

Übungsblatt 4

4.1 Protonium

Ein Antiproton $\bar{p}$ kann einen gebundenen Zustand mit einem Proton p bilden (Protonium), bevor sich beide gegenseitig annihilieren. Im ersten Schritt wird das Antiproton in einen Rydberg-Zustand mit $n \approx 30$ vom Proton eingefangen.

(a) Welche reduzierte Masse hat das System? Benutzen Sie das Bohrsche Atommodell und leiten Sie die Bindungsenergie des Protoniums als Funktion von n ab. Wie groß ist die Energie des Übergangs von $n=2$ zu $n=1$?

(b) Welchen klassischen Radius hat die Bahn mit $n=30$ und mit $n=1$? Welches elektrische Feld ist notwendig um das System bei $n=30$ zu ionisieren?

Lösung:

(a) Die reduzierte Masse des Systems ist gegeben durch:

$$\mu = \frac{m_p m_{\bar{p}}}{m_p + m_{\bar{p}}} = \frac{m_p}{2} = \frac{1836}{2} m_e$$

Durch Gleichsetzen der Coulomb- und der Zentrifugalkraft sowie aus der Drehimpulsquantisierung $l = n\hbar$ ergibt sich der Radius und die Geschwindigkeit:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{\mu v^2}{r} = \frac{l^2}{\mu r^3}$$
$$\Rightarrow r = 4\pi\epsilon_0 \frac{l^2}{\mu e^2} = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{\mu e^2} \quad \text{und} \quad v = \frac{l}{\mu r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{n\hbar}$$

Die Energie des Systems entspricht der Summe aus potenzieller und kinetischer Energie

$$E_n = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \mu v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{1}{2} E_{\text{pot}} = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2}$$

Die Energie ist also etwa

$$E_n \approx -12.48 \text{ keV} \frac{1}{n^2}$$

Woraus sich eine Übergangsenergie von $n=2$ zu $n=1$ von etwa 9.35 keV ergibt. Im Protonium gibt es zusätzlich noch eine Verschiebung von 0.75 keV des 1s-Niveaus, die von der starken Wechselwirkung zwischen Proton und Antiproton herrühren (die hier nicht berücksichtigt ist).

(b) Aus obiger Gleichung ergibt sich ein Radius des Protoniums für $n=1$ von 58 fm. Im Vergleich dazu hat das Proton einen Durchmesser von etwa 0.8 fm. Der endliche Radius des Protons verursacht eine kleine Änderung der Bindungsenergie. Für $n=30$ ergibt sich ein Bahnradius von $5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, was etwa dem Bohrschen Radius von Wasserstoff im Grundzustand entspricht.

Das äußere elektrische Feld E_0 ändert die potentielle Energie in

$$\tilde{E}_{\text{pot}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} - eE_0 r$$

Dieses Potential hat ein lokales Maximum bei der Position r_B , über das das Elektron ionisiert werden kann. Man erhält durch die Bedingung $\partial \tilde{E}_{\text{pot}}(r_B)/\partial r = 0$ die Position dieser Potentialbarriere

$$r_B = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{E_0}}$$

Die potentielle Energie an dieser Stelle ist somit

$$\tilde{E}_{\text{pot}}(r_B) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{E_0}}} - eE_0 \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{E_0}} = -\sqrt{\frac{e^3 E_0}{\pi\epsilon_0}}$$

Damit das Elektron ionisiert werden kann, muss diese Energie kleiner sein als die Gesamtenergie des n -ten Niveaus, und es ergibt sich eine n -abhängige kritische Feldstärke E_{krit}

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\text{pot}}(r_B) \leq E_n &\Leftrightarrow -\sqrt{\frac{e^3 E_0}{\pi\epsilon_0}} \leq -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2} \\ \Rightarrow E_0 \geq E_{\text{krit}}(n) &= \frac{1}{1024 \cdot \pi^3 \epsilon_0^3} \frac{\mu^2 e^5}{n^4 \hbar^4} \end{aligned}$$

Für $n=1$ ist die kritische Feldstärke etwa $2.7 \cdot 10^{16}$ V/m, für $n=30$ etwa $3.3 \cdot 10^{10}$ V/m. Eine solche Feldstärke kann für kurze Zeiten in Femtosekundenlasern erzeugt werden.

