Zusammenfassung vom 23.11.2010

Russel-Saunders-Kopplung
(Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung)

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i \qquad \vec{S} = \sum_i \vec{S}_i \qquad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{L}_i$, $\vec{S}_i$ = *Bahndrehimpuls und Spin des i-ten Elektrons*

sind Erhaltungsgrößen

➔ H *vertauscht mit* L^2, L_z, S^2, S_z, J^2 *und* J_z

➔ *diese Operatoren besitzen die Eigenwerte* $l(l+1)$, m_l, $s(s+1)$, m_s, $j(j+1)$ *und* m_j

Hund'sche Regeln

➔ *Bestimmung des Grundzustands von freien Ionen mit teilweise gefüllter Schale*

➔ *nicht gut für ganz schwere Elemente*

1. Hund'sche Regel $S = \left| \sum_{i=1}^{n} S_{z,i} \right| = \text{maximal}$

n = *Anzahl Valenzelektronen*

$S_{z,i}$ = *z-Komponente von* $\vec{S}_i$ *des i-ten Elektrons*

2. Hund'sche Regel $L = \left| \sum_{i=1}^{n} L_{z,i} \right| = \text{maximal}$

$L_{z,i}$ = *z-Komponente von* $\vec{L}_i$ *des i-ten Elektrons*

(unter Berücksichtigung der 1. Hund'schen Regel)

3. Hund'sche Regel

$J = |L - S|$ für $n \leq 2l+1$ *(Schale weniger als halb voll)*

$J = L + S$ für $n > 2l+1$ *(Schale mehr als halb voll)*

Beispiel zu den Hund'schen Regeln

Dy^{3+}: [Xe] $4f^9\ 5s^2p^6$ ➔ $l = 3$, n = 9 *(Schale mehr als halb voll)*

➔ **1. Hund'sche Regel:** **S = maximal**

$m_s \backslash m_l$	-3	-2	-1	0	1	2	3
+½	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
-½	↓	↓					

$m_s \backslash m_l$	-3	-2	-1	0	1	2	3
+½	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
-½		↓				↓	

➔ S = 5/2

➔ **2. Hund'sche Regel:** **L = maximal**

$m_S \backslash m_l$	-3	-2	-1	0	1	2	3
+½	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
-½						↓	↓

➔ L = 5

➔ **3. Hund'sche Regel:** $J = |L - S|$ für $n \leq 2l+1$ *(Schale weniger als halb voll)*

$J = L + S$ für $n > 2l+1$ *(Schale mehr als halb voll)*

➔ $J = L + S = 15/2$

➔ $^{2S+1}L_J = {}^6H_{15/2}$

Zusammenfassung vom 23.11.2010

spektroskopische Notation $^{2S+1}L_J$

L = S (= 0), P (= 1), D (= 2), F (= 3), G (= 4), H (= 5), I (= 6), J (= 7)

Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle JLSJ_z | \vec{L} + g_0 \vec{S} | JLSJ'_z \rangle = g(JLS) \langle JLSJ_z | \vec{J} | JLSJ'_z \rangle$$

$|JLSJ_z>$: *passende Basis*

$$\Rightarrow \langle JLSJ_z | L_z + g_0 S_z | JLSJ'_z \rangle = g(JLS) \langle JLSJ_z | J_z | JLSJ'_z \rangle = g(JLS) m_j \delta_{J_z, J'_z}$$

Landé g-Faktor

$$g(JLS) = \tfrac{1}{2}(g_0 + 1) - \tfrac{1}{2}(g_0 - 1) \frac{L(L+1) - S(S+1)}{J(J+1)}$$

$$\Rightarrow \quad g(JLS) \cong 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \qquad (g_0 \cong 2)$$

totales magn. Moment (*in der* $|JLSJ_z>$*-Basis*)

$$\vec{L} + g_0 \vec{S} = g(JLS) \vec{J}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{\mu} = -g(JLS) \mu_B \langle n | \vec{J} | n \rangle \qquad |n> = |JLSJ_z>$$

Langevin Paramagnetismus (*Ionen mit nicht vollen Schalen*)

$$\Delta E_n = \mu_B \vec{B}_0 \cdot \langle n | \vec{L} + g_0 \vec{S} | n \rangle = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0$$

$$\Delta E_n = m_j g(JLS) \mu_B B_0 \qquad \vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$$