen im Grundzustand bewegt sich horizontal mit einer Geschwindigkeit von  $2 \cdot 10^3 \text{ m/s}$  senkrecht zu einem inhomogenen Magnetfeld, dessen Gradient  $dB/dz = 2 \cdot 10^2 \text{ T/m}$  beträgt. Wie groß ist die Separation der beiden Strahlkomponenten nach 20cm horizontaler Flugstrecke?  
 Welche Separation würde man mit demselben Magnetfeld auf derselben Flugstrecke für Natrium- bzw. Silberatome erhalten?
- b) (3 P.) Zum Vergleich mit dem quantenmechanischen Verhalten des Spins betrachten Sie einen klassischen magnetischen Dipol, der ebenfalls mit einer vorgegebenen horizontalen Geschwindigkeit in das oben beschriebene Magnetfeld gebracht wird. Er kann während des Durchquerens des Feldes nach oben oder unten abgelenkt werden sowie sich drehen. Schon zu Anfang kann er unter beliebigem Winkel zum Feld in z-Richtung stehen, der Einfachheit halber wollen wir jedoch nicht zulassen, dass er aus der x-z-Ebene herausgedreht ist.

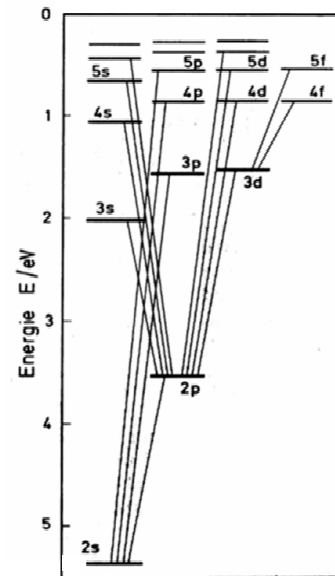
Mit den Koordinaten  $\theta$  und  $z$  stellen Sie einen Ausdruck für die Gesamtenergie des Dipols sowie die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen auf (Gravitation gebe es hier nicht).

Beantworten Sie folgende Fragen qualitativ: Welche Art der Bewegung passiert hauptsächlich, wenn die Feldstärke selber sehr klein, der Feldgradient aber beträchtlich ist? Was passiert in einem starken Feld mit einem vernachlässigbaren Gradienten?



## Aufgabe 55 (E): Spin-Bahn-Aufspaltung (6 Punkte)

Die äußeren Elektronen, die sogenannten Leuchtelektronen, der wasserstoffähnlichen Atome (insbesondere der Alkali, erste Spalte im Periodensystem) haben ein Energieniveausystem wie das Elektron des Wasserstoffatoms (wobei für die Alkali das  $n$  des unterst möglichen Niveaus für das Leuchtelektron der Zeile im Periodensystem entspricht). Der  $Z$ -fach geladene Kern und die  $Z - 1$  übrigen inneren Elektronen bilden im Prinzip eine einfache Ladung als Zentrum der Bewegung des äußeren Elektrons. Dennoch kommen auch ohne Einbeziehung des Spins (Feinstruktur) die Zustände zum selben  $n$  aber verschiedenen  $l$  nicht wie beim Wasserstoff auf exakt derselben Energie zu liegen, wie man an nebenstehendem sogenannten Grotrian-Diagramm für Lithium sieht. (Relativistische Korrektur, Lamb-Shift oder Hyperfeinstruktur, Effekte, von denen Sie vielleicht schon gehört haben, spielen hier keine Rolle.) Die Verschiebung rührt daher, dass für das äußerste Elektron doch je nach  $l$  eine gewisse Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der Sphäre der inneren  $Z - 1$  Elektronen besteht (Stichwort "Tauchbahnen"). Im Prinzip sind aber die Zustände zu einem  $n$  als deutlich gruppiert erkennbar. Die Abweichung vom entsprechenden Wasserstoffzustand bezeichnet man als "Quantendefekt".



