

Übungsblatt 3 - Lösungen

1. Warum ist es bei schwereren Elementen ungleich schwieriger, die Schrödinger-Gleichung zu lösen als beim Wasserstoff? Welche Näherung wird im Allgemeinen angewandt, um das Problem zu lösen?

Das Hauptproblem ist die Tatsache, dass man es bei Elementen mit mehreren Elektronen mit den Wechselwirkungen zwischen den Elektronen zu tun bekommt. Die elektrostatische Abstoßung ließe sich zwar prinzipiell mit einem Term $V'(r')$, der die elektrostatische Abstoßung beschreibt, in die Schrödinger-Gleichung einfügen, allerdings müsste dazu der Ort aller jeweils anderen Elektronen (und damit das r') genau bekannt sein. Die Orte der anderen Elektronen lassen sich allerdings über das Quadrat der Wellenfunktionen nur mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit angeben. Somit ist die Beschreibung einer exakten Funktion $V'(r')$ nicht möglich.

Ein kleineres, ohne Mühe lösbares Problem ist die erhöhte Kernladung, die ließe sich über eine Korrektur der Potentialfunktion $V(r)$ sehr leicht beschreiben.

2. Unter welcher Bedingung könnten sich gemäß dem Pauliprinzip zwei Wasserstoffatome durchdringen? Spekulieren Sie.

Das Pauli-Prinzip verbietet den Aufenthalt zweier Elektronen innerhalb eines gemeinsamen Volumens, solange die vier Quantenzahlen bei beiden Elektronen identisch sind. So können sich zwei Wasserstoffatome, deren Elektronen beide die Quantenzahl-Kombination $(1, 0, 0, +1/2)$ aufweisen, nicht durchdringen. Allerdings könnte das Elektron eines der beiden Wasserstoffatome leicht die Konfiguration $(1, 0, 0, -1/2)$ einnehmen: die beiden Zustände sind ja entartet, ihre Energie hängt nur von der Hauptquantenzahl ab. Damit kann dieser neue Zustand ohne Energieaufwand eingenommen werden. Die beiden Wasserstoffatome mit $(1, 0, 0, +1/2)$ und $(1, 0, 0, -1/2)$ können sich nun durchdringen. Sie werden in diesem Fall übrigens sofort eine Bindung eingehen, siehe Kapitel 1.8.

3. Das folgende Schema gilt für die Reihenfolge der Besetzung von Zuständen mit verschiedenen Quantenzahlen n und ℓ in Mehrelektronensystemen und wird als Folge von Wechselwirkungen zwischen den Elektronen verstanden.

Wie würde das Schema aussehen, wenn es keine Wechselwirkungen zwischen den Elektronen gäbe?

Alle roten Pfeile wären sofort sinnlos, sie könnten entfallen. Die Besetzung erfolgte (wie beim Wasserstoff) einfach nach der Reihenfolge $n=1, n=2, n=3, \dots$, die Wahl bezüglich der Nebenquantenzahl ℓ wäre rein zufällig. Sie wäre übrigens auch nicht vorhersehbar. Regt man das Elektron eines Wasserstoffatoms (das ist ja das einzige existierende Atom, das keine zwischenelektronischen Wechselwirkungen kennt) von $n=1$ nach $n=2$ an, so ließe sich keine Aussage treffen, ob die Nebenquantenzahl dann 0 oder 1 wäre. Beide Möglichkeiten wären genau gleich wahrscheinlich.