

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 2, Chemische Bindung (Modul A8)

Blatt 2

Aufgabe 3: Gesamt-Bahndrehimpulse und Gesamt-Spins.

- a) Gegeben sei die Konfiguration f^1 . Was ist der Bahndrehimpuls l des Elektrons?
- b) Gegeben sind die Konfigurationen f^2 und f^3 .
Welche Werte sind für die Quantenzahlen des Gesamt-Bahndrehimpulses (L) bzw. des Gesamt-Spins (S) jeweils möglich?
- c) Ein Atom besitze 4 Elektronen in unterschiedlichen Orbitalen. Welches sind die möglichen Gesamt-Spin-Quantenzahlen S und die jeweilige Spin-Multiplizität M ?

Aufgabe 4: Konfigurationen und Terme.

- a) Ein angeregtes Be-Atom habe die Konfiguration $(2s)^1(2p)^1$.
Welche Terme können daraus entstehen?
- b) Welches sind die möglichen Terme der Grundzustandskonfiguration des Fluoratoms?
- c) Welche Terme sind für die Konfiguration $(ns)^1(nd)^1$ möglich? Welcher der Terme hat vermutlich die niedrigste Energie?

Aufgabe 5: Atomare Unterterme (Niveaus).

- a) Geben Sie für die Elektronenkonfiguration $(2p)^1(3p)^1$ alle möglichen atomaren Niveaus samt zugehöriger L , S und J -Werte, sowie die entsprechenden Niveau-Symbole $^{2S+1}A_J$ an.
- b) (i) Geben Sie für jeden Term ^{2S+1}A an, aus wie vielen entarteten Niveaus dieser besteht, wenn Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt wird. (ii) Was ändert sich bei Hinzunahme der Spin-Bahn-Kopplung?