4 Quantentheorie der Atome

4.1 Lösung der Schrödinger-Gleichung für den Wasserstoff

Unzulänglichkeiten des Bohrschen Modells:

- klassisches Bild der Elektronen als Teilchen
- feste Bahnen und scharfe Energien und Impulse des Elektrons, im Widerspruch zur Unschärferelation
- ad hoc Postulate
- versagt für komplizierte Atome $Z > 1$
- beschreibt selbst Linienspektren des Wasserstoffs nicht vollständig

Wir benötigen eine quantenmechanische Beschreibung der Atome unter Berücksichtigung der Wellennatur der Elektronen

$\Longrightarrow$ **Schrödinger-Gleichung**

- beinhaltet die Quantisierung der Energieniveaus
- liefert zusammen mit dem Pauli-Prinzip (siehe unten) den Schlüssel für das Verständnis des Atomaufbaus und des Periodensystems
- allerdings ist das Vielkörperproblem für $Z > 1$ nicht exakt lösbar

Stationäre Schrödinger-Gleichung für den Wasserstoff:

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\Psi(\vec{r}) + [E - V(\vec{r})]\Psi(\vec{r}) = 0 \qquad V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \text{ (Coulomb)}}$$

Das Potential hängt nur vom Abstand $r = |\vec{r}|$ ab (kugelsymmetrisches Potential), deshalb führen wir Kugelkoordinaten ein:

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi \quad y = r\sin\vartheta\sin\varphi \quad z = r\cos\vartheta$$
$$\Psi = \Psi(r,\vartheta,\varphi) \quad \vartheta : \text{Polarwinkel} \quad \varphi : \text{Azimuthalwinkel}$$

Der Nullpunkt des Koordinatensystems liegt im Schwerpunkt des Systems Kern-Elektron. Wegen $m_K \gg m_e$ liegt dieser sehr nah am Kern. Die genauere Rechnung erfordert wieder Ersetzung der Elektronenmasse durch die reduzierte Masse.

Die Lösung dieser Gleichung wird in Büchern vorgeführt (z.B. Otter-Honecker, Demtröder oder Rohlf). Wir wollen hier nur das Ergebnis diskutieren.
Auf Grund des kugelsymmetrischen Potentials kann man folgenden Lösungsansatz machen:

$$\boxed{\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\cdot\phi(\varphi)\cdot\Theta(\vartheta)}$$

Bei der Separation der Differentialgleichungen treten Separationskonstanten auf, die wir mit $l(l+1)$ und m_l bezeichnen.

Beispiel Radialgleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\frac{R}{r} + \left[E - V(r) - \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}}_{\text{Rotationsenergie } E_{rot} = \frac{L^2}{2I}}\right]\frac{R}{r} = 0$$

Mit $I = m_e r^2$ für das Trägheitsmoment erhält man

$\boxed{L^2 = l(l+1)\hbar^2}$ Drehimpuls (vergl. Bohr: $L^2 = n^2\hbar^2$ für eine angenommene Kreisbahn)

Die Größe l ist eine positive ganze Zahl, die von $0, 1, \ldots, (n-1)$ läuft und n ist die Quantenzahl, die mit der Gesamtenergie der Bahn verknüpft ist, wie im Bohrschen Atommodell:

Azimuthalgleichung:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \phi^2} + m_l^2 \phi = 0 \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l \quad \text{Wellenfunktion muss periodisch sein in } \varphi$$

Nach diesen Vorbemerkungen ist es plausibel, dass die Lösungen der Schrödinger-Gleichung, d.h. die möglichen Wellenfunktionen Ψ, von den drei Quantenzahlen n, l, m_l abhängen:

$$\boxed{\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \Psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)}$$

- Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \ldots \infty$
  gibt für wasserstoffähnliche Atome die Energie des Elektrons an, wie im Bohrschen Modell:
  $E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 \frac{1}{n^2}$
  Bei Atomen mit mehreren Elektronen ist das nur eine Näherung.

- Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, 3, \ldots, n-1$
  bestimmt den Drehimpuls des Elektrons auf seiner Bahn
  (genauer: der zugeordneten Wellenfunktion)

- Magnetische Quantenzahl $m_l = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$
  gibt die Komponente des Drehimpulses entlang einer äußeren Achse an, z.B. in Richtung eines äußeren Magnetfeldes.

Diese Quantenzahlen charakterisieren die Bahn (Wellenfunktion) eines Elektrons im Atom (gilt auch für $Z > 1$).

Wieviele Zustände gibt es zu jeder Hauptquantenzahl n?

$$\begin{array}{lllllll} l & = & 0, & 1, & 2, & \ldots, & (n-1) \\ m_l & = & 0, & -1, 0, +1, & -2, -1, 0, +1, +2, & \ldots, & -(n-1), \ldots, -1, 0, +1, \ldots, +(n-1) \end{array}$$

d.h. $2l+1$ Zustände pro l-Wert und damit insgesamt $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ Zustände für jeden Energiewert E_n (Entartung).

Wie sehen die Funktionen $\Psi_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)$ aus?
Für $n \leq 3$ und der Abkürzung $a_0 = r_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2 m_e}$ lauten sie:

Tabelle 5.2. Die normierten vollständigen Eigenfunktionen eines Elektrons im Coulombpotential $V(r) = -Z \cdot e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$

n l m	Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r,\vartheta,\varphi)$
1 0 0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2 0 0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2 1 0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}\cos\vartheta$
2 1 ±1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$
3 0 0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(27-18\frac{Zr}{a_0}+2\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3 1 0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0}\cos\vartheta$
3 1 ±1	$\frac{1}{\sqrt{81}\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0}\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$
3 2 0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0}(3\cos^2\vartheta-1)$
3 2 ±1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0}\sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$
3 2 ±2	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0}\sin^2\vartheta\, e^{\pm 2i\varphi}$

Graphische Darstellung des Radialteils $R = R_{n,l}(r)$ (für $Z = 1$):

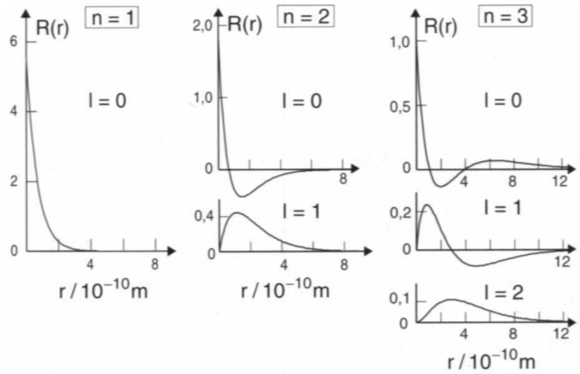


Abb. 5.3. Die Radialfunktionen $R_{n,l}(r)$ des Wasserstoffatoms für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2, 3$. Die Ordinate ist in Einheiten von $10^{-8}\,\mathrm{m}^{-3/2}$ aufgetragen

NB: Die Lösungen $\Psi_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)$ sind Produkte von Laguerre-Polynomen $R_{n,l}(r)$ und Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta,\varphi)$.

Erstaunlicherweise hängt für ein Ein-Elektronensysteme die Energie <u>nicht</u> vom Drehimpuls ab, d.h. nur von n und nicht von l. Das gilt allgemein für Potentiale der Form $V \propto \frac{1}{r}$.
Für $n = 1$ ist der Bahndrehimpuls Null, d.h. das Elektron kreist nicht um den Kern (radialsymmetrische Aufenthaltswahrscheinlichkeit).
Für $n = 1$ ist das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei $r = r_B$. Die Bahn des Elektrons ist aber diffus!
Beweis: Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Volumen dV:

$$|\Psi|^2 dV = |\Psi|^2 dx dy dz = |\Psi|^2 r^2 \sin\vartheta dr d\vartheta d\varphi \qquad \text{(Kugelkoordinaten)}$$

Da $\Psi = \Psi(r)$ können wir über ϑ und φ integrieren

$$P(r)dr = |\Psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{1}{\pi r_B^3} e^{-\frac{2r}{r_B}} 4\pi r^2 dr = \frac{4}{r_B^3} r^2 e^{-\frac{2r}{r_B}} dr$$

$$\frac{d}{dr}P(r) = \frac{4}{r_B^3}\left[2r - \frac{2r^2}{r_B}\right] e^{-\frac{2r}{r_B}} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \text{Maximum bei } r = r_B$$

Graphische Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi|^2$ des Elektrons im Wasserstoffatom:

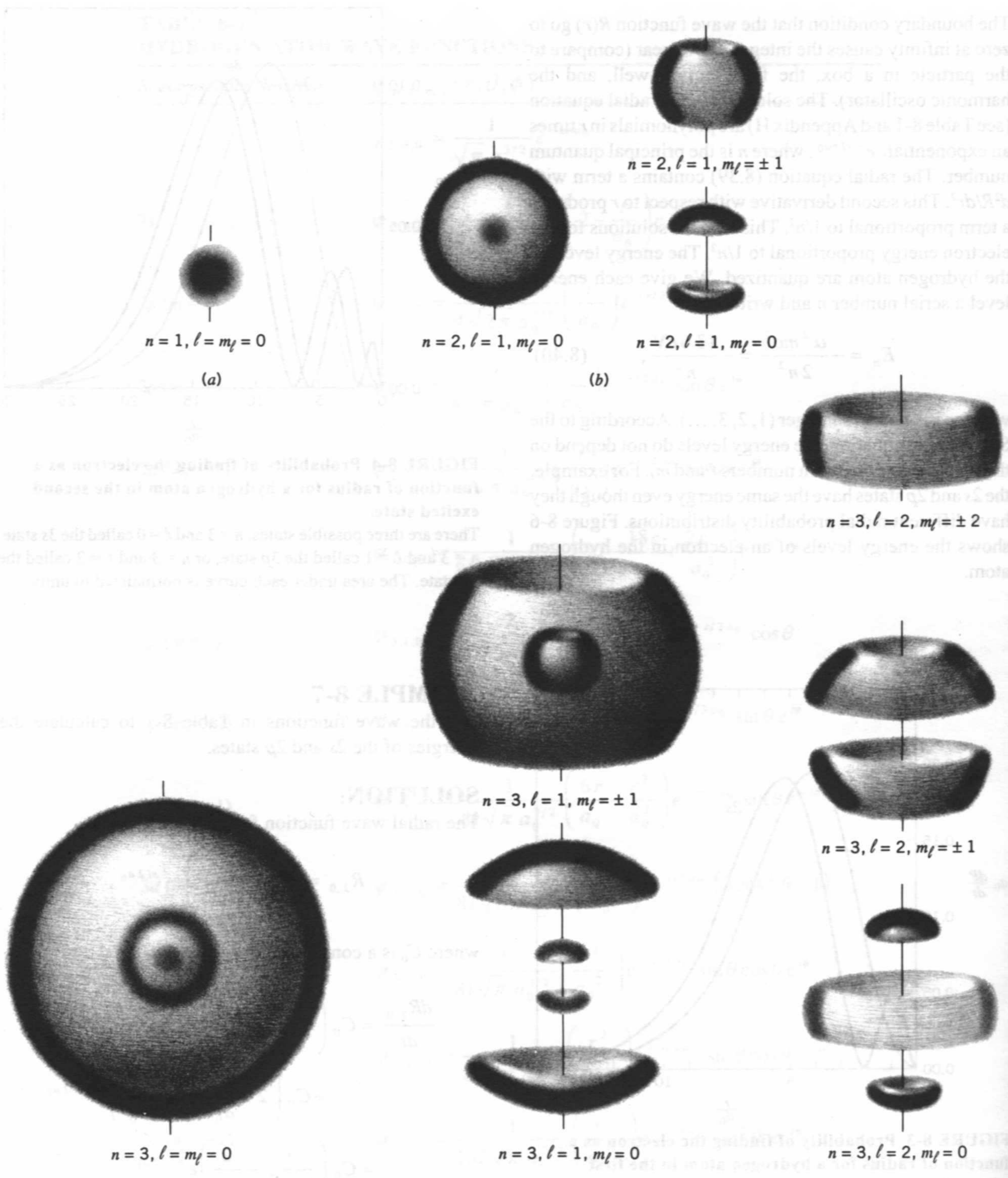


FIGURE 8-5 Sketches of $|\psi|^2$ for the hydrogen atom in three dimensions: (*a*) the $n = 1$ state, (*b*) the $n = 2$ states, and (*c*) the $n = 3$ states. After R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, Wiley (copyright © 1985).

Die Quantenzahlen l und m_l werden auch häufig mit lateinischen bzw. griechischen Buchstaben bezeichnet ($\rightarrow$ Periodensystem)

$l = 0$	s sharp	$\lvert m \rvert = 0$	σ
$l = 1$	p principel	$\lvert m \rvert = 1$	π
$l = 2$	d diffuse	$\lvert m \rvert = 2$	δ
$l = 3$	f fundamental	$\lvert m \rvert = 3$	φ
$l = 4, 5, \ldots$	g, h,...	$\lvert m \rvert = 4$	γ

(Namen stammen aus der Spektroskopie)

Darstellung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms:

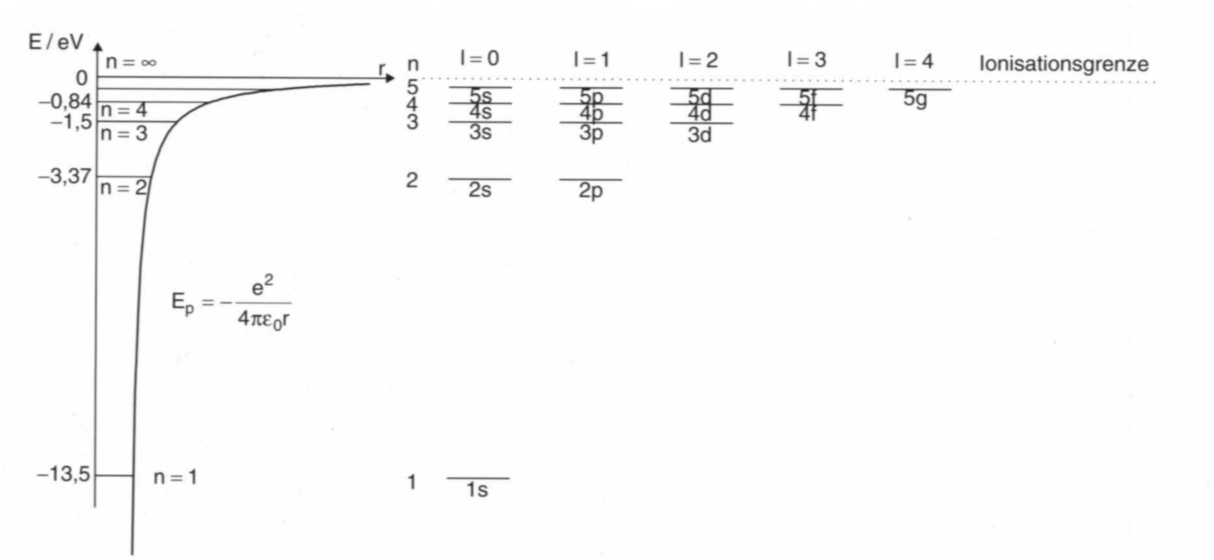


Abb. 5.5. Termschema des H-Atoms entsprechend den Energiewerten in (5.18). Die Energieskala ist maßstabsgetreu

4.2 Drehimpulse in der Quantenmechanik

Aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung für das H-Atom finden wir, dass der Betrag des Bahndrehimpulses nur folgende Werte annehmen kann:

$$\boxed{L^2 = l(l+1)\hbar^2 \qquad \text{oder} \qquad |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar} \qquad l = 0, 1, \ldots, n-1$$

Diese Quantisierung des Drehimpulses gilt nicht nur für das H-Atom, sondern allgemein für jeden Bahndrehimpuls in der Quantenmechanik!

Damit ist auch die Rotationsenergie quantisiert

$$E_{rot} = \frac{1}{2}\frac{L^2}{I} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} \qquad \text{I: Trägheitsmoment}$$

Dies gilt natürlich auch allgemein und nicht nur für den Wasserstoff sondern auch für andere Atome und Moleküle.

Wir wollen jetzt die Komponente des Drehimpulses in einer beliebigen Richtung betrachten. Dazu legen wir das Koordinatensystem so, dass diese, jetzt ausgezeichnete Richtung, der z-Achse entspricht.
Wie erhält man den Drehimpuls $\vec{L}$ aus der Wellenfunktion?
Den Transversalimpuls $\vec{p}$ erhalten wir durch Anwendung der Operation
$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}} = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$ (Impulsoperator $\hat{p}$)
auf die Wellenfunktion: $\hat{p}\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}} = p\Psi$

Für den Drehimpuls gilt $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$
Ganz analog definieren den Drehimpulsoperator $\hat{L} = -i\hbar\vec{r} \times \frac{\partial}{\partial\vec{r}}$. Das Betragsquadrat des Drehimpulses, $\vec{L}^2 = L^2$, erhalten wir durch zweimalige Anwendung des Drehimpulsoperators auf die Wellenfunktion: $\hat{L}^2\Psi = \left(-i\hbar\vec{r} \times \frac{\partial}{\partial\vec{r}}\right)^2 \Psi = l(l+1)\hbar^2\Psi$.

