

# Mikrozustände und Termsymbole

– Eine kurze Wiederholung aus PC-II –

Caroline Röhr

–

Vorlesung 'Anorganische Pigmente', WS 2015/2016

## Einelektronen-Fall: Quantenzahlen (QZ)

Quantelung	Drehimpuls (QZ: $d$ )		
	Bahn-	Eigen-	Gesamt-
Betrag	$ \vec{l}  = \sqrt{l(l+1)} \frac{h}{2\pi}$ mit $l = 0, \dots, (n-1)$	$ \vec{s}  = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$ mit $s = \pm \frac{1}{2}$	$ \vec{j}  = \sqrt{j(j+1)} \frac{h}{2\pi}$ $j =  l+s , \dots,  l-s $
Richtung	$ \vec{l}_z  = m_l \frac{h}{2\pi}$ mit $m_l = -l, \dots, +l$	$ \vec{s}_z  = m_s \frac{h}{2\pi}$ mit $m_s = \pm \frac{1}{2}$	$ \vec{j}_z  = m_j \frac{h}{2\pi}$ mit $m_j = -j, \dots, +j$
Energien: $E = m_d h \nu$ ( $\nu$ : Lamorfrequenz)			
Zahl der Zustände: $2d + 1$			

## Mehrelektronen-Fall

Die Beschreibung der Energien von Mehrelektronenzuständen setzt die Kenntnis voraus, wie Bahn- ( $l$ ), Eigen- ( $s$ ) und Gesamtdrehimpuls ( $j$ ) jedes einzelnen Elektrons kombinieren. Man unterscheidet zwei Kopplungsmechanismen:

- Bei der **Russel-Saunders** bzw. **LS-Kopplung** (für leichtere Elemente bis etwa  $Ln$ ) ist die Wechselwirkung der Bahndrehimpulse  $\vec{l}_i$  und der Eigendrehimpulse  $\vec{s}_i$  der Elektronen  $i$  eines Metallatoms untereinander größer als die Wechselwirkung zwischen Bahn- und Eigendrehimpuls jedes einzelnen Elektrons  $i$ .

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

- Bei der **JJ-Kopplung** (für schwerere Elemente) ist die Wechselwirkung zwischen Bahn- und Eigendrehimpuls jedes Elektrons größer als die Kopplung der verschiedenen  $\vec{l}_i$  bzw.  $\vec{s}_i$ , d.h.:

$$\vec{J} = \sum_i \vec{j} = \sum_i (\vec{s}_i + \vec{l}_i)$$

## Russel-Saunders-Kopplung

Bei der Russel-Saunders-Kopplung sind für Mehrelektronensysteme in teilweise besetzten Schalen analog zum Einelektronenfall:

- Gesamtbahnimpuls:  $|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$ ,
- Gesamteigendrehimpuls:  $|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$
- Gesamtdrehimpuls:  $|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$

Die erlaubten  $2X + 1$ -Werte (Richtungsquantelung, Projektionen in  $z$ ) sind für

- $M_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$
- $M_S$ :
  - $n$  gerade:  $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm S$
  - $n$  ungerade:  $\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm S$

Termsymbol:  $\boxed{2S+1 L_J}$

- $L = 0, 1, 2, 3, \dots$  bezeichnet mit  $S, P, D, F, \dots$
- $2S + 1$ : Spinmultiplizität ... bezeichnet als Singulett, Dublett, Triplett, ...
- $J$ : Gesamtdrehimpuls, bestimmt mit  $2J + 1$ -Möglichkeiten die Multipliett-aufspaltung des Zustandes im äußeren Magnetfeld und ist gequantelt:
  - $n$  gerade:  $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$
  - $n$  ungerade:  $\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm J$

