

Bestimmung der Term Symbole:

$$2S+1 L_J$$

$$S = |\sum m_s|$$

$$L = |\sum m_l|$$

- Schale weniger als halbvoll: $J = |L - S|$
- Schale mehr als halbvoll: $J = L + S$
- Schale genau halbvoll: $L = 0$
 $\Rightarrow J = S$ (bzw. $|L - S|$)

Beispiele:



Li: 3 Elektronen



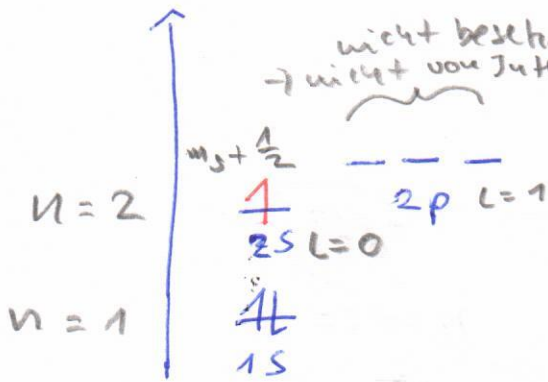
1s-orbital

• Orbitale werden von unten nach oben mit e^- aufgefüllt

• max. $2 e^-$ pro Orbital

2s-orbital

$\uparrow \downarrow$
 e^- mit spin up
 e^- mit spin down



1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = +\frac{1}{2}$$

↑
Spinquantenzahl

$$\Rightarrow \underline{2S+1} = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = \underline{2}$$

Hauptquantenzahl n : $n=2$

Nebenquantenzahl l : $l=0, 1, 2, \dots, n-1$

wier $l=0, 1$

Magnetische Quantenzahl m_l : $m_l = l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$

wier $l=0$

$$\Rightarrow m_l = 0$$

2. Bestimmung von L

$$\Rightarrow L = |\sum m_l| = 0$$

3. Bestimmung von J

Schale halbvoll $\rightarrow l=0 \rightarrow J = S = \frac{1}{2}$

4. Bestimmung des Buchstabens im Termensymbol

• hat nichts mit Schale zu tun!

• sondern:

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$



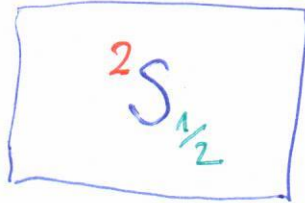
wird so bezeichnet

weiter Li:

$$\Rightarrow L=0 \rightarrow S$$

$$J=S=\frac{1}{2}$$

$$S=\frac{1}{2} \rightarrow \text{oberer Index: } 2 \\ (2S+1)$$



2. Beispiel:

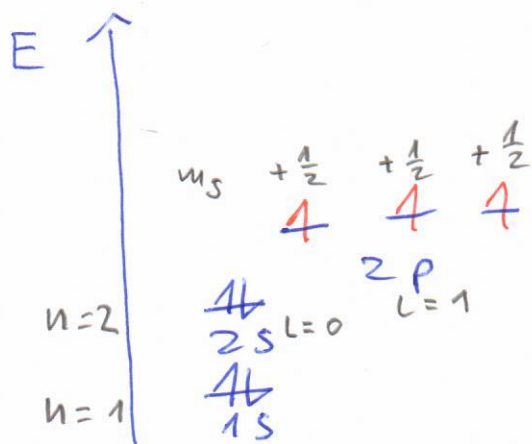
N

N: 7 Elektronen

1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

$$\Rightarrow \underline{2S+1} = 2 \cdot \frac{3}{2} + 1 = \underline{4}$$



3 x 2p-orbitale

s-orbital



kugelförmig

$n=2$; $l=1$: jetzt magnetische Quantenzahl m_l
bestimmen mit $m_l = l, l-1, \dots, 0, \dots, -l$

$$\Rightarrow m_l = 1, 0, -1$$

⇒



(nicht m_s !)

