PEP 3 – Blatt 10 – WS 2013/2014

Besprechung am 9./10. Januar 2014

10.1 Starrer Rotator (10)

(a) Berechnen Sie die Rotationsfrequenz im ersten angeregten Rotationszustand von H_2 und N_2 ($D(H_2) =$ 77pm, $D(N2_) =$ 110pm).

(b) Welche Rotationszustände sollten bei Raumtemperatur angeregt sein?

(c) Ab welcher Temperatur werden die Rotationsfreiheitsgrade zur spezifischen Wärme der beiden Gase beitragen?

Hinweis: Das Trägheitsmoment zweier punktförmiger Massen, die um den gemeinsamen Mittelpunkt im Abstand R rotieren, ist $I = 2m \cdot R^2$.

Lösung:

(a) Trägheitsmoment: $I = 2m\left(\frac{D}{2}\right)^2 = \frac{1}{2}mD^2$, m ist Masse eines H(N)-Atoms.

$J = I \cdot \omega, \omega = 2\pi\nu$, und

$J = \hbar \cdot \sqrt{l(l+1)}$ und damit

$\nu = \frac{\hbar\sqrt{l(l+1)}}{\pi m D^2}$, mit $l = 1$.

$H_2 : \nu = 4.8 \cdot 10^{12}$Hz,

$N_2 : \nu = 1.7 \cdot 10^{11}$Hz.

(b) $E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mD^2} = \frac{1}{2}k_BT$ oder

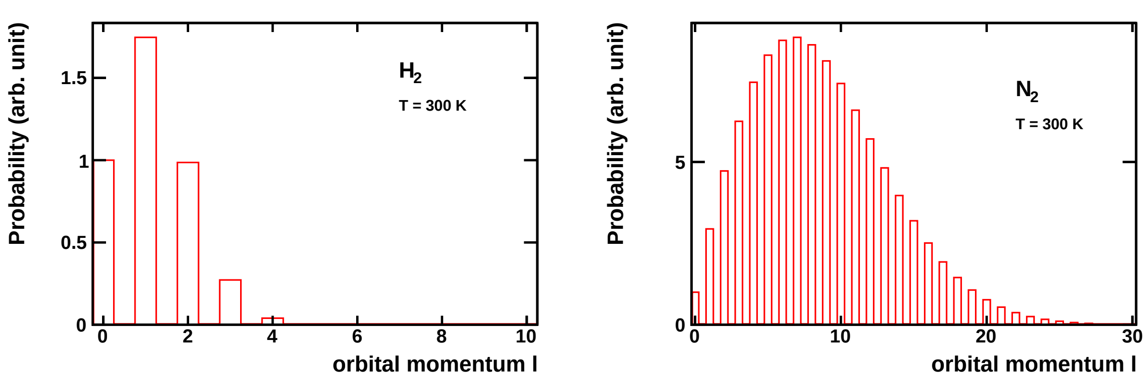
$l(l+1) \approx l^2 = \frac{D^2}{\hbar^2}\frac{1}{2}k_BTm$, und damit

$H_2 : l \approx 1$,

$N_2 : l \approx 7$.

Genauere Betrachtung:

Besetzungswahrscheinlichkeit $P = (2l+1)e^{-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mD^2 k_B T}}$.



Im wesentlichen $l = 0, 1, 2, 3, 4$ besetzt für H_2 ($l(l+1) \approx l^2$ keine gute Näherung für kleine l). Bei N_2 breite Besetzung, Maximum um $l = 7$.

(c) Gesucht ist die Temperatur, bei der gerade der Zustand $l = 1$ angeregt wird.

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot 1(1+1)}{mD^2} = k_B T \text{ oder}$$

$$T_{H_2} = \frac{2\hbar^2}{mD^2 k_B} = \frac{2 \cdot (1.05)^2 \cdot 10^{-68}}{1.66 \cdot 10^{-27} \cdot (7.7)^2 \cdot 10^{-22} \cdot 1.4 \cdot 10^{-23}} = 160\text{K}.$$

$$T_{N_2} = \frac{2\hbar^2}{mD^2 k_B} = \frac{2 \cdot (1.05)^2 \cdot 10^{-68}}{14 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot (11)^2 \cdot 10^{-22} \cdot 1.4 \cdot 10^{-23}} = 5.6\text{K}.$$

10.2 Harmonischer Oszillator (10)

Berechnen Sie die Orts-Impuls-Unschärfe für die Energieeigenfunktionen des ein-dimensionalen harmonischen Oszillators.

Hinweis: Da $\langle x \rangle = 0$ und $\langle p \rangle = 0$ aus Symmetriegründen, gilt $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ und $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$.

