

EP III - Seminar

Symmetrien der Wellenfunktion & Das He-Atom (5.1.2, 5.1.3)

Symmetrien der Wellenfunktion Während Systeme von Bosonen lediglich durch symmetrische Gesamtwellenfunktionen beschrieben werden können, dienen zur Beschreibung von Fermionen stets Antisymmetrische Wellenfunktionen. Zunächst kann man also eine solche Antisymmetrische Wellenfunktion in einen Anteil, der den Ort der Fermionen beschreibt und einen der lediglich für den Spin zuständig ist, zerlegen:
(Betrachte im Folgenden ein System aus zwei Elektronen)

$$\Psi = \Psi_{Ort}(n_1, l_1, m_1, n_2, l_2, m_2) \cdot \chi_{Spin}(s_1, s_2)$$

Aus der Forderung, dass Ψ Antisymmetrisch ist ergibt sich:

- Ψ_{Ort} symmetrisch und χ_{Spin} antisymmetrisch: $\Rightarrow \Psi$ antisymmetrisch
Erlaubte Kombination
- Ψ_{Ort} antisymmetrisch und χ_{Spin} symmetrisch: $\Rightarrow \Psi$ antisymmetrisch
Erlaubte Kombination
- Ψ_{Ort} symmetrisch und χ_{Spin} symmetrisch: $\Rightarrow \Psi$ symmetrisch
Verbotene Kombination
- Ψ_{Ort} antisymmetrisch und χ_{Spin} antisymmetrisch: $\Rightarrow \Psi$ symmetrisch
Verbotene Kombination

Das He-Atom Nach dem Wasserstoffatom betrachten wir nun das nächstkompliziertere Atom, Helium. Möchte man die beiden Elektronen die um den Heliumkern kreisen beschreiben, so muss man bereits zwei sich überlagernde Coulombpotentiale betrachten. Die potentielle Energie der Elektronen lässt sich schreiben als:

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right)$$

\vec{r}_1 und \vec{r}_2 bezeichnen die Ortsvektoren der beiden Elektronen, r_{12} den Abstand der Elektronen untereinander. Der letzte Term in dieser Gleichung bewirkt, dass das Gesamtpotential nicht mehr radialsymmetrisch ist, sondern vom Winkel zwischen den Ortsvektoren der Elektronen abhängt. Mit dem Operator für die kinetische Energie im Schwerpunktsystem $\hat{E}_{kin} = \frac{-\hbar^2}{2\mu} [\Delta_1(\vec{r}_1) + \Delta_2(\vec{r}_2)]$ (μ bezeichnet hier die reduzierte Masse) folgt die Schrödingergleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} [\Delta_1\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \Delta_2\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)] + E_{pot}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Diese Schrödingergleichung ist aufgrund der Winkelabhängigkeit nicht mehr in einen Radial- und einen Winkelanteil separierbar, und damit *nicht analytisch lösbar*.

Um trotzdem mit diesem Atom rechnen zu können, kann man folgende (recht gute) Näherung betrachten:

Das attraktive Kernpotential, welches auf Elektron 1 wirkt, wird teilweise vom repulsiven Coulombpotential des zweiten Elektrons abgeschirmt, das heisst: Man kann die Ladungsverteilung ($|\Psi|^2$) des einen Elektrons im Term der potentiellen Energie des anderen Elektrons wie folgt berücksichtigen:

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{Z}{r_1} - \int \frac{\Psi\Psi^*}{r_{12}} d\vec{r} \right]$$

Unter der Annahme dass das zweite Elektron durch eine 1s-Wellenfunktion beschrieben wird erhält man damit eine Ionisationsenergie für Helium von ca. $78eV$, was dem experimentell ermittelten Wert ($-78,93eV$) sehr Nahe kommt.

Singulett- und Triplett-Zustände An dieser Stelle zunächst ein kleiner **Einschub** über die in der Vorlesung nicht behandelte **Multiplizität**:

Als Multiplizität wird die Größe $2|S| + 1$ bezeichnet. Die Multiplizität gibt an, in wie viele verschiedene Raumrichtungen sich der Spin-Vektor bezüglich einer ausgezeichneten Achse (bspw. externes B-Feld) einstellen kann. Man spricht von einer Richtungsquantelung.

Bem.: Bei Systemen mit mehreren Elektronen werden die Quantenzahlen mit großen Buchstaben bezeichnet.

Bsp.:

$S = 0 \Rightarrow 2S + 1 = 1 \Rightarrow$ Singulett-Zustand

$S = \frac{1}{2} \Rightarrow 2S + 1 = 2 \Rightarrow$ Dublett-Zustand

$S = 1 \Rightarrow 2S + 1 = 3 \Rightarrow$ Triplett-Zustand

Im He-Atom können die Spins der beiden Elektronen nun zu $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ oder $S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ koppeln. Es liegt also entweder ein **Singulett-** oder ein **Triplett-Zustand** vor.

Wie bereits oben gesehen, müssen Elektronen durch Antisymmetrische Gesamtwellenfunktionen beschrieben werden. Das hat nun Folgendes für einen Triplett Zustand (gleichgerichteter Spin) zur Folge: Der Spinanteil der Wellenfunktion ist hier symmetrisch \Rightarrow Ortsanteil der Wellenfunktion (abhängig von n, l, m) **muss** Antisymmetrisch sein!

- Fragen:**
- Was ist das Pauli-Prinzip? (*Skript*)
 - Was sind Fermionen und Bosonen und wie ist die Symmetrie der zugehörigen Wellenfunktionen? (*Skript*)