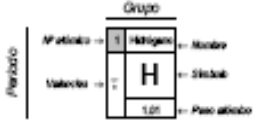


Tabla Periódica de los elementos

Periodo	IA		IIA		Grupos										VIIA (07)		VIII (08)		
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	H 1.01																		He 4.00
2	Li 6.94	Be 9.01												B 10.81	C 12.01	N 14.01	O 16	F 19	Ne 20.18
3	Na 22.99	Mg 24.31												Al 26.98	Si 28.09	P 30.97	S 32.06	Cl 35.45	Ar 39.95
4	K 39.10	Ca 40.08	Sc 44.96	Ti 47.88	V 50.94	Cr 52.00	Mn 54.94	Fe 55.85	Co 58.93	Ni 58.71	Cu 63.55	Zn 65.38	Ga 69.72	Ge 72.64	As 74.92	Se 78.96	Br 79.90	Kr 83.80	
5	Rb 85.47	Sr 87.62	Y 88.91	Zr 91.22	Nb 92.91	Mo 95.94	Tc 98 [*]	Ru 101.07	Rh 101.07	Pd 106.42	Ag 107.87	Cd 112.41	In 114.82	Sn 118.71	Sb 121.76	Te 127.60	I 126.90	Xe 131.29	
6	Cs 132.91	Ba 137.33	La 138.91	Hf 178.49	Ta 180.95	W 183.85	Re 186.21	Os 193.24	Ir 192.22	Pt 195.08	Au 196.97	Hg 200.59	Tl 204.38	Pb 207.2	Bi 208.98	Po 209 [*]	At 210 [*]	Rn 222 [*]	
7	Fr 223 [*]	Ra 226.03	Ac 227.03	Unq 261 [*]	Unp 262 [*]	Unh 263 [*]	Uns 264 [*]	Unc 265 [*]	Uue 266 [*]										



Tierras Raras Leves (TRLA) Lantánidos											Tierras Raras Pesadas (TRPA) Actínidos																
58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu
90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr

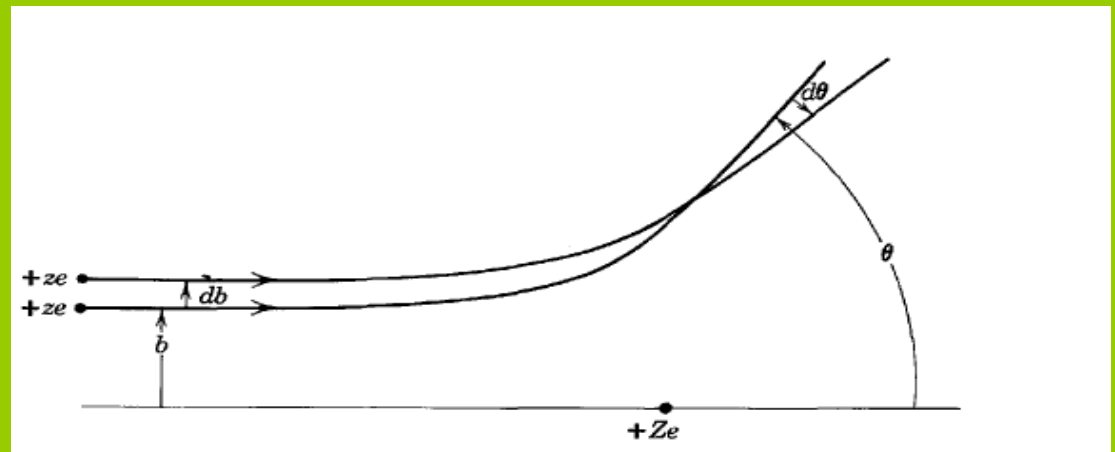
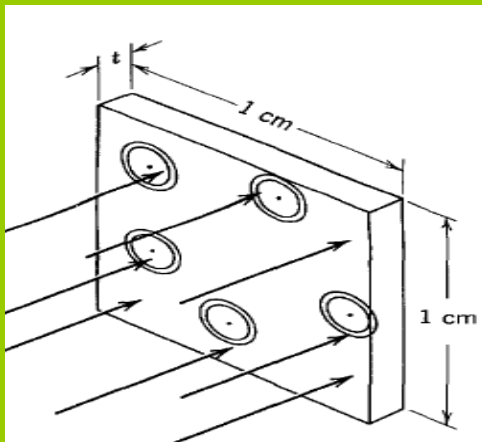
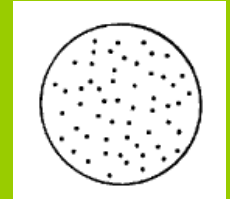
* Número atómico del isótopo más ligero.
Peso atómico basado en ¹²C

Metales				No metales		Semimetálicos	
Alcalinos		Alcalinotérreos		Halógenos	Gas noble	Aloides	

Modelos Atómicos Históricos.

