

Atom-Modell (N Elektronen, $N=Z$)

$$H = \sum_{k=1}^N \left(\vec{p}_k^2 - \frac{Z}{|\vec{x}_k|} \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$. Eigenräume tragen (in der Regel irreduzible) Darstellungen der $SO(3) \times SU(2)$, notiert $\mathcal{D}_L \otimes \mathcal{D}_S$.

Welche, zumindest für den Grundzustand?

• Vorerst: Schalenmodell

$$H_{SM} = \sum_{k=1}^N \left(\vec{p}_k^2 + \phi(r_k) \right) \quad (r_k = |\vec{x}_k|)$$

Beschreibt unabhängige e^- im Zentralpotential $\phi(r)$: Summarische Beschr. der WW eines e^- mit $N-1$ Restlichen & Kern. Für $h = \vec{p}^2 + \phi(r)$:

Schalen: $n\ell$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{auch: } s, p, d, \dots)$$

$$n = \ell + 1, \ell + 2, \dots$$

$$\text{Entartung: } 2(2\ell + 1)$$

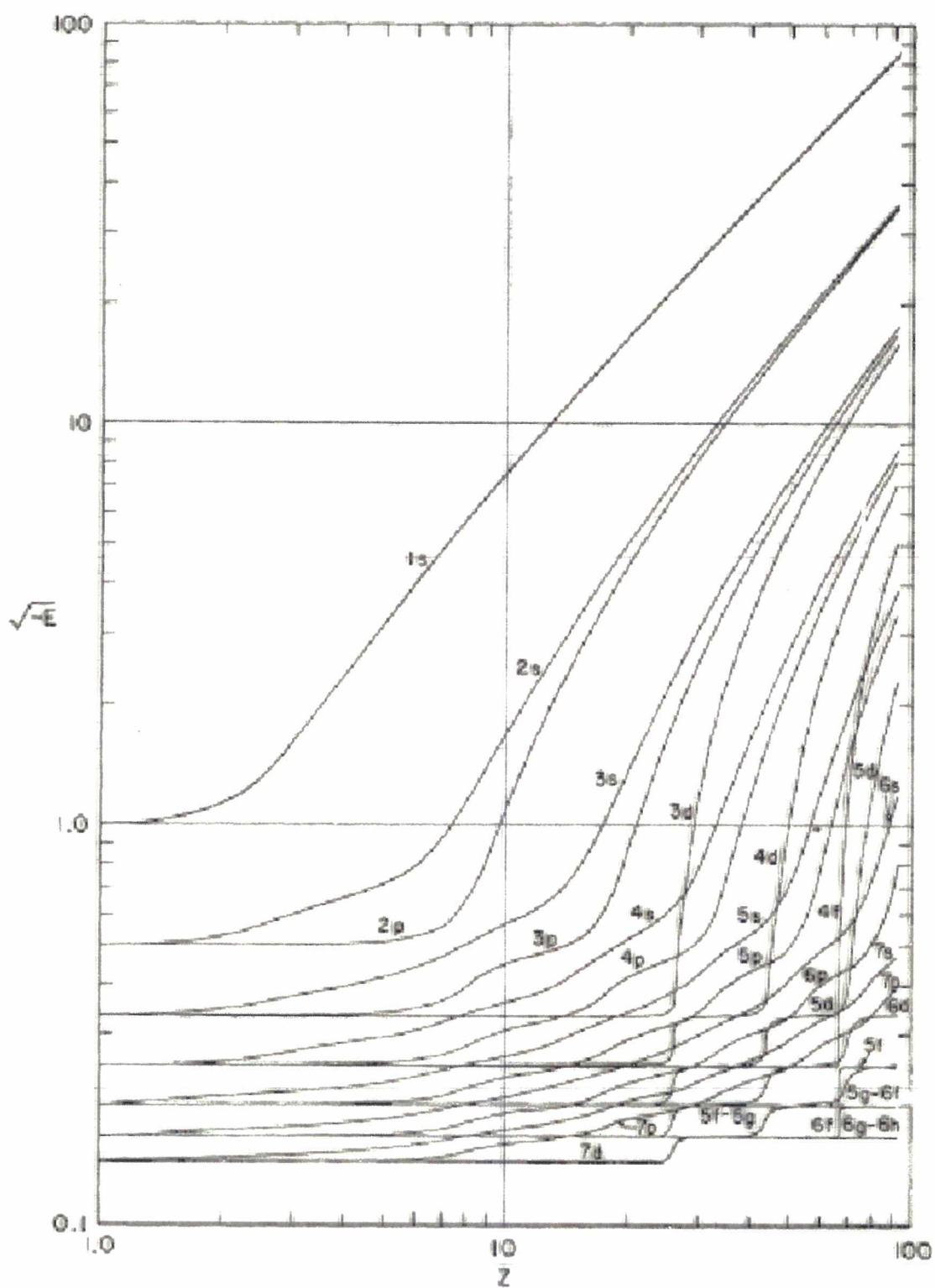


FIG. 7. The square root of the term values of Table I for the Thomas-Fermi atom is shown as a function of Z .

Mit wachsendem $N=Z$, Schalen
substantive gehüllt gemäß Mode-
lung-Regel. \rightarrow Konfigurationen

Bsp. $Z=6$ (Kohlenstoff C)

Konfig. des GZ: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$
geschloss. offene
Schale

Entwertung

$$\binom{6}{2} = 15$$

(Ent. von $2p$: 6 ; $\#e^-$: 2)

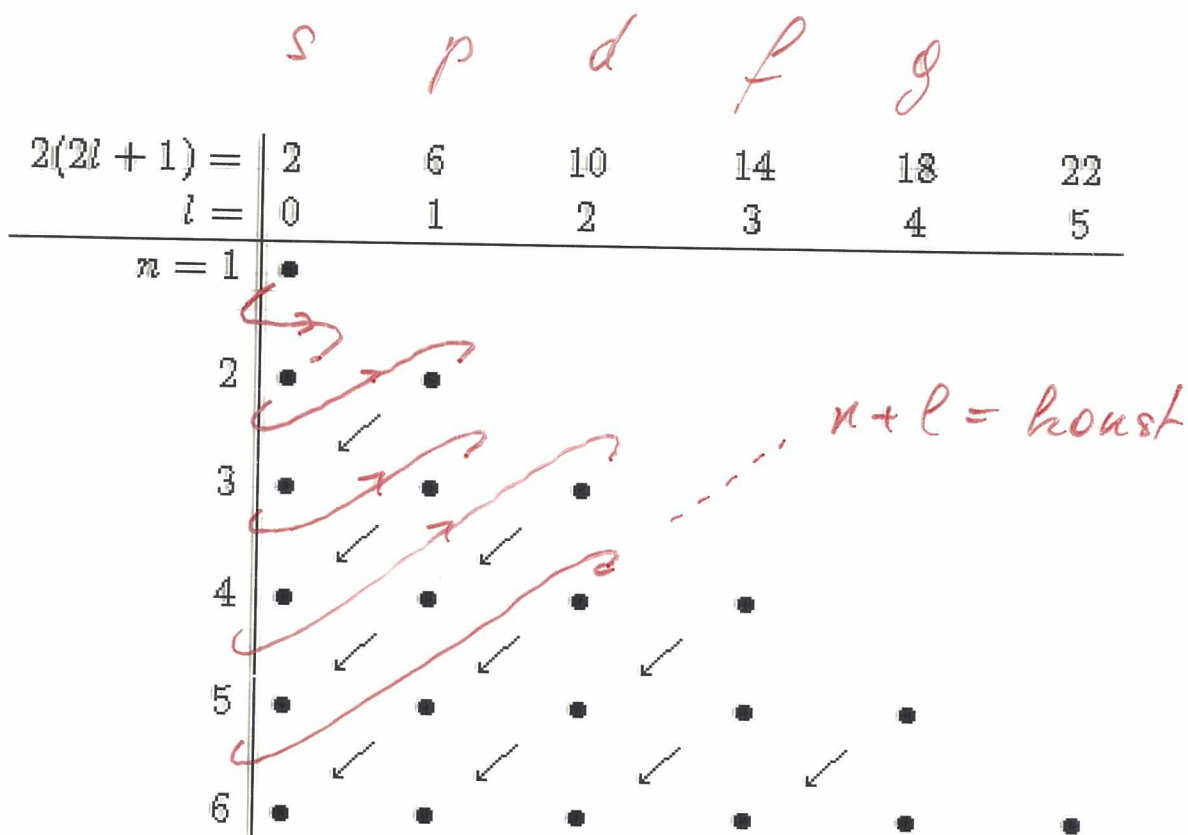
Bsp. $Z=7$ (Stickstoff N)

$$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^3$$

Entwertung

$$\binom{6}{3} = 20$$

Beachte: Konfig. tragen in der Regel
eine reduzible Darstellung der $SO(3) \times SU(2)$,