## Regeln zur Ableitung der möglichen Zustände einer Elektronenkonfiguration

- 1 Es werden gebildet:  $M_L = \sum_{i=1}^n m_l(i)$  und  $M_S = \sum_{i=1}^n m_s(i)$
- 2 Man erstellt in einer Tabelle für alle Kombinationen von  $M_L$  und  $M_S$  alle möglichen Kombinationen von  $m_l$  und  $m_s$  der Einzelelektronenzustände (Mikrozustände) zusammen, wobei als Einschränkung
  - das Pauliprinzip nicht verletzt werden darf
  - physikalisch identische Mikrozustände nur einmal auftreten dürfen.
- 3 Man entnimmt der Tabelle die größten Werte für  $M_L$  und den zugehörigen größten  $M_S$ -Wert und bildet aus den daraus abgeleiteten  $L$ - und  $S$ -Werten das Termsymbol. Die Zahl der zu diesem Zustand gehörenden Mikrozustände ergibt sich als Produkt von Spin- und Bahnmultiplizität zu
$$(2S + 1)(2L + 1)$$
- 4 Die Streichung der Mikrozustände in der Tabelle erfolgt so, dass zu jeder für den abgeleiteten Zustand möglichen Kombination von  $M_L$  und  $M_S$  ein Mikrozustand verschwindet.
- 5 Mit den verbleibenden Mikrozuständen verfährt man erneut nach 3, bis alle möglichen Terme abgeleitet sind.

Beispiel  $d^2$ 

- ①  $l = 2$  ( $d$ -Orbitale)  $\mapsto M_L = -4, \dots, +4$  und  $s = \frac{1}{2} \mapsto M_S = -1, \dots, +1$

$M_S \backslash M_L$	+1	0	-1
+4		$\uparrow\downarrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	
+3	$\uparrow \quad \uparrow \quad \text{---} \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad \downarrow \quad \text{---} \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \downarrow \quad \text{---} \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
+2	$\uparrow \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad \text{---} \quad \downarrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \text{---} \quad \downarrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
+1	$\uparrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad \text{---} \quad \downarrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \downarrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
0	$\uparrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-1	$\text{---} \quad \uparrow \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \quad \uparrow \quad \text{---} \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \quad \downarrow \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-2	$\text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \text{---} \quad \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \text{---} \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \quad \text{---} \quad \downarrow \quad \text{---} \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-3	$\text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \downarrow \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-4		$\text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \uparrow\downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	

- ② Tabelle mit  $(2L + 1) = 9$  Zeilen und  $(2S + 1) = 3$  Spalten

Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G \uparrow\uparrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	
+3	$\uparrow \uparrow \text{---} \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \downarrow \text{---} \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \downarrow \text{---} \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
+2	$\uparrow \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \text{---} \downarrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
+1	$\uparrow \text{---} \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \text{---} \text{---} \downarrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \text{---} \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
0	$\uparrow \text{---} \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \text{---} \text{---} \downarrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \text{---} \text{---} \downarrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-1	$\text{---} \uparrow \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \uparrow \text{---} \downarrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \downarrow \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-2	$\text{---} \uparrow \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \uparrow \text{---} \downarrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \downarrow \text{---} \uparrow \text{---}$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-3	$\text{---} \text{---} \uparrow \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \text{---} \uparrow \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\text{---} \text{---} \downarrow \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-4		$\text{---} \text{---} \text{---} \uparrow \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	

③  $M_L(\max) = +4$  und  $M_S = 0 \mapsto ^1 G$

Beispiel  $d^2$ 

$M_d$	+1	0	-1
+4		$^1G$ $\uparrow\uparrow$ $---$ $---$ $---$ $---$	
+3	$\uparrow$ $\uparrow$ $---$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\uparrow$ $\downarrow$ $---$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\downarrow$ $\uparrow$ $---$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
+2	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\downarrow$ $\uparrow$ $---$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
+1	$\uparrow$ $---$ $---$ $\uparrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\uparrow$ $---$ $---$ $\downarrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\downarrow$ $---$ $---$ $\downarrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
0	$\uparrow$ $---$ $---$ $\uparrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\uparrow$ $---$ $---$ $\downarrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$\downarrow$ $---$ $---$ $\downarrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
-1	$---$ $\uparrow$ $---$ $---$ $\uparrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$---$ $\uparrow$ $---$ $---$ $\downarrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$---$ $\downarrow$ $---$ $---$ $\downarrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
-2	$---$ $\uparrow$ $---$ $---$ $\uparrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$---$ $\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$---$ $\downarrow$ $---$ $\uparrow$ $---$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
-3	$---$ $---$ $\uparrow$ $\uparrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$---$ $---$ $\uparrow$ $\downarrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$	$---$ $---$ $\downarrow$ $\downarrow$ $l=2$ $l=1$ $l=0$ $l=-1$ $l=-2$
-4		$---$ $---$ $---$ $\uparrow\downarrow$	