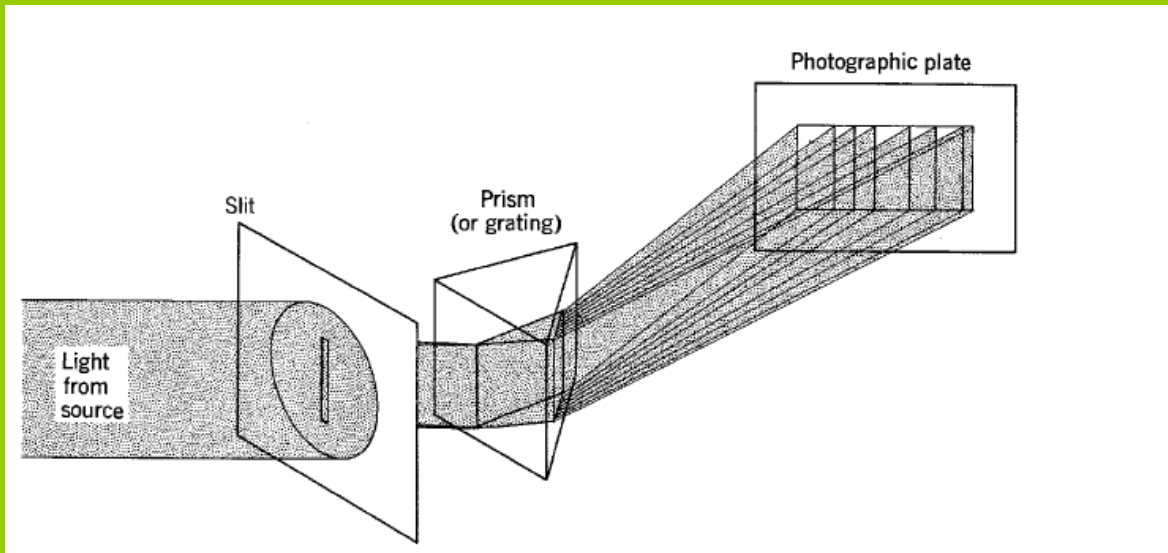
- THOMSON-1910: ***budín de pasas***, radio 10^{-10} m; máxima deflección de partículas $\alpha=10^{-4}$ rad.
- Rutherford-1911: scattering de partículas α

Modelo: núcleo central con carga positiva y electrones en órbitas circulares.



Dependencia angular testada en Ag y Au en rango angular de 5° a 150°

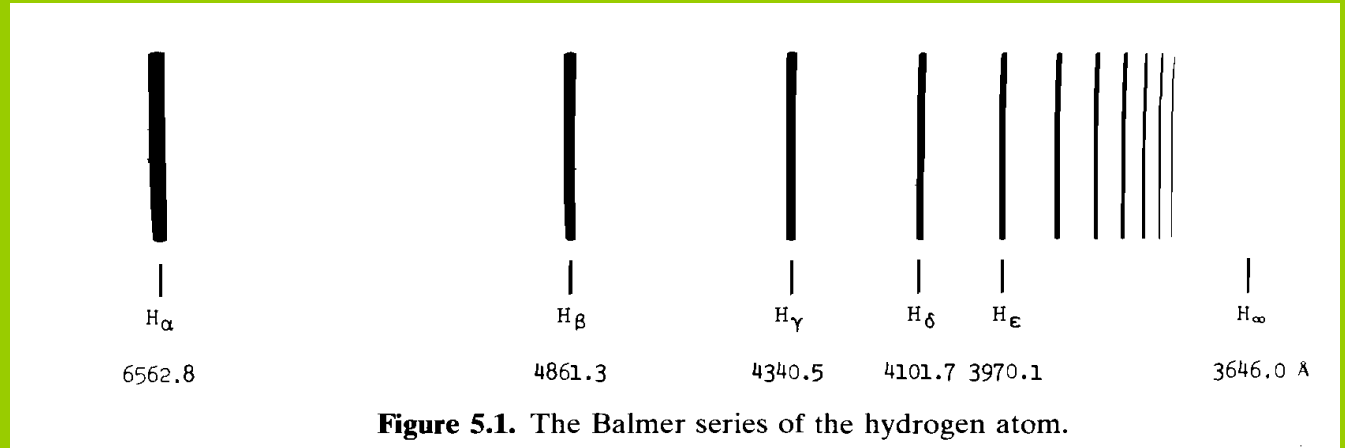
- Espectro atómico



Una descarga eléctrica atraviesa una región de gas monoatómico.
Desexcitación por emisión de radiación $em.$ que atraviesa la ranura

ESPECTROS ATÓMICOS

SERIE DE BALMER



$$\tilde{\nu} = 109,678 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ cm}^{-1}, \quad n = 3, 4, \dots$$

$$= R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

Table 4-1 The Hydrogen Series

Names	Wavelength Ranges	Formulas
Lyman	Ultraviolet	$\kappa = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, \dots$
Balmer	Near ultraviolet and visible	$\kappa = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots$
Paschen	Infrared	$\kappa = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, \dots$
Brackett	Infrared	$\kappa = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots$
Pfund	Infrared	$\kappa = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6, 7, 8, \dots$

