



Einige Aufgaben bzw. Fragen zur Nachbereitung der Vorlesung Struktur der Materie. Viele weitere sind denkbar.

Aufgabe 1 *Zu den Wurzeln der modernen Atomphysik*

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts wurde durch sorgfältiges Experimentieren klar, dass atomare Objekte dem Teilchen-Welle Dualismus unterliegen.

- Benennen und erklären Sie knapp je ein Experiment, das den Teilchen- bzw. Wellencharakter einer elektromagnetischen Welle bzw. eines Elektrons zum Vorschein bringt.
- Welche drei Eigenschaften charakterisieren das Verhalten von Quantenobjekten? Wieso kann das Bohrsche Atommodell dem nicht Rechnung tragen?

Aufgabe 2 *Zur Quantenmechanik des H-Atoms*

Die Gesetze der klassischen Mechanik beschreiben nicht das Verhalten atomarer Objekte, stattdessen gilt die Quantenmechanik.

- Benennen sie die zwei Korrespondenzprinzipien.
- Die Dynamik des im H-Atom gebundenen Elektrons wird durch die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung beschrieben. Leiten Sie diese Gleichung aus der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung ab und benennen Sie deren Bestandteile.
- Die Lösung der in a) hergeleiteten stationären Schrödinger Gleichung läßt sich schreiben als $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, wobei $R(r)$, $\Theta(\theta)$ und $\Phi(\phi)$ gewöhnliche Differentialgleichungen erfüllen. Wie hängen $R(r)$, $\Theta(\theta)$ und $\Phi(\phi)$ von den Quantenzahlen n, l, m_l ab? Welche Namen, Bedeutung und Wertebereich haben die Quantenzahlen?

Aufgabe 3 *Komplexe Atome*

Grundlegend für das Verständnis komplexer Atome ist der Elektroneneigendrehimpuls (Elektronenspin) und das Pauli Ausschlußprinzip.

- Welche Experimente legen die Existenz eines Elektronenspins nahe? Erläutern Sie knapp.
- Was versteht man unter dem Pauli Ausschlußprinzip? Wie kommt hier der Elektronenspin zum Tragen?

Die stationäre Schrödinger Gleichung für die Elektronenkonfiguration eines Mehrelektronenatoms lautet in Hartree Näherung (Spin der Elektronen der Einfachheit halber vernachlässigt)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i|} + e^2 \sum_{j \neq i} \frac{|\phi_j(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \phi_i(\vec{r}_i) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}_i).$$

- Erläutern Sie die Bestandteile der Gleichung. Was ist z.B. die Funktion $\phi_i(\vec{r}_i)$? Was legt den Wertebereich der Summe über j fest?
- Wie ergibt sich die Gesamtwellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ aus den Lösungen der Hartree Gleichung?
- Wieso sind für festes n Orbitale mit $l > 0$ schwächer gebunden als Orbitale mit $l = 0$?
- Wie hängt das Periodensystem der Elemente mit der Elektronenstruktur komplexer Atome zusammen?

Aufgabe 4 *Moleküle*

Das einfachste molekulare System ist das H_2^+ -Ion. Das nächstschwierigere wäre das H_2 -Molekül.

- a) Geben Sie die Schrödinger Gleichung für das Elektron im H_2^+ -Ion an.
- b) Diskutieren Sie das Verhalten der Lösung für sehr große Kernabstände und für den Grenzfall verschwindender Kernabstand.
- c) Gegeben zwei Atomorbitale ϕ_a und ϕ_b . Konstruieren Sie einen bindenden bzw. einen antibindenden Zustand?
- d) Diskutieren sie qualitativ die Gesamtenergie des H_2^+ -Ions als Funktion des Kernabstandes. Welche Beiträge zur Gesamtenergie gilt es zu berücksichtigen.

Moleküle besitzen eine Vielzahl von Anregungszuständen. Auch dazu kann man Fragen stellen.

- a) Zeichnen Sie qualitativ ein Bild, das die potentielle Energie des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes eines diatomaren Moleküls als Funktion des Atomabstandes zeigt.
- b) Tragen Sie in das Bild Rotations- und Schwingungsniveaus ein.
- c) Welche Auswahlregeln gelten für Übergänge zwischen den Energieniveaus?
- d) Erläutern Sie das Franck-Condon Prinzip?
- e) Wie unterscheidet sich Fluoreszenz von Phosphoreszenz?