4.2 Eigenfunktionen des H-Atoms

- (a) Skizzieren sie den Radialanteil für den 1s-Zustand im Wasserstoff ($n=1, l=0$). Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron in diesem Zustand im Abstand r vom Kern zu finden?
- (b) Bei welchem r liegt das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte des 2s-Zustands ($n=2, l=0$)?
- (c) Vergleichen sie das Bohrsche Atommodell mit der quantenmechanischen Lösung. Wo sind Gemeinsamkeiten und was ist "grundsätzlich" falsch an der Theorie von Bohr?

Lösung:

- (a) Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms sind als Produkt eines radialen und eines winkelabhängigen Anteils gegeben

$$\begin{aligned} \psi_{nlm} &= R_{nl}(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi) \\ \text{mit } R_{nl}(r) &\propto e^{-\rho/2} \cdot \rho^l \cdot L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (L \hat{=} \text{Laguerresche Polynome}) \\ \rho &= \frac{2r}{na_0} \\ a_0 &= \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} \quad (\text{Bohrscher Radius}) \end{aligned}$$

Der 1s-Zustand ist dann $\psi_{100} = -\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist gegeben durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion. Hierbei

ist über ϑ und φ zu integrieren:

$$\begin{aligned} w(r) \, dr &= \iint |\psi_{100}|^2 \, r^2 \sin \vartheta \, d\varphi \, d\vartheta \\ &= \frac{4}{a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \, dr \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned} \psi_{100} &\propto e^{-\rho/2} L_2^1(\rho) = (\rho - 2) e^{-\rho/2} \\ w(r) \, dr &= \iint |\psi_{200}|^2 \, r^2 \sin \vartheta \, d\varphi \, d\vartheta \\ &\propto \left(\frac{r}{a_0} - 2 \right)^2 r^2 e^{-r/a_0} \, dr \end{aligned}$$

Am Maximum ist die Ableitung gleich 0, d.h.

$$\begin{aligned} \frac{dw(r)}{dr} &\propto \left(\frac{r^2}{a_0^2} - 6 \frac{r}{a_0} + 4 \right) \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) r e^{r/a_0} = 0 \\ \Rightarrow &\quad \text{Minima bei } r = 0 \text{ und } r = 2a_0 \\ &\quad \text{Maxima bei } r = (3 \pm \sqrt{5}) a_0 \end{aligned}$$

(c)

Gemeinsamkeiten: diskrete Zustände, $1/n^2$ Abhängigkeit der Energie, Bohr beschreibt Rydberg Zustände hinreichend genau.

Unterschiede: Bohrsches Elektron hat immer Drehimpuls, auch im Grundzustand (1s-Zustand) im Gegensatz zu Schrödinger!!!, neue Quantenzahlen l und m , ...

4.3 Orbitale

Der Winkelteil der Wellenfunktionen des Wasserstoffs ist durch die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ gegeben, welche gleichzeitig Eigenfunktionen des quadrierten Drehimpulsoperators sind. Falls kein äußeres Feld anliegt, sind Zustände mit gleichem l aber unterschiedlichem m energetisch entartet. Deshalb ist auch jede Superposition dieser Zustände wieder ein Energieeigenzustand. Betrachten sie die beiden Funktionen

$$\begin{aligned} Y_{1x}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_1^1(\vartheta, \varphi) - Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi)] \\ Y_{1y}(\vartheta, \varphi) &= \frac{i}{\sqrt{2}} [Y_1^1(\vartheta, \varphi) + Y_1^{-1}(\vartheta, \varphi)] \end{aligned}$$

Skizzieren sie die Winkelabhängigkeit dieser Funktionen. Welche Form besitzen diese in kartesischen Koordinaten? Interpretieren Sie die resultierende Wahrscheinlichkeitsdichte. Vergleichen Sie diese mit $Y_1^0(\vartheta, \varphi)$ und geben Sie die Definition von $Y_{1z}(\vartheta, \varphi)$ an.

