

Übungen zur Quantenmechanik II

10. Übungsblatt

12. Jan. 2006

Zur Hundsche Regel

Über die relative Lage der Niveaus eines Atoms mit gleicher Konfiguration, d.h. gleicher radialer Wellenfunktionen aber mit verschiedenen Drehimpuls L und Spin S macht die folgende empirisch aufgestellte HUNDSche Regel eine Aussage:

Das Niveau mit dem größtmöglichen S und dem größten Wert von L , der bei diesem S möglich ist, hat die kleinste Energie.

a) Diskutieren Sie die möglichen Terme oder Niveaus für p -Atome wie Bor, Kohlenstoff, Stickstoff, Sauerstoff, Fluor

Elektronenanzahl	Terme	Elemente	
p, p^5	2P	B, F	
p^2, p^4	${}^1S, {}^1D, {}^3P$	C, O	(*)
p^3	${}^2P, {}^2D, {}^4S$	N	

LANDAU-LIFSCHITZ folgend*, in dem Sie die nach dem PAULIVERBOT übrig bleibenden Terme von zwei und drei Teilchen notieren und nach L und S klassifizieren. Es gibt sechs p -Zustände

a)	1	1/2	b)	0	1/2	c)	-1	1/2
a')	1	-1/2	b')	0	-1/2	c')	-1	-1/2

und der Zwei-Elektronenzustand $a + a'$ $2, 0$ gehört zu 1D , wobei D für $L = 2$ und 1 für die Spinentartung $2S + 1$ mit $S = 0$ steht. Konstruieren Sie weiter solche Terme, bis Sie die alle drei spektroskopischen Terme von p^2 bzw. p^4 in der Liste (*) gefunden haben.

Konstruieren Sie analog die Drei-Elektronenzustände, z.B. $a + a' + b$ $2, 1/2$, der zu 2D gehört.

b) Konsultieren Sie eine spektroskopische Tabelle**, um nachzuprüfen, ob die Abfolge der Terme nach der HUNDSchen Regel, wie sie in der Tabelle (*) notiert ist, mit der bei C, N und O beobachteten übereinstimmt.

c) 3P und 4S der p^2 bzw. der p^3 -Zustände lassen sich als eine einzige *Determinante* schreiben:

$$\Psi(1, 2) = \left\| \begin{array}{cc} \varphi_{1,1}(\theta_1, \phi_1) & \varphi_{1,0}(\theta_1, \phi_1) \\ \varphi_{1,1}(\theta_2, \phi_2) & \varphi_{1,0}(\theta_2, \phi_2) \end{array} \right\| \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2)$$

Dabei bedeutet $\| \dots \|$ die Determinante der *Kugelfunktion* $\varphi_{l,m}$ der ersten und des zweiten Elektrons und χ_{\uparrow} deren *Spinor*. Die Abhängigkeit von den Radien r_1 und r_2 ist weggelassen worden. Für p^3 ist die 4S -Wellenfunktion

$$\Psi(1, 2, 3) = \left\| \begin{array}{ccc} \varphi_{1,1}(\theta_1, \phi_1) & \varphi_{1,0}(\theta_1, \phi_1) & \varphi_{1,-1}(\theta_1, \phi_1) \\ \varphi_{1,1}(\theta_2, \phi_2) & \varphi_{1,0}(\theta_2, \phi_2) & \varphi_{1,-1}(\theta_2, \phi_2) \\ \varphi_{1,1}(\theta_3, \phi_3) & \varphi_{1,0}(\theta_3, \phi_3) & \varphi_{1,-1}(\theta_3, \phi_3) \end{array} \right\| \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) \chi_{\uparrow}(3)$$

Prüfen Sie nach, ob die beiden Wellenfunktionen tatsächlich Eigenfunktionen von L^2 und S^2 sind.

* Quantenmechanik, Bd. III, Kap. X, Das Atom.

** z.B. die von Charlotte Moore.