

Kapitel 16

Mehrelektronenatome

Bisher haben wir uns vorwiegend mit der quantenmechanischen Beschreibung des einfachsten Atoms, des Wasserstoffatoms, beschäftigt und teilweise diese Betrachtungen auf andere Systeme, in denen ein einzelnes Elektron um einen positiven Kern kreist, erweitert. In diesem Kapitel widmen wir uns nun Atomen mit mehreren Elektronen. Eine exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung ist zwar für das Heliumatom (zwei Elektronen) unter gewissen Annahmen möglich, jedoch für Atome mit mehr als zwei Elektronen aussichtslos. Es existieren aber diverse Näherungslösungen bzw. daraus abgeleitete angenäherte Modelle. Wir beschäftigen uns hier mit einem der einfachsten Modelle, dem *Schalenmodell*, welches sich direkt aus der Verallgemeinerung der Resultate des Wasserstoffatoms ergibt.

Als erstes befassen wir uns mit der Wellenfunktion von Mehrelektronenatomen. In diesem Zusammenhang formulieren wir das vierte Postulat der Quantenmechanik und gehen auf die sogenannte *Austauschsymmetrie* ein. Anschliessend folgt das Pauli-Prinzip und die Klassifizierung von Teilchen (Elementarteilchen, Atome, Moleküle, ...) in Fermionen und Bosonen. Ausgehend von diesen Gesetzen befassen wir uns dann mit dem Aufbau von Mehrelektronenatomen. Wir betrachten die Besetzung der elektronischen Zustände, die Berechnung von Gesamtdrehimpuls, Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls, sowie die Bestimmung des Grundzustands aufgrund der sogenannten *Hundschen Regeln*.

16.1 Die Wellenfunktion von Mehrelektronenatomen

16.1.1 Das vierte Postulat der Quantenmechanik

Für die Wellenfunktion ψ von nichtwechselwirkenden Teilchen, beispielsweise für ein Mehrelektronenatom, gilt das folgende Postulat:

Postulat 4 Die Wellenfunktion $\psi(1, 2, 3, \dots, n)$ eines Systems aus n nicht-unterscheidbaren, nicht-wechselwirkenden Teilchen wird durch ein (Tensor-)produkt der Wellenfunktionen $\psi(i)$ der einzelnen Teilchen beschrieben

$$\psi(1, 2, \dots, n) = \psi(1)\psi(2)\psi(3) \cdot \dots \cdot \psi(n). \quad (16.1)$$

Im nächsten Abschnitt gehen wir auf die sogenannte Austauschsymmetrie ein, welche die Eigenschaften der Mehrteilchenwellenfunktion (16.1) bzgl. der Vertauschung von Teilchen bzw. ihrer Indizes präzisiert.

16.1.2 Die Austauschsymmetrie

Bevor wir auf die allgemeine Formulierung eingehen, illustrieren wir die Austauschsymmetrie am Beispiel eines Zweielektronensystems, wobei die Elektronen keinen Spin besitzen.

Illustration der Austauschsymmetrie an einem Zweielektronensystem ohne Spin

Wir betrachten zwei Elektronen (ohne Spin) am Ort $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ und $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$, die sich im Coulombfeld eines Atomkerns der Ladung $+Ze$ bewegen (vgl. Abb. 16.1). Der Kern wird als fest betrachtet und befindet sich im Ursprung des Koordinatensystems. Die potentielle Energie der Elektronen setzt sich zusammen aus der potentiellen Energie $V_1(\vec{r}_1)$ und $V_2(\vec{r}_2)$ im Coulombfeld des Atomkerns

$$V_1(\vec{r}_1) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \text{ mit } r_1 = |\vec{r}_1|, \quad (16.2)$$

$$V_2(\vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \text{ mit } r_2 = |\vec{r}_2| \quad (16.3)$$

und der potentiellen Energie $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ der Coulombwechselwirkung zwischen den beiden Elektronen

$$V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \text{ mit } r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|. \quad (16.4)$$

Die kinetische Energie $E_{\text{kin}}^{(1)}$ und $E_{\text{kin}}^{(2)}$ der beiden Elektronen ist gegeben durch

$$E_{\text{kin}}^{(1)} = \frac{1}{2m} (p_{x_1}^2 + p_{y_1}^2 + p_{z_1}^2), \quad (16.5)$$

$$E_{\text{kin}}^{(2)} = \frac{1}{2m} (p_{x_2}^2 + p_{y_2}^2 + p_{z_2}^2). \quad (16.6)$$

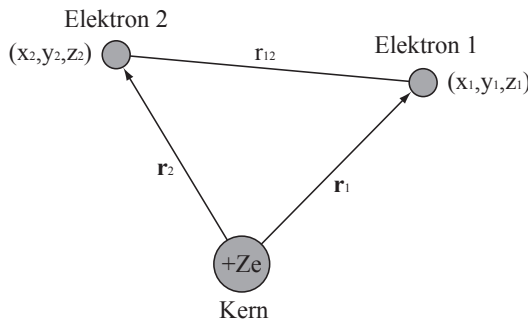


Abb. 16.1: Zwei Elektronen im Coulombfeld eines Atomkerns der Ladung $+Ze$.

