

# 11. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Besprechung in der Woche vom 17.7.

## Aufgabe 33 Morse-Potential

Das in Aufgabe 31 behandelte Vibrationspektrum beruht auf der Annahme, dass das Vibrationspotential harmonisch ist. Das Morse-Potential verbessert diese Annäherung durch eine exponentielle Beschreibung des Potentials:

$$V_{\text{Morse}}(R) = E_d \left( e^{-2a(R-R_e)} - 2e^{-a(R-R_e)} \right),$$

wobei  $E_d$  die Dissoziationsenergie,  $R_e$  den Kernabstand mit geringster potentieller Energie beschreibt. Die Konstante  $a$  beschreibt wie stark das Potential gekrümmt ist und muss experimentell bestimmt werden.

- Zeigen Sie, dass das Morse-Potential eine harmonische Annäherung, wie in Aufgabe 31, legitimiert. Stellen Sie den Zusammenhang zwischen  $E_d$ ,  $a$  und  $k_s$  her. Wie könnte  $a$  experimentell bestimmt werden?
- Für das Morse-Potential kann die Schrödingergleichung analytisch gelöst werden. Die resultierenden Schwingungsenergien lauten

$$E_\nu = \hbar\omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega^2}{4E_d} \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2.$$

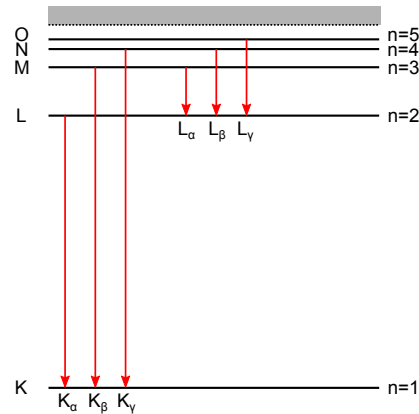
Berechnen Sie die Energieabstände  $\Delta E_\nu = E_{\nu+1} - E_\nu$ . Wie verhalten sich diese im Vergleich zu den Energieabständen aus Aufgabe 31?

- Die Dissoziationsenergie für Kohlenstoff beträgt 11.16 eV.
  - Berechnen Sie daraus  $a$  und skizzieren (oder plotten) Sie das harmonische- und Morse Potential von  $0.5R_e$  bis  $3.5R_e$ . Fügen Sie die Energielevel für beide Potentiale mit  $\nu = 0, 10, 25, 40$  in die Grafik hinzu. Was ist dabei zu beobachten?
  - Berechnen Sie für welche  $\nu_{\text{max}}$  die Vibrationszustände noch gebunden sind.

*Bemerkung:* Heutzutage gibt es bessere Approximationen für das tatsächliche Potential, wie z.B. das RKR- oder MLR-Potential.

### Aufgabe 34 Röntgenstrahlung von Wolfram

Die K-Absorptionskante von Wolfram (d.h. die Wellenlänge, wo Freisetzung von Elektronen aus der K-Schale beginnt) liegt bei 0.17845 Angström. Die Wellenlängen der  $K_{\alpha}$ -,  $K_{\beta}$ -,  $K_{\gamma}$ -, und  $K_{\delta}$ -Linien liegen bei: 0.2100, 0.1840, 0.1790 und 0.1789 Angström (Feinstruktur sei vernachlässigt).



- Geben Sie die Energien der K, L, M, N, und der O-Schale an.
- Welche Minimalenergie ist nötig, um die L-Serie anzuregen?
- Wie groß ist die Wellenlänge der  $L_{\alpha}$ -Linie?
- Die Energie  $E_K$  in der K-Schale kann nach der Rydbergformel unter Berücksichtigung einer effektiven Kernladungszahl  $Z_{\text{eff}} = Z - S$  und einer Abschirmkonstante  $S$  abgeschätzt werden:

$$E_K = h\nu = (Z - S)^2 \cdot Ry \cdot \frac{1}{n^2},$$

wobei  $Z$  die ungeschirmte Kernladungszahl ist. Wie groß ist die Abschirmkonstante  $S$  für ein Elektron in der K-Schale von Wolfram?

### Aufgabe 35 (nicht Teil des Bonussystems) Allgemeine Fragen zur Wiederholung

Diese Aufgabe soll bearbeitet und besprochen werden, dient aber eher als Ausgangspunkt für weitere Fragen und Diskussionen zur Wiederholung.

- Welche Quantenzahlen werden benötigt, um ein Elektron im Wasserstoffatom vollständig zu beschreiben?
- Was ist die effektive Rabinfrequenz und wovon hängt sie ab?
- Wie stark muss ein Zweiniveausystem optisch getrieben werden, um das obere Niveau stärker als das untere zu besetzen?
- Was sind die möglichen Gesamtdrehimpulse, wenn Sie zwei Elektronen im 2s-Niveau per LS-Kopplung koppeln? Wie sieht es für Elektronen im 3p-Zustand aus?
- Wann wird die sogenannte  $jj$ -Kopplung relevant?
- Welche Bedeutung hat die Quantenzahl  $F$  und wie hängt der Abstand zweier benachbarter Hyperfeinniveaus ( $E_{F+1} - E_F$ ) von  $F$  ab?
- Was ist die Wellenlänge der Materiewelle eines Kohlenstoffatoms mit Schallgeschwindigkeit?
- Was bedeutet *Singulett-Zustand* bzw. *Triplet-Zustand* beim Heliumatom?
- Warum ist der  $2^3S_1$ -Zustand von Helium metastabil (über 2 Stunden mittl. Lebensdauer)?

- j) Wie viele Nullstellen hat die radiale Wahrscheinlichkeitsverteilung des  $3s$ -Zustandes von Wasserstoff?
- k) Welches sind die zwei niederenergetischsten Wasserstoff-Niveaus, deren Entartung durch den Lambshift aufgehoben werden?
- l) Was bestimmt die Linienbreite eines Zerfallskanals?
- m) Was versteht man unter  $sp^3$ -Hybridisierung und welche Form nimmt die Elektronenstruktur an?