Lösung: Laut Vorlesung gilt für $\zeta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$ für eine Wellenfunktion mit Quantenzahl ν:

$\zeta|\nu\rangle = \sqrt{\frac{\nu+1}{2}}|\nu+1\rangle + \sqrt{\frac{\nu}{2}}|\nu-1\rangle$

Erwartungswert $\langle\nu|\zeta^2|\nu\rangle = \langle\nu|\zeta\zeta|\nu\rangle =$

$\langle\nu|\zeta\sqrt{\frac{\nu+1}{2}}|\nu+1\rangle + \langle\nu|\zeta\sqrt{\frac{\nu}{2}}|\nu-1\rangle =$

$\langle\nu|\sqrt{\frac{\nu+1}{2}}\sqrt{\frac{\nu+2}{2}}|\nu+2\rangle + \langle\nu|\sqrt{\frac{\nu+1}{2}}\sqrt{\frac{\nu+1}{2}}|\nu\rangle + \langle\nu|\sqrt{\frac{\nu}{2}}\sqrt{\frac{\nu}{2}}|\nu\rangle + \langle\nu|\sqrt{\frac{\nu}{2}}\sqrt{\frac{\nu-1}{2}}|\nu-2\rangle.$

$|\nu\rangle$ sind orthogonal für verschiedne ν, und damit

$\langle\zeta^2\rangle = \frac{\nu+1}{2} + \frac{\nu}{2} = \nu + \frac{1}{2}$ und damit

$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(\nu + \frac{1}{2})$

Analog kann man den mittleren quadratischen Impuls mit dem in der Vorlesung definierten Operator $\frac{\partial}{\partial\zeta}$ berechnen.

Alternativ: Im Mittel steckt die halbe Energie in der kinetischen Energie, also

$\frac{\langle p^2\rangle}{2m} = \frac{1}{2}E = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})$ und damit

$\langle p^2\rangle = m\hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})$ und damit

$\langle x^2\rangle\langle p^2\rangle = (\nu + \frac{1}{2})^2\hbar^2$ oder

$\langle x\rangle\langle p\rangle = (\nu + \frac{1}{2})\hbar$ und für den Grundzustand mit $\nu = 0$

$\langle x\rangle\langle p\rangle = \frac{\hbar}{2}$ (Wellenfunktionen sind Gaussfunktionen).

10.3 Drehimpuls (10)

Bei den Wasserstoffwellenfunktionen wird der Drehimpuls durch Quantenzahlen l und m_l bestimmt. Der Drehimpuls L hängt von l ab über $|L| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$. Die z-Komponente des Drehimpulses hängt von der Quantenzahl m_l ab: $L_z = m_l\hbar$, mit $m_l \in \{-l, ..., l\}$.

(a) Zeichnen Sie die möglichen Stellungen des Drehimpulsvektors fur $l = 1, l = 2$ und $l = 3$ bezüglich der z-Achse.

(b) Welchen Winkel zur z-Achse hat der Drehimpuls eines Elektrons im Wasserstoffatom mindestens für $l = 1$ und $l = 50$?

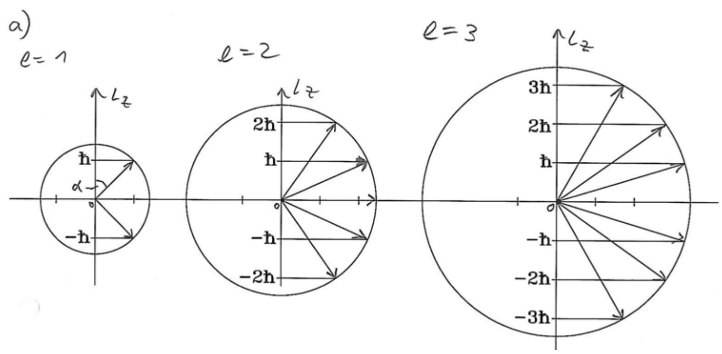
(c) Welcher Quantenzahl entspricht der Drehimpuls einer CD bei einer Rotationsfrequenz von 200 Upm? Gefordert ist nur eine Abschätzung. (CD: Gewicht 15 g, Durchmesser 12 cm).

(d) Eine Wellenfunktion des Wasserstoffatoms lautet

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta e^{-i\phi}.$$

Berechnen Sie die Eigenwerte der Operatoren für die z-Komponente und den Betrag des Bahndrehimpulses. Wie groß ist l ?

Lösung:



(a)

(b) $\cos\alpha = \dfrac{l\hbar}{\sqrt{l(l+1)}\hbar} = \dfrac{1}{\sqrt{1+\frac{1}{l}}}.$

$l = 1, \alpha = 45°,$

$l = 50, \alpha = 8°,$

(c) $L = I\omega, I = \dfrac{1}{2}mR^2$ und damit

$$\sqrt{l(l+1)}\hbar = \frac{1}{2}mr^2\omega$$

$$l \approx \frac{mr^2\omega}{2\hbar} = 5 \cdot 10^{30}.$$

(d) $\hat{l_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$, $\hat{l_z}\psi(r,\theta,\phi) = -\hbar\psi(r,\theta,\phi), l_z = -\hbar.$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$$\psi(r,\theta,\phi) = F(r)\sin\theta e^{-i\phi}.$$

$$\frac{1}{F(r)}\hat{l}^2\psi = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\cos\theta)e^{-i\phi} + \frac{1}{\sin\theta}(-1)e^{-i\phi}\right] =$$

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}(\cos^2\theta - \sin^2\theta) - \frac{1}{\sin\theta}\right]e^{-i\phi} =, \cos^2\theta = 1 - \sin^2\theta$$

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}(1 - 2\sin^2\theta) - \frac{1}{\sin\theta}\right]e^{-i\phi} =$$

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta} - 2 - \frac{1}{\sin^2\theta}\right]\sin\theta e^{-i\phi} =$$

$2\hbar^2\frac{\psi}{F(r)}$ und damit

$$2\hbar^2 = l(l+1)\hbar^2$$

$$l = 1, |l| = \sqrt{2}\hbar.$$