2. Klausur: Experimentalphysik III - Quantenmechanik WS 04/05

Bearbeitungszeit: 120 min

Aufgabe 1: Lichtdruck

Welchen Druck übt ein roter ($\lambda = 400$ nm) Laserstrahl mit rundem Querschnitt (Durchmesser 1 mm) und einer Leistung von 200 W auf eine schwarze Wand und auf einen Spiegel aus?

(7 Punkte)

Aufgabe 2: Large Hadron Collider

An dem im Bau befindlichen LHC am CERN in Genf werden Protonen mit jeweils 7 TeV Energie aufeinander geschossen. Wie klein sind die Strukturen, die man mit dieser Energie auflösen kann? (5 Punkte)

Aufgabe 3: Kontinuitätsgleichung und Ladungserhaltung

(a) Zeigen Sie, dass aus der Schrödingergleichung die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho(\vec{x},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{x},t) = 0$$

folgt. Dabei ist $\rho(\vec{x},t) = |\Psi(\vec{x},t)|^2 = \Psi^*(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte und

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2im}\big(\Psi^*(\vec{x},t)\vec{\nabla}\Psi(\vec{x},t) - \Psi(\vec{x},t)\vec{\nabla}\Psi^*(\vec{x},t)\big)$$

die Wahrscheinlichkeitsstromdichte. (7 Punkte)

(b) Zeigen Sie, dass die Gesamtladung $Q = \int d^3\vec{r}\ \rho(\vec{r},t)$ erhalten ist. (3 Punkte)

Hinweis:

- Benutzen Sie für Teil (b) den *Gaußschen Integralsatz*

  $$\int_V d^3\vec{r}\ \vec{\nabla}\cdot\vec{A} = \int_O d\vec{S}\cdot\vec{A}\,.$$

  $\int_V$ ist ein Volumenintegral über das Volumen V und $\int_O$ das Oberflächenintegral über die Oberfläche von V. Nehmen Sie an, dass Ihr physikalisches System zwar groß, aber nicht unendlich ausgedehnt ist.

Aufgabe 4: Halboffener Potentialtopf
Gegeben sei ein auf einer Seite offener Potentialtopf:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & : x < 0 \\ 0 & : 0 < x < a \\ V_0 & : x > a \end{cases}$$

($V_0 > 0$).

(a) Welches sind die Rand- und Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion? (4 Punkte)

(b) Machen Sie Ansätze für die gebundenen Wellenfunktionen in den Bereichen $x < a$ und $x > a$. Denken Sie Normierbarkeit! (4 Punkte)

(c) Stellen Sie die Gleichungen auf, mit denen sich die Konstanten Ihrer Ansätze festlegen lassen.

Aufgabe 5: Kopplung von Spins
Positronium ist der Bindungszustand zwischen einem Elektron und seinem positiv geladenen Antiteilchen Positron. Da das Positron die entgegengesetzte Ladung hat, zeigt hier, im Gegensatz zum Elektron, das magnetische Moment in die dem Spin entgegengesetzte Richtung.

(a) Machen Sie für die Wechselwirkung zwischen den beiden Spins den Ansatz $\Delta E = a\, \hat{\vec{s}}_\mathrm{e} \cdot \hat{\vec{s}}_\mathrm{p}$.

Welches Vorzeichen hat die Konstante a nach klassischen Überlegungen? (5 Punkte)

(b) Welche Werte kann der Gesamtspin annehmen? (2 Punkte)

(c) Skizzieren Sie die Feinstrukturaufspaltung im Grundzustand ($1s$).

Auch der Kern des Wasserstoffatoms, das Proton, hat Spin 1/2. Dieser Spin koppelt mit dem Gesamtdrehimpuls des Elektrons. Auch beim Proton zeigen Spin und magnetisches Moment in entgegengesetzte Richtungen. (5 Punkte)

(d) Wie ist der Gesamtdrehimpuls im Grundzustand? (3 Punkte)

(e) Ist das Wasserstoffatom ein Boson oder ein Fermion? Gilt dies nur für den Grundzustand oder für alle Zustände? (3 Punkte)

Aufgabe 6: Strahlungsübergänge

Betrachten Sie die Strahlungsübergänge $2p \to 1s$ des Wasserstoffatoms, wenn rechts/links zirkular polarisiertes Licht $\vec{\epsilon}_{L/R} = \vec{e}_x \pm i\vec{e}_y$ abgestrahlt wird. Die Übergangsrate ist proportional zu $\int d^3r\ \psi^*_{n'l'm'}(\vec{r})\vec{\epsilon}\cdot\vec{r}\,\psi_{nlm}(\vec{r})$.