Demnach ergibt sich die z-Komponente des Drehimpulses $L_z = xp_y - yp_x$ durch Anwendung des Operators $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$. Nach Einführung von Polarkoordinaten lässt sich dieser Operator einfacher schreiben als

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad \text{also} \qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi = L_z\Psi$$

Das vergleichen wir mit der Azimuthalgleichung, die aus der Separation der Schrödinger-Gleichung entstanden ist:

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi + m_l^2 = 0$$

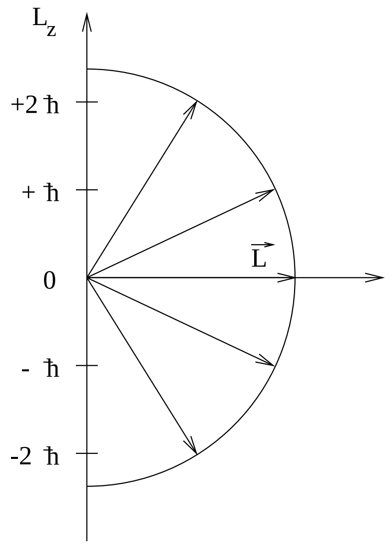
Offenbar gibt also die magnetische Quantenzahl m_l die Komponente des Drehimpulses in z-Richtung an:

$$\boxed{L_z = m_l\hbar} \qquad m_l = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$$

Die z-Komponente des Drehimpulses kann also nur ganz bestimmte Werte annehmen. Auch das gilt ganz allgemein für alle Drehimpulse in der Quantenmechanik.

Beispiel für $l = 2$

$|\vec{L}| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$
Es sind nur 5 Einstellungen dieses Drehimpulses bezüglich der z-Achse möglich.
$L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$
Beachte, dass keine Parallelstellung des Drehimpulses zur z-Achse möglich ist, da L_z immer kleiner ist als L
$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar > m_l\hbar$



Welche Werte haben die x- und y-Komponenten des Drehimpulses?
Diese Komponenten sind unscharf und können nicht gemessen werden. Betrachten wir dazu noch mal den Drehimpuls in Komponentenschreibweise:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$$

Die gleichzeitige scharfe Messung von L_x, L_y, L_z würde bedeuten, dass die Orte x, y, z und die Impulse p_x, p_y, p_z gleichzeitig scharf gemessen werden. Das aber widerspricht der Heisenbergschen Unschärferelation! Wir können deshalb nur L^2 und L_z bestimmen, nicht aber L_x und L_y.
Mathematisch ausgedrückt: Die Lösungen der Schrödinger-Gleichungen sind Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ (mit den Eigenwerten $l(l+1)$ und m_l), nicht aber die Operatoren L_x und L_y.
NB: Man kann natürlich noch die Kombination $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$ messen!

Zusammenfassung Drehimpulse in der Quantenmechanik:

- Der Betrag des Bahndrehimpulses ist quantisiert und kann die Werte annehmen
  $\boxed{L^2 = l(l+1)\hbar^2, \qquad l = 0, 1, 2, \ldots}$
- Die Komponente des Drehimpulses entlang einer Achse, üblicherweise legt man die z-Achse des Koordinatensystems so, hat scharf definierte quantisierte Werte
  $\boxed{L_z = m_l\hbar, \qquad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l}$
- Diese Quantisierungsachse wird durch die Versuchsbedingungen vorgegeben, z.B. äußeres Magnetfeld. Die anderen Komponenten des Drehimpulsvektors sind nicht messbar.
- Auch in der Quantenmechanik gilt die Erhaltung des Drehimpulses. Regeln für die Addition von Drehimpulsen werden später besprochen.

4.3 Magnetisches Moment

Klassische Elektrodynamik:
Ein Kreisstrom I bildet einen magnetischen Dipol mit dem magnetischen Dipolmoment

$\vec{\mu} = I \cdot A \cdot \vec{n}$

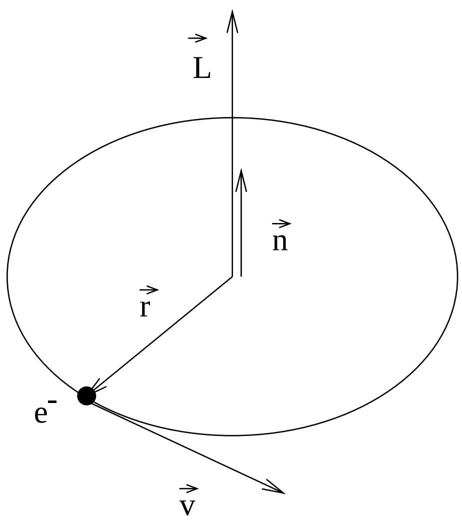
A: Kreisfläche
$\vec{n}$: Einheitsvektor senkrecht zu A

Für das Drehmoment $\vec{\tau}$ und die potentielle Energie V dieses Dipols in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ gilt:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \qquad V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Bohrsches Atommodell:
Wie groß ist das magnetische Moment des Elektrons auf seiner Kreisbahn um den Kern?
Kreisstrom $I = -e\frac{v}{2\pi r} = -e\frac{\omega}{2\pi}$
(Ladung × Umlauffrequenz)
mit $A = \pi r^2$ erhält man also
$\vec{\mu} = -e\frac{\omega}{2\pi}\pi r^2 \vec{n} = -\frac{e\omega r^2}{2}\vec{n}$
und mit dem Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \omega r^2 \vec{n}$ können wir schreiben

$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}}$$



Diese Relation, die wir aus rein klassischen Betrachtungen erhalten haben, gilt nun wieder allgemein in der Quantenmechanik. Wie wir gesehen haben, ist in der Quantentheorie der Atome der Bahndrehimpuls eine wohldefinierte, messbare Größe, im Gegensatz zum Bahnradius oder der Kreisfrequenz!
Da das Elektron negativ geladen ist, sind $\vec{\mu}$ und $\vec{L}$ antiparallel.

Wie der Drehimpuls ist natürlich auch das magnetische Moment $\vec{\mu}$ quantisiert. Für den Betrag gilt:

$$|\vec{\mu}| = \frac{e}{2m_e}\sqrt{l(l+1)}\hbar$$

Die Größe $\boxed{\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}} = 9,27 \cdot 10^{-24} Am^2$ heißt Bohrsches Magneton. Typische Magnetfelder in Experimenten sind von der Größenordnung $1Tesla = 1T = 1\frac{Vs}{m^2}$. Deshalb benutzt man für μ_B häufig die Einheit $\boxed{\mu_B = 0,58 \cdot 10^{-4}\frac{\text{eV}}{T}}$

Für die z-Komponente des magnetischen Moments gilt

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e}L_z = -\frac{e}{2m_e}m_l\hbar$$

m_e: Elektronenmasse
m_l: magn. Quantenzahl

$$\boxed{\mu_z = -m_l \mu_B} \qquad m_l = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$$

Die z-Komponente des magnetischen Moments ändert sich also in Einheiten des Bohrschen Magnetons. Jetzt wird auch der Name magnetische Quantenzahl verständlich.

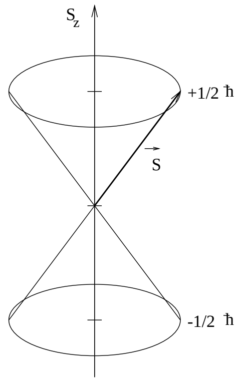
4.4 Der Spin des Elektrons

Die Schrödinger-Gleichung, so wie wir sie für das Wasserstoffatom aufgestellt und gelöst haben, kann nicht alle beobachteten Spektrallinien und deren Aufspaltung in äußeren Feldern, erklären. Dazu haben Gouldsmith und Uhlenbach 1925 den Eigendrehimpuls oder Spin S des Elektrons postuliert. Wie der Bahndrehimpuls ist der Spin quantisiert und es gelten die Relationen:

$$\boxed{|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \qquad s_z = m_s\hbar} \qquad \text{s: Spinquantenzahl}$$

Das Elektron hat einen halbzahligen Spin $s = \frac{1}{2}$ und m_s kann $2s + 1 = 2$ Werte annehmen $m_s = \pm\frac{1}{2}$

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$$
$$s_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$$



Man sagt, das Elektron ist ein Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen. Man hat viele andere Elementarteilchen gefunden, die einen Eigendrehimpuls besitzen. Sie werden eingeteilt in Teilchen mit halbzahligem Spin ($s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$), genannt Fermionen, und Teilchen mit ganzzahligem Spin ($s = 0, 1, 2, \ldots$), genannt Bosonen.

