

Übungsblatt 12 (letztes Übungsblatt in diesem Semester)

Ausgabe: 7.7.2006

Rückgabe: 17.7.2006 vor der Vorlesung

1. Antisymmetrische Wellenfunktionen für Mehr-Elektronen-Systeme können systematisch erzeugt werden, indem man die Ein-Teilchen-Wellenfunktionen, die man verwenden möchte, mit permutierten Teilchenindizes in eine Determinante schreibt ('Slater-Determinante'). Auswertung der Determinante ergibt automatisch eine Linearkombination, die sich antisymmetrisch bei Vertauschung zweier Koordinaten verhält. Eine antisymmetrische Ortswellenfunktion für den $1s2s$ Zustand von He könnte man zum Beispiel schreiben als

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) & \psi_{2s}(\mathbf{r}_1) \\ \psi_{1s}(\mathbf{r}_2) & \psi_{2s}(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix}. \text{ Zeigen Sie:}$$

a) Eine so aus den drei Ein-Teilchen-Wellenfunktionen ψ_a, ψ_b, ψ_c konstruierte Orts-Wellenfunktion für drei Teilchen ist antisymmetrisch bei Vertauschung von je zwei Koordinaten. Der Normierungsfaktor ist jetzt $1/3^{1/2}$ (allgemein $1/N^{1/2}$, mit N Anzahl der Teilchen).

b) Aus den zwei bekannten Spin-Wellenfunktionen α und β kann keine antisymmetrische 3-Teilchen-Spinfunktion konstruiert werden.

(4 Punkte)

2. Verwenden Sie die erste Hund'sche Regel um alle Elemente bis zur vierten Zeile des Periodensystems anzugeben, die in ihrer atomaren Form einen Triplet-Grundzustand haben.

(1 Punkt)

3. Besser als durch ein Oszillatorpotential kann das aus der Bindung zweier Atome zu einem Molekül resultierende Potential durch das sogenannte Morse-Potential beschrieben werden. Dieses hat die analytische Form:

$$V(x) = D_0 [1 - \exp(-\beta x)]^2 - D_0$$

wobei D_0 und β Parameter sind, die die Tiefe und die Steilheit des Potentialtopfes beschreiben. Die Koordinate x ist relativ zum Gleichgewichtsabstand des Moleküles gegeben. Das Molekül HCl kann recht gut durch ein solches Potential beschrieben werden, wobei die (experimentell gefundenen) Potentialparameter die Werte $D_0 = 5.33$ eV und $\beta = 1.731722 \text{ \AA}^{-1}$ haben. Verwenden Sie das auf der VL Web-Seite gegebene Applet zur numerischen Lösung der ein-dimensionalen Schrödinger-Gleichung, um

- die Energie der niedrigsten drei Zustände und
- die Quantenzahl des höchsten gebundenen Zustands in dem gegebenen Potential zu berechnen.

(3 Punkte)

4. In den Powerpoint-Folien zur Vorlesung (exp3-t16.pdf) ist ein Diagramm mit den Ionisationsenergien der Atome in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z abgebildet. Diskutieren Sie den Verlauf der Ionisationsenergien in der zweiten und dritten Zeile des Periodensystems (Li-Ne und Na-Ar) unter Beachtung der Elektronenkonfiguration. Berücksichtigen Sie insbesondere die Abnahme der Ionisationsenergie von Be zu B und von N zu O (analog in der dritten Reihe).

(2 Punkte)