

FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Physik

Übungen zur Vorlesung

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

- Prof. Karsten Heyne -

Aufgabenblatt 9 vom 21.06.2007

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

vor Freitag 28.06.2007, 12.00 h.

Aufgabe 9—1 (1 Punkte)

Das EPR-Signal eines Radikals mit einem Elektronenspin $S = 1/2$, der mit einem magnetischen Kern mit Kernspin I koppelt (Hyperfeinwechselwirkung), ist in vier Linien gleicher Intensität aufgespalten. Welchen Kernspin I hat der Kern?

Aufgabe 9—2 (3 Punkte)

Neben der massenabhängigen Isotopieverschiebung gibt es eine Isotopieverschiebung, die vom Kernvolumen abhängt.

- (a) Zeigen Sie zunächst für wasserstoffähnliche Atome, dass das elektrostatische Potential aufgrund der Ausdehnung des Kerns (man stelle sich die Kernladung gleichförmig verteilt innerhalb einer Kugel mit dem Radius R vor) sich wie folgt beschreiben lässt.

$$V(r) = \begin{cases} +\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right); & r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}; & r > R \end{cases}$$

- (b) Leiten Sie hieraus einen Störoperator ab und berechnen Sie mit Hilfe der Störungstheorie in erster Ordnung für s -Zustände (beliebiges n) die Energieverschiebung als Funktion von R . Nehmen Sie an, dass sich die s -Wellenfunktion im Bereich des Kerns nicht ändert, also $R_{n\ell}(r) = R_{n\ell}(0)$ ist.

Aufgabe 9—3 (2 Punkte)

Berechnen Sie den g -Faktor für einen 3P_2 -Zustand. Berechnen Sie das Magnetfeld, das benötigt wird, um bei einer Mikrowellenfrequenz von 9.5 GHz ein Umklappen des Elektronenspins zu induzieren. Wie groß ist die relative Differenz ($\Delta N/N$) der Boltzmann-Besetzungszahlen beider Energieniveaus bei einer Temperatur von 100 K? Wie groß muss die Temperatur sein, um ($\Delta N/N$) konstant zu halten, wenn die Mikrowellenfrequenz bzw. das Magnetfeld verzehnfacht wird?

Aufgabe 9—4 (3 Punkte)

Helium in Grundzustand mit Variationsverfahren. Als normierte Testfunktion für den Helium-Grundzustand wählen wir

$$\psi_{1s}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)$$

mit

$$\psi_{1s}(r_1) = \sqrt{\left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)} e^{-\alpha r_1}; \quad \psi_{1s}(r_2) = \sqrt{\left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)} e^{-\alpha r_2}$$

Bestimmen Sie den Wert für α , bei dem ϵ sein Minimum hat. Für die Berechnung des Coulomb-Integrals J siehe Vorlesung. Interpretieren Sie den für α gefundenen Wert im Rahmen der effektiven Abschirmung der Kernladung. Warum ist das Ergebnis wesentlich besser als das aus erster Ordnung Störungsrechnung (-74.8 eV)?