Dies soll in dieser Aufgabe jedoch nicht das Thema sein. Betrachten Sie die Niveaus wie im Wasserstoffatom (ohne Spin) und um den Quantendefekt verschoben als gegebene Ausgangslagen für die folgenden Rechnungen. Es liegen für Lithium das 2s-Niveau bei  $-5,31\text{eV}$ , 2p bei  $-3,54\text{eV}$ , 3s bei  $-2,01\text{eV}$ , 3p bei  $-1,55\text{eV}$  und 3d bei  $-1,51\text{eV}$  (diese Zahlen brauchen Sie in der Aufgabe eigentlich gar nicht). Mit Einbeziehung des Spins bzw. der Spin-Bahn-Wechselwirkung gilt dann allgemein Folgendes: s-Zustände spalten nicht auf (aber sie bekommen entsprechend  $l = 0$   $j = l + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$  zugeordnet). Alle anderen teilen sich jeweils in zwei mit  $j = l - \frac{1}{2}$  und  $j = l + \frac{1}{2}$ .

Das  $j = l + \frac{1}{2}$ -Niveau ist  $\Delta E = \frac{\mu_0 m_e e^8}{512 \pi^4 \epsilon_0^3 \hbar^4} \cdot \frac{Z^2}{2n^3(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$  nach oben verschoben,

das  $j = l - \frac{1}{2}$ -Niveau  $\Delta E = -\frac{\mu_0 m_e e^8}{512 \pi^4 \epsilon_0^3 \hbar^4} \cdot \frac{Z^2}{2n^3l(l + \frac{1}{2})}$  nach unten. Die Niveaus werden dann mit

${}^nL_j$  bezeichnet, wobei  $L$  für den  $l$ -bezeichnenden Buchstaben  $S, P, \text{etc.}$  steht. (Nehmen Sie hier die angegebenen Ausdrücke für  $\Delta E$  so ohne Begründung hin, auch wenn Sie in der Literatur eventuell etwas anders lautende Formeln finden.)

a) (4 P.) Verbessern Sie das Lithium-Schema für  $n = 2$  und  $n = 3$  durch Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Errechnen Sie dazu die Energien aller nun vorhandenen Niveaus (als Abweichung von den gegebenen Ausgangslagen; auch wenn letztere in eV nur bis auf zwei Nachkommastellen angegeben sind, errechnen Sie die Aufspaltung in mikro-eV).

Zeichnen Sie die Aufspaltungen schematisch und tragen Sie die erlaubten optischen Übergänge ein zwischen allen Niveaus zu  $n = 2$  und  $n = 3$ . Diese gehorchen dann den Auswahlregeln  $\Delta l = \pm 1$  und  $\Delta j = 0, \pm 1$ . (In dem abgebildeten Schema sind nicht alle eingezeichnet, da einige weit außerhalb des sichtbaren Bereichs liegen.)

b) (2 P.) Für Natrium liegen ohne Berücksichtigung des Spins, aber mit "Quantendefekt" das 3s-Niveau bei  $-5,12\text{eV}$  und das 3p-Niveau bei  $-3,015\text{eV}$ . Berechnen Sie eventuelle Niveaufspaltungen und Wellenlängen von Spektrallinien, die sich zwischen den erhaltenen Niveaus ergeben (bis auf Angström genau). (Es handelt sich um die sogenannten

Natrium-D-Linien; die Bezeichnung "D" ist historisch und passt nicht zum oben erläuterten Bezeichnungsschema. Die Literaturwerte der Linien werden Sie hier nicht reproduzieren, nur die ungefähren Wellenlängen bzw. Größenordnung der Aufspaltung. Die Angabe der Lage der Ausgangsniveaus ist nicht genau genug und die  $\Delta E$ -Formeln sind nur grob von der des Einelektronenatoms abgewandelt als sie  $Z^2$  statt  $Z^4$  enthalten; der Einfluss der inneren Elektronen wurde nicht exakt eingerechnet.)

