Pauli Prinzip

(Paulisches Ausschließungsprinzip, Pauli Verbot)

Mail: wido@uni-bremen.de

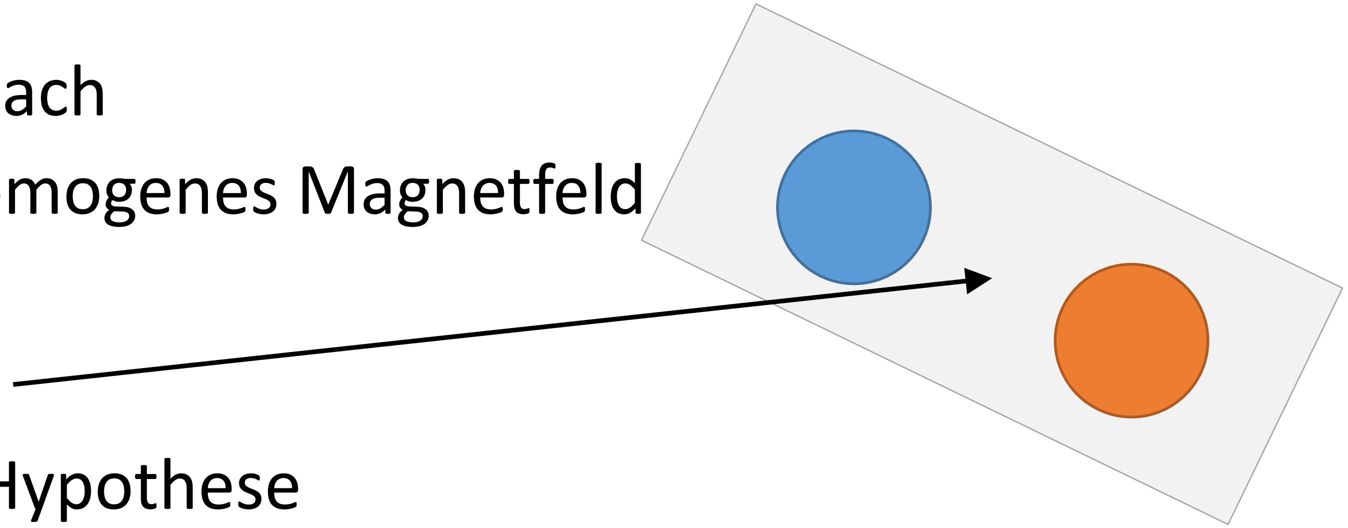
Wichtige Vorkenntnisse

- Lienienspektren für das H-Atom (Balmer Serie, …)
- Bohrsches Atommodell
- Quantenzahlen *n*, *l* und m_l
- Energiezustande für das H-Atom hängen nur von *n* ab
- Grundlagen der QM: Schrödinger Gleichung $\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi$
- Wellenfunktionen, Radiale Wahrscheinlichkeitsdichte (H-Atom)

Historische Entwicklung

1921: Otto Stern und Walter Gerlach

Atom Strahl durch nicht homogenes Magnetfeld



1925: Uhlenbeck und Goudsmit Hypothese

-mehr Elektronen Systeme nicht eine Spektrallinie sondern zwei dicht nebeneinander

- Elektronen haben eine innewohnende Eigenschaft (Elektronenspin)

1925: Pauli und sein Axiom der QM

Wie müssen e^- in mehr-Elektronensystemen angeordnet werden?

Für ein bestimmtes Orbital (z.B. 1s) gegeben sind n, l und m_l

Weitere **Spin**(orientierungs)**quantenzahl** m_s zwei mögliche Werte:

$m_s = \pm\frac{1}{2}$ (α und β Spin) (Spin up ↑ und Spin down ↓)

$\Rightarrow$ 2 e-/Orbital mit entgegengesetztem Spin

Für zwei Elektronen in einem Atom können nicht alle vier Quantenzahlen die gleichen Werte annehmen

Beispiel: Helium Atom

2 e^- mit Elektronenkonfiguration $1s^2$ ($n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$)

Was erfüllt das Pauli Prinzip?

