

Aufgabe 22

Titan hat im Grundzustand die Elektronenkonfiguration $[\text{Ar}] 3d^2 4s^2$.

- Geben Sie unter Berücksichtigung der Russel-Saunders-Kopplung und des Pauli-Prinzips alle auftretenden Terme an.
- Geben Sie den Term des Grundzustands an und erläutern Sie, wie man diesen findet.
- Welche Terme hätte man für die Konfiguration $3d^1 4s^1 4d^1 5s^1$?

Aufgabe 23

Die 3d-Orbitale werden für Übergangsmetall-Komplexe oder Übergangsmetall-Ionen in Kristallen üblicherweise als Linearkombinationen der Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}$, bei der in der Vorlesung verwendeten Vorzeichenwahl, wie folgt dargestellt:

$$d_{3z^2-r^2} \text{ (oder kurz: } d_{z^2}) \rightarrow Y_{2,0}$$

$$d_{x^2-y^2} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{2,-2} + Y_{2,2})$$

$$d_{xz} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{2,-1} + Y_{2,1})$$

$$d_{zy} \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{2,-1} - Y_{2,1})$$

$$d_{xy} \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{2,-2} - Y_{2,2})$$

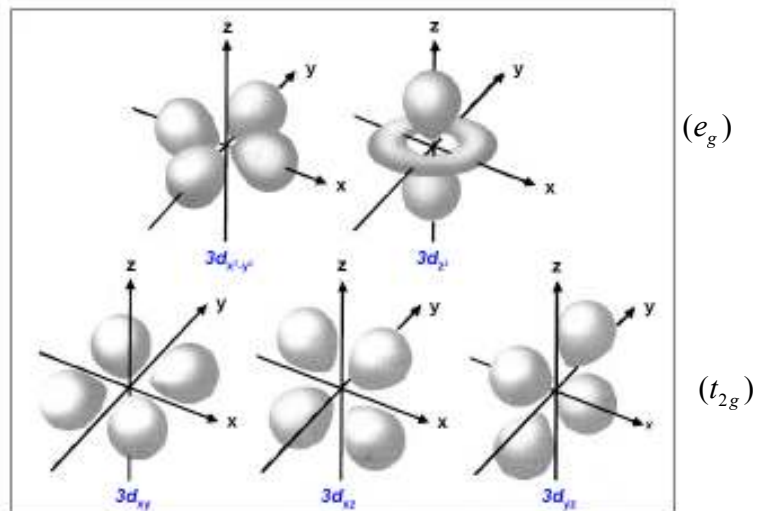


Abb. nach Mortimer, Thieme Verlag

- Zeigen Sie (unter Verwendung der Eigenschaften der $Y_{l,m}$), dass die Linearkombinationen orthogonal und normiert sind,
- dass weiterhin $l=2$, d.h. $\langle \vec{L}^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2 = 2 \cdot 3\hbar^2$ gilt, aber $\langle L_z \rangle = 0$ ist, und
- dass ein d_{xy} -Orbital ein um 45° in der xy -Ebene gedrehtes $d_{x^2-y^2}$ -Orbital ist, indem Sie in

$d_{x^2-y^2}$ den Winkel φ durch $\varphi - \frac{\pi}{4}$ ersetzen.

- Wie werden die entsprechenden p_x, p_y, p_z -Orbitale durch Linearkombinationen von $Y_{l,m}$ erzeugt?

Aufgabe 24

Berechnen Sie den Landéschen g-Faktor für den Grundzustand der dreiwertigen Ionen von Neodym ($[\text{Xe}] 4f^4 6s^2$) und Erbium ($[\text{Xe}] 4f^{12} 6s^2$).