

5 Mehrelektronensysteme

Alle (el. neutralen) Atome (außer H-Atom) besitzen mehr als ein Elektron.

5.1 Zusammensetzung der Drehimpulse

Drehimpuls L mit Spin S führten zu wichtigen Quantenzahlen beim H-Atom.

? was tun bei vielen Elektronen?

5.1.1 Russell-Saunders Kopplung (LS)

Annahme: Kopplung der Bahndrehimpulse untereinander

\gg Spin-Bahn-Kopplung

und Kopplung der Spins untereinander \gg

Spin-Bahn-Kopplung

$$(S + S) + (L + L)$$

\Rightarrow Bahndrehimpulse addieren sich zu Gesamtbahndrehimpuls

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \vec{L}_3 + \dots$$

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{L(L+1)}$$

mit der Quantenzahl L

$$\text{(mit einem Elektron } |\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Kap 2.4.1)

auch die Einzelspins addieren sich zum Gesamtspin

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \dots$$

Fazit: Reche mit \vec{L} und \vec{S} wie bei Einzelelektron

Beispiel He-Atom ($Z=2, N=2, 2e^-$)

$$m_1 = m_2 = 1 \Rightarrow l_1 = l_2 = 0$$

1) Spin parallel = verboten (Pauli-Prinzip)

2) Spin antiparallel

$$\Rightarrow L=0, S=0, Y=0$$

Bezeichnung 1S_0 $(2S+1) = 0+1 = 1$

↑
jetzt großes S

= Spin-Singulett

$(2S+1) = 1$ Einstellmöglichkeiten des Spin

$$m_1 = 1, m_2 = 2, l_1 = l_2 = 0$$

1) Spin parallel (jetzt erlaubt)

$$\Rightarrow L=0, S=1, Y=1$$

Bezeichnung 3S_1

Spin-Triplett

(?)

3 Einstellmöglichkeiten des Gesamtspin $-1, 0, 1$

2) Spin antiparallel

$$L=0, S=0, Y=0$$

Bez. 1S_0 = Spin Singulett

Spin parallel : $S=1$ "Orthohelium"

Spin antiparallel : $S=0$ "Parahelium"

keine optischen Übergänge zwischen diesen beiden Gruppen.

für $N = 2, 3, 4$ Elektronen

2	$S = 0$ Singulett	$S = 1$ Triplett	
3	$S = 1/2$ Dublett	$S = 3/2$ Quartett	
4	$S = 0$ Singulett	$S = 1$ Triplett	$S = 2$ Quintett
5	$S = 1/2$ Dublett	$S = 3/2$ Quartett	$S = 5/2$ Sextett

5. 1. 2 $j j$ -Kopplung

Annahme einzelne Spin - Bahn Kopplung

>> Bahndrehimpulse untereinander

⇒ erst koppeln Einzelbahndrehimpulse und Einzelspins
zum Gesamtdrehimpuls (siehe Kap 3. 1. 1)

$$|\vec{j}| = \hbar \sqrt{j(j+1)}$$

dann koppeln die Gesamtdrehimpulse der einzelnen
Elektronen ($j j$ -Kopplung)

Gesamtdrehimpuls nicht mehr definiert

⇒ keine Quantenzahl mehr für L

5.2 Das Periodensystem der Elemente

Was sind die Grundzustände für N Elektronen,
die sich über die Coulomb-WW abstoßen?

5.2.1 Die Hund'schen Regeln

⇒ Folien

2. viel Spin S max
3. viel Drehimpuls L max
4. wenig $J = L + S$ min. (L und S antiparallel)
(viel J wenn Schale $>$ halb voll)
Reihenfolge wichtig

Zu 4. wenn Unterschale mehr als halb gefüllt
drehen sich "Löcher" mit L
⇒ $J = L + S$ maximal ist besser!

Es gibt Ausnahmen.

$$\begin{array}{l} \text{Spin} \quad S = \sum m_s \quad ; \quad m_s = +\frac{1}{2} \quad \text{oder} \quad -\frac{1}{2} \\ \text{Drehimpuls} \quad L = \sum m_l \quad ; \quad m_l = -l, \dots, l \end{array}$$

$$\text{Gesamtdrehimpuls: } J = L + S$$
