

### Aufgabe 1, Heliumatom

Berechnen Sie das effektive Potential im Heliumatom, das eines der beiden Elektronen erfährt, wenn sich das andere im Grundzustand befindet.

### Aufgabe 2, Wellenfunktionen des Heliumatoms

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

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

Das  $^3S_1$  Niveau ist dreifach entartet mit den entsprechenden Wellenfunktionen

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

für  $M_S = 1, 0$ , und  $-1$ .

Die Spinwellenfunktionen in den Gleichungen (1) und (2) lauten:

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

a.) Konstruieren Sie die symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen  $\varphi_S$  und  $\varphi_A$  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 (1) und (2) 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. (3) 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 3, 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.

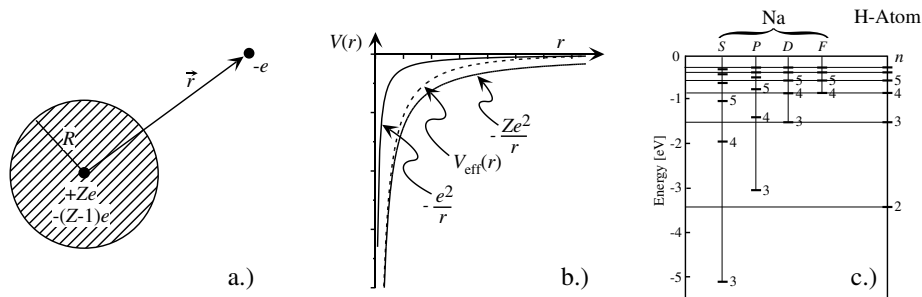


Abbildung 1: a.) Das Valenzelektron eines Alkaliatoms „sieht“ eine positive Ladung abgeschirmt durch die negative Ladung der Kernelektronen. Die effektive Kernladung variiert deshalb zwischen  $+e$  für große Werte von  $r$  und  $+Ze$  für kleine Werte von  $r$ . b.) Das resultierende Effektivpotenzial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

#### Aufgabe 4, Grundzustand des Heliumatoms

In der Vorlesung wurde die Slater Determinante eingeführt, mit deren Hilfe sich vollständig antisymmetrische Zustände von N-Elektronenatomen 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 für den Spezialfall des Heliumatoms.

#### Aufgabe 5, Drehimpuls für Mehrelektronen-Systeme

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

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