

Aufgabe 1, Bindungsenergie der Elektronen im Helium-Atom

Man bestimme durch Störungsrechnung die Bindungsenergie der beiden Elektronen im Helium-Atom unter Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung aus dem Wert ohne deren Berücksichtigung ($E_{\text{ion,ohne}} = -108.8$ eV). Der Energiebeitrag dieser Abstoßung vermindert die Bindungsenergie.

Hinweis: Der Hamilton-Operator des Störterms kann nach den Legendre-Polynomen P_l entwickelt werden, wobei

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{r_1^2 \sqrt{1 + \frac{r_2^2}{r_1^2} - 2\frac{r_2}{r_1} \cos \alpha}} = \frac{1}{r_1} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos \alpha) \quad (1)$$

mit $\cos \alpha = \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$, wo α der Winkel zwischen den beiden Ortsvektoren der Elektronen und $r_1, \vartheta_1, \varphi_1$ bzw. $r_2, \vartheta_2, \varphi_2$ die Kugelkoordinaten der Ortsvektoren bedeuten. Die ersten drei Legendre-Polynome lauten $P_0 = 1$, $P_1(x) = x$, $P_2(x) = 1/2(3x^2 - 1)$. Die Entwicklung ist gültig für $r_1 > r_2$, sonst müssen r_1 und r_2 der RHS von Gl. (1) vertauscht werden.

Die Wellenfunktion des Heliumatoms unter Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen den Elektronen sei

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1,0,0} \cdot \psi_{1,0,0} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \exp(-Z(r_1 + r_2)/a_0).$$

Aufgabe 2, Drehimpuls für Mehrelektronen-Systeme

Welche Werte kann die Quantenzahl J annehmen, wenn der Gesamtdrehimpuls gegeben ist durch die Summe

- von zwei Bahndrehimpulsen mit $l_1 = 4$ und $l_2 = 2$
- der Bahndrehimpulse eines p- und eines d-Elektrons
- der Spins und der Bahndrehimpulse von drei s-Elektronen
- der Spins und der Bahndrehimpulse eines p- und eines d-Elektrons
- der Bahndrehimpulse von drei p-Elektronen mit identischer Hauptquantenzahl n und Spinprojektion m_s ?

Aufgabe 3, Wellenfunktionen des Heliumatoms

Die 1S_0 Wellenfunktion der $1s2s$ -Anordnung für das Heliumatom lautet

$$\varphi(^1S_0) = \varphi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \chi_{0,0}(1, 2) . \quad (2)$$

Das 3S_1 Niveau ist dreifach entartet mit den entsprechenden Wellenfunktionen

$$\varphi(^3S_1) = \varphi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \begin{cases} \chi_{1,1}(1, 2) \\ \chi_{1,0}(1, 2) \\ \chi_{1,-1}(1, 2) \end{cases} , \quad (3)$$

für $m_S = 1, 0$, und -1 . Die Spinwellenfunktionen in den Gleichungen (2) und (3) lauten:

$$\begin{aligned} \chi_{0,0}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)] & \hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{\pm} &= \frac{3\hbar^2}{4} \chi_{\pm} \\ \chi_{1,1}(1, 2) &= \chi_+(1)\chi_+(2) & \hat{s}_x \chi_{\pm} &= \frac{\hbar}{2} \chi_{\mp} \\ \chi_{1,0}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)] & \hat{s}_y \chi_{\pm} &= \pm \frac{i\hbar}{2} \chi_{\mp} \\ \chi_{1,-1}(1, 2) &= \chi_-(1)\chi_-(2) . & \hat{s}_z \chi_{\pm} &= \pm \frac{\hbar}{2} \chi_{\pm} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad (4)$$

(a) Konstruieren Sie die symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen φ_S und φ_A aus den 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\Psi_{n=1,l=0,m=0}(\mathbf{r})$ und $\Psi_{n=2,l=0,m=0}(\mathbf{r})$. Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen in den Gleichungen (2) und (3) antisymmetrisch sind.

(b) Argumentieren Sie anschaulich (unter Betrachtung der Ortswellenfunktionen), welcher Spin-Zustand (Singulett oder Triplett) energetisch höher liegt.

