

UNIVERSITÄT KONSTANZ

Fachbereich Physik

Prof. Dr. Georg Maret (Experimentalphysik)

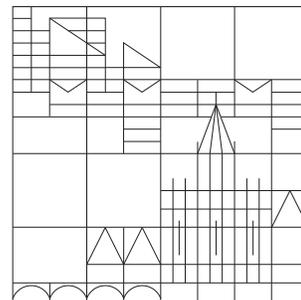
Raum P 1009, Tel. (07531)88-4151

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 12, Ausgabe 15.07.2009

Abgabe am 22.07.2009

Besprechung in den Übungen am 22. und 24.07.2009

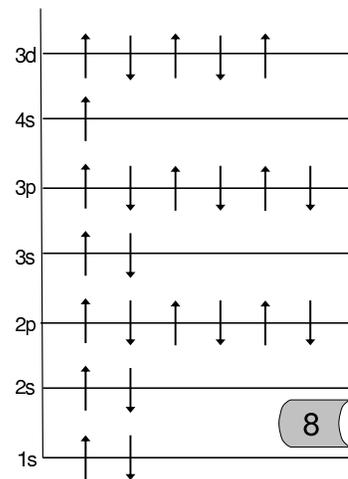
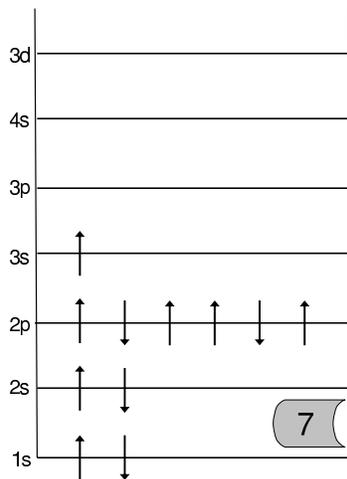
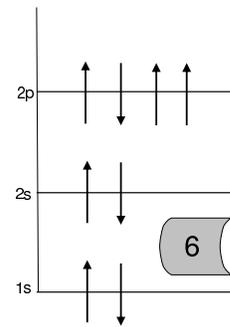
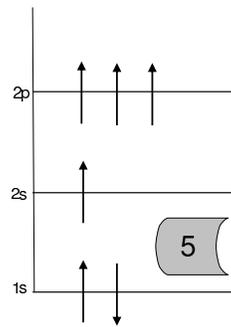
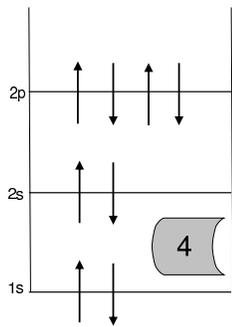
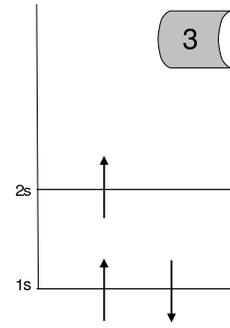
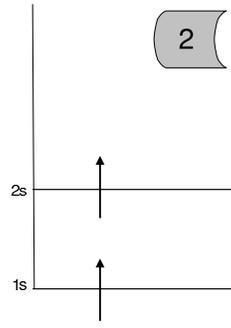
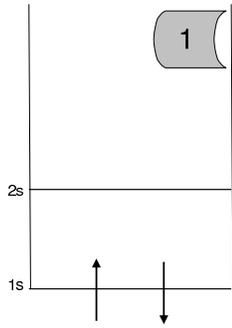
Aufgabe 60 (E): Aufbau der Atome

