

Atom & Molekülphysik

FSU Jena - WS 2008/2009

Serie 09 - Lösungen

Stilianos Louca

17. August 2010

Aufgabe 01

Per Konstruktion verschwindet die gesamte auf den He-Kern wirkende Coulomb-Kraft, es kann also als fest betrachtet werden. Jedes der beiden Elektronen *spürt* das elektrische Feld sowohl des Kerns als auch des anderen Elektrons. Im Gleichgewicht kompensiert sich diese Kraft durch die im mit-rotierenden System wirkende Fliehkraft, das heißt

$$0 = \frac{2m_e v^2}{d} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2} - \frac{8e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2} = \frac{2m_e v^2}{d} - \frac{7e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}$$

mit der Elektronenmasse m_e und Bahngeschwindigkeit v . Die potentielle Energie U des Systems ergibt sich als die Summe der potentiellen Energien der beiden Elektronen im gegenseitigen und im Kern-Feld:

$$U = \underbrace{-\frac{8e^2}{4\pi\epsilon_0 d}}_{\text{Kern-Elektronen}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d}}_{\text{Elektron-Elektron}} = -\frac{7e^2}{4\pi\epsilon_0 d}$$

Die kinetische Energie ergibt sich als die Summe der kinetischen Energien der Elektronen:

$$T = m_e v^2 = \frac{7e^2}{8\pi\epsilon_0 d}$$

Dementsprechend ergibt sich die gesamt-Energie als

$$T + U = -\frac{7e^2}{8\pi\epsilon_0 d}$$

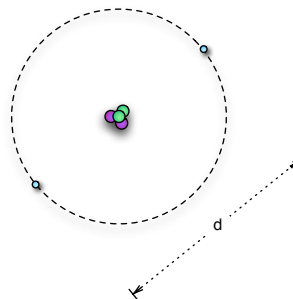
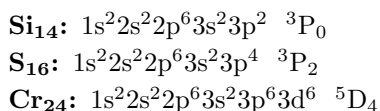


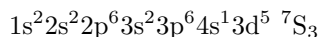
Abbildung 1: Klassisches Bild des He-Atoms.

Aufgabe 02

- a) Nach den Hundschen Regeln stellt sich solch eine Elektronenkonfiguration ein, die unter Einhaltung des Pauli-Prinzips, die kleinstmögliche Energie besitzt. Insbesondere stellen sich die Spins so ein, dass ein maximaler Gesamtspin zustande kommt, das heißt jede (n, l) -Unterschale wird erstmal mit Elektronen gleichen Spins *gefüllt*, um dann mit dem umgedrehten fortzusetzen. Per Konvention fangen wir hier mit Spin $+\frac{1}{2}$ an. Dabei tragen innere Schalen nicht zum Gesamtspin bei.



Bemerkung: Theoretische Konfigurationen können sich von *realen* unterscheiden. Speziell ist die Konfiguration von Cr_{24} eigentlich gegeben durch



- b) **LS-Kopplung:** Unter LS-Kopplung (leichtere Atome $Z < 30$) ist die **ls**-Kopplungsenergie der einzelnen Elektronen gering gegenüber der Wechselwirkungsenergie der Elektronen: Die Drehimpulse $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2$ koppeln zu einem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$, der die Quantenzahlen $L \in \{|l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2\}$ annehmen kann. Analog koppeln die einzelnen Spins $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ zu den Gesamtspin $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ des Systems, der die Quantenzahlen $S \in \{|s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2\}$ annehmen kann. Für jede Kombination S, L nimmt dann der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ die Quantenzahlen $J \in \{|L - S|, \dots, L + S\}$ an. Diese Möglichkeiten sind für die Zustände $3p$ ($l_1 = 1$) und $3d$ ($l_2 = 2$) in Abbildung 2 zusammen mit den jeweiligen $(2J + 1)$ Magnetischen-Unterkomponenten illustriert.

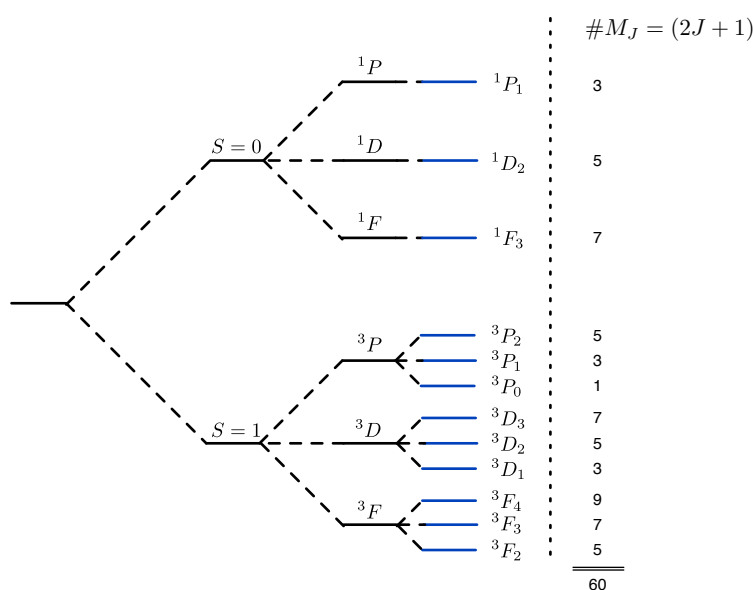


Abbildung 2: Möglichen Zustände des Atoms bei LS-Kopplung. Zustände sind nach Hund'schen Regeln energetisch geordnet.