Lösung:

Es sind

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \frac{x \pm iy}{r}$$

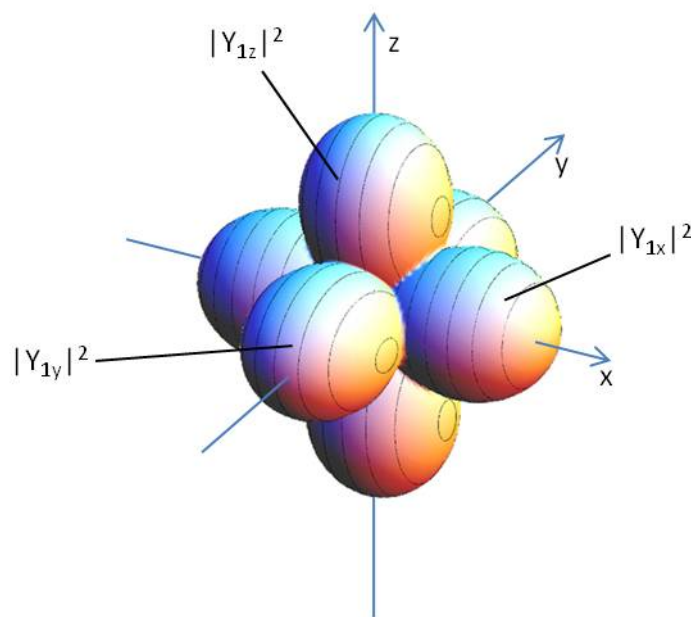
Die in der Aufgabe gegebenen Zustände kann man umformen

$$\begin{aligned} Y_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} [Y_1^1 - Y_1^{-1}] &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (-\sin \vartheta e^{i\varphi} - \sin \vartheta e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (2 \cos \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} \end{aligned}$$

und entsprechend

$$\begin{aligned} Y_{1y} = \frac{i}{\sqrt{2}} [Y_1^1 + Y_1^{-1}] &= \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (-\sin \vartheta e^{i\varphi} + \sin \vartheta e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta (2i \sin \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} \end{aligned}$$

Mit $Y_{1z} = Y_1^0$ haben Y_{1x} , Y_{1y} und Y_{1z} die gleiche Form und sind entlang der Koordinatenachsen ausgerichtet (siehe Abbildung).



4.4 Spin-Bahn-Kopplung

Im Ruhesystem des Elektrons bewegt sich der Kern um das Elektron. Welches Magnetfeld erzeugt er nach klassischer Rechnung (d.h. im Bohrschen Atommodell) am Ort des Elektrons? Wie groß ist die zusätzliche potenzielle Energie des Elektrons durch dieses Magnetfeld, wenn das durch den Spin des Elektrons erzeugt magnetische Moment $\vec{\mu}_s$ gegeben ist durch das "Bohrsche Magneton" $|\vec{\mu}_s| = \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$?

Hinweis: Verwenden sie das Biot-Savart-Gesetz und die Beziehung $\vec{l} = m\vec{r} \times \vec{v}$. Berücksichtigen sie den "Thomas-Faktor" bei der Berechnung der Energie.

Lösung:

Das Biot-Savart-Gesetz liefert das Magnetfeld im Zentrum eines stromdurchflossenen Leiters mit Radius r :

$$\vec{B}(r) = \frac{\mu_0}{2} \frac{\vec{I} \times \vec{r}}{r^2}$$

Aus $\vec{I} = Ze \cdot \vec{v} / (2\pi r)$ und $\vec{v} \times \vec{r} = \vec{l} / m_e$ folgt das gesuchte Magnetfeld

$$\vec{B}_l = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3 m_e} \vec{l}$$

Beispiel: Für Wasserstoff ($Z = 1$, $r = a_0$ und $|\vec{l}| = \hbar$) ergibt sich ein Magnetfeld von $B_l = 12.46$ T. (Streng genommen ist der Drehimpuls im Grundzustand 0, bzw. es sollte $|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar$ verwendet werden)

Tatsächlich muss dieses Feld in das Laborsystem transformiert werden, woraus sich ein zusätzlicher Faktor $1/2$ – der sogenannte "Thomas-Faktor" – ergibt. Die Energieverschiebung berechnet sich dann wie folgt:

$$\begin{aligned} \Delta E &= -\frac{1}{2} \vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{\mu_0 Ze}{8\pi r^3 m_e} \vec{s} \cdot \vec{l} \\ &\approx \frac{\mu_0 Ze^2}{8\pi r^3 m_e^2} \vec{s} \cdot \vec{l} \end{aligned}$$

Für obiges Beispiel erhält man mit der Abschätzung $\vec{s} \cdot \vec{l} = s_z l_z$ die Energieverschiebung $\Delta E = 3.62 \cdot 10^{-3}$ eV.