

Dr. Marco Busch
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin
Brook-Taylor-Straße 6 (MHP)

Übungen zur Vorlesung „Mehrelektronenatome und Moleküle“

Blatt 5

(Abgabe: 18.11.2014 **VOR** der Vorlesung)

Aufgabe 10: (4 Punkte)

Leiten Sie die Formel für die elektronische Gesamtenergie eines Atoms mit der Kernladungszahl Z im Rahmen des Thomas-Fermi-Modells ab und vergleichen Sie die damit berechneten Energien mit experimentell ermittelten Werten für He (79.0 eV), Li (203.5 eV), B (671.0 eV) und Ne (3511.6 eV).

Aufgabe 11: (6 Punkte)

Berechnen Sie bei Vernachlässigung jeglicher Spin-Bahn- und Spin-Spin-Wechselwirkung in erster Ordnung Störungstheorie die Energie des Grundzustands des neutralen He-Atoms. Setzen Sie dazu die Gesamt-Ortswellenfunktion als Produkt von zwei 1s-Zustandsfunktionen des H-Atoms an und betrachten Sie die elektronische Wechselwirkung als Störoperator. (Hinweis: Benutzen Sie für den Operator $1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ die Darstellung/Entwicklung mit den Legendre-Polynomen.) Berücksichtigen Sie in einem zweiten Schritt die gegenseitige elektronische Abschirmung des Kernpotentials durch eine effektive Kernladungszahl $Z_{\text{eff}} < Z$ (mit $Z = 2$) in den 1s-Zustandsfunktionen und im Hamilton-Operator. Bestimmen Sie damit die Energie des Grundzustands durch Minimierung der Gesamtbindungsenergie als Funktion der effektiven Kernladungszahl Z_{eff} .