(c) Zeigen Sie, dass die erste Spin-Wellenfunktion aus Gl. (4) eine Eigenfunktion von $\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2$ mit Eigenwert 0 ist und deshalb einen gesamten Spin $S=0$ entspricht. Zeigen Sie auch, dass die drei letzten Wellenfunktionen $S=1$ und $M_S=1, 0$ und -1 entsprechen.

Aufgabe 4, Grundzustand des Heliumatoms

In der Vorlesung wurde die Slater Determinante eingeführt, mit deren Hilfe sich vollständig antisymmetrische Zustände von Mehrelektronenatomen konstruieren lassen:

$$\psi_c(q_1, \dots, q_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} U_{\alpha}(q_1) & U_{\beta}(q_1) & \dots & U_{\nu}(q_1) \\ U_{\alpha}(q_2) & U_{\beta}(q_2) & \dots & U_{\nu}(q_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ U_{\alpha}(q_n) & U_{\beta}(q_n) & \dots & U_{\nu}(q_n) \end{vmatrix}$$

wobei $U_{\mu}(q_i)$ die Einelektronenwellenfunktion des i -ten Elektrons ist. Bestimmen Sie mit Hilfe der Slater Determinante die Grundzustandswellenfunktion des Heliumatoms.

Aufgabe 5, Wasserstoffähnliche Atome

In einem Atom mit mehr als einem Elektron können die Zustände der einzelnen Elektronen noch durch die Quantenzahlen n , l und m beschrieben werden. Allerdings ist aufgrund der gegenseitigen Wechselwirkung der Elektronen das Coulomb-Potenzial modifiziert, so dass sich die entsprechenden Energien von denen des Wasserstoffatoms unterscheiden. Besonders, die l -Entartung der Energieeigenwerte ist aufgehoben. Wir studieren diesen Effekt am Beispiel des Natriumatoms. Im Natriumatom besetzt das am schwächsten gebundene Elektron (Valenzelektron) einen 3 S -Zustand. Die anderen 10 Elektronen besetzen alle möglichen Zustände von $n=1$ bis $n=2$ (Kernelektronen) und kreisen viel näher am Kern. Deshalb schirmen sie die vom Valenzelektron „gesehene“ Ladung ab [Abb. 1 a.). Das resultierende Effektivpotenzial des Valenzelektrons ist in Abb. 1 b.) gezeigt.

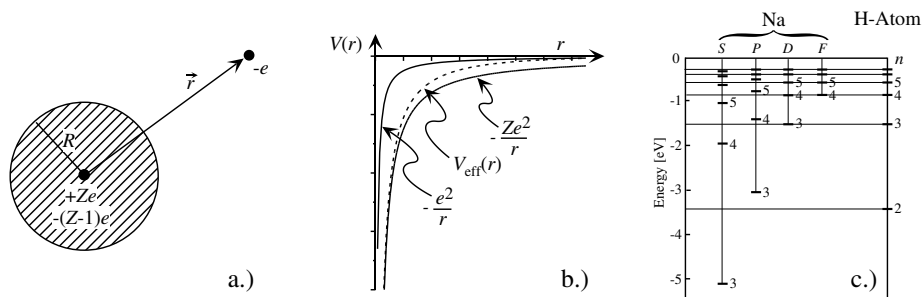


Abbildung 1: a.) Das Valenzelektron eines Alkaliatoms „sieht“ eine positive Ladung abgeschirmt durch die negative Ladung der Kernelektronen. Die effektive Kernladung variiert deshalb zwischen $+e$ für große Werte von r und $+Ze$ für kleine Werte von r . b.) Das resultierende Effektivpotenzial des Valenzelektrons. c.) Vereinfachtes Energieschema für Natrium zusammen mit den Energieniveaus von Wasserstoff.

Beschreiben Sie die Unterschiede zwischen dem Energieschema des Natriumatoms (Abb. 1 c.)) und dem des Wasserstoffatoms. Können Sie einen systematischen Effekt auf die Energieniveaus für wachsendes l beobachten? Erklären Sie die l -Abhängigkeit der Energie des Valenzelektrons durch Betrachtung der radialen Verteilung der Elektron-Wellenfunktion.