Für welche m im Anfangszustand ist der Übergang erlaubt? Beachten Sie $Y_{lm} \sim e^{im\varphi}$.

(10 Punkte)

Aufgabe 7: Elektronenkonfiguration

(a) Skizzieren Sie die Elektronenkonfiguration von Li ($Z = 3$) und Na ($Z = 11$). (4 Punkte)

(b) Warum haben Li und Na ähnliche chemische Eigenschaften? (2 Punkte)

(c) Warum stehen im Grundzustand des Stickstoffatoms ($Z = 7$) die Spins der $2p$-Elektronen parallel? (5 Punkte)

Aufgabe 8: Li_2O

Warum bildet das Li_2O-Molekül ungefähr einen 90°-Winkel? (5 Punkte)

Aufgabe 9: Spin im Magnetfeld

Der Hamiltonoperator für einen Spin im Magnetfeld ist $\hat{H} = -g_s \frac{e\hbar}{4m} \vec{\mathcal{B}} \cdot \vec{\sigma}$ ($g_s = 2$). Wenn die Koordinaten so gewählt werden, dass das Magnetfeld parallel zur z-Achse liegt, vereinfacht sich $\vec{\mathcal{B}} \cdot \vec{\sigma}$ zu $\mathcal{B}\sigma_z$.

(a) Stellen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung für $\psi(t) = \binom{\psi_\uparrow(t)}{\psi_\downarrow(t)}$ auf. (3 Punkte)

(b) Wir wollen die Zeitentwicklung eines Spins betrachten, der anfänglich in die y-Richtung zeigt, das heißt $\psi(t = 0) = u_y$, wobei u_y Eigenvektor von $\hat{S}_y$ zum Eigenwert $\hbar/2$ ist. Bestimmen Sie u_y.

(Vergessen Sie nicht, u_y zu normieren: $u_y^\dagger u_y = 1$) (3 Punkte)

(c) Berechnen Sie $\psi(t)$, indem Sie die Schrödingergleichung mit der oben angegebenen Anfangsbedingung lösen. (4 Punkte)

(d) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \hat{S}_x \rangle(t)$, $\langle \hat{S}_y \rangle(t)$ und $\langle \hat{S}_z \rangle(t)$. (4 Punkte)

Hinweis:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Aufgabe 10: Molekülspektrum von H_2

Die für das Molekülspektrum von H_2 relevanten Freiheitsgrade sind Rotation (Trägheitsmoment $\hbar^2/2\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$ eV) und Oszillation (Grundfrequenz $\hbar\omega_0 = 0,543$ eV).

(a) Bei niedrigen Temperaturen reicht die thermische Energie nicht, um diese Freiheitsgrade anzuregen. Bei welchen Temperaturen tauen sie auf? (2 Punkte)

(b) Skizzieren Sie das Molekülspektrum von H_2.

Zeichnen Sie die elektromagnetischen Übergänge ein, die bei Zimmertemperatur vorkommen können. (7 Punkte)

Lösungsvorschlag

---

1. Impuls eines Photons:

$$\Delta p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} = 2,636 \cdot 10^{-28} \text{ Ns} .$$

Druck auf die Wand: $p = \frac{F}{A} = \frac{N \cdot \Delta p}{\Delta t \cdot A}$ mit N als der Anzahl der Photonen. Damit

$$\frac{\text{Photonen}}{\text{Sekunde}} = \frac{N}{\Delta t} = \frac{200 \text{ W}}{E_\gamma} = \frac{200 \text{ W}}{\Delta p \cdot \text{c}} = 7,91 \cdot 10^{-20} \text{ J} .$$