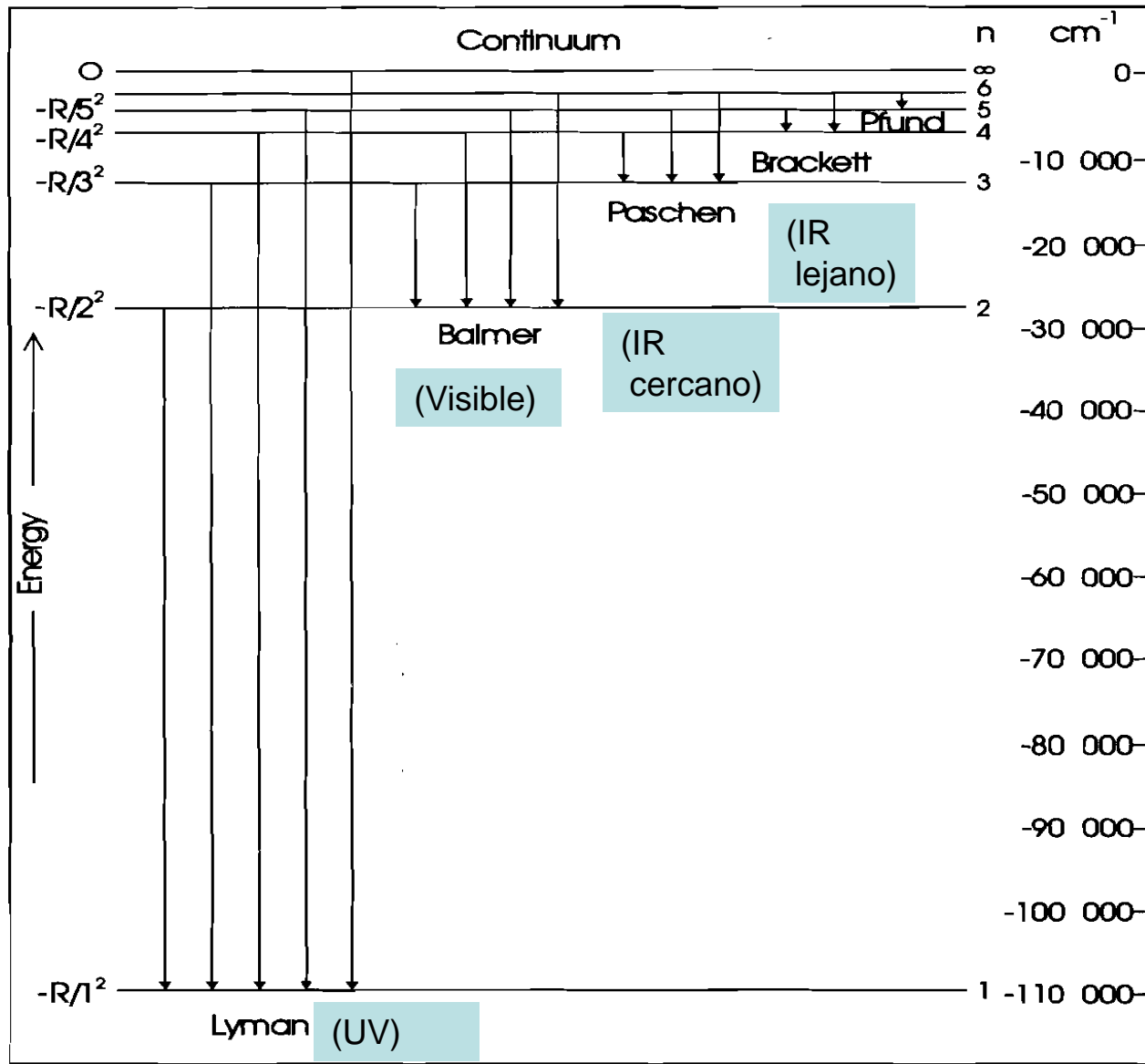


Figure 5.2. Energy levels of the hydrogen atom.

Postulados de Bohr (1913)

1-Órbitas circulares alrededor del núcleo con interacción Coulombiana electrón-núcleo.

2-El electrón se mueve en órbitas cuyo momento angular verifica:

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

3-La energía del electrón en la órbita es constante, no hay radiación electromagnética.

4-se emite radiación cuando el electrón pasa de una órbita (energía E_i) a otra (E_f) en forma discontinua. La frecuencia emitida es

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

Modelo de Bohr

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

$$mvr = n\hbar$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

La cuantización del momento angular lleva a la cuantización de la órbita

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

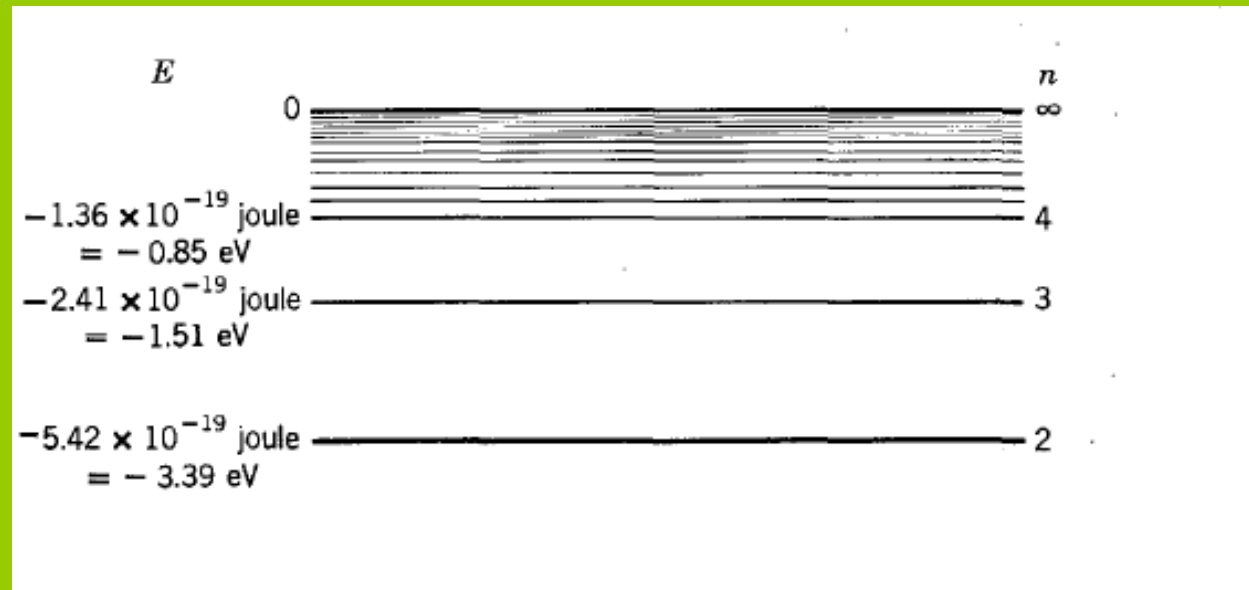


Diagrama de niveles de energía del átomo de hidrógeno

S=momento de spin electrónico

Matrices de Pauli

ÁTOMOS DE HIDROGENOIDES-espectro de un electrón

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{Ze^2 \psi}{4\pi\epsilon_0 r} = E\psi.$$

$$\frac{-\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \psi - \frac{Ze^2 \psi}{4\pi\epsilon_0 r} = E\psi.$$

$$\psi = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty,$$

$$l = 0, 1, \dots, n - 1,$$

$$m = 0, \pm 1, \dots, \pm l.$$

$$E_n = \frac{-\mu Z^2 (e^2 / 4\pi\epsilon_0)^2}{2n^2 \hbar^2} = \frac{-R}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \rightarrow s, p, d, f, \dots$$