Zurück zum Elektron:
Das magnetische Moment, das durch den Eigendrehimpuls erzeugt wird, ist wiederum proportional zum Spin

$$\boxed{|\vec{\mu_s}| = g_s\mu_B\sqrt{s(s+1)}}$$

Allerdings findet man, dass der Faktor g_s (Landé-Faktor) den Wert

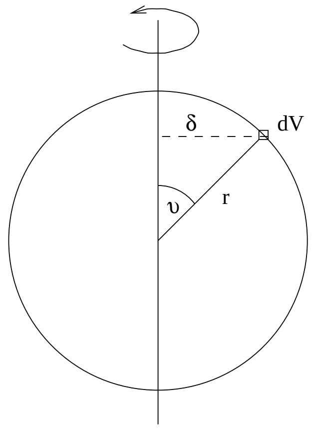
$$\boxed{g_s = 2,0023\ldots \approx 2}$$

hat im Gegensatz zum Bahndrehimpuls, für den ja gilt $|\vec{\mu}| = \mu_B\sqrt{l(l+1)}$.

Hier stoßen wir endgültig an die Grenzen der klassischen Physik. Der Versuch, den Spin des Elektrons und sein magnetisches Moment durch eine Analogie einer rotierenden, geladenen und homogenen Kugel zu erklären, versagt. Zunächst einmal haben wir keinerlei Anhaltspunkt für eine räumliche Ausdehnung des Elektrons, wir können es als punktförmig annehmen. Experimente der Hochenergiephysik schränken den Radius des Elektrons auf $r < 10^{-18}m$ ein. Weiter würde sich für eine homogene, geladene Kugel der Landé-Faktor zu 1 ergeben.

Wir betrachten die mit ω um eine Achse rotierende homogene Kugel (Massendichte ϱ_M, Ladungsdichte ϱ_Q).
Der Beitrag des Volumenelementes dV zum Drehimpuls ist
$dL = \omega \cdot \varrho_M \delta^2 dV$
und zum magnetischen Moment
$d\mu = \varrho_Q \cdot dV \cdot \frac{\omega}{2\pi}\pi\delta^2 = \frac{1}{2}\omega\varrho_Q\delta^2 dV$
Die Integration über
$\delta^2 dV = r^2 \sin^2\vartheta r^2 \sin\vartheta dr d\vartheta d\varphi = r^4 \sin^3\vartheta dr d\vartheta d\varphi$
liefert in beiden Fällen $\frac{2}{5}R^2V$ ($V = \frac{4}{3}\pi R^3$, Kugelvolumen), also

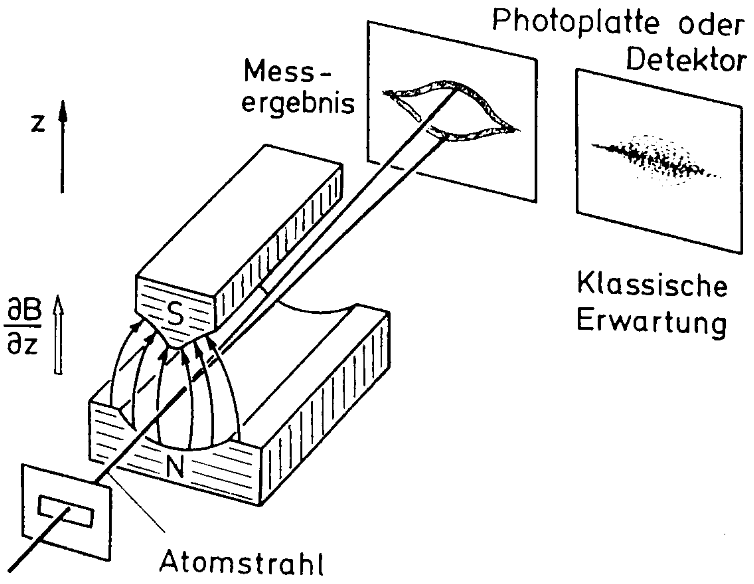
$$L = \omega\tfrac{2}{5}mR^2 \quad \text{und} \quad \mu = \tfrac{1}{2}\omega\tfrac{2}{5}QR^2 \quad \text{oder} \quad \tfrac{\mu}{L} = \tfrac{Q}{2m}$$



Der Spin ist wie Masse und Ladung eine intrinsische Eigenschaft der Teilchen

Der Spin des Elektrons und der Wert des Landé-Faktors findet seine Erklärung in der relativistischen Theorie, die von Dirac um 1928 aufgestellt wurde. Die Dirac-Gleichung, also die relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung, fordert auch die Existenz des Positrons, des Antiteilchens des Elektrons, bzw. die Existenz von Antimaterie allgemein.

Stern-Gerlach Experiment:
Der experimentelle Beweis für den Eigendrehimpuls des Elektrons, sowie seine Quantisierung, gelingt mit dem Experiment von Stern und Gerlach (1922). Ein Strahl aus Silberatomen wird durch ein stark inhomogenes Magnetfeld geleitet. Für Silberatome gilt, dass der Drehimpuls und damit das Magnetische Moment durch den Spin eines (des äußersten) Elektrons gegeben ist. Nach dem Durchlaufen des Feldes werden die Atome auf einer Photoplatte nachgewiesen. Das inhomogene Magnetfeld stellt ein Potential $V = -\vec{\mu_s}\vec{B}$ dar und damit erfahren die Atome eine Kraft $\vec{F} = -gradV$ mit einer Komponente $\boxed{F_z = (\vec{\mu_s})_z \cdot \frac{\partial B}{\partial z}}$.



Die klassische Erwartung wäre, das alle möglichen Orientierungen des magnetischen Momentes vorkommen, die Kraft auf die Atome deshalb alle Werte zwischen $-|\vec{\mu_s}|\frac{\partial B}{\partial z}$ und $+|\vec{\mu_s}|\frac{\partial B}{\partial z}$ annehmen kann und die Atome deshalb einen Fleck auf der Photoplatte bilden.

Hingegen sammeln sich die Atome in zwei Streifen, was bedeutet, dass die Komponente des magnetischen Momentes, die wir untersuchen und z-Komponente nennen, nur zwei Werte annimmt. Weil die Zahl der möglichen Werte aber $2s+1$ ist, folgt daraus, dass der Drehimpuls der Silberatome (und damit der Spin des Elektrons) $s = \frac{1}{2}$ ist.

Gesamtdrehimpuls des Wasserstoffatoms:
Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ ist die Vektorsumme aus Bahndrehimpuls $\vec{L}$ und Eigendrehimpuls $\vec{s}$ des Elektrons. Der Gesamtdrehimpuls bleibt erhalten, nicht notwendigerweise $\vec{L}$ oder $\vec{S}$.

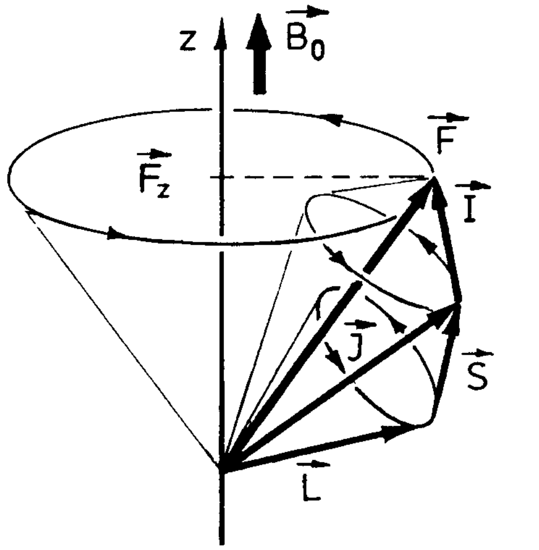
$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Der Gesamtdrehimpuls ist quantisiert, nach den Regeln, die wir schon für $\vec{L}$ oder $\vec{S}$ gefunden haben. Für den Betrag von $\vec{J}$ gilt:

$$|\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

Die möglichen Werte für j sind $j = |l-s|, |l-s|+1, \ldots, |l+s|$, wobei l und s natürlich die Beträge von Bahndrehimpuls und Spin angeben: $\vec{L} = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, $|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$.
Für die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses gilt:

$$J_z = m_j\hbar \qquad \text{mit} \qquad m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$



Die Vektoren $\vec{L}$ und $\vec{S}$ präzedieren so um den Vektor $\vec{J}$, dass sich ein fester Wert für den Betrag von $\vec{J}$ einstellt und eine feste z-Komponente J_z. Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ präzediert wie üblich um die z-Achse.

