

FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK 4

Übung 3 - Mehrelektronensysteme

Hannah Schamoni

1 Hundsche Regeln

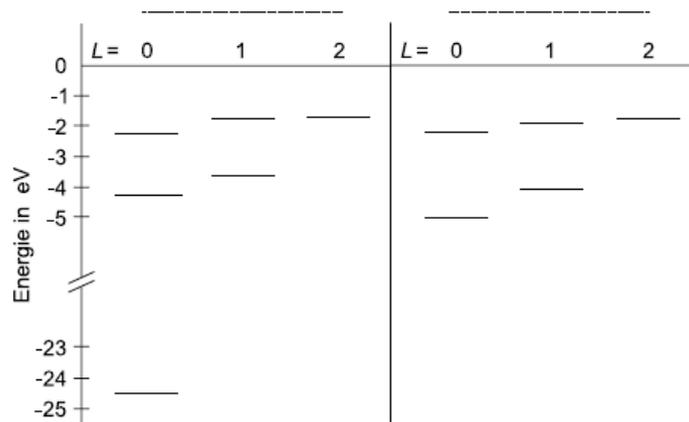
Ein Atom habe die Elektronenkonfiguration $(\text{Ne})3s^23p^63d^64s^2$. Leite nach den Hundschen Regeln die spektroskopischen Symbole $^{2S+1}L_J$ des Grundzustands des neutralen Atoms und des Grundzustands des 11-fach ionisierten Atoms ab. Begründe die einzelnen festgelegten Quantenzahlen nach den Hundschen Regeln.

2 Elektronenkonfiguration

- Betrachte die Konfiguration $1s^22s^22p^3d$ von Kohlenstoff und bestimme die spektroskopischen Symbole $^{2S+1}L_J$, in die diese durch Coulomb-Abstoßung der Elektronen und Spin-Bahn-Kopplung zerfällt. Welche Dimension hat die Konfiguration?
- Die Grundzustandskonfiguration von zweifach ionisiertem Europium Eu^{2+} ist $(\text{Xe})4f^7$. Bestimme gemäß den Hundschen Regeln das $^{2S+1}L_J$ -Symbol des Grundzustands von Eu^{2+} . In wie viele Zeeman-Komponenten spaltet der Grundzustand auf, wenn man ein schwaches B -Feld anlegt, und durch welche Quantenzahl werden die Zeeman-Komponenten charakterisiert?
- Gib die vollständige Liste der spektroskopischen Symbole $^{2S+1}L_J$ an, von denen aus ein elektrischer Dipolübergang in den Grundzustand von Eu^{2+} möglich ist. (Die Paritätsauswahlregel braucht nicht berücksichtigt zu werden.)

3 Helium-Atom I

- Die folgende Abbildung zeigt einen Ausschnitt aus dem Termschema des Helium-Atoms für die niedrigsten Energieniveaus. Gegeben sind die Energien der einzelnen Energieniveaus sowie der jeweilige Drehimpuls L . Mögliche Aufspaltungen der Energieniveaus durch Feinstruktur sind nicht eingezeichnet. Beschrifte die Energieniveaus vollständig mit den entsprechenden spektroskopischen Symbolen. Welches der beiden Termschemata gehört zum Triplet-, welches zum Singulett-Helium?
- Erläutere den Unterschied zwischen dem Triplet- und Singulett-System des Helium-Atoms. Welches der beiden Systeme weist für $L \neq 0$ Feinstrukturaufspaltung auf? Begründe die Antwort.
- Warum gibt es keinen 1^3S_1 -Zustand? Gib für diesen (hypothetischen) Zustand für beide Elektronen alle Quantenzahlen an.
- Warum werden die Übergänge $2^1S_0 \rightarrow 1^1S_0$ und $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0$ nicht beobachtet?



4 LS-Kopplung und Auswahlregeln

- a) Betrachte ein 3F -Niveau und ein 3D -Niveau eines Mehrelektronenatoms und bestimme deren Zerlegung unter dem Einfluss der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Zeichne beide Niveaus und ihre Aufspaltungen in ein gemeinsames Niveauschema, worin die relative Größe der Aufspaltungen durch den jeweiligen Wert von $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ gegeben ist.
Hinweis: $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))\hbar^2$. Geh davon aus, dass das 3F -Niveau höher liegt als das 3D -Niveau.
- b) Bestimme die erlaubten Übergänge zwischen den aufgespaltenen Niveaus aus **a)**, wobei die Auswahlregeln für die elektrische Dipolstrahlung

$$\Delta J = 0, \pm 1, 0 \rightarrow 0, \quad \Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta S = 0$$

zu berücksichtigen sind.