④ insgesamt  $(2L + 1)(2S + 1) = 9 \cdot 1 = 9$  entartete Zustände



Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G$ $\uparrow\uparrow$ $-\quad-\quad-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	
+3	$^3F$ $\uparrow \quad \uparrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad \downarrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \downarrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
+2	$\uparrow \quad -$ $\uparrow \quad -$ $-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad -$ $\downarrow \quad -$ $-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \uparrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
+1	$\uparrow \quad -$ $-\quad-$ $\uparrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad -$ $-\quad-$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \uparrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
0	$\uparrow \quad -$ $-\quad-$ $-\quad-$ $\uparrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\uparrow \quad -$ $-\quad-$ $-\quad-$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$\downarrow \quad \uparrow$ $-\quad-\quad-$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-1	$-\quad-$ $\uparrow \quad -$ $-\quad-$ $\uparrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$-\quad-$ $\uparrow \quad -$ $-\quad-$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$-\quad-$ $\downarrow \quad -$ $-\quad-$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-2	$-\quad-$ $-\quad-$ $\uparrow \quad -$ $\uparrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$-\quad-$ $-\quad-$ $\uparrow \quad -$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$-\quad-$ $-\quad-$ $\downarrow \quad -$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-3	$-\quad-$ $-\quad-$ $-\quad-$ $\uparrow \quad \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$-\quad-$ $-\quad-$ $-\quad-$ $\uparrow \quad -$ $\downarrow \quad -$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	$-\quad-$ $-\quad-$ $-\quad-$ $\downarrow \quad \uparrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>
-4		$-\quad-$ $-\quad-$ $-\quad-$ $\uparrow \quad \downarrow$ <small><math>l=2 \quad l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad l=-2</math></small>	

③ neues  $M_L(\max) = +3$  und  $M_S = +1 \mapsto ^3 F$

Beispiel  $d^2$ 

$M_d$	+1	0	-1
+4		$^1G$ $\uparrow\uparrow$ $-\quad-\quad-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	
+3	$^3F$ $\uparrow$ $\uparrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\uparrow$ $\downarrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\downarrow$ $\uparrow$ $-\quad-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
+2	$\uparrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\uparrow$ $-\quad-\quad\downarrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\downarrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
+1	$\uparrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\uparrow$ $-\quad-\quad\downarrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\downarrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
0	$\uparrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\uparrow$ $-\quad-\quad\downarrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$\downarrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
-1	$\uparrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-\quad\downarrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$-\quad-\quad\downarrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
-2	$\uparrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-\quad\downarrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$-\quad-\quad\downarrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
-3	$-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$-\quad-\quad\uparrow$ $-\quad-\quad\downarrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	$-\quad-\quad\downarrow$ $-\quad-\quad\uparrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>
-4		$-\quad-\quad-\quad-\quad\uparrow\downarrow$ <small><math>l=2</math> <math>l=1</math> <math>l=0</math> <math>l=-1</math> <math>l=-2</math></small>	

④ insgesamt  $(2L + 1)(2S + 1) = 7 \cdot 3 = 21$  entartete Zustände

Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G$	
+3	$^3F$		$^1D$
+2			
+1			
0			
-1			
-2			
-3			
-4			

③ neues  $M_L(\max) = 2$  und  $M_S = 0 \mapsto ^1D$

Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G$ $\uparrow\uparrow$ $---$ $---$ $---$ $---$	
+3	$^3F$ $\uparrow$ $\uparrow$ $---$ $---$	$\uparrow$ $\downarrow$ $---$ $---$	$\downarrow$ $\downarrow$ $---$ $---$
+2	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$	$\downarrow$ $\uparrow$ $---$ $---$
+1	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$	$\downarrow$ $---$ $\uparrow$ $---$
0	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$	$\downarrow$ $---$ $\uparrow$ $---$
-1	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$	$\downarrow$ $---$ $\uparrow$ $---$
-2	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$	$\downarrow$ $---$ $\uparrow$ $---$
-3	$\uparrow$ $---$ $\uparrow$ $---$	$\uparrow$ $---$ $\downarrow$ $---$	$\downarrow$ $---$ $\uparrow$ $---$
-4		$\uparrow\downarrow$	