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad R = R_H = 109,677,4212 \text{ cm}^{-1} \equiv \frac{M}{m+M} R_\infty \equiv \frac{\mu}{m} R_\infty$$

Experimento de Frank Hertz (1914)

Los niveles energéticos de átomos multielectrónicos también están cuantizados

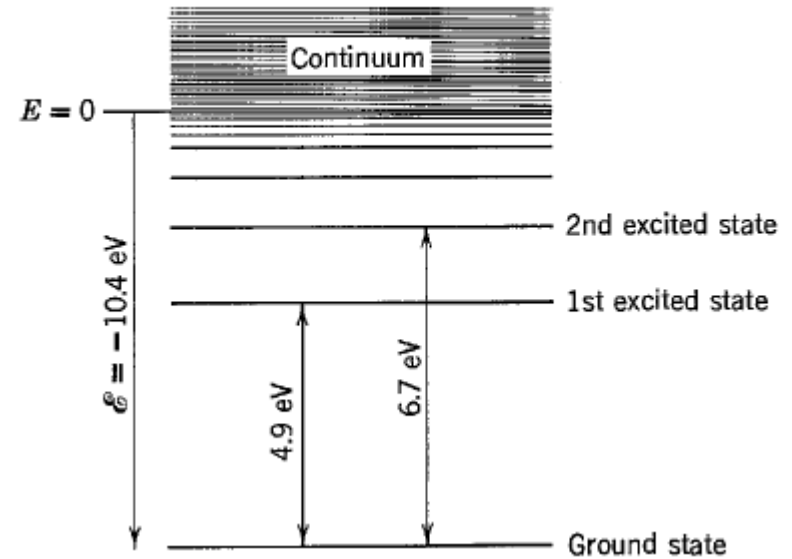
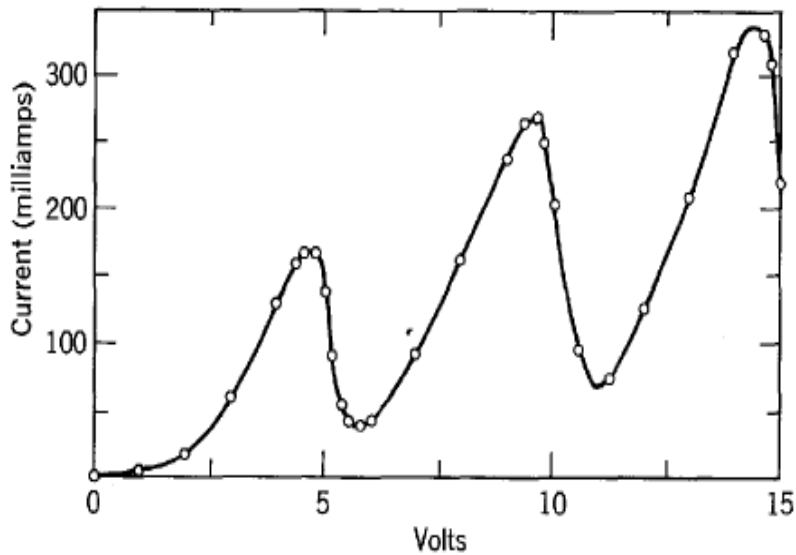
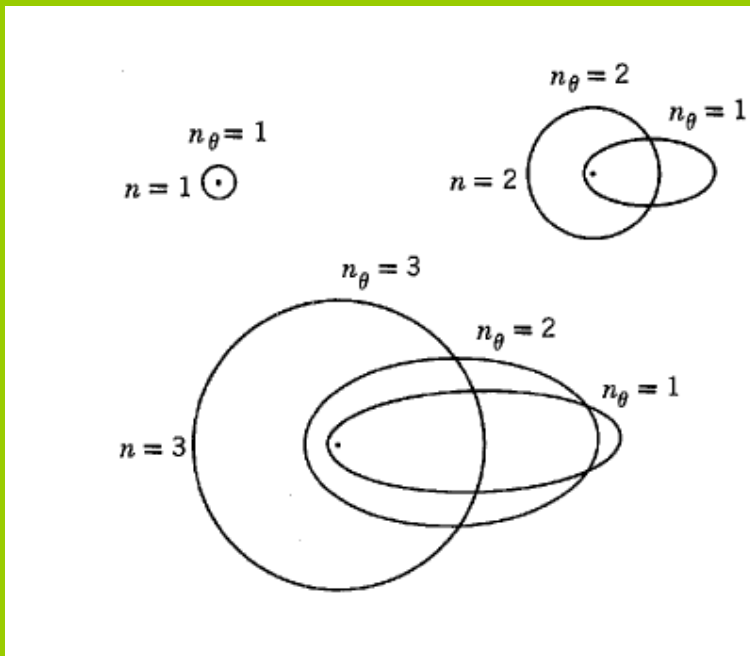


Diagrama simplificado para CORRIENTE en función de Voltaje (Frank-Hertz) y niveles de energía de Hg.

Modelo de Sommerfeld

Órbitas elípticas, siendo la de BOHR un caso particular.

