

**Themenschwerpunkt A:**  
**Atom- und Molekülphysik**

**Aufgabe 1: Sauerstoffatom und -molekül****(20 Punkte)**

- a) In atomaren Mehrelektronensystemen koppeln die Bahndrehimpulsvektoren  $l_i$  und die Spinvektoren  $s_i$  der einzelnen Elektronen zum Gesamtdrehimpuls  $J$  des Elektronensystems (Spin-Bahn-Kopplung).  
Die Spin-Bahn-Kopplung im O-Atom wird als LS-Kopplung bezeichnet (Russell-Saunders-Kopplung). Geben Sie als Formel an, wie bei der LS-Kopplung der Vektor  $J$  aus den  $l_i$  und  $s_i$  entsteht.  
Beschreiben Sie ebenfalls als Formel die alternative Kopplungsform, welche bei sehr schweren Elementen vorkommt.  
Erläutern Sie, warum gerade die leichten Elemente, wie z. B. O, die LS-Kopplung zeigen. (4P)
- b) Die Notation für die Konfiguration der 2p-Elektronen im Grundzustand des O-Atoms lautet  $^3P_2$ . Geben Sie die physikalische Deutung des Buchstabens P sowie der beiden Zahlenwerte in dieser Notation an.  
Geben Sie die Hundschen Regeln an und zeigen Sie, dass diese für das O-Atom zur obigen Konfiguration führen. (5P)
- c) Bestimmen Sie die Bindungsenergie des äußeren Elektrons des  $O^{5+}$ -Ions nach dem Modell der Alkali-Atome unter der Annahme einer idealen Abschirmungswirkung durch die K-Schale. Erklären Sie anhand der radialen Ortsabhängigkeit des Potentials und der elektronischen Wellenfunktionen, warum tatsächlich generell in Elektronensystemen die Abschirmung nicht ideal ist und außerdem zur Aufhebung der Bahndrehimpulsentartung führt. (5P)
- d) Der elektronische Übergang zwischen dem 3s- und dem 3p-Zustand tritt im O-Emissionsspektrum auf, im optischen Absorptionsspektrum bei  $T = 300$  K hingegen nicht. Der Übergang zwischen 3s und 4s tritt in keinem Spektrum auf. Begründen Sie diese Beobachtungen. (2P)
- e) Bei der unmittelbaren Annäherung zweier Atome können durch den Überlapp ihrer Wellenfunktionen bindende und antibindende Orbitale entstehen, die die Art und Energie der resultierenden Molekülbindung bestimmen. Benennen Sie die Art der Bindung, welche zum  $O_2$ -Molekül führt und geben Sie die für diese Bindungsart charakteristische Größenordnung der Bindungsenergie an. (2P)
- f) Für das  $N_2$ -Molekül, dessen Atome jeweils ein Elektron weniger enthalten als die O-Atome, ist die Bindungsenergie wesentlich höher als für  $O_2$ . Begründen Sie diese Tatsache. Nutzen Sie hierbei den in Teilaufgabe e) beschriebenen Sachverhalt aus. (2P)