Beispiel für $l = 1$, d.h. p-Zustand des H-Atoms:
Die möglichen Werte für den Betrag des Gesamtdrehimpulses sind gegeben durch $j = l-s, l+s$ (wegen $s = \frac{1}{2}$), also $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$. Für die z-Komponente finden wir dann die Einstellmöglichkeiten:

$$j = \frac{1}{2}: \quad m_j = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$
$$j = \frac{3}{2}: \quad m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$$

Graphische Darstellung:

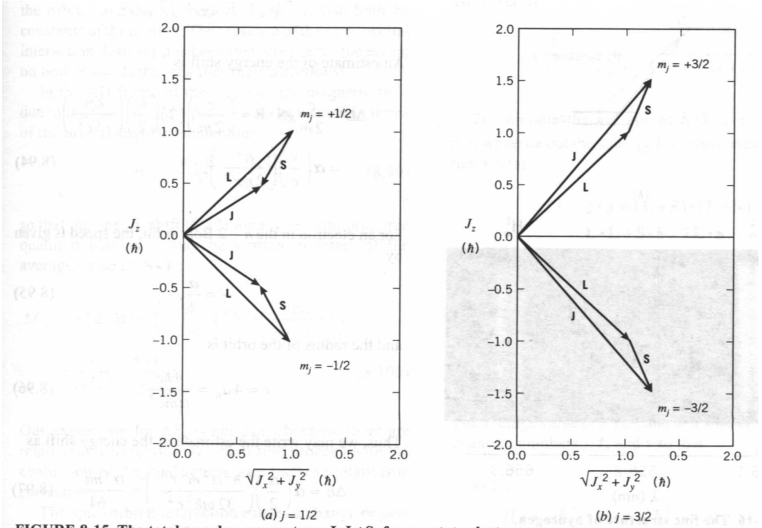


FIGURE 8-15 The total angular momentum, J=L+S, for a *p* state electron. The total angular momentum is the vector sum of the orbital (L) and the intrinsic (S) angular momentum. For a *p* state, $\ell = 1$, corresponding to an orbital angular momentum of $\sqrt{2}\hbar$. The electron spin quantum number is 1/2, corresponding to an intrinsic angular momentum of $\sqrt{3}\hbar/2$. The two possibilities for the total angular momentum quantum number are (*a*) $j = 1/2$ or (*b*) 3/2 corresponding to $J = \sqrt{3}\hbar/2$ or $\sqrt{15}\hbar/2$. The smaller value of *J* corresponds to L and S being approximately antialigned, and the larger value of *J* corresponds to L and S being approximately aligned.

$\vec{J} = \vec{J_1} + \vec{J_2}$
$|\vec{J}| = J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$
$j = |j_1 - j_2|,\ |j_1 - j_2| + 1,\ \ldots,\ |j_1 + j_2|$
3. Komponente $J_z = m_j \hbar$
$m_j = -j,\ -j+1,\ \ldots,\ j-1,\ j$

Die hier am Beispiel des H-Atoms besprochenen Regeln für die Addition von Drehimpulsen gelten allgemein für beliebige Drehimpulse in der Quantenmechanik, Bahndrehimpulse oder Spins $\vec{J_1}$ und $\vec{J_2}$!

4.5 Der Zeeman-Effekt

P. Zeeman entdeckte 1896, dass Spektrallinien von Atomen im Magnetfeld aufspalten. Wir verstehen diesen Effekt natürlich jetzt als Folge der Quantisierung des magnetischen Moments. Zustände mit unterschiedlicher magnetischer Quantenzahl m_l, die normalerweise die gleiche Energie haben (Entartung), erhalten eine zusätzliche potentielle Energie
$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B_z = +m_l \mu_B B_z$
Die Richtung des $\vec{B}$-Feldes, die ausgezeichnete Richtung, legen wir entlang der z-Achse. Jetzt ergeben sich für eine Bahndrehimpulsquantenzahl l insgesamt $2(l+1)$ Energiezustände. Die Differenz dieser Energieniveaus ist wegen $m_l = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$: $\boxed{\Delta E = \mu_B B}$.

Beispiel für $l = 1$ und $l = 2$:

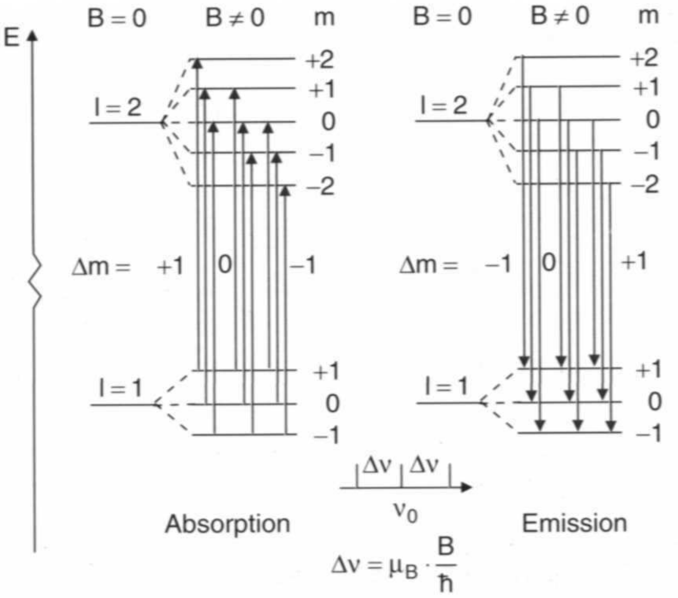


Abb. 5.12. Termschema für Zeeman-Übergänge mit $\Delta m = \pm 1, 0$ in Absorption und Emission

Der Energieunterschied ΔE ist unabhängig von den Quantenzahlen n, l, m_l, d.h. die Aufspaltung der Energieniveaus im $\vec{B}$-Feld wird zu äquidistanten Linien führen.

$\Delta\nu = \mu_B \frac{B}{h}$

Welche Übergänge sind möglich?

Dazu müssen wir berücksichtigen, dass das Photon einen Spin besitzt:

$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ mit $s = 1$.

Für die z-Komponente des Photospins gilt $m_s = \pm 1$. Der Wert $m_s = 0$ ist für das Photon nicht erlaubt. Der Grund liegt in der speziellen Relativitätstheorie: weil das Photon keine Masse hat, gibt es kein System in dem das Photon in Ruhe ist. Die Werte $m_s = -1$ und $m_s = +1$ entsprechen links- bzw. rechts-zirkular polarisierbarem Licht.

Die Drehimpulserhaltung, die auch in der Quantenphysik gilt, führt dazu, dass nur bestimmte Änderungen der Quantenzahlen l und m_l erlaubt sind. Normalerweise erfolgen Übergänge durch elektrische Dipolstrahlung. Aufgrund des Spins des Photons gelten folgende Auswahlregeln für die erlaubten Übergänge bei Emission oder Absorbtion.

$$\Delta n \neq 0 \quad \Delta l = \pm 1 \quad \Delta m_l = 0 \quad \text{oder} \quad \Delta m_l = \pm 1$$

Da die Aufspaltung der Energiezustände ΔE überall gleich groß ist, beobachtet man im Magnetfeld die Aufspaltung in drei Linien

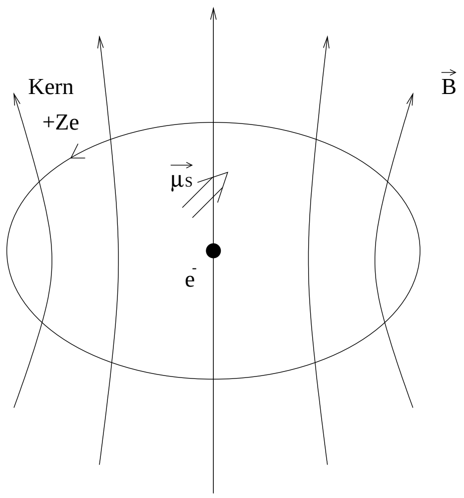
$$\nu_1 = \nu_0 - \frac{\mu_B B}{h}$$
$$\nu_2 = \nu_0 \qquad \nu_0\text{: Frequenz der Linie ohne Magnetfeld}$$
$$\nu_3 = \nu_0 + \frac{\mu_B B}{h}$$

Wir haben hier den normalen Zeeman-Effekt besprochen und den Spin und das magnetische Moment des Elektrons nicht berücksichtigt. Das ist näherungsweise richtig für Atome, bei denen sich der Spin der Elektronen zu Null addiert, z.B. bei 2 Elektronen in der äußersten Schale, bei denen der Spin entgegengesetzt steht $\uparrow\downarrow$.
Ist dies nicht der Fall, so tritt der anomale Zeeman-Effekt auf, der eine komplizierte Aufspaltung der Linien zeigt.