m_l	+1	0	-1
	↑	↑	↑

2. Bestimmung von L

$$L = |\sum m_l| = +1 + 0 + (-1) = 0$$

alle m_l zusammengezählt,
weil alle mit e^-
besetzt → für Berechnung
wird Anzahl der
 e^- beachtet ist

3. Bestimmung von J

Schale gerade halbvoll → $L=0$ → $J=S=\frac{3}{2}$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

↓	↓	↓	↓
S	P	D	F

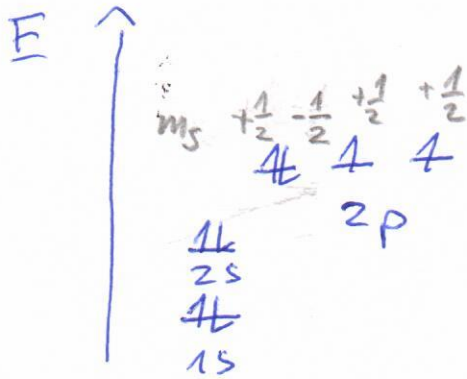
mit $L=0$ → S

⇒ ⁴S_{3/2}

3. Beispiel:

0

0: 8 Elektronen

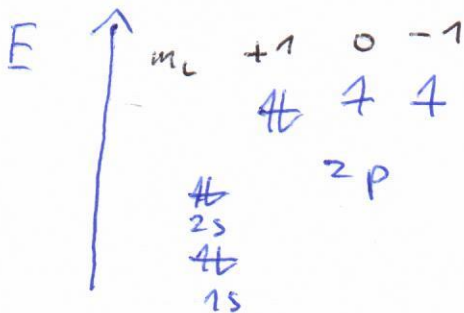


1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \underline{2S+1} = 2 \cdot 1 + 1 = \underline{3}$$

↑ spin up $+\frac{1}{2}$
 ↓ spin down $-\frac{1}{2}$



2. Bestimmung von L

$$L = |\sum m_l| = (+1) + (+1) + 0 + (-1) = 1$$

weil mit zwei e⁻ besetzt

3. Bestimmung von J

schale mehr als halbvoll $\rightarrow J = L + S = 1 + 1 = 2$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

