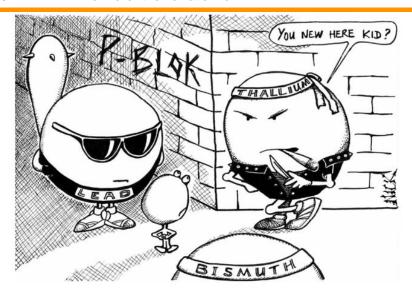
# 5-1 / 1 Mehrelektronenatome



Unwittingly, and against his mother's advice, Vince the first-row Transition Metal had been lured far away from home, and now found himself surrounded by heavier elements of the P-Block.

# 5-1 / 2 Mehrelektronenatome

- 5.1 Pauli-Prinzip
- 5.2 Das Heliumatom
- 5.2 Elektronenstruktur der Elemente
- 5.4 LS- und jj-Kopplung
- 5.5 Röntgenspektren
- 5.6 Atome im elektrischen Feld

#### 5-1/3 Symmetrie der Wellenfunktion

Die Elektronen 1 und 2 befinden sich in dem durch die Quantenzahlen  $a \equiv (n_1, l_1, m_{l_1}); \quad b \equiv (n_2, l_2, m_{l_2})$ 

bezeichneten Zustand mit den Einteilchenwellenfunktionen:  $\psi_a(1), \psi_b(2)$ 

Ladungsverteilung darf sich bei Vertauschung der Elektronen wegen Ununterscheidbarkeit der Elektronen nicht ändern →

 $\psi^s = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2) + \psi_a(2) \cdot \psi_b(1)$ Symmetrische Wellenfunktion:  $\psi^a = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2) - \psi_a(2) \cdot \psi_b(1)$ Antisymmetrische Wellenfunktion:

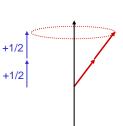
Zwei Elektronen mit gleichen Quantenzahlen n, l,  $m_l$  besitzen eine symmetrische Wellenfunktion.

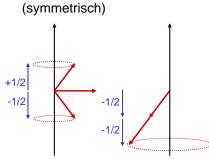
#### 5-1 / 4 **Spinfunktion**

**Gesamtspin:**  $\vec{S} = \vec{s_1} + \vec{s_2}$ ;  $|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$ ;  $S_z = M_S \hbar$ 

Singulett: S = 0

(antisymmetrisch)





$$\chi_{s} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi^{+}(1) \chi^{-}(2) - \chi^{+}(2) \chi^{-}(1) \right]$$

$$\chi_{s} = \begin{cases} \chi^{+}(1)\chi^{+}(2) & M_{s} = +1\\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi^{+}(1)\chi^{-}(2) + \chi^{+}(2)\chi^{-}(1) \right] ; M_{s} = 0\\ \chi^{-}(1)\chi^{-}(2) & M_{s} = -1 \end{cases}$$

Triplett: S = 1

# 5-1 / 5 Pauli-Prinzip

Das statistische Verhalten von quantenmechanischen Teilchen hängt von ihrem Spin ab. Man unterscheidet:

Teilchen mit halbzahligem Spin: Fermionen (z.B. e<sup>-</sup>, p<sup>+</sup>, n<sup>0</sup>) Teilchen mit ganzzahligem Spin: Bosonen (z.B. Photonen, Alkali-Atome)

### Pauli-Prinzip:

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems mehrerer identischer Fermionen ist immer antisymmetrisch, die eines Systems aus identischen Bosonen immer symmetrisch bezüglich einer Vertauschung zweier Teilchen.

#### Das heißt:

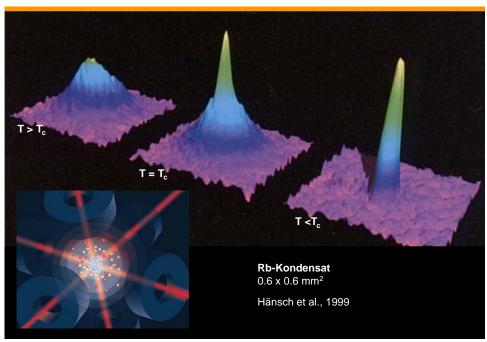
Vertauscht man in der Gesamtwellenfunktion zwei identische Fermionen wechselt die Wellenfunktion das Vorzeichen; vertauscht man zwei identische Bosonen bleibt die Wellenfunktion gleich.

## 5-1 / 6 Pauli-Prinzip

## Folgerungen:

- Pauli-Prinzip gilt für Elektronen in Atomen, Molekülen, Festkörpern, aber auch viele andere Systeme (z.B. Protonen und Neutronen im Atomkern)
- Ein durch die Quantenzahlen n, l,  $m_l$ ,  $m_s$  beschriebener Einelektronen-Zustand eines Atoms kann höchstens durch ein Elektron besetzt werden.
- Ein durch die Quantenzahlen n, l,  $m_l$  beschriebener Einelektronen-Zustand eines Atoms ("Atomorbital") kann höchstens durch zwei Elektron besetzt werden, die dann antiparallel stehen müssen.

5-1 / 7 Bose-Einstein Kondensation



5-1 / 8 Atomlaser

