

TC1 – Grundlagen der Theoretischen Chemie

Irene Burghardt (burghardt@chemie.uni-frankfurt.de)

Praktikumsbetreuung:

Konstantin Falahati (k.falahati@yahoo.com)

Jan von Cosel (jvcosel@theochem.uni-frankfurt.de)

Robert Binder (rbinder@theochem.uni-frankfurt.de)

Tianji Ma (beiai@hotmail.de)

Vorlesung: Di 10h-12h, Fr 9h-10h

Übungen: Fr 10h-11h

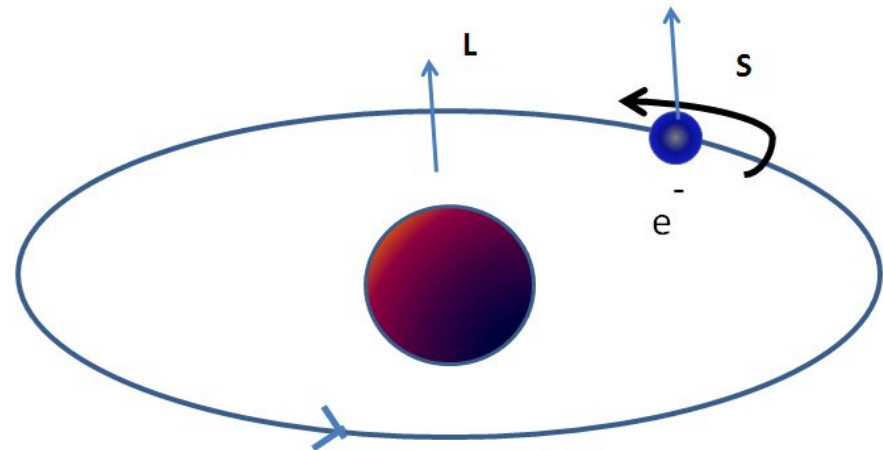
Web site: <http://www.theochem.uni-frankfurt.de/TC1>

Spin-Quantenzahlen: s, m_s

$$|\psi_{nlm_l m_s}\rangle = |\psi_{nlm_l}\rangle |\alpha\rangle \quad (s = 1/2, m_s = 1/2)$$

$$\text{oder } |\psi_{nlm_l m_s}\rangle = |\psi_{nlm_l}\rangle |\beta\rangle \quad (s = 1/2, m_s = -1/2)$$

- intrinsischer, nichtganzzahliger Drehimpuls des Elektrons
- entdeckt von Goudsmit, Uhlenbeck (1925)
- $\hat{s}^2 |\alpha\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\alpha\rangle$; $\hat{s}_z |\alpha\rangle = \frac{1}{2} \hbar |\alpha\rangle$
 $\hat{s}^2 |\beta\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\beta\rangle$; $\hat{s}_z |\beta\rangle = -\frac{1}{2} \hbar |\beta\rangle$
- formal identisch zu einem Drehimpuls mit $l = \frac{1}{2}$:
 $\hat{l}^2 |\psi_{lm}\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\psi_{lm}\rangle$;
 $\hat{l}_z |\psi_{lm}\rangle = m_l \hbar |\psi_{lm}\rangle$



Singulett- und Tripletzustände



4 Kombinationen für zwei Spins $1/2$:

Gesamtspin $S = 1$: Triplet)

$$\begin{aligned} &|\alpha_1\rangle|\alpha_2\rangle \\ &(1/\sqrt{2})(|\alpha_1\rangle|\beta_2\rangle + |\beta_1\rangle|\alpha_2\rangle) \\ &|\beta_1\rangle|\beta_2\rangle \end{aligned}$$

Gesamtspin $S = 0$: Singulett)

$$(1/\sqrt{2})(|\alpha_1\rangle|\beta_2\rangle - |\beta_1\rangle|\alpha_2\rangle)$$

NB: Multiplizität $= 2S + 1$

Background: Addition von Drehimpulsen (Spins)

Addition zweier Drehimpulse $\hat{l}_1$ und $\hat{l}_2$ führt zu einem Gesamtdrehimpuls $\hat{L} = \hat{l}_1 + \hat{l}_2$, so dass

$$\hat{L}^2 |l_1 m_{l_1}, l_2 m_{l_2}; L M_L\rangle = \hbar^2 L(L+1) |l_1 m_{l_1}, l_2 m_{l_2}; L M_L\rangle$$

wobei $L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$

Die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses nimmt folgende Werte an:

$$\hat{L}_z |l_1 m_{l_1}, l_2 m_{l_2}; L M_L\rangle = \hbar M_L |l_1 m_{l_1}, l_2 m_{l_2}; L M_L\rangle$$

wobei $M_L = L, L - 1, \dots, -L$

“Gepaarte” und “ungepaarte” Elektronen

- das Bild “gepaarter” ($\uparrow\downarrow$) und “ungepaarter” ($\uparrow\uparrow$) Elektronen ist vereinfacht . . .
- Die Konfiguration $+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}$ ($\alpha\beta$) taucht sowohl im Singulett- als auch in den Triplett-Zuständen auf!