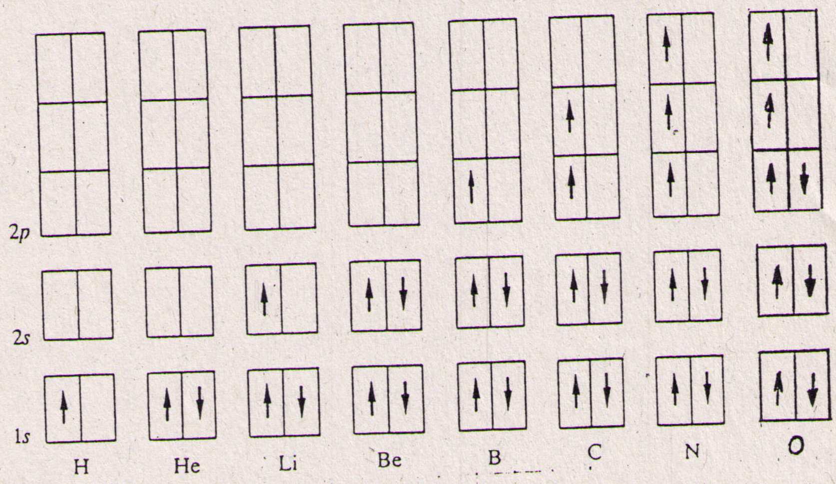
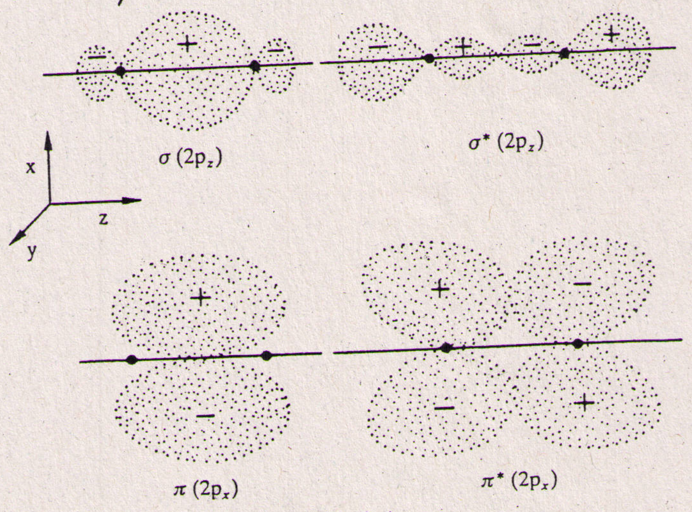
Aufgabe 3

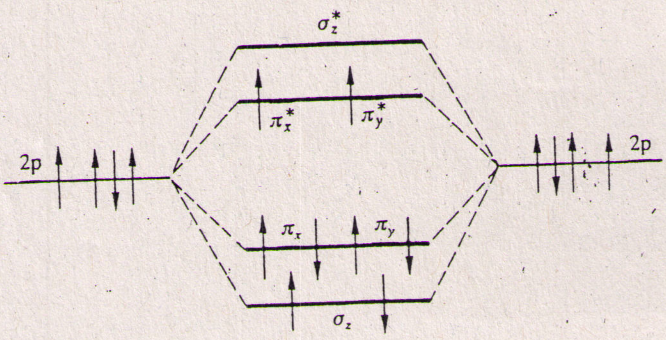
a) – Die Orbitale freier Atome werden nach dem Pauli-Prinzip besetzt:



– Im O_2-Molekül gibt es acht 2p-Elektronen, welche auf 6 Molekülorbitale [$\sigma(2p_z)$, $\pi(2p_x)$, $\pi(2p_y)$, jeweils bindend (σ, π) und antibindend (σ^*, π^*) sym. Orbit.] zu verteilen sind:



– bei der Besetzung der möglichen Orbitale werden im Grundzustand 2 Elektronen mit gleichem Spin in die entarteten $\pi^*_{x,y}$ - Orbitale gesetzt:



Aufgabe 3 b)

- Im O_2 - Molekül addieren sich die Spin - Beiträge zu einem Gesamtspin von $S = 1 \cdot (\hbar)$

- In einem äußeren Magnetfeld orientieren sich die Moleküle entweder parallel, $\perp$, od. antiparallel zum Feld, so daß die Feldrichtung in Molekül - Achsenrichtung zeigt : $\vec{B} \rightarrow B_z$

Somit ergibt sich, mit Def. Elektronenspin aus Gl. 4.19 : $\vec{\mu}_s = - \frac{2 \mu_B}{\hbar} \cdot \vec{S}$ und $s = 1 \cdot \hbar$

$$\boxed{\mu_z = - m_s \cdot 2 \mu_B} \qquad (1)$$

und $m_s = +1, 0, -1$

- Für die Wechselwirkungsenergie mit dem Feld $\vec{B}$ in z - Richtung ergibt sich dann:

$$\boxed{V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = 2 \mu_B \cdot m_s \cdot B_z} \qquad (2)$$

- Somit hat man zu einer Temperatur T folgende Bilanz für die Besetzung der Zustände mit $m_s = +1, 0, -1$

m_s	Besetzungshäufigkeit N_i	Wechselwirkungsenergie V_i	
-1	N_1	$V_1 = - 2 \mu_B \cdot B_z$	$\vec{s} \uparrow\uparrow$
0	N_2	$V_2 = 0$	
$+1$	N_3	$V_3 = + 2 \mu_B \cdot B_z$	$\vec{s} \downarrow\uparrow$

- Der Zustand mit minimaler potentieller Energie ("Grundzustand") wird für $\vec{s} \uparrow\uparrow \vec{B}$ erreicht.
- Für die Besetzung der energetisch höheren ("angeregten") Zustände gilt die Boltzmann-Stat.:

$$\frac{N_i}{N_1} = e^{-\Delta V_{i1}/kT}$$

$$\Rightarrow \quad \left(\text{mit } \alpha = \frac{2\mu_B B_z}{kT}\right):$$

$$\frac{N_3}{N_1} = e^{-\Delta V_{31}/kT} = e^{-4\mu_B B_z/kT} = e^{-2\alpha}$$

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\Delta V_{21}/kT} = e^{-2\mu_B B_z/kT} = e^{-\alpha}$$

- mit $N = N_1 + N_2 + N_3 = \left(\frac{N_3}{N_1} + \frac{N_2}{N_1} + 1\right) N_1$ ergeben sich folgende Besetzungswahrscheinlichkeiten:

$$\frac{N_1}{N} = \frac{1}{\frac{N_3}{N_1} + \frac{N_2}{N_1} + 1} = \frac{1}{e^{-2\alpha} + e^{-\alpha} + 1} \qquad (3a)$$

$$\frac{N_2}{N} = \frac{N_2}{N_1} \cdot \frac{N_1}{N} = \frac{e^{-\alpha}}{e^{-2\alpha} + e^{-\alpha} + 1} \qquad (3b)$$

$$\frac{N_3}{N} = \frac{N_3}{N_1} \cdot \frac{N_1}{N} = \frac{e^{-2\alpha}}{e^{-2\alpha} + e^{-\alpha} + 1} \qquad (3c)$$