

Atome, Moleküle & Kerne

Sommersemester 2024
Vorlesung # 15a, 18.06.24

Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

8. Mehrelektronensysteme

Zu 8.1 Das Helium-Atom / Pauli-Prinzip - Erläuterungen

8.1. Das Helium-Atom

8.1.1 Energiezustände

$$\text{He}: 2e^-, 2u, 2p$$

a) 0. Näherung: $2e^-$ im Coulombpotential
 $z=2$

$$\begin{aligned} H &= H_1 + H_2 \\ \psi &= \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} H &= H_1 + H_2 \\ \psi &= \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \end{aligned}} \right\} H\psi = E\psi$$

$$E = - \frac{R_{\text{He}} \cdot h c \cdot z^2}{n_1^2} - \frac{R_{\text{He}} \cdot h c \cdot z^2}{n_2^2}$$

$$\left[R_{\text{He}} = \frac{m e^4}{64 \pi^2 \epsilon_0^2 h^3 c} \right]$$

$$\begin{aligned} E &= -4 \cdot 13,6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \\ &= 108 \text{ eV für } n_1 = n_2 = 1 \end{aligned}$$

Erwartete Ionisationsenergie:

$$E_{\infty} = 54 \text{ eV / Elektron}$$

Beobachtet:

$$\begin{aligned} E_{\infty 1} &= 24,6 \text{ eV} \\ E_{\infty 2} &= 54,4 \text{ eV} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} E_{\infty 1} &= 24,6 \text{ eV} \\ E_{\infty 2} &= 54,4 \text{ eV} \end{aligned}} \right\} E = 79 \text{ eV !}$$

b) 1. Näherung: Beziehe V_{12} mit ein!

$$\Delta E = \iint \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$r_1^2 \sin\theta_1 d\theta_1 d\phi_1 dr_1$$

$$r_2^2 \sin\theta_2 d\theta_2 d\phi_2 dr_2$$

Für Grundzustand: Wasserstoffwellenfunktion

$$\psi = \psi_{100}(r_1) \cdot \psi_{100}(r_2)$$

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{5}{4} \frac{m e^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} = \underline{34 \text{ eV}}$$

$$\Rightarrow E = E_0 + \Delta E$$

$$= (-108,2 + 34) \text{ eV} = \underline{-74,8 \text{ eV}}$$

5% Fehler

c) Termische: wasserstoffähnlich:

- 1. e^- sitzt bei $n=1, l=0$
- 2. e^- $n \geq 1, l \geq 0$

Guter Ansatz, aber

Beobachtung von 2 Systemen der He:

→ Parahelium (Singulettsystem Spin $\uparrow\downarrow$)
 $S=0$

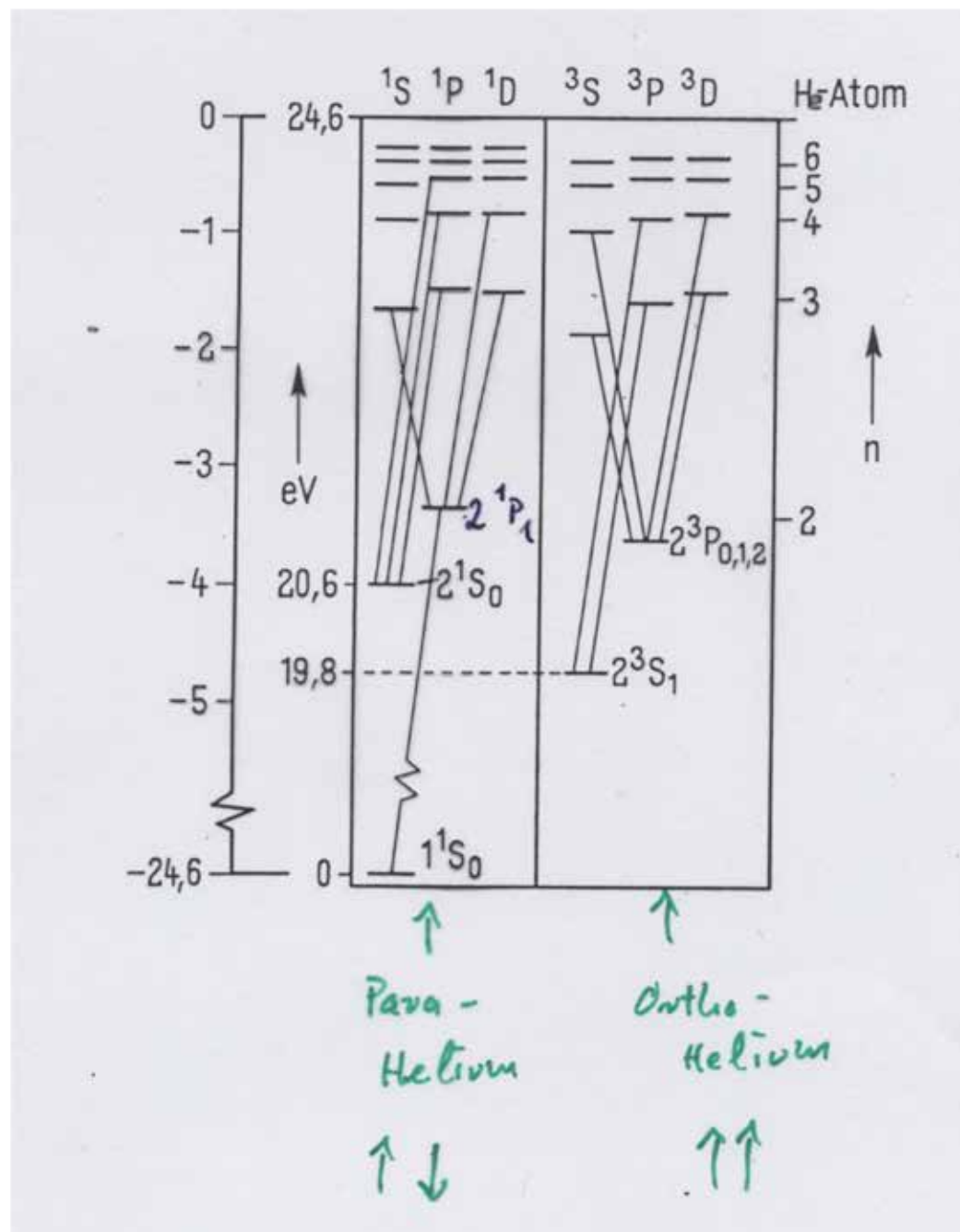
→ Orthohelium (Triplettsystem Spin $\uparrow\uparrow$)
 $S=1$

Es fehlt der 1^3S_1 - Zustand!

⇒ Pauliprinzip: es gibt keine Zustände bei Fermionen mit ident. Quantenzahlen.

1^1S_0
bei $-24,6 \text{ eV}$

2^3S_1
bei $-19,8 \text{ eV}$



8.1.2 Wellenfunktion

(a) Ansatz:
$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1) \cdot \psi_2(2) + \psi_2(1) \cdot \psi_1(2))$$

Symmetrische Gesamt w.f.

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1) \cdot \psi_2(2) - \psi_2(1) \cdot \psi_1(2))$$

Antisymmetrische Gesamtfunktion

Symmetrie bezieht sich auf Austausch
Elektron 1 mit Elektron 2

Vertauschung $1 \rightarrow 2$ bzw $2 \rightarrow 1$:

$$\begin{aligned} P \cdot \psi_S &= \psi_S & |P\psi_S|^2 &= |\psi_S(2,1)|^2 \\ & & &= |\psi_S(1,2)|^2 \\ P \psi_A &= -\psi_A & |P\psi_A|^2 &= |-\psi_A(2,1)|^2 \\ & & &= |\psi_A(1,2)|^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\psi_S|^2 = |\psi_1|^2 \cdot |\psi_2|^2 \quad \text{für id. Koordinaten, d.h. } n_1 = n_2$$

$$|\psi_A|^2 = 0$$

b) Symmetrieeigenschaften von Teilchen

Pauli: gekoppelt an Spin

Für identische Teilchen

Bosonen: ψ_s

Fermionen ψ_A

Spin 0, 1, ...

Spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

Bs: $\underbrace{H}_0, \underbrace{\gamma, g, W^\pm}_1,$

Bs. Quarks, Leptonen

$\underbrace{G}_{\geq 2}$

Phononen, He^4

p, n, He^3 , $\Delta_{5/2}^{++}$

Alle Quantenzahlen
müssen übereinstimmen

Bestenfalls vergleichbare
Quantenzahlen

Bose-Einstein-Statistik

Fermi-Dirac-Stat.

$$N(E) = \frac{1}{a \cdot e^{E/kT} - 1}$$

$$N(E) = \frac{1}{a \cdot e^{E/kT} + 1}$$

c) Spinzustände für Systeme mit 2 id. Teil.

Spin können $\uparrow \uparrow \Rightarrow$ oder $\uparrow \downarrow$ sein

Tripletts

$$\chi_S(1,2) = \chi^+(1) \cdot \chi^+(2) = \chi_1^+$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(1) \cdot \chi^-(2) + \chi^-(1) \cdot \chi^+(2)] = \chi_1^0$$

$$\chi^-(1) \cdot \chi^-(2) = \chi_1^-$$

Singulett

$$\chi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(1) \cdot \chi^-(2) - \chi^-(1) \cdot \chi^+(2)] = \chi_0^0$$

Gesamtwellenfunktion:

Anti-symmetrisch

$$\Psi_A = \chi_S(1,2) \cdot \chi_A(1,2) \quad \text{oder}$$

$$\Psi_A = \chi_A(1,2) \cdot \chi_S(1,2)$$

Für 2 id. Fermionen

Tripletts $S = 1$



$S_z = +1$

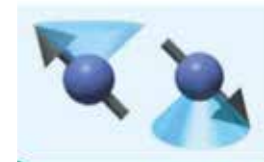


$S_z = 0$



$S_z = -1$

Singulett
 $S = 0$



B₁: a) Helium im Grundzustand ↑↓

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1) \cdot \psi_2(2) + \psi_2(1) \cdot \psi_1(2)) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi^+(1) \cdot \chi^-(2) - \chi^-(1) \cdot \chi^+(2))$$

$$= \psi_{100}(r_1) \cdot \psi_{100}(r_2) \cdot \{ \chi^+(1) \chi^-(2) - \chi^-(1) \chi^+(2) \}$$

$$\underline{\underline{= 1 \ ^1S_0}}$$

b) Helium im angeregten Zustand ↓↑
od. ↑↑

$$\Psi_{\text{sing.}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1) \cdot \psi_2(2) + \psi_2(1) \cdot \psi_1(2)) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi^+(1) \chi^-(2) - \chi^-(1) \cdot \chi^+(2))$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{100}(r_1) \cdot \psi_{200}(r_2) + \psi_{200}(r_1) \cdot \psi_{100}(r_2) \right\} \cdot \chi^0$$

$$\underline{\underline{= 2 \ ^1S_0}}$$

$$\psi_{\text{Trip}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{100}(r_1) \psi_{200}(r_2) - \psi_{200}(r_1) \psi_{100}(r_2) \right]$$

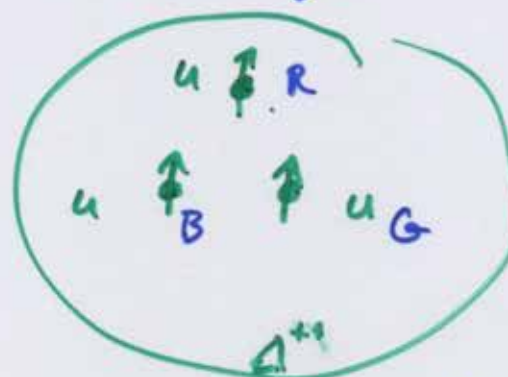
$$\cdot \begin{cases} \chi_1^1 \\ \chi_1^0 \\ \chi_1^{-1} \end{cases}$$

$$\equiv 2^{\frac{3}{2}} s_1 \quad \text{Triplet.}$$

„Anwendung“ : Δ^{++} Resonanz.