Usó las fórmulas de la mecánica clásica en coordenadas polares y aplicó las condiciones de cuantización del momento angular.



Las diferentes órbitas caracterizadas por el mismo valor de n son *degeneradas*.

Sommerfeld levantó la degeneración tratando el problema en forma **relativística**.

$v/c \approx 10^{-2}$ o menor. La corrección relativista es de orden $(v/c)^2 \approx 10^{-4}$. Es del orden necesario para explicar la estructura fina en el espectro de hidrógeno atómico.

Momento angular

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y,$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0,$$

$$\hat{L}^2 Y_{LM}(\theta, \phi) = \hbar^2 L(L+1) Y_{LM}(\theta, \phi),$$

$$\hat{L}_z Y_{LM}(\theta, \phi) = M\hbar Y_{LM}(\theta, \phi).$$

$$L_+ = L_x + iL_y$$

Funciones de spin:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \left| \frac{1}{2}; +\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = [\hat{H}, \hat{l}^2] = 0,$$

$$\psi = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi),$$

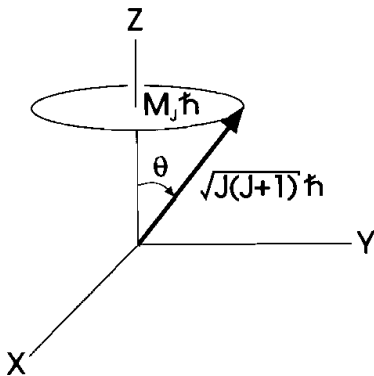
$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm},$$

$$\hat{l}^2\psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm},$$

$$\hat{l}_z\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm}.$$

Para un momento angular, J en general, precece alrededor de un eje z

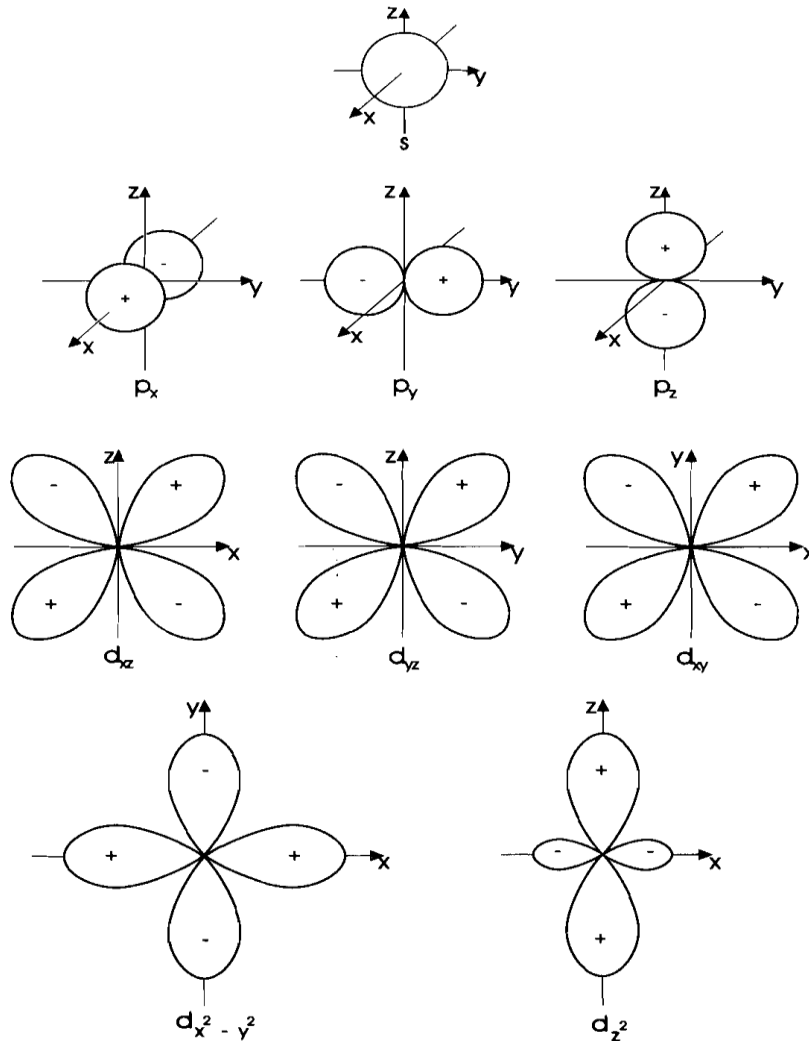
M_J : corresponde a diferentes orientaciones espaciales de \mathbf{J}



Degeneración $(2J+1)$, para un espacio isótropo (ausencia de campos externos)

Experimento de Stern-Gerlach (1922): componente Z del momento dipolar magnético de átomos de Ag

PARTE ANGULAR DE LOS ORBITALES 1s, 2p, 3d



$$\psi = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi),$$

Transición dipolar eléctrica

$\Delta n =$ irrestricto

$\Delta l = \pm 1, \Delta m_l = \pm 1$

Acoplamiento spin órbita (estructura fina)

e^- (partícula cargada)



El movimiento orbital => corriente

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_e \mu_B \mathbf{S}$$

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Campo en el e^- proporcional al
momento angular l

$$\hat{H}_{so} = \xi(r) \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

$$\xi(r) = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \right)$$

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Atracción COULOMBIANA
entre electrón y núcleos

$$[\hat{H}^{(0)} + \xi(r)\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}]\psi = E\psi,$$

(derivación adecuada: EQR
(electrodinámica cuántica relativista))

l_z y s_z ya no conmutan con \mathbf{H} - Debido al acoplamiento spin-órbita L y s no son 2 operadores independientes