Demzufolge lautet die Hamiltonfunktion H für das Zweielektronensystem

$$\begin{aligned} H &= E_{\text{kin}}^{(1)} + E_{\text{kin}}^{(2)} + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ &= \frac{1}{2m} (p_{x_1}^2 + p_{y_1}^2 + p_{z_1}^2) + \frac{1}{2m} (p_{x_2}^2 + p_{y_2}^2 + p_{z_2}^2) \\ &\quad - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \end{aligned} \quad (16.7)$$

Der entsprechende Hamiltonoperator \hat{H} ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) \\ &\quad - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \end{aligned} \quad (16.8)$$

Dieser Hamiltonoperator \hat{H} wirkt auf die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$, welche den Zustand des Zweiteilchensystems beschreibt, wobei $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, das Elektron 1 zur Zeit t im Volumenelement $dV_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ am Ort \vec{r}_1 und gleichzeitig das Elektron 2 im Volumenelement $dV_2 = dx_2 dy_2 dz_2$ am Ort \vec{r}_2 anzutreffen. Da die potentielle Energie $V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ die Zeit t nicht explizit enthält, existieren stationäre Zustände, d.h. es gilt

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-iEt/\hbar}, \quad (16.9)$$

wobei $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &+ \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{aligned} \quad (16.10)$$

ist. Das Lösen dieser Gleichung ist erheblich erschwert durch den Wechselwirkungsterm $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Aus diesem Grund ist auch das Postulat 4 nicht anwendbar, da die beiden Elektronen nicht unabhängig voneinander sind. Wir werden hier diese Wechselwirkung vernachlässigen. In dieser Näherung ist dann der Hamiltonoperator als Summe zweier unabhängiger Hamiltonoperatoren darstellbar. Jedes Elektron hat dann seine eigene Schrödinger-Gleichung mit den Lösungen $u_a(\vec{r}_1)$ bzw. $u_b(\vec{r}_2)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) u_a(\vec{r}_1) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} u_a(\vec{r}_1) = E_a u_a(\vec{r}_1), \quad (16.11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) u_b(\vec{r}_2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} u_b(\vec{r}_2) = E_b u_b(\vec{r}_2). \quad (16.12)$$

Die Gesamtwellenfunktion $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ lässt sich dann in Übereinstimmung mit Postulat 4 als Produkt der beiden Funktionen $u_a(\vec{r}_1)$ und $u_b(\vec{r}_2)$ schreiben und gehört zum Energiewert $E = E_a + E_b$. $u_a(\vec{r}_1)$ und $u_b(\vec{r}_2)$ sind dabei gegeben durch die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms.

Jedoch folgt aus der Unschärferelation, dass man die Bewegung eines Elektrons nicht genau verfolgen kann. Als Konsequenz ergibt sich daraus, dass man die beiden Elektronen im betrachteten Atom nicht auseinanderhalten bzw. unterscheiden kann. Das hat zur Folge, dass sich bei der Vertauschung der beiden Elektronen, repräsentiert durch die Vertauschung der beiden Indizes 1 und 2, die Wahrscheinlichkeitsdichte $|u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ nicht ändern darf. Dies ist die Forderung der *Austauschsymmetrie*.

Die Produktwellenfunktion $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$ erfüllt diese Forderung nicht, denn $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$ ist nicht die selbe Funktion wie $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$, es sei denn die Quantenzahlen n_a, l_a, m_{l_a} stimmen paarweise mit den Quantenzahlen n_b, l_b, m_{l_b} überein. Andererseits ist in der Näherung $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = 0$ die Produktwellenfunktion $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$ mit vertauschten Indizes 1 und 2 auch eine Eigenfunktion des Hamiltonoperators \hat{H} zum selben Eigenwert $E = E_a + E_b$. Diese Tatsache können wir zur Konstruktion von Eigenfunktion ausnützen, welche die Austauschsymmetrie erfüllen und den Zustand des Zweielektronensystems beschreiben, indem wir Linearkombination von $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$ und $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$ bilden. Diese sind nach Satz 9.4 wiederum Eigenfunktionen von \hat{H} zum selben Eigenwert $E = E_a + E_b$. Es ergeben sich dann die beiden folgenden normierten Linearkombinationen der Produktwellenfunktionen $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$ und $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$, welche der Forderung der Austauschsymmetrie genügen

$$u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) + u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)), \quad (16.13)$$

$$u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)), \quad (16.14)$$

wobei die *symmetrische* Linearkombination $u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ bei der Vertauschung der beiden Indizes 1 und 2 unverändert bleibt und die *antisymmetrische* Linearkombination $u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ nur das Vorzeichen wechselt. Demzufolge bleiben $|\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 = |u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ und $|\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 = |u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ bei der Vertauschung der Indizes 1 und 2 unverändert und die Forderung der Austauschsymmetrie ist gewährleistet.

Wir weisen an dieser Stelle darauf hin, dass in der Realität aufgrund des Pauli-Prinzips (siehe Abschnitt 16.2) für Elektronen nicht beide Möglichkeiten (16.13) und (16.14), d.h. symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion, zugelassen sind, sondern Elektronen eine antisymmetrische Wellenfunktion haben müssen.

Allgemeine Formulierung der Austauschsymmetrie

Die Forderung der Austauschsymmetrie muss auch im Fall von zwei wechselwirkender Elektronen erfüllt sein, denn diese lassen sich genau so wenig unterscheiden wie unabhängige Elektronen. Allerdings kann man dann nicht mehr mit den im vorangegangenen Abschnitt benützten Produktwellenfunktionen operieren. Ebenfalls sind auch noch die Spinkoordinaten σ_1 und σ_2 in die Wellenfunktion einzubeziehen. Die Gesamtwellenfunktion inkl. Spin muss dann entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein, wenn die Forderung der Austauschsymmetrie erfüllt sein soll bzw. ist, wie erwähnt, für Elektronen (mit Spin)

nach dem Pauli-Prinzip (siehe Abschnitt 16.2) nur eine antisymmetrische Gesamtwellenfunktion zugelassen.

