Modul P20: Mehrelektronen- und Molekülphysik WS 2013 / 14 **Übung 1**

Aufgabe 1: Quantenzahlen

1) Welche Werte können die Quantenzahlen n,l und m eines Atoms annehmen?
2) Wie groß ist der Gesamtbahndrehimpuls |L| eines Elektrons im Wasserstoffatom mit l=3, welche Werte können bei der Messung in einer bestimmten Richtung l_z gemessen werden?
3) Was bedeutet „Entartung"? Warum sind die Energien des Wasserstoffatoms gegenüber l und m entartet?

Aufgabe 2: Hundsche Regeln

In dieser Aufgabe sollen sie die Atom-Anregungszustände des Schwefel-Atoms diskutieren.

1. Geben sie die Elektronenkonfiguration des Schwefel-Atoms an.
2. Durch welche Quantenzahlen werden die Elektronen in der äusseren, ungefüllten Schale charakterisiert? Welche Werte können diese Quantenzahlen annehmen?
3. Welche Gesamtdrehimpulse L und Gesamtspins S kann das Mehrelektronensystem annehmen? Stellen sie alle durch das Pauli-Prinzip möglichen Konfigurationen in einer Tabelle zusammen.
4. Sortieren sie die erlaubten Konfigurationen nach ihren Termsymbolen ${}^{2S+1}L$ und benutzen sie die Hundschen Regeln, um die Reihenfolge der Energien der verschienden Niveaus zu bestimmen.

Aufgabe 3: Wellenfunktion des He-Atoms

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

$$\varphi({}^1S_0) = \varphi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\,\chi_{0,0}(1,2)$$

Das ${}^3S_1$Niveau ist dreifach entartet mit den enstprechenden Wellenfunktionen

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

für $m_S = 1{,}0$ und -1.

Die Spinwellenfunktionen in diesen beiden Gleichungen lauten:

$$\chi_{0,0}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

$$\chi_{1,1}(1,2) = \chi_+(1)\chi_+(2)$$

$$\chi_{1,0}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

$$\chi_{1,-1}(1,2) = \chi_-(1)\chi_-(2)$$

mit

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2\chi_\pm = \frac{3\hbar^2}{4}\chi_\pm$$

$$\hat{s}_x\chi_\pm = \frac{\hbar}{2}\chi_\mp$$

$$\hat{s}_y\chi_\pm = \pm\frac{i\hbar}{2}\chi_\mp$$

$$\hat{s}_z\chi_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}\chi_\pm$$

a) Konstruieren Sie die symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen φ_S und φ_A aus den 1-Teilchen Wellenfunktionen $\Psi_{100}(\boldsymbol{r})$ und $\Psi_{200}(\boldsymbol{r})$. Zeigen Sie, dass die Wellenfunktionen $\varphi({}^1S_0)$ und $\varphi({}^3S_1)$ 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 $\chi_{0,0}(1,2)$ eine Eigenfunktion von $\hat{\boldsymbol{S}}^2 = (\hat{\boldsymbol{s}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_2)^2$ mit Eigenwert 0 ist und deshalb einem gesamten Spin S=0 entspricht. Zeigen Sie auch, dass die drei letzten Wellenfunktionen S=1 und $M_s = 1, 0$ und -1 entsprechen.