

Übung zur Atom- und Molekülphysik C. Laubschat

7) Mehrelektronenatom im einfachsten Einteilchenbild:

Nehmen Sie an, die N Elektronen eines Mehrelektronenatoms bevölkern die N energetisch niedrigsten Zustände in einem Einteilchen-Coulombpotential, und die Abwesenheit mehrerer Elektronen bewirke nichts weiter als eine Abschirmung des Kernpotentials im Sinne einer Reduzierung der realen Kernladungszahl Z auf einen effektiven Z_{eff} .

- a) Die ersten Ionisierungsenergien des Li- und des Na-Atoms betragen 5.39 eV bzw. 5.1 eV (Konfiguration $[\text{He}]2s^1$ bzw. $[\text{Ne}]3s^1$). Schätzen Sie Z_{eff} ab, bestimmen Sie die Maxima der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (Wasserstoff $2s: \cong 5a_0$, $3s: \cong 13a_0$) und vergleichen Sie die Ergebnisse mit den Abständen nächster Nachbarn in den reinen Metallen (0.3023 nm bzw. 0.3659 nm)!
- b) Bei den Seltenen Erden wird die 4f-Schale aufgefüllt; bei Yb ist sie abgeschlossen ($Z=70$, Konfiguration $[\text{Xe}]4f^{14} 6s^2$). Die Bindungsenergie des $4f_{7/2}$ -Zustands beträgt hier 8.91 eV. Schätzen Sie Z_{eff} ab! Vergleichen Sie den resultierenden Bahnradius mit dem metallischen Ionenradius (Hälfte des Abstands benachbarter Yb-Ionen im reinen Metall) von 0.194 nm! Berechnen Sie ferner die erwartete Spin-Bahn-Aufspaltung der $4f^{13}$ -Konfiguration! Was folgern Sie aus der Abweichung des Resultates vom wirklichen Wert (1.2 eV) über den Potentialverlauf?

8) Schalenaufbau des Atoms und Hundsche Regeln:

Wie lautet die Elektronenkonfiguration und was ist der Grundzustand von freien B-, C-, N-, O- und F-Atomen? Warum ist MN^{3+} ($Z=25$) als freies Ion diamagnetisch, im Festkörper aber paramagnetisch? (Berücksichtigen Sie, dass äußere s-Elektronen bei höheren Oxidationszahlen abgegeben sind!)

9) LS-Kopplung und Hundsche Regeln:

Aus welchen Termen besteht ein $3d^2$ -Multipllett in LS-Kopplung, und in welcher Reihenfolge liegen die einzelnen Terme energetisch?