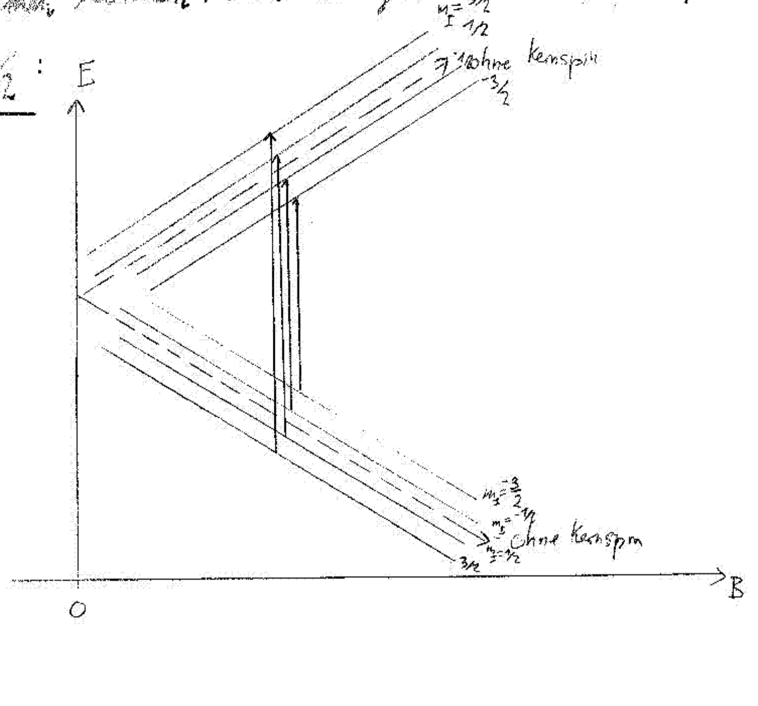
Heiko Dumlich, Max Hoffmann 28.6.2007

9-1

Der Kernspin koppelt mit einem angelegten äußeren Magnetfeld zu einem effektiven Magnetfeld bezüglich dessen der Elektronenspin zwei mögliche Ausrichtungen hat. Der Übergang $\Delta m_S = \pm 1$ wird beobachtet und die Frequenz ist abhängig von der Stärke des effektiven Magnetfeldes. Es werden vier Linien beobachtet, das heißt die Kernmagnetquantenzahl m_I muss 4 verschiedene Werte annehmen können. Dies ist genau dann gegeben, wenn

$I = 3/2$:

$\Delta m_I = 0$



9-2

a) Im Allgemeinen ist das Potential gegeben durch das Arbeitsintegral

$$V(r) = \int_{\infty}^{r} \vec{F}(\vec{r}')\cdot d\vec{r}' \quad .$$

Die Kraft ist gegeben durch das Coulomb-Gesetz

$$\vec{F} = \frac{Qe}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,\hat{\vec{r}} \quad \text{mit: } Q = Ze \quad \hat{\vec{r}} = \vec{r}/r \, .$$

Außerhalb kann die Ladungsverteilung als Punktmasse betrachtet werden:

$$V_a = \int_{\infty}^{r} \frac{Qe}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{1}{r'^2}\,\hat{\vec{r}}'\cdot d\vec{r} = \frac{Qe}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\left.-\frac{1}{r'}\right|_{r=\infty}^{r}$$

$$= \frac{-Qe}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad .$$

Innerhalb herrscht das Potential der Kugeloberfläche plus der benötigten Arbeit um die Probeladung an den betrachteten Ort zu bringen, bei ortsabhängiger Ladung $Q(r)$.

$$Q = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho \Leftrightarrow \rho = \frac{3Q}{4\pi r^3} \quad \text{mit } \rho: \text{Ladungsdichte (const.)}$$

$$V_{in} = V_a + \int_R^r \frac{Q(r)\, e}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r'^2}\, dr' = V_a + \frac{4\pi\varrho e}{3\cdot 4\pi\varepsilon_0} \int_R^r r'\, dr'$$

$$= V_a + \frac{\varrho e}{3\varepsilon_0} \left[\frac{r'^2}{2}\right]_{r'=R}^{r} = V_a + \frac{3 Q e}{4\pi R^3 3\varepsilon_0} \frac{r^2 - R^2}{2}$$

$$= V_a + \frac{Q e}{4\pi R \cdot 2 \cdot \varepsilon_0} \left(\frac{r^2}{R^2} - 1\right)$$

$$= \frac{Q e}{4\pi\varepsilon_0 2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3\right) = \frac{Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3\right)$$

D.h.