Zum Abschluss dieses Abschnitts formulieren wir die Forderung der Austauschsymmetrie allgemein:

Die Wellenfunktion $\psi(1, 2, \dots, n)$ eines Systems aus n (wechselwirkenden) Teilchen (Elektronen) erfüllt die *Austauschsymmetrie*, wenn beim beliebigen Tausch zweier Teilchen (Elektronen) die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(1, 2, \dots, n)|^2$ unverändert bleibt.

Es sei bemerkt, dass diese Forderung der Austauschsymmetrie auch in diesem allgemeinen Fall durch die Konstruktion von symmetrischen (bleiben unverändert bei der Vertauschung zweier Teilchen) und antisymmetrischen (ändern das Vorzeichen bei der Vertauschung zweier Teilchen) Wellenfunktionen erfüllt werden kann. Wir weisen zudem darauf hin, dass die Existenz von symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen sich in der Klassifizierung der Teilchen in Fermionen und Bosonen widerspiegelt (siehe Abschnitt 16.3).

16.2 Das Pauli-Prinzip

W. Pauli formulierte 1925 das berühmte *Pauli-Prinzip*, auch *Paulisches Ausschlussprinzip* genannt. Es lautet folgendermassen:

Ein System von Elektronen wird durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben.

Diese allgemeine und abstrakte Formulierung wird anschaulicher, wenn man sie auf das in Abschnitt 16.1.2 betrachtete Beispiel von zwei Elektronen anwendet, deren Wechselwirkung vernachlässigt wird. Nach dem Pauli-Prinzip wird dieses System durch die antisymmetrische Wellenfunktion $u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ beschrieben, welche nach (16.14) gegeben ist durch

$$u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)). \quad (16.15)$$

Diese Funktion verschwindet, wenn $u_a(\vec{r})$ und $u_b(\vec{r})$ die selbe Funktion darstellen, d.h. wenn die vier Quantenzahlen n_a, l_a, m_{l_a} und m_{s_a} des einen Elektrons mit den entsprechenden vier Quantenzahlen n_b, l_b, m_{l_b} und m_{s_b} des anderen Elektrons übereinstimmen. Dies bedeutet, dass ein solcher Zustand des Zweielektronensystems nicht vorkommt.

Diese Beobachtung lässt sich auf ein System bestehend aus beliebig vielen Elektronen verallgemeinern. Daraus ergibt sich folgende alternative Formulierung des Pauli-Prinzips:

Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Das Pauli-Prinzip in dieser Formulierung werden wir uns bei der Betrachtung des Atomaufbaus von Mehrelektronenatomen (siehe Abschnitt 16.4) zunutze machen. Zuvor behandeln wir jedoch in einem kleinen Einschub eine allgemeine Klassifizierung von Teilchen in zwei Sorten, die durch Wellenfunktionen verschiedener Symmetrien beschrieben werden können.

16.3 Fermionen und Bosonen

Aufgrund von experimentellen Ergebnissen lassen sich im Allgemeinen Teilchen in zwei Sorten unterteilen, *Bosonen* und *Fermionen*, die folgendermassen definiert sind:

Definition 16.1 *Wir unterscheiden die beiden folgenden Teilchentypen:*

- a) *Teilchen mit halbzahligem Spin ($s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$) wie zum Beispiel Elektronen, Protonen und Neutronen werden **Fermionen** genannt und werden durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben. Fermionen erfüllen das Pauli-Prinzip.*
- b) *Teilchen mit ganzzahligem Spin ($s = 0, 1, 2, \dots$) wie zum Beispiel Photonen, α -Teilchen und Helium-Atome werden **Bosonen** genannt und werden durch eine symmetrische Wellenfunktion beschrieben. Bosonen unterliegen nicht dem Pauli-Prinzip.*

Neben den Elementarteilchen¹ (Elektronen, Protonen und Neutronen) mit Spin $s = 1/2$ existieren viele Atomkerne mit halbzahligem Spin zwischen $s = 1/2$ und $s = 9/2$. Die Quantenzahl m_s kann dann jeweils alle halbzahligem Werte zwischen $-s$ und $+s$ annehmen. Ebenfalls gibt es auch einige Atomkerne mit ganzzahligem Spin zwischen $s = 0$ und $s = 6$. Entsprechend kann in diesem Fall die Quantenzahl m_s alle ganzzahligen Werte zwischen $-s$ und $+s$ annehmen.

16.4 Der Aufbau von Mehrelektronenatomen

Wir kommen nun zu einer qualitativen Betrachtung des Aufbaus von Mehrelektronenatomen anhand des *Schalenmodells*. Wie in der Einleitung erwähnt, ergibt sich dieses einfachste Modell direkt aus den Resultaten der Berechnungen zum Wasserstoffatom.

Die Zustände der Elektronen werden ausgehend vom Wasserstoffatommodell durch die vier Quantenzahlen n , l , m_l und m_s beschrieben, für die gilt

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad (16.16)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1, \quad (16.17)$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad (16.18)$$

$$m_s = \pm 1/2. \quad (16.19)$$

¹Aus heutiger Sicht gelten die Teilchen, welche im Standardmodell der Teilchenphysik aufgeführt sind als Elementarteilchen. Im Rahmen dieses Skripts, sind jedoch die Elektronen, Protonen und Neutronen die kleinsten Bestandteile der Atome und aus diesem Grund fassen wir diese drei Teilchen unter dem Namen Elementarteilchen zusammen.

