

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie II

Präsenzaufgaben

1. Konstruieren Sie alle Spin-Eigenfunktionen für vier Elektronen.
2. Bestimmen Sie die möglichen Atomzustände von $\text{Co}(0)$ mit der Elektronenkonfiguration $[\text{Ar}] 4s^2 3d^7$.

Hinweise: Man ermittelt zuerst die möglichen Werte von M_S und S .

Beginnend mit maximalem S und M_S erzeugt man alle möglichen Elektronenkonfigurationen (getrennt für α und β) und bestimmt die dazugehörigen M_L -Werte. Hierbei kann man die Teilchen-Loch-Symmetrie ausnutzen. Durch sammeln der $2L + 1$ zusammengehörigen Konfigurationen findet man die möglichen L_α und L_β , die nun zu L gekoppelt werden. Schließlich führt man die LS-Kopplung durch.

Nun verringert man S um eins und wiederholt das Verfahren. Dabei tritt zu jedem Term höherer Spinmultiplizität sein entsprechendes L erneut auf (was somit keinen neuen Term liefert).