Handwritten note: No. of subshells

Schale	# Zustände	# Zustände (kumulativ)	Schalennummer
1s	2	2	1
2s	2	4	2
2p	6	10	
3s	2	12	3
3p	6	18	
4s	2	20	4
3d	10	30	
4p	6	36	
5s	2	38	5
...			

• Zurück zu

$$H = H_{SM} + W$$

$$W = \underbrace{-\sum_{k=1}^N \frac{z}{|\vec{x}_k|}}_{\text{WW exakt}} + \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \quad - \underbrace{\sum_{k=1}^N \phi(v_k)}_{\text{WW summarisch}}$$

Bei $H \xrightarrow{SM} H$: Entwertung der Konfigurationen teilweise aufgehoben

Aufspaltung einer Konfiguration

Beispiel: offene Schale $(p)^2$, z.B. C, Si

Entartung $\binom{6}{2} = 15$

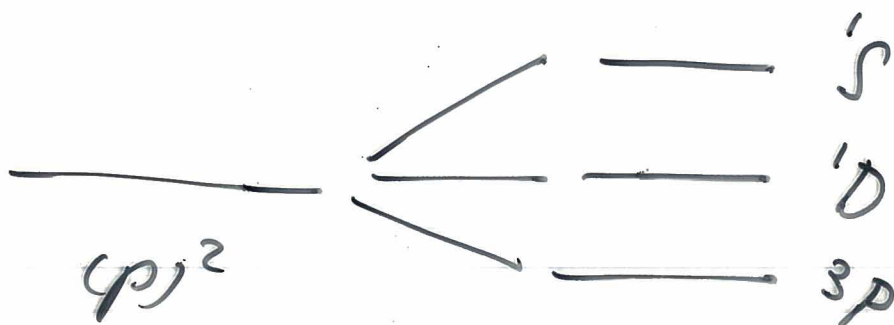
Vorkommende Darstellungen $D_L \oplus D_S$

$$(D_0 \oplus D_0) \oplus (D_1 \oplus D_1) \oplus (D_2 \oplus D_0)$$

$$= 1S \oplus 3P \oplus 1D$$

(Notation: $2S+1_L$)

Aufspaltung durch U



Konfiguration Multipletts

Ordnung der Multipletts \rightarrow Hund'sche Regeln.

Hund'sche Regeln

1. Das LS -Multiplet mit dem grössten S hat die kleinste Energie
2. Falls mehrere L mit dem gleichen S vorkommen, hat das grösste L die kleinste Energie

Für höchstens halb gefüllte Schalen

$$N \leq \frac{1}{2} \cdot 2(2l+1) = 2l+1$$

$$\parallel S = \frac{N}{2}, \quad L = l + (l-1) + \dots + (l-N+1) \parallel$$

enthält Zustand der Symbolreihe

$$l^+ (l-1)^+ \dots (l-N+1)^+$$

Speziell: halb gefüllte Schale $N = 2l+1$:

$$L = 0$$

Ergänzung des Atommodells durch Spin-Bahn-Kopplung

$$\tilde{H} = H + H_{SB}$$

$$H_{SB} = \sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m \cdot \mu c^2} \frac{1}{r_k} \frac{d\phi}{dr_k} \vec{L}_k \cdot \vec{S}_k$$

Bei $H \rightsquigarrow \tilde{H}$, Reduktion der Symmetrie:

$$(R, U) \in SO(3) \times SU(2) \rightsquigarrow (R(U), U)$$

separate Drehungen von Ort und Spin aller Elektronen.

gemeinsame Drehungen

$$\vec{L}, \vec{S}$$

\rightsquigarrow

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Erhaltungsgrößen

Atom Kern, insb. Bestimmung von L, S, J im Grundzustand



$\sim 1 \text{ eV}$



Konfigurationen

L, S -Multipletts

Terme

(1)

(2)

(3)