Mit $A = \pi r^2$ und $r = 0,5 \cdot 10^{-3}$ m folgt

$$\boxed{p = 1,70 \text{ Pa}} .$$

2. $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$, $E = p \cdot \text{c}$, d.h.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h \cdot \text{c}}{E} = 1,77 \cdot 10^{-19} \text{ m} .$$

3. (a) Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \Psi(\vec{x}, t) + V(x)\Psi(\vec{x}, t)$$

und die komplex konjugierte SG:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{x}, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \triangle \Psi^*(\vec{x}, t) - V(x)\Psi^*(\vec{x}, t) .$$

Somit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) &= \Psi^*(\vec{x}, t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x}, t) + \Psi(\vec{x}, t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\vec{x}, t) \\
&= \Psi^* \cdot \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi + V\Psi\right) + \Psi \cdot \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\Psi^* + V\Psi^*\right) \\
&= \frac{\hbar}{2im}\left(-\Psi^*\triangle\Psi + \Psi\triangle\Psi^*\right)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}\cdot\vec{j} &= \frac{\hbar}{2im}\left[\left(\vec{\nabla}\Psi^*\right)\left(\vec{\nabla}\Psi\right) + \Psi^*\triangle\Psi - \left(\vec{\nabla}\Psi\right)\left(\vec{\nabla}\Psi^*\right) - \Psi\triangle\Psi^*\right] \\
&= \frac{\hbar}{2im}\left(\Psi^*\triangle\Psi - \Psi\triangle\Psi^*\right) = -\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) \qquad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

(b) Man zeige: $\frac{d}{dt}Q = 0$:

V ist das Volumen, in dem $\rho \neq 0$ ist; V ist endlich laut der Aufgabenstellung. O ist die Oberfläche des Volumens V, aber V ist so groß, dass $\vec{j}$ auf O null ist, damit folgt

$$\frac{d}{dt}Q = \int_V d^3\vec{r}\ \underbrace{\frac{d}{dt}\rho(\vec{x},t)}_{-\vec{\nabla}\cdot\vec{j}} = -\int_V d^3r\ \left(-\vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{x},t)\right) = -\int_O d\vec{S}\cdot\vec{j} = 0\,.$$

4. (a) Randbedingung: $\psi(0) = 0$. (Normierbarkeit bei gebundenen Zuständen: $\psi(x) \to 0$ für $x \to \infty$). Anschlussbedingung: $\psi(x)$ ist stetig **und** $\psi'(x)$ ist stetig.

(b) Im Bereich $0 < x < a$ gilt $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ und im Bereich $x > a$: $\psi_2(x) = Ce^{-\kappa x}$ mit $\kappa > 0$ (gebundener Zustand: nur exponentiell abfallende Lösung erlaubt).

(c) Es gilt nach (a) und (b)

$$\begin{aligned}
&\psi(0) = 0\ : \quad A = -B \ \Rightarrow\ \psi_1(x) = A'\sin(kx) \qquad A' = 2iA\,, \\
&\psi(a)\ \text{stetig:} \quad A'\sin(ka) = Ce^{-\kappa a} \\
&\psi'(a)\ \text{stetig:} \quad kA'\cos(ka) = -\kappa Ce^{-\kappa a}\,.
\end{aligned}$$

Energie:

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\,; \quad V_0 - E = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$$

5. (a) klassisch: zwei entgegengesetzte Dipole ziehen sich an (vgl. Stabmagnet) $\Rightarrow\ \Delta E > 0$ bei $\vec{\mu}_\mathrm{p}\cdot\vec{\mu}_\mathrm{e} < 0$ gilt

$$\vec{\mu}_\mathrm{p} \sim -\hat{\vec{s}}_\mathrm{p} \quad , \qquad \vec{\mu}_\mathrm{e} \sim \hat{\vec{s}}_\mathrm{e}\,,$$

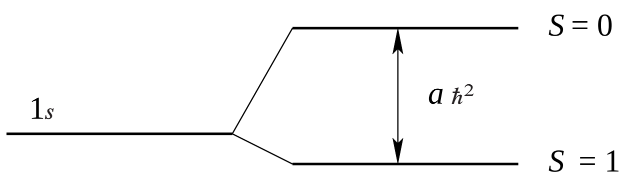
damit folgt $\Delta E < 0$ bei $\hat{\vec{s}}_\mathrm{e}\cdot\hat{\vec{s}}_\mathrm{p} > 0$ muss $a < 0$ sein.

