

Übungsblatt 11

Aufgabe 1

$${}^1D: L=2, S=0 \Rightarrow {}^1D_2$$

$${}^2P: L=1, S=\frac{1}{2} \Rightarrow {}^2P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}$$

$${}^4F: L=3, S=\frac{3}{2} \Rightarrow {}^4F_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}}$$

$${}^3G: L=4, S=1 \Rightarrow {}^3G_{3, 4, 5}$$

$${}^2D: L=2, S=\frac{1}{2} \Rightarrow {}^2D_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$$

$${}^3H: L=5, S=1 \Rightarrow {}^3H_{4, 5, 6}$$

Aufgabe 2

(a) Die Konfiguration des angeregten B^+ -Ions ist $1s^1 2s^2 2p^1$. Zur Bestimmung der Termsymbole müssen nur die Elektronen in nicht-abgeschlossenen Unterschalen betrachtet werden, also das $1s$ - und $2p$ -Elektron ($l_1=0, l_2=1$). Die einzige mögliche Kombination für den Drehimpuls ist $L=1$, es wird also nur P -Terme geben. Beide Elektronen haben einen Spin von $\frac{1}{2}$, was zu den möglichen Gesamtspins 0 und 1 führt. Die auftretenden Terme sind also 1P und 3P .

(b) Wie üblich kann der Gesamtdrehimpuls J die Werte $L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$ annehmen. Für den 1P -Term ist damit nur $J=1$ möglich und es ergibt sich ein 1P_1 -Term, während für den Triplett-Term $J=0, 1, 2$ möglich ist und damit die Terme ${}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2$

(c) Die Entartung wird nach $2J+1$ berechnet, sodass sich die folgenden Werte ergeben:

$${}^1P_1: 3; \quad {}^3P_0: 1; \quad {}^3P_1: 3; \quad {}^3P_2: 5$$

Aufgabe 3

$$np^2: \quad {}^1S, \quad {}^1D, \quad {}^3P$$

$$ns^1: \quad \ell=0, \quad s=\frac{1}{2}$$

p^2 -Term	s-Elektron	Resultierende Terme
${}^1S (s=0, L=0)$	$s=\frac{1}{2}, \ell=0$	${}^2S (s=\frac{1}{2}, L=0)$
${}^1D (s=0, L=2)$	$s=\frac{1}{2}, \ell=0$	${}^2D (s=\frac{1}{2}, L=2)$
${}^3P (s=1, L=1)$	$s=\frac{1}{2}, \ell=0$	${}^2P (s=\frac{1}{2}, L=1); \quad {}^4P (s=\frac{3}{2}, L=1)$

Aufgabe 4

(a) $J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$

$${}^4S \Rightarrow L = 0, S = \frac{3}{2} \Rightarrow {}^4S_{\frac{3}{2}}$$

$${}^2P \Rightarrow L = 1, S = \frac{1}{2} \Rightarrow {}^2P_{\frac{1}{2}}, {}^2P_{\frac{3}{2}}$$

$${}^2D \Rightarrow L = 2, S = \frac{1}{2} \Rightarrow {}^2D_{\frac{3}{2}}, {}^2D_{\frac{5}{2}}$$

(b) Die Entartungen der einzelnen Terme nach $2J+1$ ergeben sich zu $4({}^4S_{\frac{3}{2}}, {}^2P_{\frac{3}{2}}, {}^2D_{\frac{3}{2}})$, $2({}^2P_{\frac{1}{2}})$ und $6({}^2D_{\frac{5}{2}})$.

Durch den Entartungsgrad kann der ${}^2P_{\frac{1}{2}}$ -Term eindeutig dem höchsten Niveau zugeordnet werden, während der ${}^2D_{\frac{5}{2}}$ dem zweitniedrigsten Niveau bei 19223 cm^{-1} entspricht.

Für die Aufspaltung durch Spin-Bahn-Kopplung erwarten wir nur um wenige Wellenzahlen unterschiedliche Anregungsenergien, sodass der ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ -Term dem vierfach entarteten Zustand bei 28838 cm^{-1} entspricht und der ${}^2D_{\frac{3}{2}}$ -Term dem Niveau bei 19231 cm^{-1} zugeordnet werden kann. Als Grundzustand bleibt der ${}^4S_{\frac{3}{2}}$ -Term übrig. Dieser Zuordnung entspricht die Erwartung, dass der Grundzustand die höchste Multiplizität besitzt.

Energie	Anzahl Zustände	Term
28842 cm^{-1}	2	${}^2P_{\frac{1}{2}}$
28838 cm^{-1}	4	${}^2P_{\frac{3}{2}}$
19231 cm^{-1}	4	${}^2D_{\frac{3}{2}}$
19223 cm^{-1}	6	${}^2D_{\frac{5}{2}}$
0 cm^{-1}	4	${}^4S_{\frac{3}{2}}$

Zum gleichen Ergebnis kommt man, wenn man die Hundschen Regeln anwendet:

- Der Grundzustand muss die höchste Multiplizität besitzen: $^4S_{3/2}$
- Bei gleicher Multiplizität sind die Terme mit höherem Bahndrehimpuls L energetisch günstiger: $^2P > ^2D$
- Ist die Schale halb oder mehr gefüllt, ist der Term mit größerem Gesamtdrehimpuls J niedriger: $^2D_{3/2} > ^2D_{5/2}$;
 $^2P_{1/2} > ^2P_{3/2}$