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$$

\mathbf{j} conmuta con \mathbf{H}

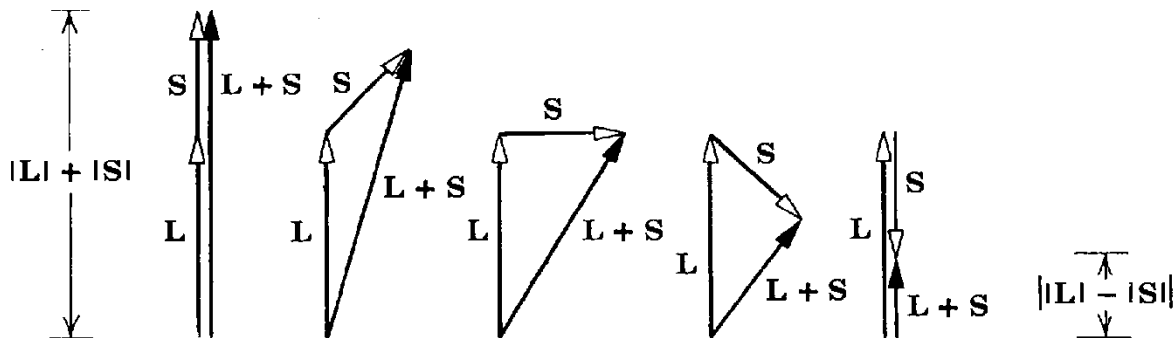
j^2 y j_z SI conmutan con \mathbf{H}

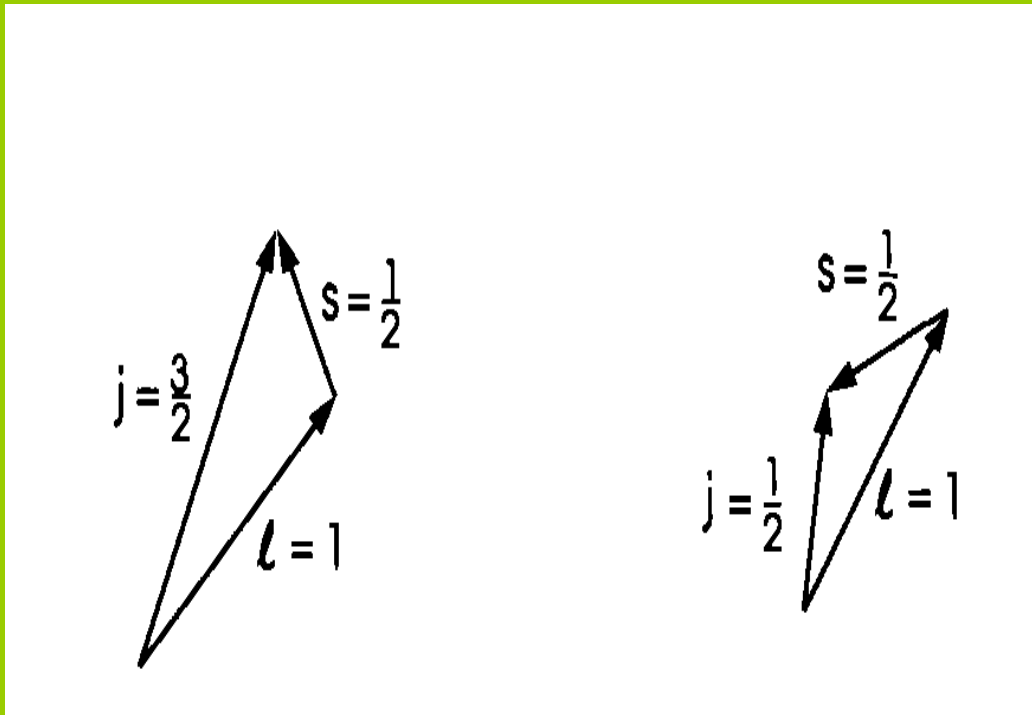
(cte de movimiento)

$$J_z = L_z + S_z$$

$$J_z = m_j \hbar$$

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, +j - 1, +j$$





$$|2p, j = \frac{3}{2}, m_j = \frac{3}{2}\rangle,$$

$$|2p, j = \frac{3}{2}, m_j = \frac{1}{2}\rangle,$$

$$|2p, j = \frac{3}{2}, m_j = -\frac{1}{2}\rangle,$$

$$|2p, j = \frac{3}{2}, m_j = -\frac{3}{2}\rangle,$$

$$|2p, j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2}\rangle,$$

$$|2p, j = \frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}\rangle.$$

Los estados acoplados $|J M_J\rangle$ están relacionados con los no acoplados $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ por

$$|j_1, j_2 J, M_J\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | JM_J\rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle,$$

Aparecen los coeficientes de Glebsh Gordan

Ejemplo:
electrones p

$$|l = 1, m_l = -1\rangle |s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle.$$

(Representación desacoplada:
Producto de funciones angular
y spin de un electrón: 6 funciones)

$$|l = 1, m_l = 1\rangle |s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle,$$

$$|l = 1, m_l = 0\rangle |s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle,$$

Representación en estados acoplados y desacoplados

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \xi(r)\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = (\hat{H}^{(0)} + \xi(r)\hat{l}_z\hat{s}_z) + \frac{\xi(r)(\hat{l}_+\hat{s}_- + \hat{l}_-\hat{s}_+)}{2}$$

$$\begin{aligned} \langle l = 1, m_l | \langle s = \frac{1}{2}, m_s | \hat{H} | s = \frac{1}{2}, m_s \rangle | l = 1, m_l \rangle \\ = E_{2p}^{(0)} + \zeta_{2p} m_l m_s \end{aligned}$$

$$E_{2p}^{(0)} = -R_H/4$$

$$\zeta_{2p} = \hbar^2 \int R_{2p}^*(r) \xi(r) R_{2p}(r) r^2 dr.$$

$$\xi \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{\xi(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)}{2}.$$