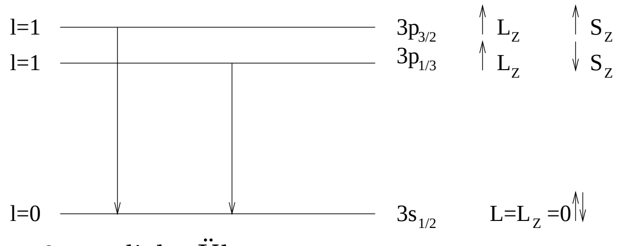
4.6 Spin-Bahn-Kopplung (Feinstruktur)

Bereits ohne Anlegen eines äußeren Magnetfeldes kann man bei genauem Hinsehen eine Aufspaltung der Linien beobachten, die sogenannte Feinstruktur, für $l > 0$. Der Grund dafür ist die Wechselwirkung des magnetischen Moments durch den Elektronenspinn mit dem Magnetfeld, das durch die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt wird.

Wir können uns das „halbklassisch“ vorstellen, indem wir uns in das Ruhesystem des Elektrons setzen. Der Kern mit der Ladung $+Ze$ „umkreist“ das Elektron und erzeugt ein Magnetfeld am Ort des Elektrons. Die Energie hängt nun wieder davon ab, ob die z-Komponente des Elektronenspins (bzw. des magnetischen Moments) parallel oder antiparallel zu diesem $\vec{B}$-Feld steht. Die Energieaufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung hängt also von Betrag und Orientierung von $\vec{L}$ und $\vec{s}$ ab, d.h. vom Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$.



Beispiel: Doppellinie des gelben Natriumlichtes:



Im Zustand $l = 0$ gibt es keine resultierende Kreisbewegung des Elektrons und daher kein Magnetfeld, durch das das Energieniveau aufgespalten wird.

$\Rightarrow$ 2 mögliche Übergänge

Die Feinstrukturaufspaltung ist proportional zu α^2, daher der Name Feinstrukturkonstante.

Hyperfeinstruktur: Auch das Proton besitzt einen Spin ($s = \frac{1}{2}$). Die Wechselwirkung mit dem Spin des Elektrons führt zu einer Aufspaltung des Grundzustandes des H-Atoms. Der Übergang zwischen beiden Zuständen ($\lambda = 21cm$) wird zum Nachweis für Wasserstoff im Weltall benutzt!

4.7 Das Periodensystem der Elemente

Atome mit mehr als einem Elektron sind wesentlich komplizierter als das Wasserstoffatom. Der Grund ist, dass die Elektronen nicht nur mit dem Kern, sondern auch untereinander wechselwirken. Im Gegensatz zur Beschreibung des Sonnensystems, bei der wir in guter Näherung die Masse der Planeten gegenüber der Sonne vernachlässigen dürfen, ist hier die Summe der Elektronenladungen gleich der Kernladung.
Trotzdem kann man näherungsweise die Elektronen durch Wellenfunktionen beschreiben, die denen des H-Atoms sehr ähnlich sind. Das für uns wichtige Resultat ist, dass diese Wellenfunktionen durch die gleichen <u>4 Quantenzahlen</u> charakterisiert sind. Zusätzlich zu unserem Resultat aus der Schrödinger-Gleichung (Kap. 4.1) müssen wir noch die Einstellung des Elektronspins m_s bezüglich einer vorgewählten Achse berücksichtigen:

$$\boxed{n, l, m_l, m_s}$$

Die zu klärende Frage lautet nun: Welche Werte nehmen diese Quantenzahlen für die Elektronen eines Atoms im Grundzustand an?
Die Antwort liegt im Pauli-Prinzip:

Ein atomarer Zustand kann höchstens ein Elektron aufnehmen. Zwei Elektronen in einem Atom können nicht in allen Quantenzahlen n, l, m_l, m_s übereinstimmen.

Das Pauli-Prinzip ist die Konsequenz eines quantenmechanischen Phänomens, das mit der Symmetrie der Wellenfunktionen von Elektronen zusammenhängt. Betrachten wir die Wellenfunktion für ein System von 2 Elektronen, z.B. das Helium-Atom:

$\Psi(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ $\quad$ $\vec{r_1}, \vec{r_2}$ sind die Ortsvektoren der beiden Elektronen

Die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist dann gegeben durch $\frac{dP}{dV} = |\Psi(\vec{r_1}, \vec{r_2})|^2$. Die beiden Elektronen sind <u>identisch</u> und <u>ununterscheidbar</u>. Deshalb ändert sich $\frac{dP}{dV}$ nicht, wenn man die beiden Elektronen vertauscht, also

$$|\Psi(\vec{r_1}, \vec{r_2})|^2 = |\Psi(\vec{r_2}, \vec{r_1})|^2$$

Bezüglich des Austausches der beiden Teilchen haben wir also zwei Möglichkeiten für die Wellenfunktion:
symmetrisch: $\Psi_S(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = +\Psi_S(\vec{r_2}, \vec{r_1})$
asymmetrisch: $\Psi_A(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = -\Psi_A(\vec{r_2}, \vec{r_1})$
Diese Lösungen setzen sich wie folgt aus den einzelnen Wellenfunktionen der beiden Elektronen $\Psi_a(\vec{r_1}), \Psi_b(\vec{r_2})$ zusammen:

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_a(\vec{r_1})\Psi_b(\vec{r_2}) + \Psi_b(\vec{r_1})\Psi_a(\vec{r_2})]$$
$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_a(\vec{r_1})\Psi_b(\vec{r_2}) - \Psi_b(\vec{r_1})\Psi_a(\vec{r_2})]$$

a und b bezeichen hier die beiden Sätze der vier Quantenzahlen n, l, m_l, m_s, die die Wellenfunktion der beiden Elektronen charakterisieren. Der Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ dient zur Normierung.
Es gilt nun:

Zwei identische Bosonen (ganzzahliger Spin) haben eine symmetrische Wellenfunktion (Ψ_s) und zwei identische Fermionen (halbzahliger Spin) haben eine antisymmetrische Wellenfunktion (Ψ_A).

Aus diesem quantenmechanischem Prinzip, zusammen mit obigen Überlegungen, folgt nun das Pauli-Prinzip. Zwei Elektronen können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen, d.h. $a = b$, ohne dass die Gesamtwellenfunktion Ψ_A verschwindet.

Zurück zum Aufbau der Atome:
Das Pauli-Prinzip führt zu einer Schalenstruktur des Atomaufbaus. Die Energie der Zustände ist hauptsächlich durch die Quantenzahl n gegeben, durch Spin-Bahn-Kopplung und Wechselwirkungen der Elektronen auch durch l. Die verfügbare Zahl der Plätze für ein bestimmtes n, d.h. eine Schale, ist $2n^2$.

Elektronenschalen

n	Schale	max. Anz. von e	Konfiguration
1	K	2	$1s^2$
2	L	8	$2s^2 2p^6$
3	M	18	$3s^2 3p^6 3d^{10}$
4	N	32	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$

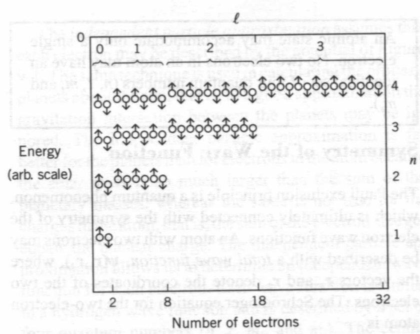
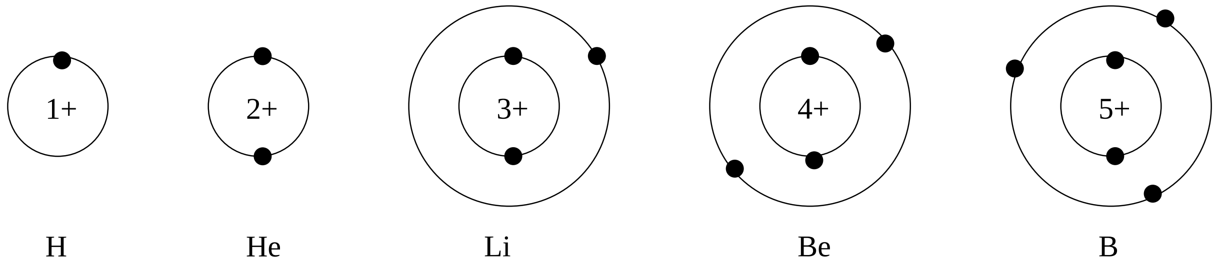
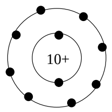


FIGURE 9-2 Pauli exclusion principle for an atom with a very large number of electrons ($Z >> 1$).
Each electron resides in the lowest energy state available and only one electron is allowed in each quantum state. The energy of each state is strongly dependent on the principle quantum number n and somewhat dependent on the orbital angular momentum quantum number ℓ.

Bildliche Darstellung:

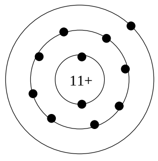


Achtung: Die Bahnen der Elektronen sind diffus! Diese Diagramme, sowie die Schalenstruktur überhaupt, sind natürlich so zu verstehen, dass es sich dabei um Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten handelt!