Alle Zustände, die zu einer festen Hauptquantenzahl n gehören, bilden dabei eine *Schale*, alle Zustände, die zu einer festen Drehimpulsquantenzahl l gehören, bilden eine *Unterschale*. In einer Unterschale hat es demzufolge Platz für $(2s + 1)(2l + 1) = 2(2l + 1)$ Elektronen und in einer Schale für $\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2$ Elektronen.

Wir kommen nun zur Besetzung der Elektronenzustände und damit der Schalen und Unterschalen von Atomen durch Elektronen. Diese erfolgt nach zwei Prinzipien:

1. Pauli-Prinzip (siehe Abschnitt 16.2): Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.
2. Ein Atom nimmt einen stabilen Zustand ein, wenn seine Gesamtenergie minimal ist.

Für die Angabe der Besetzung der Elektronenzustände und damit zur Charakterisierung des Elektronenzustands eines Atoms verwendet man die folgende Notation: Man gibt die Hauptquantenzahl n gefolgt von der Drehimpulsquantenzahl l , bezeichnet durch den zugehörigen Buchstaben, in Klammern an und hochgestellt die Anzahl Elektronen, welche sich in dieser Unterschale befinden. Zum Beispiel gilt für das Natriumatom die Elektronenkonfiguration $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$, d.h. es befinden sich jeweils zwei Elektronen in der $1s$ - und $2s$ -Unterschale, sechs Elektronen in der $2p$ -Unterschale und ein Elektron in der $3s$ -Unterschale.

Wir werden nun auf die Elektronenkonfigurationen der Atome eingehen und damit den Aufbau des Periodensystems erläutern.

16.4.1 Das Periodensystem der Elemente

Wir betrachten nun ausgehend vom Wasserstoffatom die Atome des Periodensystems (vgl. Abb. 7.3, indem wir die Elektronenzustände schrittweise nach den oben genannten Regeln mit Elektronen besetzen).

Bis zu Argon mit der Ordnungszahl 18 (Ende Periode² III) werden die Zustände der Reihe nach besetzt, d.h. das Füllen der Unterschalen erfolgt in der Reihenfolge $1s$, $2s$, $2p$, $3s$ und $3p$ (siehe Tab. 16.1).

Anschliessend erfolgt eine erste Ausnahme. Da die $4s$ -Unterschale energetisch tiefer liegt als die $3d$ -Unterschale, werden die nächsten beiden Elektronen in der $4s$ -Unterschale untergebracht (Kalium und Calcium). Es folgt dann mit kleinen Ausnahmen die Besetzung der $3d$ -Unterschale mit zehn weiteren Elektronen (Scandium bis Zink). Damit sind alle Zustände mit $n = 3$ besetzt und die nächsten sechs Elektronen finden in der $4p$ -Unterschale Platz (Gallium bis Krypton). Somit ist die IV. Periode abgeschlossen.

Die V. Periode wird analog zur IV. Periode mit Elektronen gefüllt: Zwei Elektronen finden in der $5s$ -Unterschale (Rubidium und Strontium) Platz, mit

²Die Reihen des Periodensystems werden Perioden und die Spalten Gruppen und Nebengruppen genannt (vgl. Abschnitt 7.3).

Ordnungszahl (Z)	Symbol	Bezeichnung	Elektronenkonfiguration
1	H	Wasserstoff	$(1s)^1$
2	He	Helium	$(1s)^2$
3	Li	Lithium	$(1s)^2(2s)^1$
4	Be	Beryllium	$(1s)^2(2s)^2$
5	B	Bor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^1$
6	C	Kohlenstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$
7	N	Stickstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$
8	O	Sauerstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^4$
9	F	Fluor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^5$
10	Ne	Neon	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$
11	Na	Natrium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$
12	Mg	Magnesium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2$
13	Al	Aluminium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^1$
14	Si	Silicium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$
15	P	Phosphor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^3$
16	S	Schwefel	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4$
17	Cl	Chlor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$
18	Ar	Argon	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6$

Tab. 16.1: Die Elektronenkonfigurationen der Atome mit Ordnungszahlen 1 - 18 des Periodensystems.

kleinen Ausnahmen zehn Elektronen in der $4d$ -Unterschale (Yttrium bis Cadmium) und sechs Elektronen in der $5p$ -Unterschale (Indium bis Xenon).

Zum Start der VI. Periode werden zwei Elektronen in der $6s$ -Unterschale platziert (Cäsium und Barium). Dann folgen mit kleinen Ausnahmen vierzehn Elektronen in der $4f$ -Unterschale (Lanthan bis Ytterbium) und zehn Elektronen in der $5d$ -Unterschale (Lutetium bis Quecksilber) und zum Abschluss der VI. Periode sechs Elektronen in der $6p$ -Unterschale (Thallium bis Radon).

Die Besetzung der Elektronenzustände in der VII. und damit letzten Periode erfolgt nach dem selben Muster wie bei der VI. Periode. Die $7s$ -Unterschale wird mit zwei Elektronen gefüllt (Francium und Radium), die $5f$ -Unterschale mit vierzehn (Actinium bis Lawrencium), die $6d$ -Unterschale mit zehn (Rutherfordium bis Copernicium) und die $7p$ -Unterschale mit sechs (Ununtrium bis Ununoctium).