④ insgesamt  $(2L + 1)(2S + 1) = 5 \cdot 1 = 5$  entartete Zustände

Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G$	
+3	$^3F$		$^1D$
+2			
+1			
0			
-1			
-2			
-3			
-4			

③ neues  $M_L(max) = +1$  und  $M_S = 0 + 1 \mapsto ^3P$

Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G$ ↑↑ --- ---	
+3	$^3F$ ↑ ↑   ↓ ↓	↑ ↓   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↓
+2	↑ ↓   ↑ ↓	↑ ↓   ↓ ↑	↓ ↓   ↓ ↓
+1	↑ ---   ↑ ↓	↑ ---   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↓
0	↑ ---   ↑ ↓	↑ ↓   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↓
-1	↓ ---   ↓ ↑	↓ ---   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↓
-2	↓ ↑   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↑	↓ ↓   ↓ ↓
-3	↓ ↓   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↓	↓ ↓   ↓ ↓
-4		↓ ↓	

④ insgesamt  $(2L + 1)(2S + 1) = 3 \cdot 3 = 9$  entartete Zustände

Beispiel  $d^2$ 

$M_L \backslash M_S$	+1	0	-1
+4		$^1G$ ↑↑ --- ---	
+3	$^3F$ ↑ ↑   ↓ ↓	↑ ↓   ---   ↓ ↑   ---	↓ ↓   ↓ ↓   ↓ ↓
+2	↑ ↑   ↑ ↑   ---	↑ ↓   ↓ ↓   ↓ ↑   ---	↓ ↓   ↓ ↓   ↓ ↓
+1	↑ ---   ↑ ---   ↑ ---	↑ ---   ↓ ---   ↓ ---   ↑ ---	↓ ---   ↓ ---   ↓ ---
0	↑ ---   --- ↑   --- ↑   --- ↑	↑ ---   ↓ ---   ↓ ---   ↑ ---	↓ ---   ↓ ---   ↓ ---
-1	↑ ---   --- ↑   --- ↑   --- ↑	↑ ---   ↓ ---   ↓ ---   ↑ ---	↓ ---   ↓ ---   ↓ ---
-2	↑ ↑   ↑ ↑   ---	↑ ↓   ↓ ↓   ↓ ↑   ---	↓ ↓   ↓ ↓   ↓ ↓
-3	↑ ---   --- ↑   --- ↑   --- ↑	↑ ---   ↓ ---   ↓ ---   ↑ ---	↓ ---   ↓ ---   ↓ ---
-4		↑ ↓	

③ neues  $M_L(\max) = 0$  und  $M_S = 0 \mapsto ^1S \mapsto$  ENDE

## Beispiel $d^2$

Mikrozustände insgesamt:  ${}^1G, {}^3F, {}^1D, {}^3P, {}^1S$



Terme für alle  $d^n$ -Konfigurationen (Vorlage 5)

Konfiguration	Terme
$d^1, d^9$	$^2D$
$d^2, d^8$	$^3F, ^3P, ^1G, ^1D, ^1S$
$d^3, d^7$	$^4F, ^4P, ^2H, ^2G, ^2F, 2 \times ^2D, ^2P$
$d^4, d^6$	$^5D, ^3H, ^3G, 2 \times ^3F, ^3D, 2 \times ^3P, ^1I, 2 \times ^1G, ^1F, 2 \times ^1D, 2 \times ^1S$
$d^5$	$^6S, ^4G, ^4F, ^4D, ^4P, ^2I, ^2H, 2 \times ^2G, 2 \times ^2F, 3 \times ^2D, ^2I, ^2S$

! noch kein Ligandenfeld, nur für kugelsymmetrische freie Atome/Ionen !