Ne

Die Besetzung der äußersten Schale bestimmt die chemischen Eigenschaften eines Atoms (Elements), z.B.: Neon hat wie Helium eine komplett besetzte, abgeschlossene Schale. Deshalb ähneln sich diese chemischen Elemente. Es sind reaktionsträge Edelgase.
Das Gegenteil ist z.B. beim Natrium der Fall. Dort ist wie beim Lithium nur ein Elektron auf der äußeren Schale. Dieses Elektron wird bei chemischen Reaktionen gerne abgegeben. Das Bestreben, die äußere Schale aufzufüllen erklärt das chemische Verhalten der Elemente und chemische Verbindungen wie Na^+Cl^-..



Na

Damit verstehen wir auch die Abhängigkeit des Atomvolumens und der Ionisationsenergie von der Kernladungszahl Z:

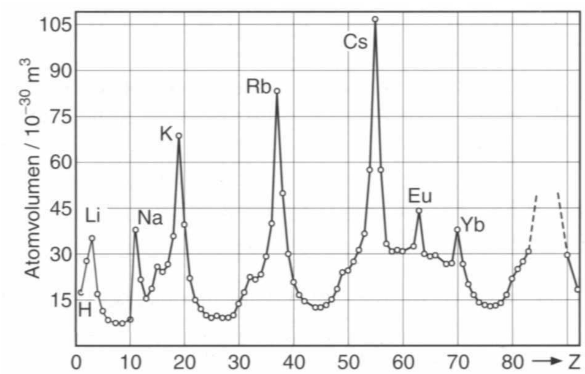


Abb. 6.16. Variation der Atomvolumina mit der Kernladungszahl Z

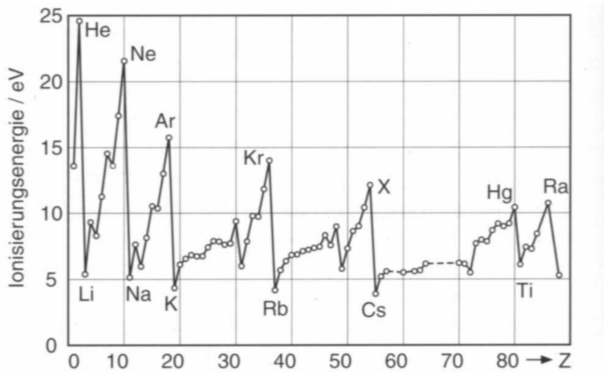


Abb. 6.17. Variation der Ionisierungsenergie mit der Kernladungszahl Z

Bei den Alkalimetallen (Li, Na, K...) wird mit dem Auffüllen neuer Schalen begonnen. Durch Hinzufügen eines Elektrons ($Z+1$) reduziert sich der Radius. Das kann man qualitativ dadurch verstehen, dass die Elektronen auf den inneren Bahnen die Kernladung abschirmen und deshalb die beiden Elektronen in der äußeren Schale eine effektive Kernladung von $+2e$ verspüren (Bohr: $r_n \propto \frac{1}{Z}$). Die Ionisationsenergie, d.h. die Energie die nötig ist, das äußerste Elektron eines Atoms zu entfernen, zeigt die gleiche Periodizität. Dieses Elektron ist bei den Alkalimetallen leicht zu entfernen, während die äußeren Elektronen den abgeschlossenen Schalen der Edelgase (He, Ne, Ar, ...) besonders fest gebunden sind.

In der Reihenfolge der Besetzung der Schalen, d.h. beim Aufbau des Periodensystems der Elemente, gibt es einige Unregelmäßigkeiten und andere Merkmale. Wir können hier nur auf einige Aspekte kurz eingehen.

1) Bei Argon ($Z = 18$) ist die dritte Schale (M-Schale) vollständig mit Elektronen im s- und p-Zustand gefüllt, d.h. für $l = 0$ und $l = 1$. Obwohl noch 10 Elektronen in die $3d$ Schale passen würden, also $l = 2$, beginnt beim nächsten Element Kalium (K) bereits das Besetzen der vierte Schale. Erst ab dem Scandium ($Z = 21$) werden die $3d$ Zustände aufgefüllt (Übergangselemente). Ähnliche Verhältnisse treten auf bei Besetzung der fünfte Schale (ab Rubidium) und den höheren. Offenbar ist es u.U. energetisch günstiger die nächste Schale mit s-Elektronen

zu besetzen als Elektronen mit hohem Drehimpuls in der gleichen Schale hinzuzufügen. Der umgekehrte Fall liegt z.B. bei Chrom und Kupfer vor, die sich ein Elektron aus der M-Schale zurückholen.

Elektronenkonfiguration der Elemente bis $Z = 54$:
(aus dem Buch von Otter und Honecker)

Atom Nr. Z	Element		Schalen K n=1 s	L n=2 s	L p	M n=3 s	M p	M d	N n=4 s	N p	N d	O n=5 s	O p	Grundzustand bei L-S-Kopplung	Ionisierungsenergie eV	
1	Wasserstoff	H	1											$^2S_{1/2}$	13,60	
2	Helium	He	2											$^1S_0$	24,58	
3	Lithium	Li	2	1										$^2S_{1/2}$	5,39	
4	Beryllium	Be	2	2										$^1S_0$	9,32	
5	Bor	B	2	2	1									$^2P_{1/2}$	8,30	
6	Kohlenstoff	C	2	2	2									$^3P_0$	11,26	
7	Stickstoff	N	2	2	3									$^4S_{3/2}$	14,54	
8	Sauerstoff	O	2	2	4									$^3P_2$	13,61	
9	Fluor	F	2	2	5									$^2P_{3/2}$	17,42	
10	Neon	Ne	2	2	6									$^1S_0$	21,56	
11	Natrium	Na	2	2	6	1								$^2S_{1/2}$	5,14	
12	Magnesium	Mg	2	2	6	2								$^1S_0$	7,64	
13	Aluminium	Al	2	2	6	2	1							$^2P_{1/2}$	5,98	
14	Silicium	Si	2	2	6	2	2							$^3P_0$	8,15	
15	Phosphor	P	2	2	6	2	3							$^4S_{3/2}$	10,55	
16	Schwefel	S	2	2	6	2	4							$^3P_2$	10,36	
17	Chlor	Cl	2	2	6	2	5							$^2P_{3/2}$	13,01	
18	Argon	A	2	2	6	2	6							$^1S_0$	15,76	
19	Kalium	K	2	2	6	2	6		1					$^2S_{1/2}$	4,34	
20	Calcium	Ca	2	2	6	2	6		2					$^1S_0$	6,11	
21	Scandium	Sc	2	2	6	2	6	1	2					$^2D_{3/2}$	6,56	Übergangselemente
22	Titan	Ti	2	2	6	2	6	2	2					$^3F_2$	6,83	
23	Vanadium	V	2	2	6	2	6	3	2					$^4F_{3/2}$	6,74	
24	Chrom	Cr	2	2	6	2	6	5	1					$^7S_3$	6,76	
25	Mangan	Mn	2	2	6	2	6	5	2					$^6S_{5/2}$	7,43	
26	Eisen	Fe	2	2	6	2	6	6	2					$^5D_4$	7,90	
27	Kobalt	Co	2	2	6	2	6	7	2					$^4F_{9/2}$	7,86	
28	Nickel	Ni	2	2	6	2	6	8	2					$^3F_4$	7,63	
29	Kupfer	Cu	2	2	6	2	6	10	1					$^2S_{1/2}$	7,72	
30	Zink	Zn	2	2	6	2	6	10	2					$^1S_0$	9,39	
31	Gallium	Ga	2	2	6	2	6	10	2	1				$^2P_{1/2}$	6,00	
32	Germanium	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2				$^3P_0$	7,88	
33	Arsen	As	2	2	6	2	6	10	2	3				$^4S_{3/2}$	9,81	
34	Selen	Se	2	2	6	2	6	10	2	4				$^3P_2$	9,75	
35	Brom	Br	2	2	6	2	6	10	2	5				$^2P_{3/2}$	11,84	
36	Krypton	Kr	2	2	6	2	6	10	2	6				$^1S_0$	14,00	
37	Rubidium	Rb	2	2	6	2	6	10	2	6		1		$^2S_{1/2}$	4,18	
38	Strontium	Sr	2	2	6	2	6	10	2	6		2		$^1S_0$	5,69	
39	Yttrium	Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1	2		$^2D_{3/2}$	6,38	Übergangselemente
40	Zirkon	Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2	2		$^3F_2$	6,84	
41	Niob	Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4	1		$^6D_{1/2}$	6,88	
42	Molybdän	Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5	1		$^7S_3$	7,13	
43	Technetium	Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	6	1		$^6D_{9/2}$	7,23	
44	Ruthenium	Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7	1		$^5F_5$	7,37	
45	Rhodium	Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8	1		$^4F_{9/2}$	7,46	
46	Palladium	Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10			$^1S_0$	8,33	
47	Silber	Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1		$^2S_{1/2}$	7,57	
48	Cadmium	Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2		$^1S_0$	8,99	
49	Indium	In	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	1	$^2P_{1/2}$	5,79	
50	Zinn	Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	$^3P_0$	7,33	
51	Antimon	Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	3	$^4S_{3/2}$	8,64	
52	Tellur	Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	4	$^3P_2$	9,01	
53	Jod	I	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	5	$^2P_{3/2}$	10,44	
54	Xenon	Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	6	$^1S_0$	12,13	