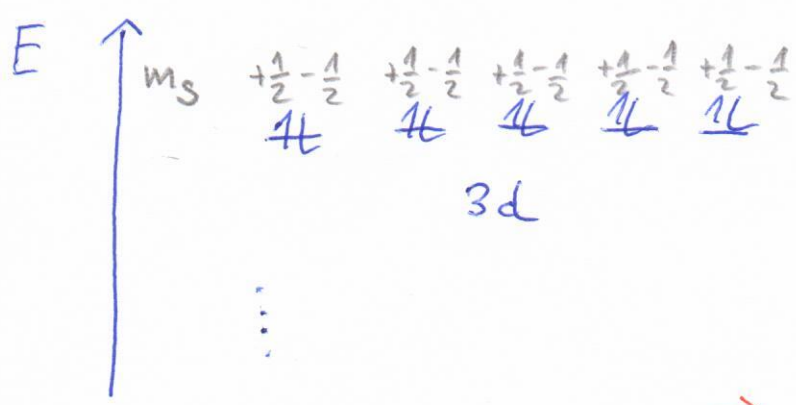
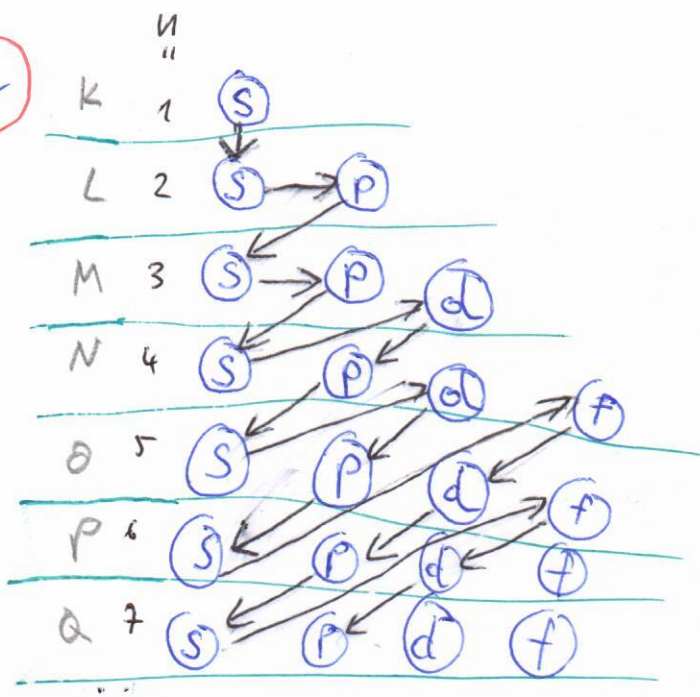
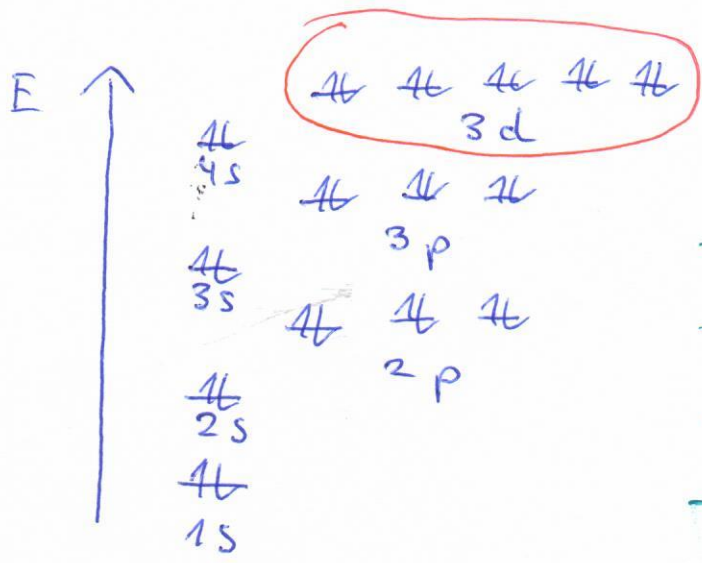
\downarrow \downarrow \downarrow \downarrow
 s p d f

da $L=1$

$$\Rightarrow \underline{3}P_2$$

4. Beispiel:

Zu: 30 Elektronen

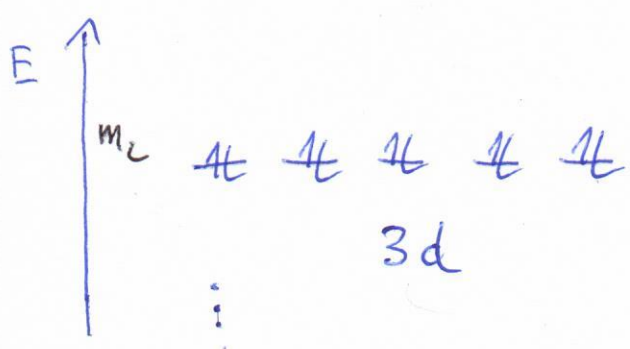


1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 0$$

$$\Rightarrow \underline{2S+1} = 2 \cdot 0 + 1 = \underline{1}$$

2. Bestimmung von L



Hauptquantenzahl: $n=3$

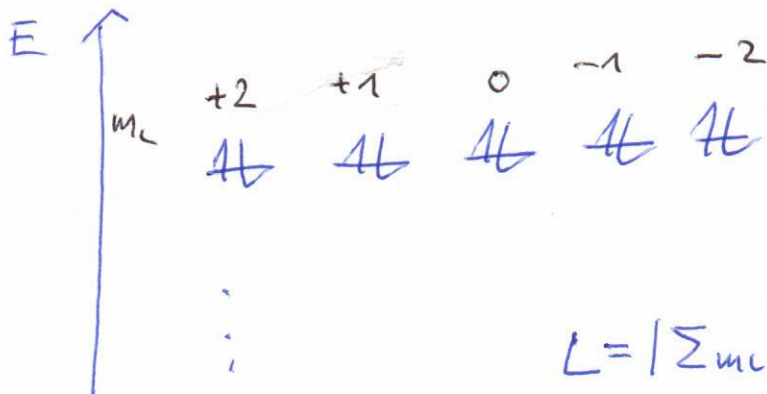
Nebenquantenzahl: $L=0, 1, 2 \dots n-1$ hier: $L=0, 1, 2$