Für einige Gruppen von Atomen existieren in der Literatur spezielle Namen, die wir hier kurz auflisten:

- Die Atome, bei denen die d - oder f -Unterschalen besetzt werden, werden *Übergangselemente* genannt.
- Die Atome, bei denen die d -Unterschalen besetzt werden, heißen *Übergangsmetalle*. Die Atome der $3d$ -Unterschale (Scandium bis Zink) erhalten den Namen *Eisengruppe*, die Atome der $4d$ -Unterschale (Yttrium bis Cad-

mium) *Palladiumgruppe* und die Atome der $5d$ -Unterschale (Lutetium bis Quecksilber) *Platingruppe*.

- Die Atome Lanthan bis Ytterbium der $4f$ -Unterschale nennt man *Lanthanoide* oder *seltene Erden* und die Atome Actinium bis Lawrencium der $5f$ -Unterschale *Actinoide*.

Allgemein bestimmen die äussersten Elektronen die chemischen Eigenschaften eines Atoms. Aus diesem Grund haben Atome, welche in der selben Gruppe des Periodensystems positioniert sind, ähnliche chemische Eigenschaften. Auf die Eigenschaften der Atome der ersten und letzten Gruppe gehen wir hier beispielhaft ein.

Die Alkali-Atome

Die Alkali-Atome Lithium bis Francium befinden sich in der ersten Gruppe des Periodensystems und besitzen ein Elektron in der äussersten Schale. Auf das äusserste Elektron wirkt aufgrund der Abschirmung der anderen Elektronen eine reduzierte und relativ geringe Kernladung. Deshalb kann das äusserste Elektron relativ leicht vom Atom getrennt werden. Aus diesem Grund können Alkali-Atome angenähert durch das Wasserstoffatommodell beschrieben werden (vgl. Abb. 16.2). Dies zeigt sich auch in Experimenten, die Eigenschaften von Alkali-Atomen sind denen von Wasserstoff sehr ähnlich. Z.B. sind die Atome in dieser Gruppe chemisch sehr reaktiv. Dennoch unterscheiden sich die Alkali-Atome vom Wasserstoffatom in einem wesentlichen Punkt, Wasserstoff ist weder fest noch zeigt er Eigenschaften von Metallen. Dies ist auch der Grund, weshalb Wasserstoff, obwohl es im Periodensystem auch in der ersten Gruppe aufgeführt wird, nicht zu den Alkali-Atomen gezählt wird.

Die Edelgase

Zu den Edelgasen gehören die sieben Atome der achten und letzten Gruppe des Periodensystems, d.h. Helium, Neon, Argon, Krypton, Xenon, Radon und Ununoctium. Sie zeichnen sich alle durch abgeschlossene Unterschalen aus, d.h. alle möglichen Zustände in der jeweiligen Unterschale sind mit Elektronen voll besetzt. Zum Beispiel haben in der s -Unterschale zwei, in der p -Unterschale

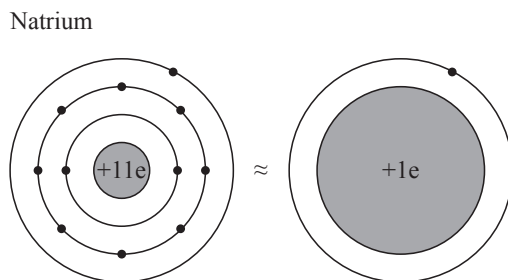


Abb. 16.2: Illustration der Ähnlichkeit der Alkali-Atome zum Wasserstoffatom am Beispiel von Natrium ($Z = 11$).

sechs, in der d -Unterschale zehn und in der f -Unterschale vierzehn Elektronen Platz. Die Elektronen in einer solchen abgeschlossenen Unterschale sind stark an den Atomkern gebunden, da die Kernladung nur schwach von den Elektronen in niedrigeren Schalen abgeschirmt wird. Aus diesem Grund sind Edelgase im Vergleich zu anderen Atomen chemisch inaktiv. Eine weitere Eigenschaft von abgeschlossenen Unterschalen ist, dass ihr Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} , ihr Gesamtspin \vec{S} und ihr Gesamtdrehimpuls \vec{J} verschwinden (vgl. Abschnitt 16.4.2).

16.4.2 Gesamtbahndrehimpuls, Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls für Mehrelektronenatome

In diesem Abschnitt besprechen wir die Bestimmung des Gesamtbahndrehimpulses, des Gesamtspins und des Gesamtdrehimpulses für ein Mehrelektronenatom. Wir unterscheiden dabei die beiden Fälle *Russell-Saunders-Kopplung* und *jj-Kopplung*. Im ersten Fall ist die Coulomb-Wechselwirkung viel grösser als die Spin-Bahn-Kopplung und im zweiten Fall ist die Coulomb-Wechselwirkung viel kleiner als die Summe aller Spin-Bahn-Kopplungen der einzelnen Elektronen. Wir gehen nun genauer auf die beiden Fälle ein:

a) *Russel-Saunders-Kopplung*

Bei Mehrelektronenatomen mit nicht zu hoher Kernladungszahl Z , d.h. bei leichten Atomen, ist die Coulomb-Wechselwirkung viel grösser als die Spin-Bahn-Kopplung. In diesem Fall koppeln die Bahndrehimpulse \vec{L}_i der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} im folgenden Sinn