Fortsetzung der Elektronenkonfiguration für Elemente mit $Z > 54$:

Atom Nr. Z	Element		Schalen N n = 4 s	p	d	f	O n = 5 s	p	d	f	P n = 6 s	p	d	Q n = 7 s	Ionisierungsenergie eV	
55	Cäsium	Cs	2	6	10		2	6			1				3,89	
56	Barium	Ba	2	6	10		2	6			2				5,21	
57	Lanthan	La	2	6	10		2	6	1		2				5,61	Seltene Erden
58	Cer	Ce	2	6	10	2	2	6			2				5,6	
59	Praseodym	Pr	2	6	10	3	2	6			2				5,46	
60	Neodym	Nd	2	6	10	4	2	6			2				5,51	
61	Promethium	Pm	2	6	10	5	2	6			2					
62	Samarium	Sm	2	6	10	6	2	6			2				5,6	
63	Europium	Eu	2	6	10	7	2	6			2				5,67	
64	Gadolinium	Gd	2	6	10	7	2	6	1		2				6,16	
65	Terbium	Tb	2	6	10	9	2	6			2				5,98	
66	Dysprosium	Dy	2	6	10	10	2	6			2				6,8	
67	Holmium	Ho	2	6	10	11	2	6			2					
68	Erbium	Er	2	6	10	12	2	6			2				6,08	
69	Thulium	Tm	2	6	10	13	2	6			2				5,81	
70	Ytterbium	Yb	2	6	10	14	2	6			2				6,22	
71	Lutetium	Lu	2	6	10	14	2	6	1		2				6,15	Übergangselemente
72	Hafnium	Hf	2	6	10	14	2	6	2		2				5,5	
73	Tantal	Ta	2	6	10	14	2	6	3		2				7,7	
74	Wolfram	W	2	6	10	14	2	6	4		2				7,98	
75	Rhenium	Re	2	6	10	14	2	6	5		2				7,87	
76	Osmium	Os	2	6	10	14	2	6	6		2				8,7	
77	Iridium	Ir	2	6	10	14	2	6	9						9,2	
78	Platin	Pt	2	6	10	14	2	6	9		1				9,0	
79	Gold	Au	2	6	10	14	2	6	10		1				9,22	
80	Quecksilber	Hg	2	6	10	14	2	6	10		2				10,43	
81	Thallium	Tl	2	6	10	14	2	6	10		2	1			6,11	
82	Blei	Pb	2	6	10	14	2	6	10		2	2			7,42	
83	Wismuth	Bi	2	6	10	14	2	6	10		2	3			7,29	
84	Polonium	Po	2	6	10	14	2	6	10		2	4			8,43	
85	Astatin	At	2	6	10	14	2	6	10		2	5			9,5	
86	Radon	Rn	2	6	10	14	2	6	10		2	6			10,75	
87	Francium	Fr	2	6	10	14	2	6	10		2	6		1	4	
88	Radium	Ra	2	6	10	14	2	6	10		2	6		2	5,28	
89	Actinium	Ac	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1	2		Actiniden
90	Thorium	Th	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	2		
91	Protactinium	Pa	2	6	10	14	2	6	10	2	2	6	1	2		
92	Uran	U	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2		
93	Neptunium	Np	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2		
94	Plutonium	Pu	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6		2		
95	Americium	Am	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6		2		
96	Curium	Cm	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1	2		
97	Berkelium	Bk	2	6	10	14	2	6	10	8	2	6	1	2		
98	Californium	Cf	2	6	10	14	2	6	10	10	2	6		2		
99	Einsteinium	Es	2	6	10	14	2	6	10	11	2	6		2		
100	Fermium	Fm	2	6	10	14	2	6	10	12	2	6		2		
101	Mendelevium	Mv	2	6	10	14	2	6	10	13	2	6		2		
102	Nobelium	No	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6		2		
103	Lawrencium	Lw	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	1	2		
104																

2) Man beobachtet, dass es energetisch günstiger ist, den Spin in nicht abgeschlossenen Schalen parallel zu stellen. Man kann zeigen, dass diese Elektronen so im Mittel einen größeren Abstand haben. Das verringert die gegenseitige Coulombabstoßung und reduziert daher das Energieniveau.
Dies wird durch die Hundsche Regel ausgedrückt:
Im Grundzustand eines Atoms hat der Gesamtspin den maximalen Wert, der mit dem Pauli-Prinzip vereinbar ist.

Spinkonfigurationen der zehn leichtesten Elemente:

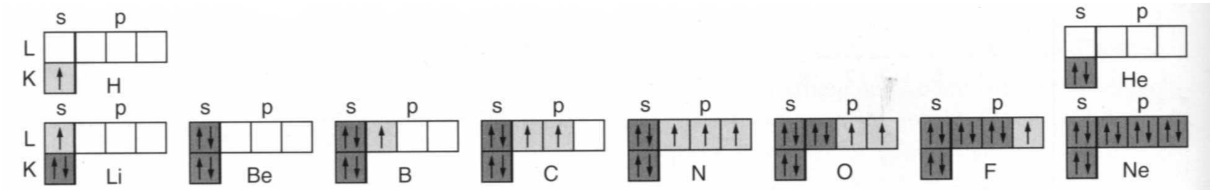
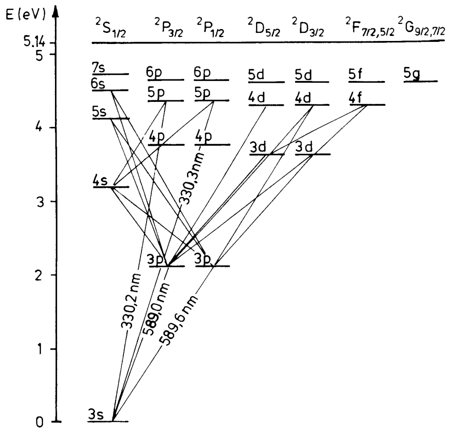


Abb. 6.14. Aufbau der Elektronenkonfigurationen für die Grundzustände der zehn leichtesten Elemente

3) Ende des Periodensystems: Das Periodensystem bricht ab, weil Atome mit großer Kernladungszahl (ab $Z > 92$) instabil sind. Sie zerfallen durch Aussendung von α-Strahlung oder durch Spaltung. Bis zum Element $Z = 105$ (Hahnium) sind die Elektronenkonfigurationen ermittelt. Die Elemente bis zur Ordnungszahl 109 sind zwar kernphysikalisch nachgewiesen, sie zerfallen aber so schnell, dass über ihre Elektronenhüllen wenig bekannt ist.

Zum Abschluss besprechen wir noch kurz das Termschema des Natrium-Atoms. Das Natrium hat abgeschlossene K- und L-Schalen und das elfte Elektron befindet sich im 3s-Zustand. Die zehn inneren Elektronen schirmen das Potential des Kerns ab und ihre Drehimpulse addieren sich zu Null, d.h. wir sprechen von einem wasserstoffähnlichen Atom. Dieser Atomrumpf ist aber ausgedehnt, deshalb ist die Entartung aufgehoben. Besonders s- und p-Zustände unterscheiden sich stark in der Energie (unterschiedliche mittlere Kernabstände!). Die s-Zustände zeigen keine Feinstrukturaufspaltung. Alle Zustände mit $l > 0$ sind gemäß $j = l \pm \frac{1}{2}$ aufgespalten.
Einige Übergänge für elektrische Dipolstrahlung sind auch eingezeichnet. Besonders intensiv sind die Übergänge $3p_{\frac{3}{2}} \rightarrow 3s_{\frac{1}{2}}$ und $3p_{\frac{1}{2}} \rightarrow 3s_{\frac{1}{2}}$, die die gelbe Natrium-Doppellinie verursachen.



Bemerkung zur Notation:
Die vollständige spektroskopische Termbezeichnung ist

$$n^{2s+1}L_J$$

Dabei steht n für die Hauptquantenzahl, s für den Gesamtspin der Elektronen $L = S, P, D, F, \ldots$ für den Bahndrehimpuls $(l + 0, 1, \ldots)$ und J für den Gesamtdrehimpuls.