magnetische Quantenzahl m_l : $m_l = L, L-1, \dots, 0, \dots, -L$

für $L=0 \rightarrow m_l = 0 \rightarrow s$ -orbitale

für $L=1 \rightarrow m_l = +1, 0, -1 \rightarrow p$ -orbitale

für $L=2 \rightarrow m_l = +2, +1, 0, -1, -2 \rightarrow d$ -orbitale



$$L = |\sum m_l| = (+2) + (+2) + (+1) + (+1) + 0 + 0 + (-1) + (-1) + (-2) + (-2) = 0$$

3. Bestimmung von J

$$L=0 \rightarrow J=S=\underline{\underline{0}}$$

4. Bestimmung des Buchstabens

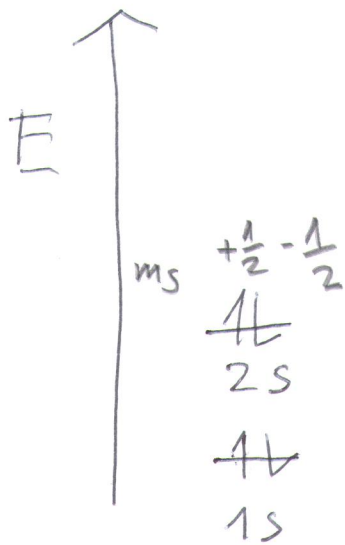
$$\begin{array}{cccc} L=0, & 1, & 2, & 3 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ S & P & D & F \end{array}$$

\Rightarrow

$1S_0$

5. Beispiel:

Be: 4 Elektronen



1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 0$$

$$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot 0 + 1 = 1$$

2. Bestimmung von L

$$L = |\sum m_l| = 0$$

3. Bestimmung von J

schale ganz voll

$$\rightarrow L = 0$$

$$\rightarrow J = S = 0$$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow$$

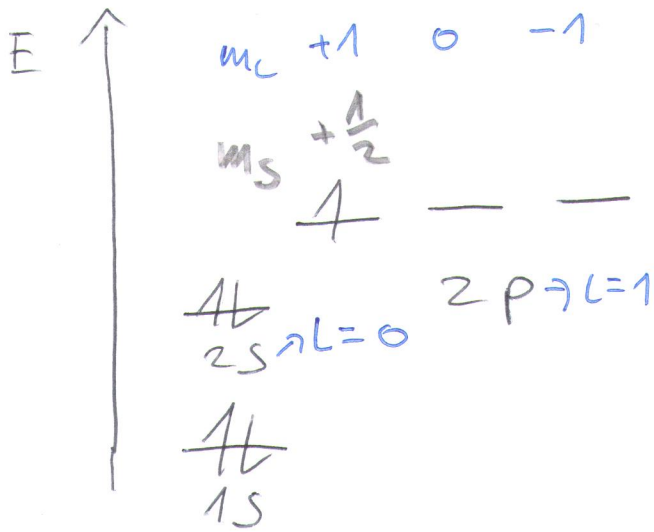
$$S \quad P \quad D \quad F$$

da $L = 0$

$$\Rightarrow {}^1S_0$$

6. Beispiel

B: 5 Elektronen



1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$$

2. Bestimmung von L

$$L = |\sum m_l| = +1$$

(da nur in

$m_l = +1$ ein Elektron sitzt)

→ bei $L=1$

$$\Rightarrow m_l = +1, 0, -1$$

3. Bestimmung von J

schale weniger als halbvoll $\rightarrow J = |L - S|$

$$= |1 - \frac{1}{2}| = \frac{1}{2}$$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

