FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Physik

Übungen zur Vorlesung

''Einführung in die Physik der Atome und Moleküle I'' (SoSe 2007)

- Prof. Karsten Heyne -

Aufgabenblatt 5 vom 16.05.2007

Abgabe bei Dr. Stefan Weber, webers@physik.fu-berlin.de

vor Freitag 24.05.2007, 12.00 h.

Aufgabe 5—1 (0.5 / 1 / 1 / 2.5 / 0.5 Punkte)

Consider the following two situations: 1) A 1-dimensional box with length 2L, and the potential V is 0 within the box and goes to infinity at the walls. 2) The same box split in two 1-dimensional boxes, each with length L, by a central wall (at x=L), where V also goes to infinity.

(a) Give the energies of the 4 lowest lying eigenstates for all boxes, and draw their wavefunctions and energy levels in the three boxes.

In statistical mechanics, entropy (S) is defined as: $S = -k \sum p_i ln p_i$ with k the Boltzmann constant, and p_i the probability of the system being in state i. Label the eigenstates $|n_{2L}\rangle$ for the box with length 2L.

(b) List the following wave functions in order of decreasing entropy, and calculate their entropy S.
$|\Psi_1\rangle = 1/\sqrt{3}\,|1_{2L}\rangle + 1/\sqrt{3}\,|2_{2L}\rangle + 1/\sqrt{3}\,|3_{2L}\rangle$
$|\Psi_2\rangle = |3_{2L}\rangle$
$|\Psi_3\rangle = 1/\sqrt{2}\,|1_{2L}\rangle + 1/\sqrt{3}\,|2_{2L}\rangle + 1/\sqrt{6}\,|3_{2L}\rangle$

(c) Calculate the energy expectation value for the three wave functions in (b). Does a high energy expectation value imply a high entropy?

Now we consider the system with the box split in 2 1-dimensional boxes, and assume that initially the left box contains a particle in the lowest state: $|1_{L-left}\rangle$, while at the same time the right box is empty. Now we perturb the system by removing the central wall, without changing the total energy of the system. After this change the system will maximize its entropy.

(d) Assume that the probability p_n is zero for the eigenstates $|n_{2L}\rangle$ with $n > 3$. Calculate what the probability is of finding the system in the eigenstates $|n_{2L}\rangle$ with n=1,2,3, after the system has maximized its entropy over these three states.

Hints: Use the normalization condition and energy conservation to express the probabilities of p_1, p_2 and p_3 as a function of p_3. Then maximize the entropy to find the value of p_3 (and finally calculate S). Whereas the quantum system could not relax before removal of the central wall, the distribution calculated in (d) does not have to represent a thermal distribution and now the quantum system could relax further by donating energy to the radiation field (emission).

(d) Calculate the probabilities p_n with n=1,2,3 (again assume $p_n = 0$ for $n > 3$) for a thermal distribution over these levels, if $kT = \frac{h^2}{32mL^2}$.

Aufgabe 5—2 (2 Punkte)

Berechnen Sie die Translationsenergie E_R, die ein Wasserstoffatom nach der Emission eines Photons besitzt. Der optische Übergang finde zwischen dem Zustand $n = 4$ und dem Zustand $n = 1$ statt. Berechnen Sie unter Beachtung von E_R die Energie des emittierten Photons und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Energie des optischen Übergangs.

Aufgabe 5—3 (1.5 / 1 Punkte)

Mit einem Gitterspektrographen soll die Balmer-Serie ($n_1 = 2$) des Wasserstoffatoms vermessen werden. Die Apparatur hat ein Auflösungsvermögen von $\lambda/\Delta\lambda = 10^6$.

- (a) Bis zu welchem Zusand n_2 können zwei benachbarte Spektrallinien noch aufgelöst werden?
- (b) Bei Anregung der kurzwelligsten Serie eines ($Z = 1$)-fach ionisierten Edelgases beobachtet man bei 30.379 nm die langwelligste Emissionslinie. Wie groß ist die Rydbergkonstante und um welches Edelgas handelt es sich?