

Estructura de la Materia 3 - Cátedra: Mónica Pickholz
Primer Cuatrimestre de 2021 – Ejercitación. Fecha 5/5/2017

(Justifique todas sus respuestas.)

Problema: Considere un sistema atómico neutro de número atómico $Z=84$.

- a) Encuentre los términos espectrales posibles para este átomo indicando los números cuánticos de momento angular de spin, orbital y total S, L y J correspondientes a cada subespacio.
- b) Suponga que el átomo se encuentra en el siguiente estado electrónico (para la capa de valencia)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0, 1, -1, -1\rangle + |0, \bar{1}, -1, -\bar{1}\rangle \right)$$

donde se han omitido los electrones de las capas internas completas y se ha usado la siguiente notación compacta para los orbitales espaciales:

$$|-1\rangle = |R_{61}(r) \cdot Y_{1,-1}(\theta, \varphi)\rangle, |0\rangle = |R_{61}(r) \cdot Y_{1,0}(\theta, \varphi)\rangle, |1\rangle = |R_{61}(r) \cdot Y_{1,1}(\theta, \varphi)\rangle.$$

- 1) Determine la energía electrónica de dicho estado, considerando para ello que todas las integrales mono- y bi-electrónicas entre los orbitales espaciales $|-1\rangle$, $|0\rangle$ y $|1\rangle$ son dato del problema, y omitiendo en su análisis la totalidad de los electrones restantes presentes en las capas internas completas.
- 2) Verifique si el mismo es autoestado de los operadores \hat{L}^2 y \hat{S}^2 .
- 3) En caso afirmativo, identifique los correspondientes valores de L y S e indique si pertenece al subespacio de estados con energía más baja de acuerdo a las reglas de Hund detallando los números cuánticos de momento angular orbital, de spin y total asociados a dicho subespacio. Justifique sus respuestas.

Ayuda: Para cualquier momento angular se cumple:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 \quad \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) \mp m} |j, m \pm 1\rangle$$