↓	↓	↓	↓
S	P	D	F

da $L=1$

$$\Rightarrow {}^2P_{1/2}$$

7. Beispiel

C: 6 Elektronen

E ↑	m_l	+1	0	-1
	m_s	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	—
		A	A	—
			2 p $l=1$	
		A		
	2 s $l=0$			
	A			
	1 s			

1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

$$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot 1 + 1 = 3$$

2. Bestimmung von L

$$L = |\sum m_l| = (+1) + 0 = 1$$

3. Bestimmung von J

Schale weniger als halbvoll $\rightarrow J = |L - S|$

$$= |1 - 1| = 0$$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

↓	↓	↓	↓
S	P	D	F

da $L = 1$

\Rightarrow

3 p
0

8. Beispiel

F: 9 Elektronen

E ↑

m_l	+1	0	-1
m_s	$+\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
	At	At	At
		2p	l=1
At	l=0		
2s			
At			
1s			

1. Bestimmung von S

$$S = |\sum m_s| = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$$

2. Bestimmung von L

$$L = |\sum m_l| = \underbrace{(+1)}_{2e^-} + \underbrace{(+1)}_{2e^-} + \underbrace{0}_{1e^-} + \underbrace{0}_{2e^-} + \underbrace{(-1)}_{1e^-} = 1$$

3. Bestimmung von J

schale mehr als halbvoll $\rightarrow J = L + S = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

↓ ↓ ↓ ↓

s p d f

da $L = 1$

\Rightarrow

$2p_{3/2}$

9. Beispiel

N_e : 10 Elektronen

E ↑

m_l	+1	0	-1
m_s	$+\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2} - \frac{1}{2}$
	At	At	At
		2p	l=1
	At		l=0
	2s		
	At		
	1s		

1. Bestimmung von S

$$S = \left| \sum m_s \right| = \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2})$$
$$\frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) = 0$$