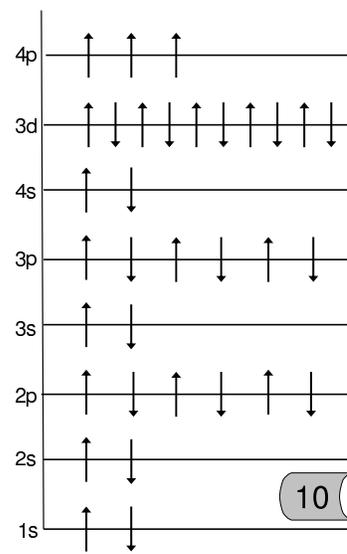
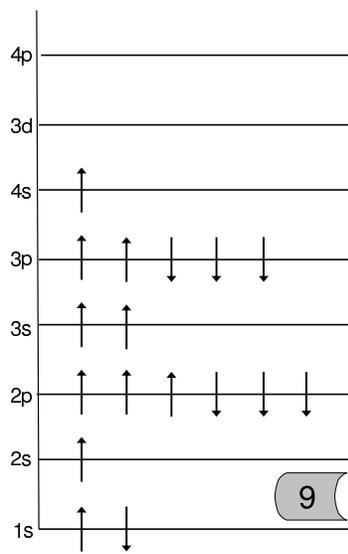
Es ist zwar für Vielelektronenatome nur numerisch möglich, die Elektronenzustände und deren genaue Energien zu bestimmen, jedoch sind die mit dem Lösen der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom erhaltenen Einelektronenzustände der Schlüssel zum Aufbau des *Periodensystems*. Im Prinzip werden diese sukzessive mit Elektronen aufgefüllt. Jeder Einelektronenzustand ist durch vier Quantenzahlen gekennzeichnet: Hauptquantenzahl n , Drehimpuls l , magnetische Quantenzahl m_l und Spinquantenzahl m_s . Das *Pauli-Prinzip* besagt dann, dass sich je zwei Elektronen in einem Atom in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden müssen oder dass keine zwei Elektronen dieselben vier Quantenzahlen haben dürfen.

Zu jeder Hauptquantenzahl n (deren niedrigster Wert ist 1) gibt es n verschiedene Drehimpulsquantenzahlen l (von 0 bis $l - 1$, diese werden mit Buchstaben s,p,d,f,... notiert). Zu jedem l läuft m_l von $-l$ bis l . Für den Spin gibt es zwei Zustände, m_s ist $\pm \frac{1}{2}$, dies wird mit Pfeilen notiert (\uparrow up or \downarrow down). Aus alledem folgt, dass eine Schale mit festem n maximal $\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2$ Elektronen aufnehmen kann. Verschiedene l unterscheiden sich in ihrer energetischen Lage, nur verschiedene m_l und/oder m_s nicht (wir betrachten hier keine Aufspaltung im Magnetfeld und lassen Feinstruktur aufgrund von Spin-Bahn-Kopplung außer Acht). Die $n=1$ Schale fasst also 2 Elektronen zu $l=0$ (s-Elektronen), die $n=2$ Schale 8 Elektronen, die sich in 2 s-Elektronen und 6 p-Elektronen aufteilen, die $n=3$ Schale mit 2 s-, 6 p- und 10 d-Elektronen insgesamt 18 Elektronen, usw. Die Serien von l -Unterschalen zu verschiedenen n fangen bei den höheren Schalen an zu überlappen. So liegt z.B. die 4s-Schale unter der 3d-Schale und die 5s-Schale zwischen 4p und 4d (hier meinen die Zahlen das Schalen- n , nicht eine Anzahl Elektronen wie im Satz davor).

Da Zustände zum selben n und l , aber verschiedenen m_l bzw. Spins in unseren Schemata hier auf derselben Energie liegen, braucht es weitere Regeln, in welcher Reihenfolge diese aufzufüllen sind. Dafür gibt es die *Hundschen Regeln* (nach einem Physiker namens Hund). Solange verschiedene m_l dies zulassen, werden Spins gleich ausgerichtet (dass wir mit Spin nach oben beginnen ist bloße Konvention). Sonst gilt es allgemein, den Gesamtspin zu maximieren. Es gibt weitere Regeln, in welcher Reihenfolge die m_l besetzt werden, aber dies soll hier nicht interessieren und ist aus den untenstehenden Schemata auch nicht ersichtlich.

Und hier die Aufgabe: Welche der gezeigten Konfigurationen "sind richtig" und bilden nach den erläuterten Auffüllregeln Grundzustände von Atomen? Und um welche Elemente handelt es sich? (Dazu müssen Sie natürlich in einem Periodensystem nachschauen.)