(b) Es gilt $S = |s_\mathrm{e} - s_\mathrm{p}|, \ldots, |s_\mathrm{e} + s_\mathrm{p}|$ ist 0 oder 1 (Gesamtspinquantenzahl),

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hbar^2 S(S+1) = \hbar^2 \begin{cases} 0 \\ 2 \end{cases} .$$

(c) $1s$: $L = 0$,

$$\begin{aligned} \Delta E &= a \cdot \vec{s}_\mathrm{e} \cdot \vec{s}_\mathrm{p} \quad , \qquad a < 0\,, \quad \hat{\vec{S}} = \hat{\vec{s}}_\mathrm{e} \cdot \hat{\vec{s}}_\mathrm{p} \\ &= a \cdot \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{S}}^2 - \hat{\vec{s}}_\mathrm{e}^2 - \hat{\vec{s}}_\mathrm{p}^2\right) \\ &= a \cdot \frac{\hbar^2}{2}\left(S(S+1) - 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\right) \\ &= -a\hbar^2 \cdot \begin{cases} +\frac{3}{4} & : S = 0 \\ \frac{3}{4} - 1 = -\frac{1}{4} & : S = 1 \end{cases} . \end{aligned}$$



(d) Im Grundzustand ($1s$) tragen nur die beiden Spins bei. Die Feinstruktur ist wie beim Positron $\Rightarrow$ $S = 1$ im Grundzustand $\Rightarrow$ Gesamtdrehimpuls $= 1$ im Grundzustand.

(e) Ganzzahliger Spin $\Rightarrow$ Boson.

Der Gesamtspin von zwei halbzahligen Spins ist immer ganzzahlig $\Rightarrow$ Wasserstoff ist immer bosonisch.

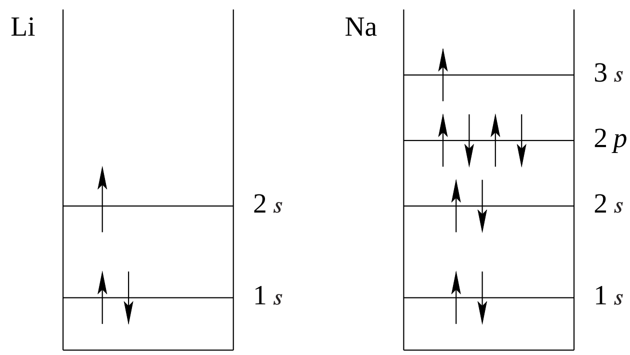
6. Übergangsmatrixelement

$$\mathcal{M}_{L/R} = \int r^2 d\cos\theta\; d\varphi\; dr \cdot Y_{00}^*(\theta,\varphi) R_{00}^*(r) \cdot \underbrace{(x \pm iy)}_{= e^{\pm i\varphi}} \cdot Y_{1m}(\theta,\varphi) R_{21}(r)$$

Man betrachte nur die φ-Integration

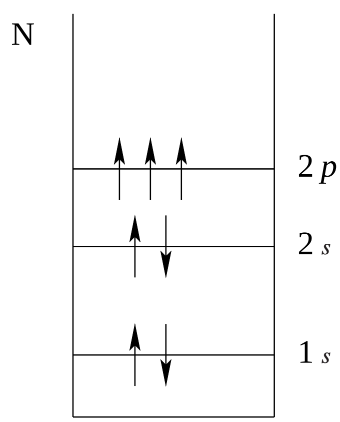
$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{L/R} &\sim \int_0^{2\pi} d\varphi\; e^{\pm i\varphi} e^{im\varphi} \\ &\neq 0\,, \quad \text{wenn} \begin{cases} m = -1 & \text{bei links} \\ m = +1 & \text{bei rechts} \end{cases} \text{polarisiertem Licht.} \end{aligned}$$

7.(a) Skizzen:



(b) Beide haben ein ungepaartes s-Elektron.