	1	2	3	4
1s	$\boxed{\uparrow\uparrow}$	$\boxed{\downarrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\downarrow\uparrow}$
	Nein!	Nein!	Nein!	Nein!

Pauli Prinzip allgemeine Formulierung

Die Wellenfunktion muss antisymmetrisch bzgl. des Austausches zweier Fermionen (z.B. Elektronen) sein.

$$\Psi(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = -\Psi(\vec{x}_j, \vec{x}_i)$$

Permutationsopperator $\hat{\mathrm{P}}_{ij}$

$$\hat{\mathrm{P}}_{ij}\Psi(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \Psi(\vec{x}_j, \vec{x}_i) \qquad \hat{\mathrm{P}}_{ij}{}^2 = 1$$

Beispiel: He-Atom ($1s^2$)

$$\Psi_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \approx \Psi(\vec{x}_1) \cdot \Psi(\vec{x}_2) = \psi_{1s}\,(\vec{r}_1)\alpha_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2 \qquad \boxed{\uparrow\uparrow}$$

$$\Psi_2(\vec{x}_1, \vec{x}_1) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\beta_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\beta_2 \qquad \boxed{\downarrow\downarrow}$$

$$\Psi_3(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\alpha_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\beta_2 \qquad \boxed{\uparrow\downarrow}$$

$$\Psi_4(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\beta_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2 \qquad \boxed{\downarrow\uparrow}$$

Ist das Pauliprinzip erfüllt?

$$\Psi_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\alpha_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2 \qquad \boxed{\uparrow\uparrow}$$

$$\hat{\mathrm{P}}_{1,2}\Psi_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_1)\alpha_1 = \Psi_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \quad \text{nein!}$$

$$\Psi_2(\vec{x}_1, \vec{x}_1) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\beta_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\beta_2 \qquad \boxed{\downarrow\downarrow}$$

$$\Psi_3(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\alpha_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\beta_2 \qquad \boxed{\uparrow\downarrow}$$

$$\hat{\mathrm{P}}_{1,2}\Psi_3(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_1)\beta_1 = +\Psi_4(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \quad \text{nein!}$$

$$\Psi_4(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\beta_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2 \qquad \boxed{\downarrow\uparrow}$$

Wie erfüllt man das Pauli Prinzip?

$$\Psi \coloneqq \Psi_3 - \Psi_4 \approx \psi_{1s}(\vec{r}_1)\alpha_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\beta_2 - \psi_{1s}(\vec{r}_1)\beta_1 \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_2)\alpha_2$$

$$= \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2) \cdot (\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$$

$$\boldsymbol{\hat{P}_{1,2}\Psi} = \psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{1s}(\vec{r}_1) \cdot (\alpha_2\beta_1 - \beta_2\alpha_1)$$

$$= \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2) \cdot (-1) \cdot (-\alpha_2\beta_1 + \beta_2\alpha_1)$$

$$= (-1) \cdot \psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{1s}(\vec{r}_2) \cdot (\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$$

$$= (-1) \cdot \Psi = -\boldsymbol{\Psi}$$

Was haben wir heute gelernt?

Die Wellenfunktion muss antisymmetrisch bzgl. des Austausches zweier Fermionen (z.B. Elektronen) sein.

$$\Psi(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = -\Psi(\vec{x}_j, \vec{x}_i)$$

Was erfüllt das Pauli Prinzip?

$\boxed{\uparrow\uparrow}$	$\boxed{\downarrow\downarrow}$	$\boxed{\uparrow\downarrow}$	$\boxed{\downarrow\uparrow}$
Nein!	Nein!	Nein!	Nein!

„$\boxed{\uparrow\downarrow}$ - $\boxed{\downarrow\uparrow}$"

Ja!