

Für diese Serie gibt es wegen Auffahrt keine Vorbesprechung. Abgabe ist wie gewohnt am Dienstag (22. Mai 2012) in der Vorlesung. Das Ziel ist, im Skript die bereits bekannten Themen *Periodensystem* und *Hund'sche Regeln* selbstständig zu erarbeiten.

Übung 1. *Das Periodensystem.*

(a) Lese im Skript das Kapitel 6.4 *Das Periodensystem.*

(b) Verständnisfragen:

- (i) Was bestimmt die Periode eines Elements?
- (ii) Was bestimmt die Gruppe eines Elements?
- (iii) Kalium ($Z=19$) hat die Konfiguration $1s^1 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 = [\text{Ar}]4s^1$ und nicht wie man erwartet $[\text{Ar}]3d^1$. Wieso?

Hinweise.

- *Diese Antwort findest du nicht im Skript, sie sollte aber aus früheren Vorlesungen bekannt sein. Ansonsten kann dir jedes Standardwerk zur Atomphysik weiterhelfen.*
- *Das 4s-Elektron hat in der Nähe des Kerns eine höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit als das 3d-Elektron.*

Lösung.

- (i) Die Periode entspricht der Zeile im Periodensystem. Die Nummer der Periode wird bestimmt durch den Wert der höchsten besetzten Hauptquantenzahl n . Es müssen noch nicht alle nl mit tieferem n gefüllt sein, die genaue Reihenfolge ist nicht trivial und muss berechnet oder im Experiment gefunden werden.
- (ii) Die Gruppe entspricht der Spalte im Periodensystem. Elemente in derselben Spalte haben dieselbe Konfiguration der äussersten Schale und somit dieselben chemischen Eigenschaften.
- (iii) Die Edelgaskonfiguration $1s^1 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ bestimmt den Rumpf und ist verantwortlich für die Abschirmung des Kerns. Das 4s-Elektron hat eine höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe des Kerns (wo dieser weniger abgeschirmt ist) als das 3d-Elektron. Somit liegt es schlussendlich energetisch tiefer (höhere Bindungsenergie) und das Niveau 4s wird vor 3d gefüllt.

Übung 2. Die Hund'schen Regeln.

- (a) Lese im Skript das Kapitel 6.5 Hund'sche Regeln.
- (b) Als Beispiel für die Hund'schen Regeln wollen wir für die offene Schale d^2 das L-S-Multiplett des Grundzustandes finden.

Hinweise.

- Wie viele verschiedene Zustände gibt es in der d -Schale? Was ist somit die Entartung der Konfiguration d^2 ?
- Wie zerfällt die Darstellung von $SO(3)$ für den orbitalen Drehimpuls? Wie zerfällt die Darstellung von $SU(2)$ für den Spin? Welche antisymmetrischen Gesamtzustände $\mathcal{D}_L \otimes \mathcal{D}_S$ sind also möglich? Was sind die Multiplett Darstellungen ^{2S+1}L dieser Zustände?
- Welcher dieser Zustände ist aufgrund der ersten beiden Hund'schen Regeln der Grundzustand?
- Für die Feinstruktur berücksichtigen wir zusätzlich die Spin-Bahn-Kopplung. Bestimme die daraus resultierende zusätzliche Zerlegung des Grundzustandes und die entsprechenden L-S-Multipletts $^{2S+1}L_J$.
- Was ist also aufgrund der dritten Hund'schen Regel der Grundzustand?

Lösung. In der d -Schale ($l = 2$) gibt es $2 \times (2l + 1) = 10$ verschiedene Zustände. Die Entartung der Konfiguration d^2 mit 2 Elektronen ist somit $\binom{10}{2} = 45$.

Die Darstellung von $SO(3)$ für den orbital Drehimpuls zerfällt gemäss

$$\mathcal{D}_2 \otimes \mathcal{D}_2 = \mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_1 \oplus \mathcal{D}_2 \oplus \mathcal{D}_3 \oplus \mathcal{D}_4 = \oplus_L \mathcal{D}_L \quad (\text{L.1})$$

und jene von $SU(2)$ für den Spin gemäss

$$\mathcal{D}_{1/2} \otimes \mathcal{D}_{1/2} = \mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_1 = \oplus_S \mathcal{D}_S. \quad (\text{L.2})$$

Die möglichen antisymmetrischen Gesamtzustände $\mathcal{D}_L \otimes \mathcal{D}_S$ und ihre Multiplett Darstellungen ^{2S+1}L sind

$$(\mathcal{D}_1 \oplus \mathcal{D}_3) \otimes \mathcal{D}_1 \oplus (\mathcal{D}_0 \oplus \mathcal{D}_2 \oplus \mathcal{D}_4) \otimes \mathcal{D}_0 = {}^3P \oplus {}^3F \oplus {}^1S \oplus {}^1D \oplus {}^1G. \quad (\text{L.3})$$

Aufgrund der ersten Hund'schen Regel muss S maximal sein, also 3P oder 3F . Aufgrund der zweiten Regel muss zusätzlich L maximal sein, also 3F .

Berücksichtigen wir zusätzlich die Spin-Bahn-Kopplung so resultiert daraus die folgende zusätzliche Zerlegung des Grundzustandes:

$${}^3F = \mathcal{D}_3 \otimes \mathcal{D}_1 = \mathcal{D}_2 \oplus \mathcal{D}_3 \oplus \mathcal{D}_4 = {}^3F_2 \oplus {}^3F_3 \oplus {}^3F_4. \quad (\text{L.4})$$

Da die Schale weniger als halb gefüllt ist, ist der Grundzustand aufgrund der dritten Hund'schen Regel derjenige mit $J = |L - S|$, also

$${}^3F_2. \quad (\text{L.5})$$