Heiko Dumlich, Max Hoffmann 14. Juni 2007

8 Übungsblatt Atom- und Molekülphysik

8.1 ($2p_z$ Orbital)

Es gilt die auf Aufgabenblatt 6 (siehe 6.5 geteXt) bewiesene Formel:

$$\int_0^\infty dr\, r^n e^{-\alpha r} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

a)

Wir berechnen das permanente Dipolmoment des $2p_z$ Orbitals, wobei die Wellenfunktion gegeben ist mit $|2p_z\rangle = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos\theta$ (7.233 und 8.20). Es folgt also:

$$\begin{aligned}
\langle e\vec{r}\rangle &= \langle 2p_z|e \begin{pmatrix} r\sin\theta\cos\varphi \\ r\sin\theta\sin\varphi \\ r\cos\theta \end{pmatrix} |2p_z\rangle \\
&= \begin{pmatrix} e\int_0^\infty dr\, \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta r^2 \sin\theta r\sin\theta\cos\varphi \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \left(\frac{Zr}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cos^2\theta \\ e\int_0^\infty dr\, \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta r^2 \sin\theta r\sin\theta\sin\varphi \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \left(\frac{Zr}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cos^2\theta \\ e\int_0^\infty dr\, \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta r^2 \sin\theta r\cos\theta \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \left(\frac{Zr}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cos^2\theta \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Wir können die drei Integrale berechnen:

$$\langle e\vec{r}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{e}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5 \int_0^\infty dr\, \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \sin^2\theta\cos^2\theta\cos\varphi \\ \frac{e}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5 \int_0^\infty dr\, \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \sin^2\theta\cos^2\theta\sin\varphi \\ \frac{e}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5 \int_0^\infty dr\, \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \sin\theta\cos^3\theta \end{pmatrix}$$

Einzelbetrachtung der Integrale:

$$\begin{aligned}
\langle ex\rangle &= \frac{e}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \sin^2\theta\cos^2\theta\cos\varphi \\
&= 0
\end{aligned}$$

$\langle ex\rangle$ verschwindet wegen der φ Integration, da der $\sin\varphi$ für 0 und 2π verschwindet.

$$\begin{aligned}
\langle ey\rangle &= \frac{e}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \sin^2\theta\cos^2\theta\sin\varphi \\
&= 0
\end{aligned}$$

$\langle ey\rangle$ verschwindet, da sich $[-1+1]=0$ ergibt, welches aus $[-\cos\varphi]_0^{2\pi}$ folgt, d.h. die φ-Integration führt auf die 0.

$$\begin{aligned}\langle ez\rangle &= \frac{e}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5\int_0^\infty dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi d\theta r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}}\sin\theta\cos^3\theta\\ &= \frac{2e\pi}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5\int_0^\infty dr\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}}\int_{-1}^1 d\cos\theta\cos^3\theta\\ &= 0\end{aligned}$$

Da $\int_{-1}^1 d\cos\theta\cos^3\theta = \frac{1}{4}\left[\cos^4\theta\right]_{-1}^1 = \frac{1}{4}[1-1]=0$.
Insgesamt ergibt sich somit also:

$$\langle e\vec{r}\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

b)

$$\begin{aligned}\langle r\rangle &= \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5\int_0^\infty dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi d\theta r^5\sin\theta\cos^2\theta e^{-\frac{Zr}{a_0}}\\ &= 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5\int_0^\infty dr\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}}\int_{-1}^1 d\cos\theta\,\cos^2\theta\\ &= \frac{4}{3}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5\int_0^\infty dr\, r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}}\\ &= \frac{4}{3}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^5\cdot\frac{5!}{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^6}\\ &= \frac{2^2}{3}\frac{1}{2^5}5\cdot 2^3\cdot 3\cdot\frac{a_0}{Z}\\ &= \frac{5a_0}{Z}.\end{aligned}$$

8.2 (Dipolübergänge)

siehe - per Hand -

8.3 (Atom im monochromatischen Strahlungsfeld)

siehe - per Hand -

8.4 (Energielevel Schemata)

siehe - per Hand -