

Exphys Atome und Kerne
Vorlesung
Michael Kopp
10. Juni 2010

Chemisches Verhalten von Atomen

Atome streben Edelgasconf. an. Die Edelgasconf. ist ein ausgeglichener Zustand. Betrachtet man ein Atom physikalisch, verwendet man als "Vorbild" die nächsttieferen Edelgasconfiguration und ein paar angehängte Elektronen, die man ~~bestimmte~~ ~~behandeln kann~~. Die Elektronen selber betrachtet man oft nicht, weil die Atome ja in Edel meist in Edelgasconf. vorliegen. Da "verb. Kern" kann man dann wie He (was ja ein Edelgas) behandeln.

Edelgasconf.:

- Die Schalen sind ausgefüllt: alle Drehimp., Magn. Momente kompensieren sich.
- Stabilität: Der Abstand zw. (Energie) zw. nächsten Schale ist größer als der in einer l-Schale innerhalb der selben Schale. \Rightarrow Füllt sich alle Schale komplett.

Elektronenconf. bei geg. Anz. d. Elektronen

Konfiguration: (n, l, m, s) $l = 0, \dots, n-1, m = 0, \pm 1, \dots, \pm l, s = \pm \frac{1}{2}$

Nach Pauli müssen sich zwei Elektronen mindestens in einer Eigenschaft unterscheiden.

Die SK ist für $N \geq 2$ mehr als zwei Elektronen nicht mehr lösbar. Bst. Hartree-Fock-Methode: $N-1$ e^- werden in einem eff. Pot. zusammengefasst, in dem sich e^- Nr. N bewegt.

Das hat interessante Effekte im Magnetismus und Farbigkeit. Diese kommen daher, dass die weiter breiten-energie Schalen weiter innen liegen, wo ungepaarte Elektronen in einer dichten Packung liegen. \rightarrow diese sind flexibler für opt. Übergänge.

Grundriss von Hund'schen Regeln

- (1) Voller Schalen tragen nicht zum Gesamtdrehimpuls bei.
- (2) Elektronen mit gl. l werden auf max. Untereinheit verteilt, sodass der Gesamtspin / Drehimpuls maximal ist.

Antisymmetrie
Bsp. mit
5ten Orbital
der $p-d$ E.

1. A. ist nämlich Energie des Zustandes mit höherer Multiplizität (alle parallel spin) kleiner. Das liegt an einer Symmetrie der Wellenfunktion, die in einer Knotenfläche führt und so die Abstoßung der Elektronen kleiner werden.

Bsp. $E_{tripel} < E_{singulett}$

Einschub: Zusammensetzung von Drehimpulsen:

Notation: Zustand $n^{2s+1} L_j$, ($j = L+S$)

Multiplizität:
 $2S+1$

Drehimpulse $\underline{L}, \underline{S}$ werden addiert: $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$.

Für Quantenzahlen gilt: $\|\underline{A}\| = \sqrt{a(a+1)} \hbar, \dots$ sind

$$C \in \{|a-b|, \dots, |a+b|\} \quad (s=1)$$

Bsp. Spinaddition: $\underline{S} = \underline{S}_1 + \underline{S}_2 \quad S \in \{|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}|, |\frac{1}{2} + \frac{1}{2}|\} = \{0, 1\}$.

Gesamtdrehimpuls: $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}; \quad j(s=0) \in \{l\}, j(s=1) \in \{l-1, l, l+1\}$.

L vs J -Kopplung:

Man koppelt zuerst alle l d. ein e^- mit einem Spin, wenn

$$W_{l_1 l_2} = a_{ij} l_1 l_2 \quad \text{und} \quad W_{S_1 S_2} = b_{ij} s_1 s_2$$

Frankenistische Strahlung bei Spektroskopie:

Reinigung der Probe:

Elektronen werden in K-Schale ausgelassen

sind dann mit dort hin, wo Probe ist,

also unterhalb nach "außen" (äußere Schale) oder sogar

ins Vakuum.

Weiter innen liegende e^- springen

dann in die freien Plätze der K-Schale.

Die Peaks entsprechen den Lyman, ... -Serien.

