

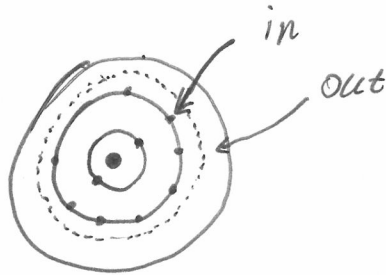
קירוב הטלדה המרכזי:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right] + \sum_{i>j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

$$r_{ij} = |r_i - r_j|$$

אם נעלה את איבר האינטראקציה בין האלקטרונים & כיוון ריבועי וכיוון מט'ק', נאשר את אלקטרונים את הכיוון המט'ק' ונשארים עם פוטנציאל אפקטיבי עבור כל קליפה

$$z_{\text{eff},i} = (z - \sigma_i)$$



תבונה 4: מודע הקדמיות

באלמנטים שליליים הקירוב השדה המרכזי, אנו יכולים לראות את הפונקציות למשוואת שרשרת של כל אטום העצרת הפונקציות ספריות, וכן המספרים הקוונטיים הראשוניים הם: m, l, n, m_s , כאשר:

$$n > 0$$

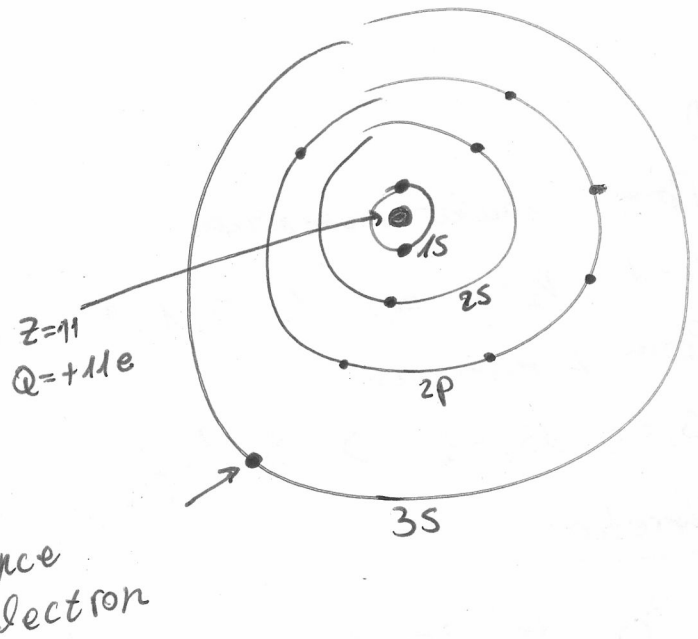
$$l \leq (n-1)$$

$$-l \leq m_l \leq l$$

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

המצבים האלקטרוניים בהם $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ מיוצגים ע"י s, p, d, f, \dots והאנרגיה גבוהה רק במ! l (לפסגה רקבול) ע"י עיקרון האיסור של פאולי, אנו רואים כי כל מצב l, n יכול להיות מאוכלס ע"י 2 אלקטרונים עם היוג, המע" ספין הפוך. ערטיגה האורביטלים כאלו עמוק 34 בפוקס. סדר מילוי האורביטלים הוא:

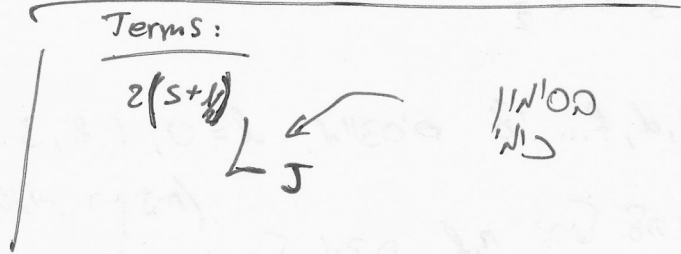
1s					
2s	2p				
3s	3p	3d			
4s	4p	4d	4f		
5s	5p	5d	5f	5g	
6s	6p	6d	6f	6g	6h
7s					



קט"מ ע"י מודל הקלאסי:

<u>element</u>	<u>Z</u>	<u>electronic configuration</u>
Li	3	$1s^2 2s^1$
Na	11	$\frac{1s^2 2s^2 2p^6 3s^1}{[Ne]}$
K	19	$[Ar] 4s^1$
Rb	37	$[Kr] 5s^1$
Cs	55	$[Xe] 6s^1$

ט"מ קט"מ = קט"מ קלאסי



קט"מ ע"י מודל

קט"מ ע"י מודל הקלאסי = קט"מ קלאסי

- $2p^1 3p^1$ (1)
- $2p^5$ (2)

פתרון:

(1)
 From angular momentum:
 $l_1 = 1, l_2 = 1 \Rightarrow L = 0, 1, 2 \Rightarrow S, P, D$
 From 2 electrons:
 $s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow S = 1, 0$

therefore:

$^3D, ^1D, ^3P, ^1P, ^3S, ^1S$

$J = L + S \Rightarrow ^3D_3, ^3D_2, ^3D_1, ^1D_2, ^3P_2, ^3P_1, ^3P_0, ^3S_1, ^1S_0$
 1P_1

2)

הקונפיגורציה $2p^5$ שלושה ערך אחד בקל'פה חיצונית
 ואם, אם נסגור 180:

$$\left. \begin{array}{l} L=l=1 \\ S=s=1/2 \end{array} \right\} \Rightarrow 2p$$

$$J = \underbrace{1 + \frac{1}{2}}_{3/2}, \underbrace{1 - \frac{1}{2}}_{1/2}$$

Terms:

$${}^2P_{3/2}, {}^2P_{1/2}$$