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3\right) & r \leq R \\ -\frac{Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} & r > R \end{cases}$$

b) Die Differenz aus gestörtem Feld und ungestörtem Feld interpretieren wir als Störung bzw. Störoperator $\hat{V}'$:

$$\hat{V}' = \begin{cases} \frac{Z e^2}{4\pi\varepsilon_0} \left(\frac{r^2}{2R^3} - \frac{3}{2R} + \frac{1}{r}\right) & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Die Energieverschiebung in 1. Ordnung Störungstheorie lautet:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi | \hat{V}' | \psi \rangle .$$

Als Wellenfunktion ψ wählen wir

$$\psi = R_{n0}(0) = 2\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}$$

und so folgt:

$$E_n^{(1)} = \int_0^R dr\, \bar{\psi}\, \hat{V}'\, \psi = \int_0^R dr\, r^2 \underbrace{\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot 4\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3}_{\varkappa} \cdot \left(\frac{r^2}{2R^3} - \frac{3}{2R} + \frac{1}{r}\right)$$

$$= \varkappa \int_0^R dr\, \frac{r^4}{2R^3} - \frac{3r^2}{2R} + r$$

$$= \varkappa \left(\frac{R^5}{10R^3} - \underbrace{\frac{\cancel{3}R^3}{2R\cancel{3}} + \frac{R^2}{2}}_{=0}\right)$$

$$= \frac{Z^4 e^2}{10 \cdot \pi\varepsilon_0 n^3 a_0^3} R^2$$

Die Energieverschiebung in 1. Ordnung ist also quadratisch zum Kernradius.

9.3

Betrachte: $^3P_2$

Es gilt allgemein: $^{2s+1}L_J$, daher für unseren Fall:

$\Rightarrow \quad s=1, \; l=1, \; j=2$

Für den g-Faktor gilt die Formel:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)} \qquad (10.79 + 10.80)$$

$$= 1 + \frac{6+2-2}{12} = \frac{12+6}{12} = \frac{3}{2}$$

$\Rightarrow \quad \underline{g_j = \frac{3}{2}}$

Um das Magnetfeld zu bestimmen, welches bei $\nu = 9.5 \cdot 10^9\,Hz$ zum umklappen des Elektronenspin führt, betrachten wir:

$$\Delta E = g_s \mu_B B_0 \qquad (10.100)$$

Wir stellen nach B_0 um: $B_0 = \frac{\Delta E}{g_s \mu_B}$,

mit $\Delta E = h\nu$, μ_B dem Bohrschen Magneton, $g_s = \frac{3}{2}$, h dem planckschen Wirkungsquantum und $\nu = 9.5 \cdot 10^9\,Hz$ folgt:

$$B_0 = \frac{h\nu}{g_s \mu_B} = 0.453\,T$$

Für die Boltzmannverteilung gilt $\frac{N_1}{N_2} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$

$\Rightarrow \frac{N_1}{N_2} \approx 1.0046$, daraus folgt für $\frac{\Delta N}{N} = 0.0046$.

Da wegen $\Delta E = \mu_B g_S B$: $\Delta E \propto B$, muss bei einer Verzehnfachung der Mikrowellenfrequenz auch die Temperatur verzehnfacht werden, denn

$$\frac{\Delta E}{k_B T} \overset{!}{=} \text{const.}, \text{ d.h. } \frac{\Delta E}{T} = \text{const.} \Rightarrow \Delta E \propto T \propto B.$$

9.4

Wir betrachten Helium im Grundzustand. Wir wählen die normierte Testfunktion:

$$\psi_{1s}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)},$$

mit $\psi_{1s}(r_1) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}\, e^{-\alpha r_1}$ und $\psi_{1s}(r_2) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}\, e^{-\alpha r_2}$.

Es ist der Wert für α zu bestimmen, für den ε minimal wird.

Es gilt mit dem Variationsverfahren: $\varepsilon = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$, zu minimieren.