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{L}_i, \quad (16.20)$$

wobei N die Anzahl der Elektronen bezeichnet. Analog koppeln die Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtspin \vec{S} , d.h. es gilt

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i. \quad (16.21)$$

Wie beim Wasserstoffatom wechselwirken aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung der resultierende Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} mit dem Gesamtspin \vec{S} und bestimmen so den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Der Betrag der Drehimpulse \vec{L} , \vec{S} und \vec{J} ist dabei auf die gleiche Art und Weise wie beim Wasserstoffatom quantisiert. Sie sind bestimmt durch die Quantenzahlen L , S und J^3 auf folgende Art

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar, \quad (16.22)$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar, \quad (16.23)$$

$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar, \quad (16.24)$$

³Für die Quantenzahlen von Mehrelektronenatomen verwendet man Grossbuchstaben.

wobei die Quantenzahlen L , S und J die folgenden Werte annehmen können

$$L = \left| \sum_{i=1}^N a_i l_i \right|, \left| \sum_{i=1}^N a_i l_i \right| + 1, \dots, \sum_{i=1}^N l_i - 1, \sum_{i=1}^N l_i, \quad (16.25)$$

$$S = \left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right|, \left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right| + 1, \dots, \sum_{i=1}^N s_i - 1, \sum_{i=1}^N s_i, \quad (16.26)$$

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S, \quad (16.27)$$

wobei l_i und s_i die Bahndrehimpulsquantenzahlen bzw. Spinquantenzahlen der einzelnen Elektronen bezeichnen und die $a_i \in \{-1, 1\}$ so gewählt sind, dass $\left| \sum_{i=1}^N a_i l_i \right|$ bzw. $\left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right|$ minimal werden. Zum Beispiel bedeutet dies im Fall $N = 2$

$$L = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2, \quad (16.28)$$

$$S = |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2 - 1, s_1 + s_2, \quad (16.29)$$

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S. \quad (16.30)$$

b) *jj-Kopplung*

Bei Mehrelektronenatomen mit hoher Kernladungszahl Z , d.h. bei schweren Atomen, ist die Coulomb-Wechselwirkung viel kleiner als die Spin-Bahn-Kopplung der einzelnen Elektronen. Es ist dann nicht mehr möglich einen Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} und einen Gesamtspin \vec{S} zu definieren, sondern die Bahndrehimpulse \vec{L}_i und Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen koppeln einzeln zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J}_i der einzelnen Elektronen und diese wiederum zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J} gemäss

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{J}_i. \quad (16.31)$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass in der Realität bei den meisten Atomen eine Mischform zwischen Russell-Saunders und *jj*-Kopplung vorliegt. Zur Veranschaulichung besprechen wir nun die Russell-Saunders-Kopplung für ein Atom mit zwei Elektronen.

Beispiel: Atom mit zwei Elektronen

Wir betrachten ein Atom mit zwei Elektronen, welche durch die Bahndrehimpulsquantenzahlen $l_1 = 1$ und $l_2 = 2$, sowie die Spinquantenzahlen $s_1 = s_2 = 1/2$ beschrieben werden. Die Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L kann in diesem Fall die folgenden drei Werte annehmen

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2 = 1, 2, 3 \quad (16.32)$$

und die Gesamtspinquantenzahl S die beiden Werte

$$S = |s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2 = 0, 1. \quad (16.33)$$

Damit ergeben sich für die Gesamtdrehimpulsquantenzahl J fünf Möglichkeiten

$$J = |L - S|, \dots, L + S = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (16.34)$$

Spektroskopische Notation

Für die Zustände von Mehrelektronenatomen verwendet man im Vergleich zum Wasserstoffatom eine geringfügig angepasste Notation. In Anlehnung an (14.41) gilt für Mehrelektronenatome:

Ein Zustand eines Mehrelektronenatoms mit Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L , Gesamtspinquantenzahl S und Gesamtdrehimpulsquantenzahl J erhält folgende Bezeichnung

$${}^{2S+1}L_J, \quad (16.35)$$

wobei für L jeweils der entsprechende Grossbuchstabe S ($L = 0$), P ($L = 1$), D ($L = 2$), ... einzusetzen ist. Bei Atomen mit einem einzigen Elektron in der äussersten Unterschale wird die Hauptquantenzahl n dieses Elektrons der Bezeichnung vorangestellt.

Es sei bemerkt, dass im Fall $L > S$ der vor dem Buchstaben hochgestellte Index $(2S + 1)$ gerade die Multiplizität des Zustands angibt, d.h. die Zahl der Möglichkeiten den Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} und den Gesamtspin \vec{S} zum Gesamtdrehimpuls \vec{J} zu kombinieren. Dabei werden die zu den drei Werten $S = 0, 1/2, 1$ der Gesamtspinquantenzahl zugehörigen Zustände mit Namen versehen:

- Für $S = 0$ ist die Multiplizität $2S + 1 = 1$ und es existiert folglich nur ein Zustand mit $J = L$ den man *Singulett-Zustand* nennt.
- Für $S = 1/2$ existieren die $2S + 1 = 2$ mögliche Zustände mit $J = L - 1/2$ und $J = L + 1/2$. Diese bilden zusammen ein *Dublett*.
- Für $S = 1$ gibt es $2S + 1 = 3$ mögliche Zustände mit $J = L - 1$, $J = L$ und $J = L + 1$. Diese bilden zusammen ein *Triplet*.

