

Experimentalphysik 4 - Boykott-Gruppenseminar

Fabs	Chris	Michi	Paul	Anton	Sören
	Hein	Martina	Mitsch		

9. Mai 2016

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung - Ex3 Zusammenfassung	3
1.1	Notation der Quantenzahlen	3
1.2	Korrekturterme der Energieniveaus	4
1.3	Näherungen für mehrere Elektronen	4
1.4	Das Pauli-Prinzip	4
2	Ex4 - 1.Vorlesung und Einführung	6
2.1	Spektroskopische Notation	6
2.2	Hund'sche Regeln und Auswahlregeln	7
2.3	Vielelektronenprobleme	8
2.4	Moseley-Gesetz	9

1 Einleitung - Ex3 Zusammenfassung

Wir hatten die QUANTENMECHANIK eingeführt, siehe Theo 4:

$$\textbf{Axiom 4: Es gilt die Schrödingergleichung: } \hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle$$

wobei $\hat{H} := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

Diese hatten wir für das Wasserstoffatom (H-At.) **analytisch** gelöst. (Coulombpotential, Kugelkoordinaten, Separation: Schwerpunkt/Relativbew., Winkel-/Radialanteil). Die Lösungen sind Polynome mit ganzzahligen Parametern, "Quantenzahlen":

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot \Theta_l^{m_l}(\vartheta) \cdot \phi_{m_l}(\varphi)$$
$$\psi_{n,l,m_l} \propto e^{-\frac{Zr}{na_0}} \underbrace{L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \cdot P_l^{m_l}(\cos \vartheta)}_{\text{zugeordnete Laguerre- bzw. Legendrepolynome}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l\varphi}$$

Es gilt für physikalische Lösungen: $|m_l| \leq l < n$

1.1 Notation der Quantenzahlen

Hauptquantenzahlen $n \in \{1, 2, 3, \dots\} = \{K, L, M, \dots\}$ "Schale"

Bahndrehimpulsquantenzahlen $l \in \{0, 1, 2, \dots\} = \{s, p, d, f, \dots\}$ "Unterschale"

Magnetbahnquantenzahlen $m_l \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$ "Orbital" (zzgl. "Spin")

$$E(\psi_n) = E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

"Rydberg-Formel", mit $E_0 := Ry = 13.6 \text{ eV}$ und Z als Kernladungszahl.
Dem Übergang entspricht dann die Differenz $E_n - E_m$.

1.2 Korrekturterme der Energieniveaus

Die Energieniveaus (EN) werden korrigiert durch:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\Delta\hat{E}_{\text{rel}} + \Delta\hat{E}_{S-B} + \Delta\hat{E}_{\text{Darwin}}}_{\Sigma = \text{Feinstruktur } \Delta E_{FS}} + \Delta\hat{E}_{\text{Lamb}} + \Delta\hat{E}_{\text{HFS}} + \Delta\hat{E}_{\text{Zeeman}}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \hat{V}$$

$$\Delta\hat{E}_{\text{rel}} = -\frac{p^4}{8m_e^3c^2}$$

$$\Delta\hat{E}_{S-B} = \frac{Zq_e^2\mu_0}{8\pi m_e^2\langle r \rangle^3} \hat{\vec{l}} \cdot \hat{\vec{s}} = \frac{Zq_e^2\mu_0\hbar^2}{16\pi m_e^2\langle r \rangle^3} \cdot \begin{cases} l, & j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1), & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \Delta\hat{E}_{FS} \stackrel{\text{H-A}}{=} E_0 \frac{Z^2}{n^2} \left[\frac{Z^2\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

$$\Delta\hat{E}_{\text{Darwin}} = \mu_0 \left(\frac{q_e\hbar}{m_e} \right)^2 Z \cdot \delta(\vec{r}) \text{ "Kernpotential"}$$

$$\Delta\hat{E}_{\text{Lamb}} \hat{=} \text{quantenelektrodynamische Wechselwirkung (WW) mit dem Vakuum}$$

$$\Delta\hat{E}_{\text{HFS}} \propto \underbrace{\vec{J} \cdot \vec{I}}_{\text{"Kernspin"}}$$

$$\Delta\hat{E}_{\text{Zeeman}} = \frac{\mu}{\hbar} \left(\hat{L}_z + g_e \hat{S}_z \right) B_z \text{ "anomal", normal f\"ur } \hat{S}_z = 0, \quad g_e \approx 2, \quad \mu = \frac{q_e\hbar}{2m_e}$$

1.3 Nherungen fr mehrere Elektronen

Fr mehrere Elektronen (e^-) mssen wir Nherungen machen, denn die $e^- - e^- - WW$ verhindert das analytische Lsen.

