

"You want proof? I'll give you proof!"

6-2 / 2 Auswahlregeln

Übergänge aufgrund Dipolwechselwirkung mit elektrischem Feld der elektromagnetischen Welle:

• Wahrscheinlichkeit bestimmt durch Übergangsdipolmoment

$$\left(\vec{M}_{ij}\right)_n \equiv \int \psi_i^* e_0 r_n \psi_j dV; \quad n = x, y, z$$

- nur möglich, wenn \vec{M}_{ij} mindestens eine von Null verschiedene Komponente besitzt

6-2/3 Auswahlregeln für Einelektronenzustände

Für Übergänge zwischen verschiedenen Zuständen mit der Wellenfunktion: $\psi_{nlm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot R_{nl}(r) \cdot \theta_m^l(\vartheta) \cdot e^{im\varphi}$

gelten folgende Auswahlregeln:

• Paritätsauswahlregel:

Wellenfunktionen besitzen definierte Parität: $\psi(\vec{r}) = \pm \psi(-\vec{r})$ Die am Übergang beteiligten Zustände müssen unterschiedliche Parität besitzen.

• Auswahlregel für magnetische Quantenzahl:

Erlaubt sind nur Übergänge mit $\Delta m = \pm 1 \rightarrow \text{zirkular polarisiertes Licht}$ $\Delta m = 0 \rightarrow \text{linear polarisiertes Licht}$

Auswahlregel für Bahndrehimpulsquantenzahl:

Erlaubt sind nur Übergänge mit $\Delta l = \pm 1$

6-2 / 4 Auswahlregeln für Mehrelektronenatome

Für Übergänge zwischen verschiedenen Zuständen gelten folgende Auswahlregeln:

• Auswahlregel für Bahndrehimpulsquantenzahl: Erlaubt sind nur Übergänge mit $\Delta L = \pm 1$

• Auswahlregel für magnetische Quantenzahl:

Erlaubt sind nur Übergänge mit $\Delta M = \pm 1 \rightarrow \text{zirkular polarisiertes Licht}$ $\Delta M = 0 \rightarrow \text{linear polarisiertes Licht}$

Auswahlregel für Spinquantenzahl (bei LS-Kopplung):

Auswahlregel für Gesamtdrehimpulsquantenzahl:

 $\Delta J = 0, \pm 1$ aber nicht $J = 0 \rightarrow J = 0$