Im Fall $S < L$ ist die Multiplizität gegeben durch $2L + 1$.

Zum Abschluss dieses Abschnitts geben wir als Beispiel die Notation für das Natriumatom an. Nach Tab. 16.1 hat Natrium elf Elektronen mit einer Elektronenkonfiguration $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$. Die drei Unterschalen $1s$, $2s$ und $2p$ sind abgeschlossen und haben daher verschwindende Quantenzahlen L , S und J . Daher genügt es das äusserste Elektron, welches sich im Zustand $n = 3$, $l = 0$ und $s = 1/2$ befindet, zu betrachten. Demzufolge gilt für das Natriumatom $L = 0$, $S = 1/2$ und $J = 1/2$ und damit die Bezeichnung $3^2S_{1/2}$, wobei wir die Hauptquantenzahl $n = 3$ des Zustands des äussersten Elektrons der Bezeichnung vorangestellt haben.

16.4.3 Hundzsche Regeln

Wir haben bisher die Elektronenkonfigurationen der einzelnen Atome kennengelernt, welche die Atome in ihrem Grundzustand einnehmen (siehe Abschnitt 16.4.1). Jedoch wissen wir noch nicht welchen Zustand $^{2S+1}L_J$ das Atom genau einnimmt. Insbesondere die Besetzung von nicht abgeschlossenen Schalen ist noch zu klären.

Eine Antwort liefern die *Hundschen Regeln*, die nach dem Physiker Friedrich Hund benannt sind und auf empirischen Resultaten beruhen. Sie geben an, welche Werte die Quantenzahlen L , S und J für ein Atom im Grundzustand annehmen. Sie lauten folgendermassen:

Hundsche Regeln

Im Grundzustand besetzen die Elektronen eines Atoms unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips die Zustände nach den folgenden Regeln:

1. Die Gesamtspinquantenzahl S nimmt den maximal möglichen Wert an.
2. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S , liegt derjenige mit maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L energetisch am tiefsten.
3. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S und maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L bildet bei weniger als halbgefüllten Schalen der Zustand mit $J = |L - S|$ (minimales J) den Grundzustand, sonst der Zustand mit $J = L + S$ (maximales J).

Es sei bemerkt, dass manchmal auch die in Abschnitt 16.4.1 im Rahmen der Behandlung der Edelgase angesprochene Regel, dass für abgeschlossene Unterschalen $L = S = J = 0$ ist, als weitere Hundzsche Regel aufgeführt wird.

Wir geben hier eine kurze Motivation der beiden ersten Regeln an und verweisen für genauere Ausführungen auf weiterführende Literatur (z.B. [10]). Dazu benützen wir die am Anfang des Abschnitts 16.4 aufgeführte Regel, dass ein Atom dann einen stabilen Zustand einnimmt, wenn seine Gesamtenergie minimal ist:

1. Aus der *ersten Hundschen Regel* folgt, dass die Zustände einer Unterschale (feste Quantenzahlen n und l) zunächst mit ungepaarten Elektronen derselben Spinquantenzahl m_s , d.h. mit paralleler Spinausrichtung, besetzt werden (maximiert Gesamtspinquantenzahl S). Solche Elektronen mit derselben Spinquantenzahl m_s haben aufgrund des Pauli-Prinzips unterschiedliche Quantenzahlen m_l und daher einen maximalen räumlichen Abstand. Dies hat eine minimale Coulomb-Wechselwirkung (Abstossung) zwischen den Elektronen zur Folge. Daher liegt der Zustand mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S energetisch am tiefsten und wird von den Elektronen des Atoms im Grundzustand eingenommen.

2. Aus der *zweiten Hundschen Regel* folgt unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips für die Besetzung der Zustände einer Unterschale (feste Quantenzahlen n und l), dass neben der Bevorzugung paralleler Spins, zuerst der Zustand mit maximalem m_l besetzt wird, anschliessend der Zustand mit $m_l - 1$, usw. (maximiert Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L). Aufgrund dieser Besetzung sind die Elektronen so weit wie möglich vom Zentrum und dadurch auch voneinander entfernt. Dies hat wiederum eine minimale Coulomb-Wechselwirkung (Abstossung) zwischen den Elektronen zur Folge. Der Effekt ist jedoch geringer als bei den Spins. Daher liegt unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S der Zustand mit maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L energetisch am tiefsten und wird von den Elektronen des Atoms im Grundzustand eingenommen.

In Tab. 16.2 sind anhand der genauen Elektronenbesetzung für die Atome Bor bis Neon diese beiden Punkte illustriert⁴.

Beispiele

Wir illustrieren die Hundschen Regeln an den Atomen Wasserstoff bis Neon (vgl. Tab. 16.3), wobei wir die Elemente Wasserstoff, Helium, Bor, Kohlenstoff und Stickstoff genauer besprechen:

1. Das Wasserstoffatom

Beim Wasserstoffatom ist die Situation am einfachsten. Wir haben ein Elektron in der $1s$ -Unterschale, das entweder den „spin up“- ($m_s = 1/2$) oder den „spin-down“- ($m_s = -1/2$) Zustand einnehmen kann. Damit resultieren die Quantenzahlen $S = 1/2$, $L = 0$ und $J = L + S = 1/2$ und der Grundzustand $1^2S_{1/2}$.

