

Hausaufgabenblatt 8: 15.12.2010

Aufgabe H8.1 (5 Punkte)

Alkaliatome haben ein Elektron außerhalb geschlossener Schalen. Beispielsweise ist die Elektronenkonfiguration von Natrium $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. Näherungsweise kann das Natriumatom als Quasi-Ein-Elektronenatom aufgefasst werden, in dem die inneren $1s$, $2s$ und $2p$ Elektronen 10 der insgesamt 11 im Kern enthaltenen Ladungseinheiten abschirmen, so dass das äußere $3s$ -Elektron sich im Potenzial der effektiven Ladung $Z_{\text{eff}} \approx 1$ bewegt. Die Ionisierungsenergie des $3s$ -Elektrons beträgt $E_I = 5.139$ eV. Für die Anregung des $3s$ -Elektrons in höhere Zustände werden folgende Energien (E_A in eV) benötigt:

3p	4s	3d	4p	5s	4d	4f	5p	6s	5d	5f	6p	6d
2.103	3.191	3.617	3.753	4.116	4.283	4.288	4.344	4.510	4.592	4.594	4.624	4.759

Die Entartung der ℓ -Unterzustände des äußeren Elektrons ist durch die Wechselwirkung mit den 10 inneren Elektronen aufgehoben.

Rechnen Sie nach, dass sich die jeweiligen Bindungsenergien durch die folgende gegenüber der für Wasserstoff modifizierten Formel beschreiben lassen:

$$E_{n\ell} = -\frac{\mathcal{R}}{[n - \Delta(n, \ell)]^2} \quad \text{mit} \quad \mathcal{R} = 13.606 \text{ eV} \quad (\text{H8.1})$$

Wie groß sind die jeweiligen Quantendefekte $\Delta(n, \ell)$? Diskutieren Sie die Abhängigkeiten der Quantendefekte von den Quantenzahlen n und ℓ ?

Aufgabe H8.2 (5 Punkte)

Berechnen Sie explizit den Erwartungswert $\langle r^{-3} \rangle$ im wasserstoffähnlichen $2p$ -Zustand. Verifizieren Sie, dass Ihr Ergebnis ein Spezialfall der folgenden allgemeinen Formel für wasserstoffähnliche Zustände $\psi_{n\ell m}$ mit $\ell \geq 1$ ist:

$$\left\langle \psi_{n\ell m} \left| \frac{1}{r^3} \right| \psi_{n\ell m} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3} \frac{1}{n^3(\ell+1)(\ell+\frac{1}{2})\ell} \quad (\text{H8.2})$$

Bemerkung:

Der Erwartungswert $\langle r^{-3} \rangle$ tritt bei der Berechnung der Spin-Bahn-Wechselwirkungsenergie auf.