(c) Die antisymmetrische Ortswellenfunktion ist energetisch günstiger, da die Elektronen weiter voneinander entfernt sind $\Rightarrow$ symmetrische Spinwellenfunktion $\Rightarrow$ alle Spins parallel.



8. Die beiden Bindungen des O-Atoms involvieren p-Elektronen, die je in einem der Orbitale p_x, p_y oder p_z sitzen. Diese Orbitale schließen den Winkel von 90° ein.

9. (a) Es gilt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1(t)\\ \psi_2(t)\end{pmatrix} = -g_s \frac{e\hbar}{4m}\ \mathcal{B}_z\ \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1(t)\\ \psi_2(t)\end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_1(t) = -g_s \frac{e\hbar}{4m}\ \mathcal{B}_z \psi_1(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi_2(t) = g_s \frac{e\hbar}{4m}\ \mathcal{B}_z \psi_2(t)$$

$$\dot{\psi}_1(t) = i g_s \frac{e\hbar}{4m}\, \mathcal{B}_z \psi_1(t)$$
$$\dot{\psi}_2(t) = -i g_s \frac{e\hbar}{4m}\, \mathcal{B}_z \psi_2(t)$$

(b) Mit $u_y = \binom{u_1}{u_2}$ folgt

$$\hat{S}_y u_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -i u_2 \\ i u_1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} u_y$$
$$u_1 = -i u_2$$
$$u_2 = i u_1$$
$$\Rightarrow u_y = A \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \qquad u_y^\dagger = A^*(1, -i)$$
$$u_y^\dagger u_y = |A|^2 \cdot (1+1) = 1 \quad \Rightarrow \quad |A| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

man wähle die Phase $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$, damit

$$\boxed{u_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}}\,.$$

(c) Mit der Anfangsbedingung $\psi_1(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ folgt

$$\Rightarrow \psi_1(t) = \psi_1(t=0)\, \exp\left\{ i g_s\, \frac{e}{4m}\, \mathcal{B}_z t \right\}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\, \exp\left\{ i g_s\, \frac{e}{4m}\, \mathcal{B}_z t \right\}$$
$$\psi_2(t) = \frac{i}{\sqrt{2}}\, \exp\left\{ -i \underbrace{g_s\, \frac{e}{4m}\, \mathcal{B}_z}_{=:\,\omega}\, t \right\}$$

(d) Erwartungswerte

$$\langle \hat{S}_x \rangle(t) = \left(\psi_1^*, \psi_2^*\right) \hat{S}_x \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \left(\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1\right)$$
$$= \frac{\hbar}{4}\left(i e^{-i\omega t} e^{-i\omega t} - i e^{i\omega t} e^{i\omega t}\right) = \frac{i\hbar}{4}\left(e^{-2i\omega t} - e^{2i\omega t}\right) = \frac{\hbar}{2} \sin(2\omega t)$$

$$\langle \hat{S}_y \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \left(-i \psi_1^* \psi_2 + i \psi_2^* \psi_1\right)$$
$$= \frac{\hbar}{4}\left(-i \cdot i e^{-i\omega t} e^{-i\omega t} + i(-i) e^{i\omega t} e^{i\omega t}\right) = \frac{\hbar}{2} \cos(2\omega t)$$

$$\langle \hat{S}_z \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \left(\psi_1^* \psi_1 - \psi_2^* \psi_y\right)$$
$$= \frac{\hbar}{4}\left(e^{-i\omega t} e^{i\omega t} - (-i) e^{i\omega t} e^{-i\omega t}\right) = 0 \ .$$

10. (a)
   1. Rotationsanregung

      $$E_J = \frac{\hbar^2}{2\Theta} J(J+1)$$
      $$\Delta E_J(0 \to 1) = \frac{\hbar^2}{2\Theta} \cdot 2 = 16 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

      entspricht $T_J = \frac{\Delta E_J}{k_B} = 186$ K.
   2. Oszillationsanregung

      $$\Delta E_\nu = \hbar\omega_0 = 0,543 \text{ eV} ,$$

      entspricht $T_\nu \approx 6300$ K.