- c) Strenggenommen muss man außer den in **b)** angegebenen Auswahlregeln auch diejenige für die Parität Π berücksichtigen. Die Paritäts-Auswahlregel für elektrische Dipolübergänge lautet: $\Pi' = -\Pi$, es gibt also Übergänge nur zwischen Zuständen entgegengesetzter Parität. Die Parität eines Zustands ist festgelegt durch $\Pi = (-1)^K$, wobei $K = \sum_i l_i$ ist, also die Summe der Bahndrehimpulsquantenzahlen aller Elektronen des Atoms. Kann es die in **b)** bestimmten Übergänge geben, wenn die beteiligten Niveaus zur selben Elektronenkonfiguration gehören?
- d) Betrachte ein Kohlenstoffatom in der angeregten Konfiguration $1s^2 2s^2 2p 3s$ und bestimme alle erlaubten elektrischen Dipolübergänge in den Grundzustand. Tue dasselbe für ein Kobalt-27-Atom in der angeregten Konfiguration $(\text{Ar}) 3d^6 4s^2 5s$.

5 L-S- vs. j-j-Kopplung

Diskutiere ein Zweielektronensystem mit einem $2p$ - und einem $3d$ -Elektron für den Fall der L - S - und den der j - j -Kopplung und zeige, dass die Zahl der möglichen Zustände und deren Gesamtdrehimpuls J in beiden Fällen die gleichen sind.

6 Einsteinium und exotische Atome

Berechne für ein fast vollständig ionisiertes Einsteiniumion (${}_{99}^{254}\text{Es}^{98+}$) den Bahnradius und die Gesamtenergie im Grundzustand mit verschiedenen gebundenen Teilchen in der Hülle ($a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e}$):

- ein Elektron,
- ein Myon $m_\mu \approx 207m_e$,
- ein Antiproton.
- Berechne für alle drei Fälle die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im $1s$ -Zustand innerhalb des Kernvolumens ($R_K \approx 1.2 \cdot (A)^{1/3}$ fm). Verwende $R_{10}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{2}} e^{-\alpha r/2}$ mit $\alpha = \frac{2Z}{a_0}$.

7 Helium-Atom II

Es soll näherungsweise die erste Ionisierungsenergie des Helium-Atoms berechnet werden.

- Was ergibt sich für die erste Ionisierungsenergie unter Vernachlässigung der Coulombabstoßung zwischen den beiden Elektronen?
- Welchen Wert erhält man, wenn man andererseits annimmt, dass das "erste" Elektron eine Elementarladung des Kerns für das "zweite" vollständig abschirmt?
- Nun soll eine etwas bessere Abschätzung versucht werden. Wie lautet zunächst die potentielle Energie $V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ des "zweiten" Elektrons im elektrostatischen Feld des Kerns und des "ersten" Elektrons am Ort \mathbf{r}_1 als Funktion des Ortsvektors \mathbf{r}_2 des zweiten Elektrons?
- Die Coulombabstoßung kann näherungsweise dadurch berücksichtigt werden, dass man das mittlere Potential

$$\bar{V}_2(r_2) = \langle V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle_{\mathbf{r}_1} \equiv \int V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\psi(\mathbf{r}_1)|^2 d^3\mathbf{r}_1$$

berechnet und für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1)$ die $1s$ -Wellenfunktion des Wasserstoffatoms mit $Z = 2$ ansetzt. Berechne dieses Integral unter Verwendung von Kugelkoordinaten. Leg dabei die z -Achse in Richtung des Vektors \mathbf{r}_2 , separiere die Integration über r_1 und θ und drücke das Differential $d \cos \theta$ durch das Differential dr_{12} des Abstands $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ der Elektronen aus. Beachte, dass die Fälle $r_1 < r_2$ und $r_1 > r_2$ unterschieden werden müssen.

Tipp: $\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{Z^{3/2}}{a_0^{3/2}} e^{-Zr/a_0}$

Kontrollergebnis (nach längerer Rechnung): $\bar{V}_2(r_2) = -\frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_2} + \frac{Z}{a_0} \right) e^{-2Zr_2/a_0}$

- Berechne nun die mittlere potentielle Energie des "zweiten" Elektrons in diesem gemittelten Potential und daraus die korrigierte erste Ionisierungsenergie des Helium-Atoms. Wie stark weicht dieser Wert vom experimentellen Wert von 20.45 eV ab?