$$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot 0 + 1 = 1$$

2. Bestimmung von L

$$L = \left| \sum m_l \right| = (+1) + (+1) + 0 + 0 + (-1) + (-1) = 0$$

3. Bestimmung von J

schon ganz voll $\rightarrow L=0 \rightarrow$

$$J = S = 0$$

4. Bestimmung des Buchstabens

$$L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

l ↓ ↓ ↓ ↓
s p d f

da $L=0$

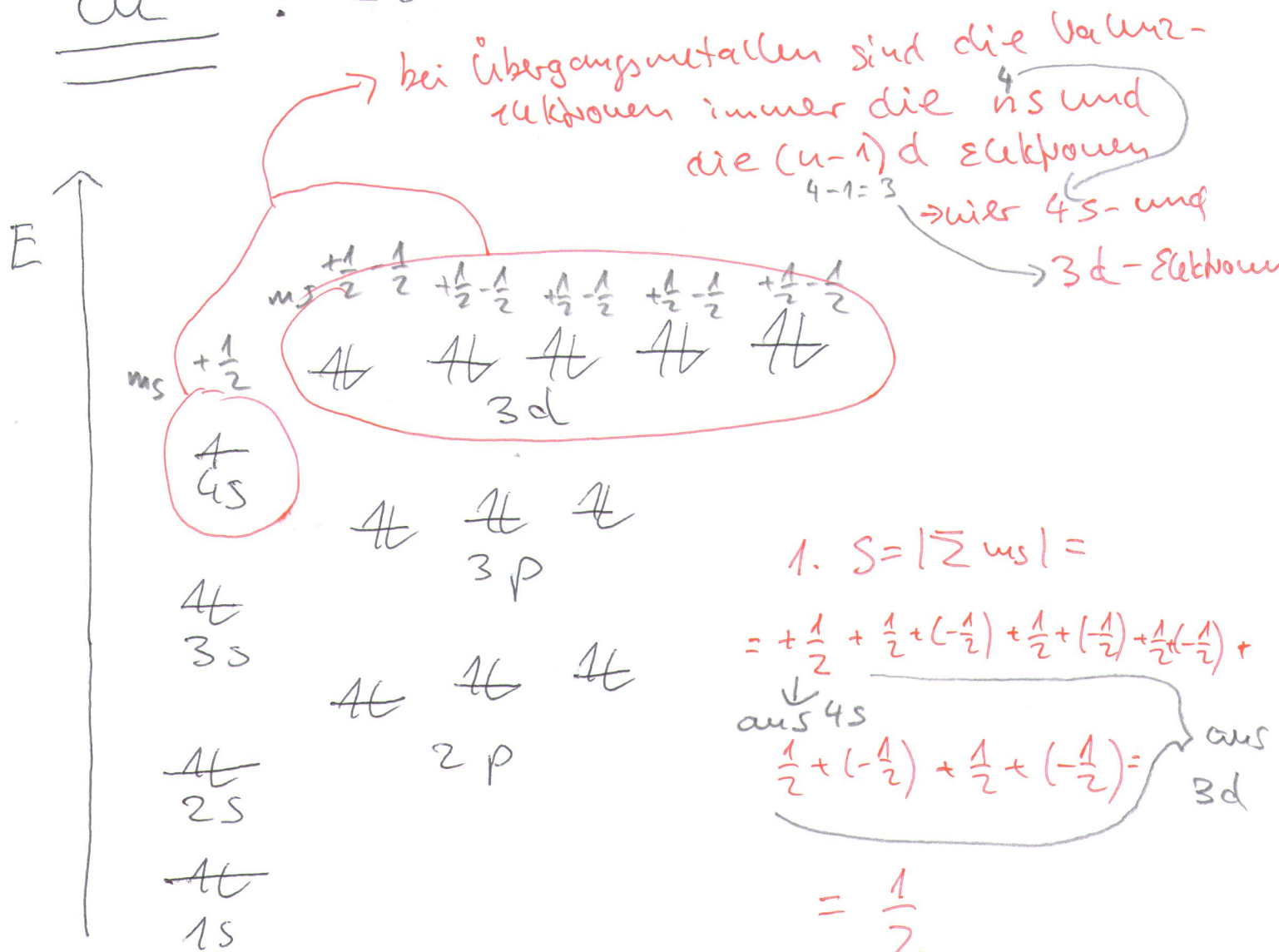
$$\Rightarrow {}^1S_0$$

Ausnahmen bei Orbitalbesetzung:

Cu und Cr

→ 4s jeweils nur mit einem Elektron besetzt, da halbgefüllte und vollständig aufgefüllte d-Schalen energetisch besonders günstig sind

Cu : 29 Elektronen



$$1. S = |\sum m_s| =$$

$$= +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) +$$

↓ aus 4s

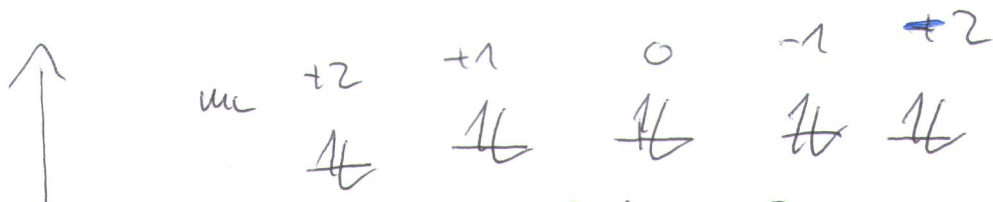
$$\frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) + \frac{1}{2} + (-\frac{1}{2}) =$$