Von welchen Konfigurationen, die nicht den obigen Grundzustandsregeln gehorchen, wissen Sie oder können Sie herausfinden, dass sie dennoch vorkommen, und das vielleicht sogar sehr verbreitet?

Aufgabe 61 (T): Harmonischer Oszillator mit Störung

Betrachten Sie den eindimensionalen harmonischen Oszillator mit der kubischen Störung

$$V(x) = \alpha x^3.$$

Hinweis: Benutzen Sie die Operatorenmethode des harmonischen Oszillators.

- Berechnen Sie mit Hilfe der zeitunabhängigen Störungstheorie die Energiekorrektur in erster und zweiter Ordnung.
- Bestimmen Sie daraus die Wellenfunktion in erster Ordnung Störungstheorie.
- Bestimmen Sie die Konstante α des kubischen Potentialterms für das in der Molekülphysik verwendete *Morsepotential*

$$V(x) = V_0 (1 - e^{-a(x-x_0)})^2$$

durch Taylorentwicklung um den verschobenen Nullpunkt. Skizzieren Sie das Morsepotential und die Energieniveaus der gebundenen Zustände.

Aufgabe 62 (T): Nicht-entarteter Stark-Effekt

Wir betrachten den nichtentarteten Grundzustand des Wasserstoffatoms mit der Wellenfunktion

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{2}{\sqrt{4\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}.$$

Das Atom befinde sich in einem äußeren, homogenen elektrischen Feld F parallel zur z -Richtung. Damit wird der Störoperator zu $\hat{W} = eF\hat{z}$.

- Bestimmen Sie die Energieverschiebung in erster Ordnung Störungstheorie.

b) Berechnen Sie die Energieverschiebung in zweiter Ordnung. Berücksichtigen Sie dabei nur Beiträge der Zustände mit $n \leq 2$.

Hinweis:

$$u_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{r^2}{a_0^{\frac{5}{2}}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

c) Durch das externe elektrische Feld F wird in dem Atom ein elektrisches Dipolmoment induziert. Berechnen Sie das Dipolmoment $p = -2E_{100}^{(2)}/F$ aus der Energieverschiebung $E_{100}^{(2)}$ der zweiten Ordnung des Grundzustandes für eine typische Feldstärke von $F = 10^6$ V/m und vergleichen Sie es mit dem atomaren Dipolmoment ea_0 .

Aufgabe 63 (T): Hybridisierung

Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung sind nicht nur die in der Vorlesung behandelten Wellenfunktionen Lösungen zu fester Energie, sondern auch beliebige Linearkombinationen von Zuständen mit gleichem Energieeigenwert. In Molekülen ist es jedoch möglich, dass Linearkombinationen der reinen Wellenfunktionen, sog. *Hybridorbitale*, energetisch günstiger sind und damit im Grundzustand auftreten.

Die Form des Methanmoleküls CH_4 lässt sich mit der Hybridisierung der $2s$ - und $2p$ -Wellenfunktionen des Kohlenstoffs verstehen. Die für $n = 2$ möglichen Hybridwellenfunktionen ergeben sich zu

$$\psi_1 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z})$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z})$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z})$$

mit den orthonormierten Wellenfunktionen des Wasserstoffs

$$\psi_{2s} = \psi_{2,0,0}$$

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} - \psi_{2,1,1})$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} + \psi_{2,1,1})$$

$$\psi_{2p_z} = \psi_{2,1,0}$$

a) Zeigen Sie, dass die Hybridwellenfunktionen orthonormiert sind und alle den gleichen Energieeigenwert haben, wenn der Energieunterschied zwischen s - und p -Orbitalen vernachlässigt wird.

b) Berechnen Sie für zwei beliebige Hybridwellenfunktionen den Ort maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

Hinweis: Verwenden sie kartesische Koordinaten und stellen Sie Beziehungen zwischen den einzelnen Koordinaten auf.

c) Bestimmen Sie anhand der in b) ermittelten Ortsvektoren den sog. Tetraederwinkel des Methanmoleküls von etwa $109,5^\circ$.