

# Lösung zu Übung 11

## Aufgabe 1

1s  $\uparrow\downarrow$ :

$$\begin{aligned} \varphi_1(\vec{r}, m) &= \psi_{100}(\vec{r}) \alpha(m) \\ \varphi_2(\vec{r}, m) &= \psi_{100}(\vec{r}) \beta(m) \\ \varphi(1, 2) &\sim \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_2(1) \\ \varphi_1(2) & \varphi_2(2) \end{vmatrix} \\ &= \psi_{100}(\vec{r}_1) \alpha(m_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) \beta(m_2) \\ &\quad - \psi_{100}(\vec{r}_1) \beta(m_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) \alpha(m_2) \\ &= \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) \cdot \\ &\quad \cdot [\alpha(m_1) \beta(m_2) - \beta(m_1) \alpha(m_2)] \end{aligned}$$

1s  $\uparrow$  2s  $\uparrow$ :

$$\begin{aligned} \varphi_1(\vec{r}, m) &= \psi_{100}(\vec{r}) \alpha(m) \\ \varphi_2(\vec{r}, m) &= \psi_{200}(\vec{r}) \beta(m) \\ \varphi(1, 2) &\sim \psi_{100}(\vec{r}_1) \alpha(m_1) \psi_{200}(\vec{r}_2) \alpha(m_2) \\ &\quad - \psi_{200}(\vec{r}_1) \alpha(m_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) \alpha(m_2) \\ &= [\psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{200}(\vec{r}_2) - \psi_{200}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2)] \cdot \\ &\quad \cdot \alpha(m_1) \alpha(m_2) \end{aligned}$$

## Aufgabe 2

2.1 Anzahl Mikrozust. =  $\binom{6}{1} \binom{14}{1} = 84$

2.2 Die beiden relevanten Elektronen befinden sich in versch. leeren Unterschalen (3p und 4f), so daß das Pauli-Prinzip nicht berücksichtigt werden muß

Mögliche Werte für L:

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2 = 3 - 1, \dots, 3 + 1 = 2, 3, 4$$

Mögliche Werte für S:

$$S = |s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2 = 0, 1$$

$\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ D & F & G \end{matrix}$   
 Singulett  
 Triplett

Terme [Entartung =  $(2L+1)(2S+1)$ ]

$^1D [5]$      $^3D [15]$   
 $^1F [7]$      $^3F [21]$   
 $^1G [9]$      $^3G [27]$

Kontrolle: alle Entartungen zusammen ergibt 84

## Aufgabe 3

Element	Konfiguration	gesuchter Mikrozustand	S	L	J	Term
Ce	GZK $4f^2 6s^2$	4f $\begin{array}{ccccccc} -3 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ \hline & & & & \uparrow & \uparrow & \end{array}$ 6s $\uparrow\downarrow$	1	5	4	$^3H_4$
Cr	AK $3d^4 4s^2$	3d $\begin{array}{cccc} -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \end{array}$ 4s $\uparrow\downarrow$	2	2	0	$^5D_0$
Nb	GZK $4d^4 5s$	4d $\begin{array}{cccc} -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \end{array}$ 5s $\uparrow$	$\frac{5}{2}$	2	$\frac{1}{2}$	$^6D_{1/2}$
Cr	GZK $3d^5 4s$	3d $\begin{array}{cccc} -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$ 4s $\uparrow$	3	0	3	$^7S_3$
Dy	AK $4f^{14} 6s$	4f $\begin{array}{ccccccc} -3 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{array}$ 6s $\uparrow$	2	6	8	$^5I_8$