Helium (He):

1. $E_B = -Z^2 E_0 \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right)$ "Bindungsenergie" (negativ!)
2. $E_B = -E_0 \left(\frac{Z^2}{1^2} + \frac{(Z-1)^2}{n_2^2} \right)$ Abschirmung des $n_2 - e^-$
3. $E_B = -E_0 \left(-2Z_R^2 + (4Z - \frac{5}{4})Z_R \right)$ minimiere $E_B(Z_R)$
4. wahrer Wert $E_B \approx -79.0 \text{ eV}$

1.4 Das Pauli-Prinzip

Die relativistische Quantenmechanik fordert fr Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ [bzw. 0, 1, 2, ...] eine unter Teilchenvertauschung \hat{P}_{ij} antisymmetrische [bzw, symmetrische] **Gesamtwellenfunktion** $|\psi\rangle = |\psi_{\text{Ort}}\rangle \otimes |\chi_{\text{Spin}}\rangle$. Wir nennen diese Teilchen **Fermionen**

[bzw. **Bosonen**]. Aus diesem Postulat folgt das:

Pauli-Prinzip: Man kann nie mehr als ein Fermion im gleichen (Orts- & Spin-) Zustand haben.

Für zwei e^- (z.B. Helium) gilt daher:

$$|\psi_{\text{Ort}}\rangle_{\text{symm.}} \Rightarrow \underbrace{|\chi_{-}\rangle}_{\text{Dies ist ein antisymmetrisches Singulett [2S+1=1]}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) \hat{=} \underbrace{|S=0, M_S=0\rangle}_{\substack{\text{[Großbuchstaben } S, M_S, J, \dots \\ \text{sind Gesamtquantenzahlen, Summen}]}}$$

$$|\psi_{\text{Ort}}\rangle_{\text{antisym.}} \Rightarrow \left. \begin{aligned} |\chi_{+}, 1\rangle &= |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle \\ |\chi_{+}, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) \\ |\chi_{+}, -1\rangle &= |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle \end{aligned} \right\} \hat{=} \begin{aligned} &|S=1, M_S=0\rangle \\ &|1, 0\rangle \\ &|1, -1\rangle \end{aligned}$$

$|\chi_{+}, -\rangle$ ist ein **symmetrisches** Triplett [2S+1=3 heißt Multiplizität].

2 Ex4 - 1.Vorlesung und Einführung

In der Ex4-Vorlesung wird es um folgende Themen gehen:

- Atome
- Kerne und Elementarteilchen
- Symmetrien
- schwache und starke Wechselwirkung
- Spaltung und Fusion

Johanna Stachels Notation:

$$e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$1 \text{ eV} = 1.60 \cdot 10^{-19} J$$

$$1 \text{ fm} = 913 \text{ MeV}/c^2 = 1.66 \cdot 10^{-27} kg$$

$$\hbar = 6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eVs} = 1.05 \cdot 10^{-34} Js$$

$$\alpha = \frac{e^2}{c\hbar} = \frac{1}{137}$$

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

2.1 Spektroskopische Notation

Um den Zustand einer Unterschale nl anzugeben, führen wir die spektroskopische Notation ein:

$$\boxed{n^{2S+1}L_J} \quad (2.1)$$

mit

$$S := \left| \sum_i m_{s,i} \right| \quad |L := \left| \sum_i m_{l,i} \right|$$

$$J := \left| \vec{L} + \vec{S} \right| = |M_L + M_S| = \left| \sum_i m_{l,i} + \sum_i m_{s,i} \right|$$

Die Notation für die Elemente des Periodensystems lautet:

$$\boxed{\begin{array}{cccc} \text{Massenzahl } \frac{m}{u} & El & \frac{q}{q_e} & \text{Ionisierung} \\ \text{Kernladungszahl } Z & & & \end{array}} \quad (2.2)$$

2.2 Hund'sche Regeln und Auswahlregeln

Die Elektronen werden für die Grundzustände so aufgefüllt, dass die Bindungsenergie(negativ) minimiert wird, das heißt deren Betrag maximal wird. Zwischen den Unterschalen gilt folgende Reihenfolge:

$5s^2$	$5p^6$	$5d^{10}$	$5f^{14}$
$4s^2$	$4p^6$	$4d^{10}$	$4f^{14}$
$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	
$2s^2$	$2p^6$		
$1s^2$			

Abbildung 2.1. Auffüllung der Grundzustände

Pro Unterzustand hat man $N_e = 2(2l + 1)$ Elektronen. Die Gesamtzahl der Elektronen in der n -ten Schale entspricht somit $N_e = 2 \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2n^2$

Innerhalb einer Unterschale gelten für die Grundzustände die hierarchischen **Hund'schen Regeln**:

1. Wenn $|\sum_i m_{s,i}|$ maximal $\Rightarrow S$ maximal und $S = |\sum_i m_{s,i}|$.
2. Wenn $|\sum_i m_{l,i}|$ maximal $\Rightarrow L$ maximal und $L = |\sum_i m_{l,i}|$.
3. Ist die Unterschale bis zu (einschließlich) halb voll, so wird J minimal d.h.
 $J \stackrel{!}{=} |L - S|$, bei mehr als halb vollen Unterschalen muss $J \stackrel{!}{=} |L + S|$ sein.

Diese Regeln bestimmen die Feinstruktur des Elements. Regt man das Element an, so gelten diese Regeln nicht mehr.