Baryon $l=0$



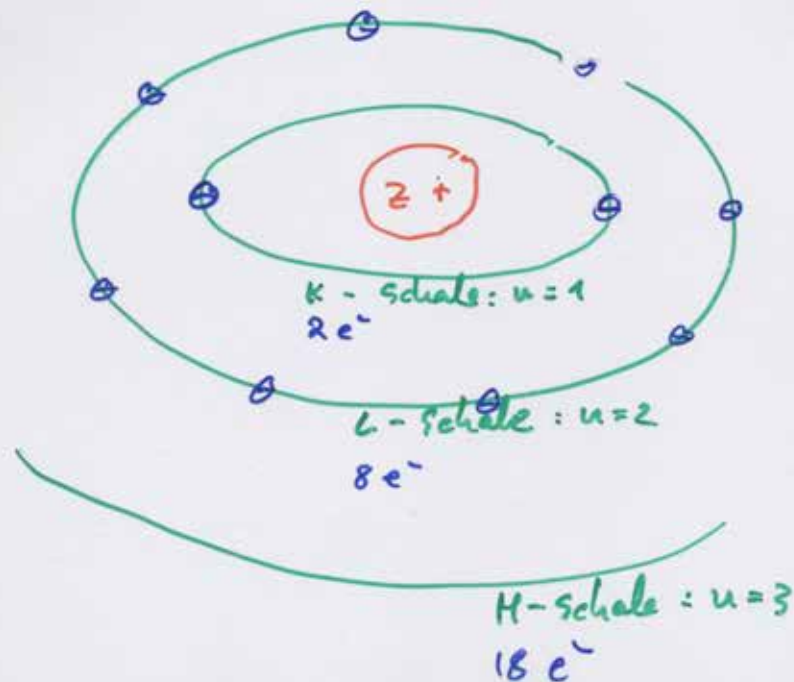
Weitere Quantenzahl:
Farbladung! $\rightarrow$ Starke WW

8.2. Aufbau der Elemente

Schalenstruktur ($z > 1$)

a) Ohne Pauliprinzip: Alle Elektronen auf Niveau $n=1$

Mit Pauliprinzip:



$$\text{K-Schale: } n=1 \quad l=0 \quad m_l=0 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \\ \Rightarrow n_e = 2$$

$$\text{L-Schale: } n=2 \quad l=0 \quad m_l=0 \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \\ 1. \quad \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \Rightarrow n_e = 8$$

$$\text{M-Schale: } n=3 \quad l=0 \quad 0 \quad \pm 2 \\ 1 \quad 1, 0, -1 \\ 2 \quad 2, 1, 0, -1, -2 \Rightarrow n_e = 18$$

$$\text{Allgemein: } n=n: \quad n \text{ Werte von } l \\ 2l+1 \text{ Orientierungsw. v. } l \\ 2 \text{ Orientierungsw. v. } s \\ \Rightarrow \sum_{l=0}^{n-1} \cdot 2(2l+1) = \underline{\underline{2n^2}}$$

Element	Z	First ionization potential, V	Atom in the ground state			
			Quantum number of last added electron		Electron configuration	Outer-most shell occupied
			<i>n</i>	<i>l</i>		
H	1	13.6	1	0	1s	K
He	2	24.6	1	0	1s ²	K
Li	3	5.39	2	0	Helium core, 2 electrons 2s	L
Be	4	9.32	2	0		L
B	5	8.30	2	1		L
C	6	11.3	2	1		L
N	7	14.5	2	1		L
O	8	13.6	2	1		L
F	9	17.4	2	1		L
Ne	10	21.6	2	1		L
Na	11	5.14	3	0	Neon core 10 electrons 3s	M
Mg	12	7.64	3	0		M
Al	13	5.98	3	1		M
Si	14	8.15	3	1		M
P	15	10.6	3	1		M
S	16	10.4	3	1		M
Cl	17	13.0	3	1		M
Ar	18	15.8	3	1		M
K	19	4.34	4	0	Argon core 4s	N

■ Konzept der **Schalenstruktur der Atomhülle**

basiert auf experimentellen Daten & theoretischen Konzepten

- Edelgase: abgeschlossene Schalen/Sub-Schalen

