

Singulets, doblets i triplets:

Recordem també els singulets, doblets i triplets en l'àtom d'hidrògen.

Quan tenim un àtom amb configuració $1s^1$, tenim 1 possible ψ :

$$\psi_{singulet} = 1s(1)$$

Quan tenim 1 electró desaparellat, $m_s = \frac{1}{2}$ o $m_s = -\frac{1}{2}$; per tant tenim un doblet amb configuració $1s^1 2s^1$ $m_s = -1/2, 1/2$

$$\psi_1 = \frac{1s(1)1s(2)+2s(2)2s(1)}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_2 = \frac{1s(1)2s(2)+1s(2)2s(1)}{\sqrt{2}}$$

En canvi, si la configuració és $1s^2 2s^1$, ens trobem amb un triplet

$$\psi_1 = \frac{1s(1)1s(2)2s(3)+1s(2)1s(1)2s(3)+1s(3)2s(1)2s(2)}{\sqrt{3}}$$

$$\psi_2 = \frac{1s(2)1s(3)2s(1)+1s(3)1s(2)2s(1)+1s(1)2s(2)2s(3)}{\sqrt{3}}$$

$$\psi_3 = \frac{1s(3)1s(1)2s(2)+1s(1)1s(3)2s(2)+1s(2)2s(3)2s(1)}{\sqrt{3}}$$

1, 2, 3 són els electrons

cosa que s'entén, ja que $2s(1)2s(2) \equiv 2s(2)2s(1)$

$2s(2)2s(3) \equiv 2s(3)2s(2)$, $2s(3)2s(1) \equiv 2s(1)2s(3)$,

$1s(1)1s(2) \equiv 1s(2)1s(1)$, $1s(3)1s(2) \equiv 1s(2)1s(3)$,

$1s(1)1s(3) \equiv 1s(3)1s(1)$

Sabent que:

1s	2s	2s
1	2	3
2	3	1
3	1	2