(b) Mit den Betrachtungen aus (a) folgt

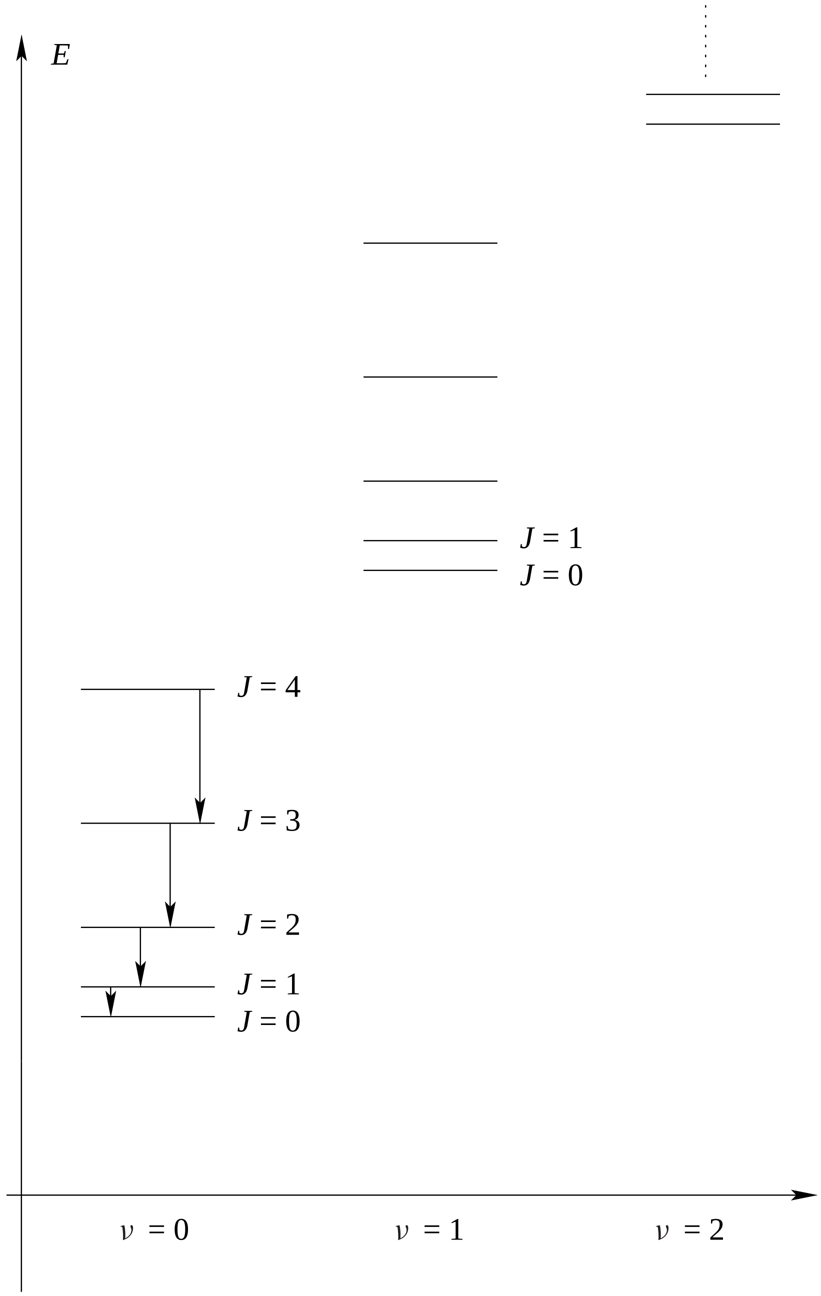
Oszillation : $E_\nu = \hbar\omega_0 \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \qquad \nu = 0, 1, 2, \ldots$

Rotation : $E_J = \frac{\hbar^2}{2\Theta} J(J+1) \qquad J = 0, 1, 2, \ldots$

Bei Zimmertemperatur ist keine Oszillation möglich nur $\nu = 0$.

Elektromagnetische Übergänge $\Delta L = 1 \Rightarrow \Delta J = 1$.

Skizze:


E
J = 1
J = 0
J = 4
J = 3
J = 2
J = 1
J = 0
ν = 0
ν = 1
ν = 2