### Aufgabe 56 (E): Landé-Faktor und Zeeman-Effekt (8 Punkte)

In einem Magnetfeld (räumlich konstant, nicht mit Gradient wie bei Stern-Gerlach) spalten die atomaren Niveaus weiter auf. Zu jedem  $j$  gibt es für das hier halbzahlige  $m_j$  die Möglichkeiten  $m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$  und die Lage jedes Niveaus unterscheidet sich von der ohne Magnetfeld um  $\Delta E = m_j g_j \mu_B B$  mit

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad s = 1/2$$

(nicht zu starkes Magnetfeld, so dass  $\vec{L}$ - $\vec{S}$ -Kopplung gilt).

a) (3 P.) Errechnen Sie für alle in der  $n=2$ - und  $n=3$ -Schale erhaltenen Niveaus aus Aufgabe 54a den  $g_j$ -Faktor und die Aufspaltung in einem Magnetfeld der Stärke 0,5T, d.h. die Größe  $g_j \mu_B B$  in mikro-eV ( $\mu_B = 9,2732 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$ ). (Da nicht nach der absoluten Lage der Niveaus gefragt ist, ist hier egal, ob wir die entsprechenden  $n$ -Schalen im Wasserstoffatom oder bei z.B. Lithium wie vorher betrachten.)

b) (2 P.) Zeichnen Sie das Niveauschema mit den Aufspaltungen im Magnetfeld schematisch. (Beziehen Sie sich hier auf das Lithium-Schema von oben, d.h. zu einem  $n$ , liegen P-Niveaus alle über den S-Niveaus, D-Niveaus alle über den P-Niveaus.)

c) (3 P.) Fertigen Sie jetzt noch sechs separate Skizzen an mit den jeweiligen im Magnetfeld aufgespaltenen Niveaus und zeichnen Sie alle optisch erlaubten Übergänge ein für die "Sammelkategorien"  $^2P \rightarrow ^2S$ ,  $^3P \rightarrow ^3S$ ,  $^3P \rightarrow ^2S$ ,  $^3S \rightarrow ^2P$ ,  $^3D \rightarrow ^3P$  und  $^3D \rightarrow ^2P$ . Auswahlregel ist jetzt  $\Delta l = \pm 1$ ,  $\Delta j = 0, \pm 1$  und  $\Delta m_j = 0, \pm 1$ .

Anweisung zu b) und c): Auch wenn das von den Zahlen her hier nicht so ist, nehmen Sie für die Niveauschemata an, dass die zuvor errechnete Aufspaltung von der Spin-Bahn-Kopplung größer ist als die durch den Zeeman-Effekt. Das vermeidet ein Überlappen der "Niveaubündel" zwecks Übersichtlichkeit.

### Aufgabe 57 (T): Ritzsches Variationsverfahren (schriftlich - 8 Punkte)

Ein Hamiltonoperator  $H$  habe den nichtentarteten Grundzustand  $\psi_0$  zur Energie  $E_0$  und erste angeregte Zustände  $\psi_1$  zur Energie  $E_1 > E_0$ .

a) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass folgendes Variationsprinzip gilt:

(i)

$$E_0 = \min_{\psi \in \mathcal{H}} \{ \langle \psi | H | \psi \rangle \mid \langle \psi | \psi \rangle = 1 \}$$

(ii)

$$E_1 = \min_{\psi \in \mathcal{H}} \{ \langle \psi | H | \psi \rangle \mid \langle \psi | \psi \rangle = 1, \langle \psi_0 | \psi \rangle = 0 \}$$

Das Rayleigh-Ritz'sche Näherungsverfahren beruht darauf eine Form für den Grundzustand als Funktion von Parametern  $a_1, a_2, \dots, a_N$ , also  $\psi(x) = \psi(x, a_1, \dots, a_N)$ , anzusetzen und durch Minimierung von  $E(a_1, \dots, a_N) = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$  eine optimale Funktion  $\psi$  und eine Abschätzung für  $E_0$  zu bestimmen.

b) (3 Punkte) Betrachten Sie das Dreieckspotential in einer Dimension:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ Fx & x > 0 \end{cases}$$

Mit dem Variationsansatz  $\psi(x) = xe^{-ax}$  bestimme man das optimale  $a$  und die Näherung für  $E_0$ .  
*Hinweis:*  $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$  ( $n \in \mathbb{N}$ ).

c) (3 Punkte) Betrachten Sie das anharmonische Potential  $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \lambda x^3$ . Bestimmen Sie mit Hilfe des Variationsansatzes  $\psi(x) = e^{-(x-a)^2/2}$  (verschobene Gaussfunktion) den optimalen Parameter  $a$ . Erklären Sie das Versagen der Methode für bestimmte Werte von  $\lambda$ .