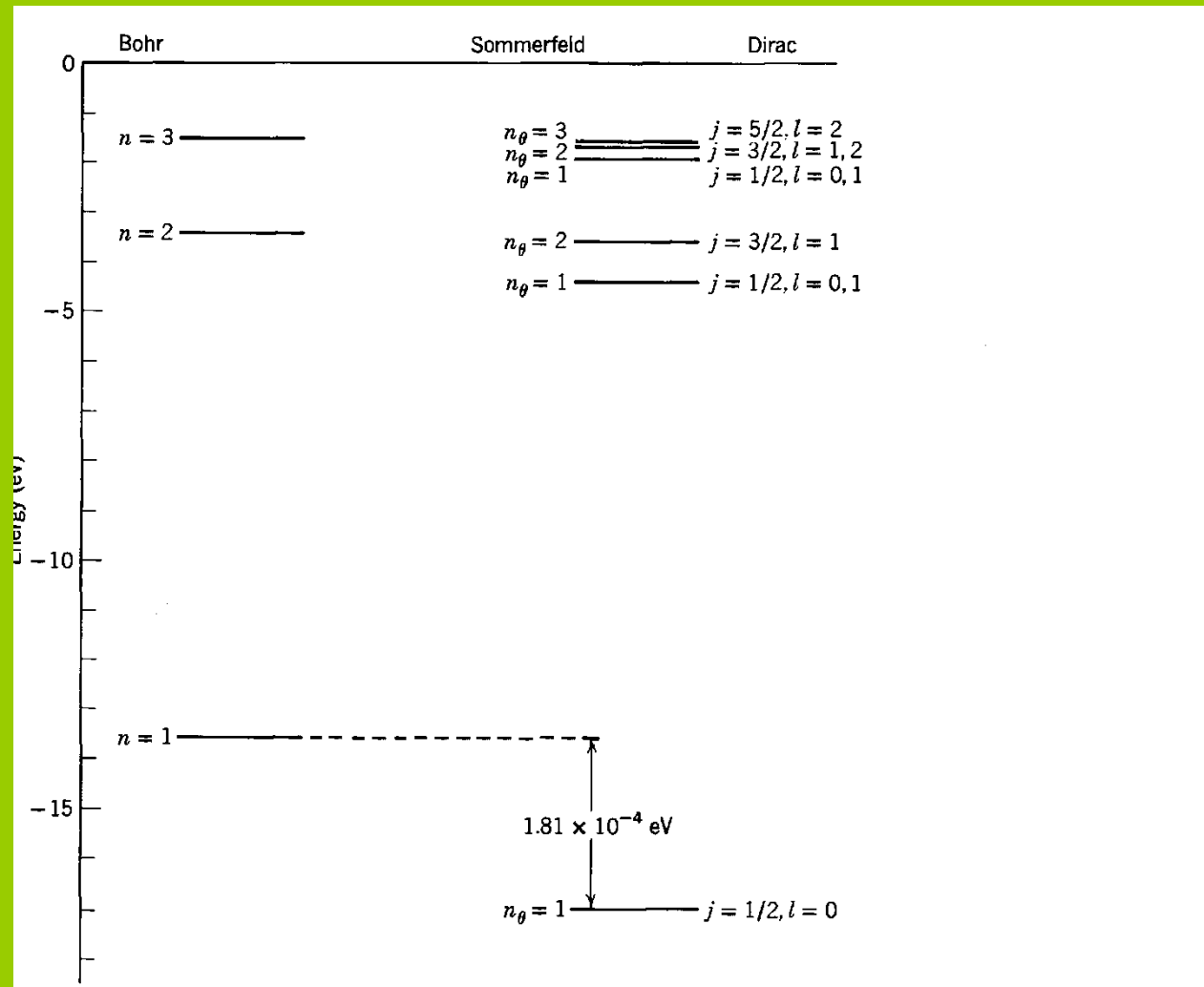
$$\hat{j}^2 = (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}) \cdot (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}) = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

J^2 conmuta con H

Tratamiento relativista de DIRAC de los niveles del átomo de hidrógeno

$$E = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Niveles de energía del átomo de hidrógeno



SISTEMA DE MUCHOS ELECTRONES

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{i,j>i}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right) \psi = E\psi.$$

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{l}}_1 + \hat{\mathbf{l}}_2 + \dots + \hat{\mathbf{l}}_N = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{l}}_i.$$

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{s}}_i$$

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}.$$

$$\hat{L}_z = \hat{l}_{z1} + \hat{l}_{z2} + \cdots + \hat{l}_{zN},$$

$$\hat{S}_z = \hat{s}_{z1} + \hat{s}_{z2} + \cdots + \hat{s}_{zN},$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2.$$

$$\hat{L}^2 \psi \approx L(L + 1)\hbar^2 \psi$$

$$[\hat{l}_{zi}, \hat{H}] \neq 0,$$

$$\hat{l}_{zi} \psi \neq m_{li} \hbar \psi,$$

$$\hat{L}_z \psi = M_L \hbar \psi,$$

$$M_L = m_{l1} + m_{l2} + \cdots + m_{lN}.$$

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0,$$

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = 0 \quad \text{and} \quad [\hat{L}_y, \hat{H}] = 0.$$

$$[\hat{L}_z^2, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{L}_x^2, \hat{H}] = 0, \quad \text{and} \quad [\hat{L}_y^2, \hat{H}] = 0,$$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$$