Die Schalen-/Orbitalübergänge werden von den sog. **Auswahlregeln** beherrscht, die wohlgeordnet nicht hierarchisch sind.

1. $\Delta L \in \{-1, 1\}$ bei L-S-Kopplung
2. $\Delta M_L \in \{-1, 0, 1\}$
3. $\Delta S = 0$ für leichte Atome
4. $\Delta J \in \{-1, 0, 1\}$ wobei $J = 0 \rightarrow J = 0$ **verboten**

2.3 Vielelektronenprobleme

Für Elemente mit mehr als einem Elektron gibt es keine analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung, auch numerische Verfahren sind mit zunehmender Elektronenzahl extrem aufwändig. Wir machen deshalb folgende Näherungen: **Alkaliatome (1. Hauptgruppe)**

- Alkaliatome haben nur ein Elektron außerhalb geschlossener Schalen. Die Grundzustände sind immer $^2S_{\frac{1}{2}}$ ($n \in \{2, 3, 4, \dots\}$ nicht notiert).
- Wir betrachten zu Näherung ein **effektives Potential** $V_{eff}(r)$

$$V_{eff}(r) = -\frac{e^2 Z_{eff}(r)}{r} \text{ mit } 1 < Z_{eff}(r) < Z \text{ und } Z_{eff} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 1, Z_{eff} \xrightarrow{r \rightarrow 0} Z$$

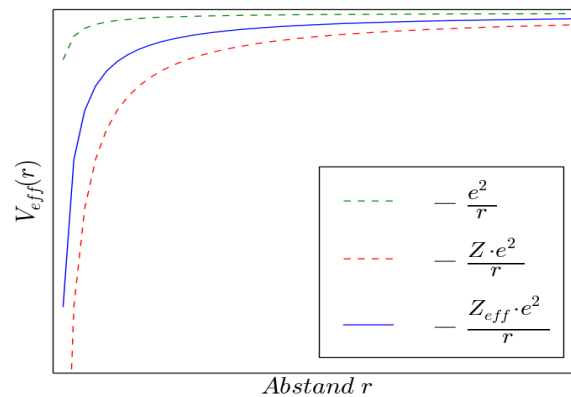


Abbildung 2.2. Effektives Potential

- Dies hebt die E_n -Entartung bezüglich Z bereits auf (Feinstruktur):
 $E_n(s) < E_n(p) < E_n(d) < E_n(f)$ (für kleine n am stärksten)
- Für große n und r (wasserstoffähnlich) lässt sich dies so schreiben:

$$E_{n,l} = -E_0 \frac{Z_{eff}^2}{n^2} = -\frac{E_0}{n_{eff}^2} = -\frac{E_0}{(n - \delta_{n,l})^2} \quad E_0 = 13.6 \text{ eV} \quad (2.3)$$

wobei $\delta_{n,l}$ der sog. **Quantendefekt** ist: $\delta_{n,l} = n - \sqrt{\frac{E_0}{-E_{n,l}}}$
 $E_{n,l} < 0$ ist die real gemessene Energie.

Um allgemeine Vielelektronenprobleme zu lösen, können wir (zumindest bis jetzt) nur nähern indem wir zur Lösung eines Elektron die anderen Elektronen unabhängig voneinander gelöst habe und das entstehen $V_{eff}(r)$ **kugelsymmetrisch** ist.

Wir suchen deshalb eine **Gesamtwellenfunktion für N Teilchen**.

Diese muss antisymmetrische unter Vertauschung sein, wir nehmen zusätzlich an, dass sie sich als Produkt der Einteilchenwellenfunktionen schreiben lässt.

Analog zu $\psi_{ges}(1, 2) = \psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)$ definieren wir die

Slaterdeterminante:

$$\psi_{ges}(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Diese ist total antisymmetrisch unter Spaltenvertauschung als Summe aus $N!$ Produkten.

2.4 Moseley-Gesetz

Für Elektronen-übergänge zwischen Zuständen wurde empirisch festgestellt, dass $\sqrt{f} \propto Z$ ist, wobei f die Frequenz des emittierten Lichts ist.

$$\textbf{Moseley Gesetz: } f = E_0 c (1/n_2^2 - 1/n_1^2) (Z - b)^2$$

$$\text{mit } c = \lambda f : \lambda = E_0 (1/n_2^2 - 1/n_1^2) (Z - b)^2$$

für Übergänge $n_1 \rightarrow n_2$, b - Abschirmkonstante

Für das Wasserstoffatom entspricht das Moseley-Gesetz der Rydberg-Formel.

Für wasserstoffähnliche Atome ($b=1$) gilt : K-Linie: $n_2 = 1$, $\alpha : n_1 = 2$, $\beta : n_1 = 3$

Für schwere Atome ($Z > 40$) gilt : L-Linie: $n_2 = 2$, $b \approx 7.4$, $\alpha : n_1 = 3$, $\beta : n_1 = 4$

Die Auswahlregeln müssen gelten.