Name	Elektronenkonfiguration	Besetzung der p -Unterschale		
		$m_l = 1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$
Bor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^1$	↑		
Kohlenstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$	↑	↑	
Stickstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$	↑	↑	↑
Sauerstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^4$	↑↓	↑	↑
Fluor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^5$	↑↓	↑↓	↑
Neon	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$	↑↓	↑↓	↑↓

Tab. 16.2: Die Besetzung der p -Unterschale am Beispiel der Atome Bor bis Neon nach den Hundschen Regeln 1 und 2. ↑ steht dabei für ein Elektron im „spin-up“-Zustand ($m_s = 1/2$) und ↓ für ein Elektron im „spin-down“-Zustand ($m_s = -1/2$).

⁴Es sei bemerkt, dass die p -Unterschale umgekehrt auch zuerst mit drei Elektronen mit „spin-down“ und erst anschliessend mit drei Elektronen mit „spin-up“ gefüllt werden kann oder in anderen Worten „spin-up“- und „spin-down“-Zustand sind äquivalent.

Name	S	L	J	$(n) {}^{2S+1}L_J$
Wasserstoff	1/2	0	1/2	$1^2S_{1/2}$
Helium	0	0	0	1^1S_0
Lithium	1/2	0	1/2	$2^2S_{1/2}$
Beryllium	0	0	0	1^1S_0
Bor	1/2	1	1/2	$2^2P_{1/2}$
Kohlenstoff	1	1	0	3^1P_0
Stickstoff	3/2	0	3/2	$4^3S_{3/2}$
Sauerstoff	1	1	2	3^1P_2
Fluor	1/2	1	3/2	$2^2P_{3/2}$
Neon	0	0	0	1^1S_0

Tab. 16.3: Die drei Quantenzahlen S , L und J und die spektroskopische Notation $(n) {}^{2S+1}L_J$ des Grundzustands für die Atome Wasserstoff bis Neon nach den Hundschen Regeln.

2. Das Heliumatom

Die beiden Elektronen besetzen im Grundzustand die beiden möglichen Zustände in der $1s$ -Unterschale. Für abgeschlossene Unterschalen verschwinden die drei Quantenzahl S , L und J und wird erhalten den Grundzustand 1^1S_0 .

3. Das Boratom

Für die abgeschlossenen Unterschalen $1s$ und $2s$ gilt $S = L = J = 0$ und es genügt das einzelne Elektron in der $2p$ -Unterschale zu betrachten. Nach den ersten beiden Hundschen Regeln nimmt es den Zustand $n = 2$, $l = 1$, $m_l = 1$ und $m_s = \pm 1/2$ ein. Demzufolge gilt $S = 1/2$ und $L = 1$ und da die $2p$ -Unterschale weniger als halb gefüllt ist, ergibt sich nach der dritten Hundschen Regel $J = |L - S| = 1/2$. Somit lautet der Grundzustand für das Boratom $2^2P_{1/2}$.

4. Das Kohlenstoffatom

Wie beim Boratom haben wir nur die beiden Elektronen in der $2p$ -Unterschale zu betrachten ($n_1 = n_2 = 2$ und $l_1 = l_2 = 1$). Nach der ersten Hundschen Regel haben sie parallelen Spin (beide $m_s = 1/2$ oder beide $m_s = -1/2$) und damit gilt $S = 1$. Die zweite Hundsche Regel legt nun die letzte Quantenzahl m_l fest. Unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips nimmt L für $m_{l_1} = 1$ und $m_{l_2} = 0$ den maximalen Wert 1 an. Für die letzte Quantenzahl erhalten wir nach der dritten Hundschen Regel $J = |L - S| = 0$ und somit für das Kohlenstoffatom den Grundzustand 3^1P_0 .

5. Das Stickstoffatom

Wiederum können wir uns auf die drei Elektronen in der $2p$ -Unterschale konzentrieren ($n_1 = n_2 = n_3$ und $l_1 = l_2 = l_3 = 1$). Die erste Hundsche Regel verlangt wiederum parallele Spins, womit $S = 3/2$ ist. Nach dem

Pauli-Prinzip müssen sie die Zustände zu $m_l = -1, 0$ und 1 besetzen. Wodurch nur die Möglichkeit $L = 0$ bleibt. Die Unterschale ist halb gefüllt und daher folgt nach der dritten Hundschen Regel $J = L + S = 3/2$. Stickstoff besitzt also den Grundzustand ${}^4S_{3/2}$.

Literaturverzeichnis

- [1] F. Pedrotti, L. Pedrotti, W. Bausch, und H. Schmidt, *Optik für Ingenieure, Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2005.
- [2] A.H. Compton, Phys. Rev. **21**, 483 (1923).
- [3] http://www.satgeo.de/satgeo/quicklooks/methoden/fe_physik.htm, 27.10.2010.
- [4] <http://de.wikipedia.org/wiki/Sonne>, 27.10.2010.
- [5] <http://de.wikipedia.org/wiki/Sonnenradius>, 27.10.2010.
- [6] <http://de.wikipedia.org/wiki/Emissionsgrad>, 27.10.2010.
- [7] <http://www.periodensystem.info/download/>, 22.02.2011.
- [8] H. Haken, und H. Wolf, *Atom- und Quantenphysik, Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2004.
- [9] <http://www2.selu.edu/Academics/Faculty/delbers/emission-spectra-1.jpg>, 14.01.2011.
- [10] F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I), Eine Einführung*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2002.
- [11] A. Goldberg, H.M. Schey, und J.L. Schwartz, American Journal of Physics **35**, 177 (1967).
- [12] J. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, de Gruyter, Berlin, 2006.