

Blatt 12

(Ausgabe am 25.1., Besprechung am 29.1./31.1.)

Die letzte Übungsstunde (Woche vor der Klausur) dient der Wiederholung des Kursmaterials und bietet die Möglichkeit, offene Fragen zu stellen.

Aufgabe 44: Triplet-Zustand im Helium

In Zentralfeldnäherung sind die Wellenfunktionen des 2^3S -Zustands (Grundzustand des Triplet-Systems) des Helium-Atoms gegeben durch

$$\Psi_c(2^3S) = \psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) & M_S = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] & M_S = 0 \\ \beta(1)\beta(2) & M_S = -1 \end{cases}$$

mit
$$\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_{1s}(\vec{r}_1)u_{2s}(\vec{r}_2) - u_{2s}(\vec{r}_1)u_{1s}(\vec{r}_2)],$$

wobei $u_{1s}(\vec{r})$ bzw. $u_{2s}(\vec{r})$ atomare 1s- bzw. 2s-Ortsraum-Wellenfunktionen sind.

Schreiben Sie die 3 Funktionen $\Psi_c(2^3S)$ in Form von Slater-Determinanten (oder als Summe von Slater-Determinanten), die aus den folgenden Spinorbitalen aufgebaut sind:

$$\begin{aligned} u_{1s\uparrow} &= u_{1s}(\vec{r})\alpha, & u_{1s\downarrow} &= u_{1s}(\vec{r})\beta \\ u_{2s\uparrow} &= u_{2s}(\vec{r})\alpha, & u_{2s\downarrow} &= u_{2s}(\vec{r})\beta \end{aligned}$$

Aufgabe 45: L-S- und j-j-Kopplung

a) Nehmen Sie im Folgenden an, dass die **L-S-Kopplung** gilt. Ermitteln Sie alle Spektralterme ^{2S+1}L , die mit den folgenden Elektronenkonfigurationen möglich sind:

$$\begin{array}{ll} \text{(i)} & (ns)^1 (n's)^1 \\ \text{(ii)} & (ns)^1 (n'p)^1 \\ \text{(iii)} & (ns)^1 (n'd)^1 \\ \text{(iv)} & (nd)^2 \end{array}$$

b) Wie lauten die zugehörigen Feinstrukturterme $^{2S+1}L_J$?

c) Ermitteln Sie für den Fall von **j-j-Kopplung** die möglichen $(j_1, j_2)_J$ -Terme zur Elektronenkonfiguration $(np)^1 (nd)^1$.