Es ergeben sich insgesamt 60 Zustände mit Gesamtdrehimpulsquantenzahlen $J \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$. Dabei ist der am stärksten gebundene Zustand der Zustand mit dem maximalen Spin, dazu maximalen Bahndrehimpuls und geringeren Gesamtdrehimpuls, in unserem Fall also $3 \quad {}^3F_2$.

jj-Kopplung: Unter jj-Kopplung (schwere Atome) überwiegt die einzelne **ls**-Kopplung der Elektronen der Wechselwirkung der Elektronen untereinander: Das Konzept von Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} und Gesamtspin \mathbf{S} ist hier sinnlos. Für jedes Elektron kann der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i$ die Quantenzahlen $|l_i - s_i|, \dots, l_i + s_i$ annehmen. Die so entstehenden \mathbf{j}_i koppeln nun miteinander (analog zur vorigen \mathbf{l}_i Kopplung) und ergeben den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$, der die Quantenzahlen $|j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$ annehmen kann.

j_1	j_2	J	$\#M_J$
1/2	3/2	1	3
1/2	3/2	2	5
1/2	5/2	2	5
1/2	5/2	3	7
3/2	3/2	0	1
3/2	3/2	1	3
3/2	3/2	2	5
3/2	3/2	3	7
3/2	5/2	1	3
3/2	5/2	2	5
3/2	5/2	3	7
3/2	5/2	4	9
			60

Tabelle 1: Mögliche Gesamtdrehimpulse für $3p, 3d$ bei **jj**-Kopplung

Auch hier ergeben sich insgesamt 60 Zustände, mit den Gesamtdrehimpulsquantenzahlen $J \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$.

Aufgabe 03

Für **genügend große** n ergibt sich das auf das *innere* Elektron wirkende elektrische Feld allein aus dem Kernfeld. Dies kann zum einen durch die viel größere Entfernung des zweiten Elektrons, und zum anderen durch die *Mittelung* dessen Feldes, bedingt durch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsverteilung auf dem gesamten Winkelraum¹ begründet werden. Somit kann das innere Elektron, insbesondere seine Gesamt-Energie, mit Elektronen in H-ähnlichen Atomen verglichen werden. Deren Energie ergab sich bekanntlich gemäß

$$E_{H,Z}^k = -\frac{R_E Z^2}{k^2}, \quad k \in \mathbb{N}$$

mit der Rydberg-Konstante $R_E \approx 13.6$ eV. Befindet sich nun das innere Elektron im Grundzustand ($k = 1$), entspricht diesem insbesondere eine kugelsymmetrische Wahrscheinlichkeitsdichte um den Kern. Das äußere Elektron sieht somit bekanntlich nur die Summe der Kern- und Elektronladung konzentriert an einem einzigen Punkt: dem Kernzentrum. Analog ergibt sich demnach auch hier dessen Energie gemäß

$$E_{H,Z-1}^n = -\frac{R_E (Z-1)^2}{n^2}$$

so dass sich die Gesamtenergie der Elektronenkonfiguration in diesem klassischen Modell ergibt gemäß

$$E = -R_E \left[Z^2 + \frac{(Z-1)^2}{n^2} \right]$$

Aufgabe 04

Seltenerdmetalle besitzen die spektroskopisch interessante Eigenschaft, dass sie auch im Festkörper diskrete Energieniveaus bilden:

Sie treten in Wirtskristallen als Ionen auf (durch Entfernung der $6s^2 4f^1$) wobei die 4f Schale durch höhere Schalen (speziell: $5s 5p$) nach draußen hin abgeschirmt ist, was die Bildung von Energiebändern verhindert.² Die Energien bzw. Linienverbreiterung dieses Niveaus wird hauptsächlich durch die Struktur des Atoms und nicht seine Umgebung bestimmt. Übergänge von diesem Niveau weisen eine geringere Linienverbreiterung auf, die Effizienz des LASERs steigt.

So wird zum Beispiel das Seltenerdmetall Neodym im bekannten ND:YAG LASER als Dotierungsmaterial für die Erzeugung der charakteristischen 1064 nm Strahlung verwendet.

¹Im Inneren kugelsymmetrischer Ladungsverteilungen verschwindet deren gesamt-Feld. Für leicht verformte Verteilungen trifft diese Aussage weniger zu.

²Zu bemerken sei, dass durch die Kristallumgebungsvariationen trotzdem eine inhomogene Linienverbreiterung stattfindet. Viele der in dieser Verbreiterung mitwirkenden Übergänge wären im atomaren Zustand verboten.