Aus der Normiertheit von ψ folgt: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$\Rightarrow \quad \varepsilon = \langle\psi|H|\psi\rangle$, mit dem Hamiltonian des Heliumatoms

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}\right], \quad (r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

diesen können wir umschreiben (mit Z der Kernladungszahl) zu:

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}}_{H_1} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}}_{H_2} + \underbrace{\frac{(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} + \frac{(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}}_{H_{Ab}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}}_{H_{ee}}.$$

H_1, H_2 sind Wasserstoffähnlich, d.h. für deren Energieerwartungswerte folgt:

$$\langle\psi|H_1|\psi\rangle = \langle\psi|H_2|\psi\rangle = -\frac{Z^2\hbar^2}{2ma_0^2} = Z^2 \cdot E_0, \quad \text{mit } E_0 = -13.6\,\text{eV}$$

(explizit: $\langle\psi|\Delta_1|\psi\rangle = \iint d^3r_1 d^3r_2\, e^{-\alpha(r_1+r_2)}\left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^2 e^{-\alpha(r_1+r_2)} = \frac{16\pi^2}{\pi^2}\alpha^6 \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2\, (-\alpha) r_1^2 r_2^2\, e^{-2\alpha(r_1+r_2)}$

mit $\int_0^\infty dr\, r^n e^{-\alpha r} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ (Beweis siehe Blatt 8 Aufgabe 1) folgt: $\langle\psi|\Delta_1|\psi\rangle = 2^4\alpha^8\left(\frac{2}{(2\alpha)^3}\right)^2 = \alpha^2$,

$\langle\psi|\Delta_1|\psi\rangle = \langle\psi|\Delta_2|\psi\rangle$ und $\langle\psi|\frac{1}{r_1}|\psi\rangle = 16\alpha^6 \int_0^\infty dr_1\, r_1 e^{-2\alpha r_1} \int_0^\infty dr_2\, r_2^2 e^{-2\alpha r_2} = 16\alpha^6 \frac{1}{(2\alpha)^2}\frac{2}{(2\alpha)^3} = \alpha$,

$\langle\psi|r_1|\psi\rangle = \langle\psi|r_2|\psi\rangle$. Es gilt also $\langle\psi|H_1|\psi\rangle = \langle\psi|H_2|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\alpha$, mit

$\alpha = \frac{Z}{a_0}$ und $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ folgt somit: $\langle\psi|H_1|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Z^2}{a_0^2} - \frac{\hbar^2}{m}\frac{Z^2}{a_0^2}$)

Wir betrachten H_{Ab}:

$$\langle\psi|\frac{1}{r_1}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{1}{r_2}|\psi\rangle = \alpha \quad \Rightarrow \quad \langle\psi|H_{Ab}|\psi\rangle = \frac{(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot 2\alpha = -2Z(Z-2)\cdot 2E_0$$
$$= -4Z(Z-2)E_0$$

und H_{ee} liefert mit dem Skript (11.29):

$$\langle\psi|H_{ee}|\psi\rangle = J = \frac{5}{8}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z}{a_0}, \quad \text{wobei } \alpha = \frac{Z}{a_0} \qquad J = -\frac{5}{4}Z\cdot E_0$$

Zusammenfügen liefert:

$$\varepsilon = \langle\psi|H|\psi\rangle = \left(2Z^2 - 4Z^2 + 8Z - \frac{5}{4}Z\right)E_0, \quad \text{minimieren nach } Z \text{ liefert:}$$

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial Z}\left(-2Z^2 + \frac{27}{4}Z\right)E_0 \overset{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad -4Z + \frac{27}{4} = 0 \quad \Rightarrow \quad Z = \frac{27}{16},$$

mit $\alpha = \frac{Z}{a_0}$ folgt also $\alpha = \frac{27}{16}\frac{1}{a_0}$.

9.4

$$E_{min} = E_0 \cdot \left(-2\left(\frac{27}{16}\right)^2 + \left(\frac{27}{4}\right)\left(\frac{27}{16}\right)\right) = 5{,}695 \cdot E_0 = -77{,}46 \text{ eV}$$

α, welches proportional zu Z ist hat den Wert $\approx 1{,}69$, ist somit kleiner als 2, was der vollen Kernladung entsprechen würde. Wir können also eine Abschirmung beobachten. Die Testfunktion liegt mit ihrem berechneten Wert näher als die erste Ordnung Störungstheorie, d.h. die Realität wird durch diese besser beschrieben, bzw. die Abschirmungungseffekte.