### Aufgabe 58 (T): Grundzustand von Helium (schriftlich - 7+3 Punkte)

Gesucht ist der Grundzustand des Heliumatoms (Zwei-Elektronensystem). Wir zerlegen den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = H_1 + H_2 + W$$

mit

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{Z^*e^2}{4\pi\epsilon_0 r_i}, \quad W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{Z - Z^*}{r_1} - \frac{Z - Z^*}{r_2} \right).$$

$Z$  ist die Kernladung und  $Z^*$  die reduzierte Kernladung, die durch die Abschirmung des anderen Elektrons entsteht.

a) (4 Punkte) Berechnen Sie mit Hilfe des Ansatzes  $\psi(r_1, r_2) = R_{10}(r_1)R_{10}(r_2)Y_{00}^2$  und den bekannten Lösungen  $R_{n=1, l=0}(r) = 2 \left( \frac{Z^*}{a_B} \right)^{3/2} e^{-Z^*r/a_B}$  des Grundzustandes 1s des Einteilchenproblems (gegeben durch  $H_i$ ) den Erwartungswert von  $H$ .

*Hinweis:* Für das Austauschintegral gilt:  $\langle \psi | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \psi \rangle = \frac{5}{8} \frac{Z^*}{a_B}$ .

b) (3 Zusatzpunkte) Berechnen Sie das Austauschintegral  $\langle \psi | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \psi \rangle$  indem Sie die Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta_1, \phi_1) Y_{lm}(\theta_2, \phi_2)$$

verwenden ( $r_{<} = \min(r_1, r_2)$ ,  $r_{>} = \max(r_1, r_2)$ ) und die Orthonormalität derselben ausnutzen.

c) (2 Punkte) Bestimmen Sie  $Z^*$  so, dass die Gesamtenergie minimal wird. Wie lautet die Gesamtenergie?

d) (1 Punkt) Vergleichen Sie das Ergebnis der Energie des Grundzustandes von Helium ( $Z = 2$ ) mit dem experimentellen Wert  $E_0 = -78,88$  eV.

*Hinweis:* Der berechnete Wert liegt nicht sehr weit weg vom experimentellen Wert.

### Aufgabe 59 (T): Austauschentartung (schriftlich - 5 Punkte)

Zwei Elektronen befinden sich in einem Potential  $V(\mathbf{r})$ . Zwischen ihnen bestehe eine ortsabhängige Wechselwirkung  $W$ , die symmetrisch gegenüber des Austausches der Elektronen sein soll ( $W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = W(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ ). Die (normierten) Einteilchen-Lösungen  $E_n$  und  $\phi_n(\mathbf{r})$  seien bekannt.

a) (1 Punkt) Stellen Sie den Gesamt-Hamiltonoperator  $H$  auf. Betrachten Sie zuerst die *nullte Näherung*, d.h.  $W = 0$ . Zeigen Sie, dass jede Linearkombination

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \cos \alpha \phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) + \sin \alpha \phi_m(\mathbf{r}_1)\phi_n(\mathbf{r}_2)$$

mit beliebigem  $\alpha$  eine Lösung darstellt (*Austauschentartung*).

b) (2 Punkte) Berechnen Sie den Erwartungswert  $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$  für  $W \neq 0$  mit der Wellenfunktion aus a). Das Ergebnis sollte zwei Integrale enthalten, das direkte Integral (klassisches Wechselwirkungsintegral)

$$K = \langle \phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) | W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) \rangle$$

und das (quantenmechanische) Austauschintegral

$$J = \langle \phi_n(\mathbf{r}_1)\phi_m(\mathbf{r}_2) | W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \phi_n(\mathbf{r}_2)\phi_m(\mathbf{r}_1) \rangle.$$

c) (2 Punkte) Bestimmen Sie den Parameter  $\alpha$  so, dass der Erwartungswert  $E$  extremal wird. Welche Energieeigenwerte und Eigenfunktionen ergeben sich?