

Prof. Dr. Andreas Knorr

Dr. Marten Richter, Dipl. Phys. Julia Kabuß, Wassilij Kopylov, MSc.

5. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II**Abgabe: Bis Do. 28.11.2013 8:25 vor Beginn der Vorlesung im EW 203**

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Tutorium und den Namen des Tutors auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe erfolgt in maximal Vierergruppen.

Aufgabe 8 (7 Punkte): Coulomb-Integral

Sowohl für die Berechnung der Grundzustands-Energiekorrektur des Helium-Atoms durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung mittels Störungstheorie als auch für die Ansätze über die Variationsrechnung wird das Coulombintegral J_{1s1s} benötigt. Zeigen Sie, dass für dieses gilt:

$$J_{1s1s} = \int \int \frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}})|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{5}{8} \frac{Z_{\text{eff}}}{a_0}.$$

Verwenden Sie hierbei die Wellenfunktion Ψ :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}}) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1, Z_{\text{eff}})\psi_{100}(\mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}}),$$

wobei

$$\psi_{100}(\mathbf{r}, Z_{\text{eff}}) := 2 \left(\frac{Z_{\text{eff}}}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha|\mathbf{r}|} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

die Grundzustands-Wellenfunktion eines Elektrons im Feld eines Kernes mit Ladung Z_{eff} ist mit $\alpha = 2 \frac{Z_{\text{eff}}}{a_0}$.

Tipp: Zeigen und verwenden Sie $\int_1^{-1} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2x}} dx = -\frac{2}{\max(r_1, r_2)}$.

Aufgabe 9 (8 Punkte): Hundsche Regeln

In Atomen mit mehreren Elektronen führt die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen zu einer energetischen Aufspaltung der Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl n (d.h. innerhalb von Schalen) und gleicher Nebenquantenzahl l . Die energetische Reihenfolge von verschiedenen Elektronenkonfigurationen in Abhängigkeit der weiteren Quantenzahlen folgt aus den Coulombintegralen und kann in Form der Hundschen Regeln zusammengefasst werden.

- (a) Konstruieren Sie mit Hilfe der Hundschen Regeln die Grundzustands-Elektronenkonfigurationen der ersten zehn Elemente ($Z=1..10$). Stellen Sie dazu tabellarisch dar, in welchem Zustand (n, l, m_l, m_s) sich die einzelnen Elektronen befinden, und geben Sie zusätzlich die Orbitalbesetzungen in der Form $1s^2 2s$ (=Be) an. Erläutern Sie für Kohlenstoff ($Z = 6$), welche Regeln angewandt wurden.
- (b) Geben Sie für Kohlenstoff die Terme (also z.B. 3P_1) aller möglichen Zustände des $2p^2$ Orbitals in energetisch aufsteigender Reihenfolge an. Erklären Sie Ihr Ergebnis.