aus 3d

$$= \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$$

weiter m



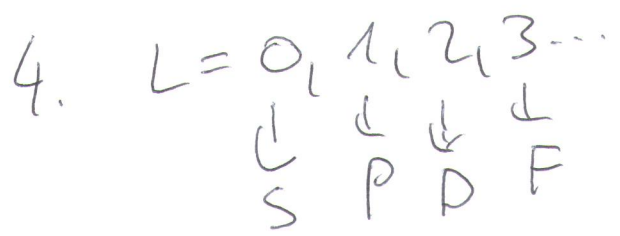
3d $l=2$

$\frac{7}{45} \quad l=0 \rightarrow m_l=0$
 \hookrightarrow ist eh 0

2. $L = |\sum m_l| =$

$= (+2) + (+2) + (+1) + (+1) + 0 + 0 + (-1) + (-1) +$
 $(+2) + (-2) = 0$

3. Da $L=0 \rightarrow J=S = \frac{1}{2}$

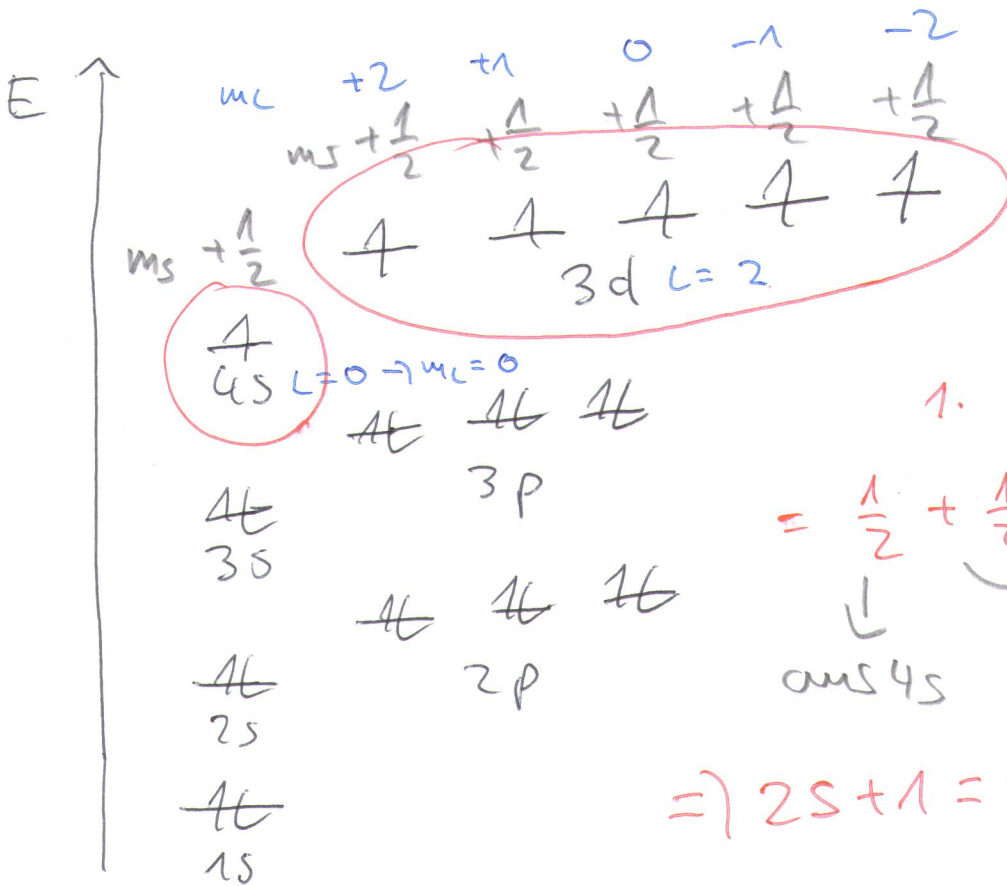


da $L=0$

\Rightarrow

$^2S_{1/2}$

CT 24 Elektronen



1. $S = |\sum m_s| =$

$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 3$

↓
ans 4s ans 3d

$\Rightarrow 2S + 1 = 2 \cdot 3 + 1 = 7$

2. $L = |\sum m_l| = 0 + (+2) + (+1) + 0 + (-1) + (-2)$

↓
ans 4s = 0

3. Da $L=0 \rightarrow J=S=3$

4. $L = 0, 1, 2, 3 \dots$

↓ ↓ ↓ ↓ da $L=0$
s p d f

\Rightarrow 7S_3