Table 5.4. One-electron and Multi-electron Atoms

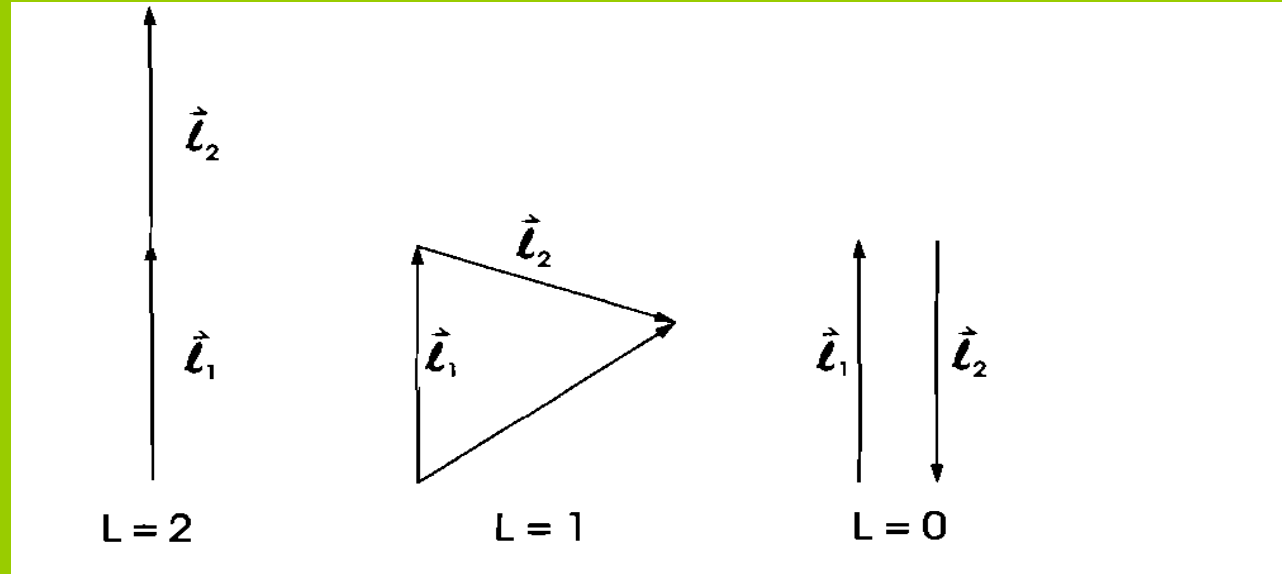
Multi-electron Atoms						One-electron Atoms					
$\hat{L}^2 \psi = L(L + 1)\hbar^2 \psi$						$\hat{l}^2 \psi = l(l + 1)\hbar^2 \psi$					
$\hat{L}_z \psi = M_L \hbar \psi$						$\hat{l}_z \psi = m_l \hbar \psi$					
$\hat{S}^2 \psi = S(S + 1)\hbar^2 \psi$						$\hat{s}^2 \psi = s(s + 1)\hbar^2 \psi$					
$\hat{S}_z \psi = M_S \hbar \psi$						$\hat{s}_z \psi = m_s \hbar \psi$					
$L = 0,$	$1,$	$2,$	$3,$	$4,$	5	$l = 0,$	$1,$	$2,$	$3,$	$4,$	5
S	P	D	F	G	H	s	p	d	f	g	h

$$2S+1 L,$$

Degeneración
→

$$g = (2L + 1)(2S + 1).$$

Ejemplo $l_1=1, l_2=1$



Configuración $2p^2$ del
Átomo de carbono

2 electrones y
6 spin orbitales

$$\begin{aligned} \chi_1 &= p_1\alpha \\ \chi_2 &= p_0\alpha; \\ \chi_3 &= p_{-1}\alpha; \\ \chi_4 &= p_1\beta; \\ \chi_5 &= p_0\beta; \\ \chi_6 &= p_{-1}\beta \end{aligned}$$

15
determinantes
=
15
configuraciones

	$M_S = 1$	0	-1
$M_L = 2$	—	$ 1, \bar{1} $	—
$M_L = 1$	$ 1, 0 $	$ 1, \bar{0} 1, 0 $	$ \bar{1}, \bar{0} $
$M_L = 0$	$ 1, -1 $	$ 1, -\bar{1} \bar{1}, -1 0, \bar{0} $	$ \bar{1}, -\bar{1} $
$M_L = -1$	$ 0, -1 $	$ -1, \bar{0} -\bar{1}, 0 $	$ \bar{0}, -\bar{1} $
$M_L = -2$	—	$ -1, -\bar{1} $	—

microestado

15 configuraciones: no todas spin adaptadas

Notación

$|1, \bar{0}|$

significa.

$$m_{l1} = 1, m_{s1} = \frac{1}{2}, m_{l2} = 0, m_{s2} = -\frac{1}{2}$$

Acoplamiento Spin órbita

$$\hat{H}_{so} = \zeta \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}.$$

Valores permitidos

$$J=L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$$

$$\hat{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}.$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2}{2}$$

Las **componentes** de **L** y **S** no conmutan con H

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

J², L² y S² conmutan con H

$$\begin{aligned} \langle H_{so} \rangle &= \zeta \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle = \zeta \langle nJM_JLS | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | nJM_JLS \rangle \\ &= \frac{\zeta [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]}{2}. \end{aligned}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ee}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ee} + \zeta \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ee} + \sum \xi(r_i) \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{L}^2\psi = L(L+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{L}_z\psi = M_L\hbar\psi$$

$$\hat{S}^2\psi = S(S+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{S}_z\psi = M_S\hbar\psi$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{L}^2\psi = L(L+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{S}^2\psi = S(S+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{J}^2\psi = J(J+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{J}_z\psi = M_J\hbar\psi$$

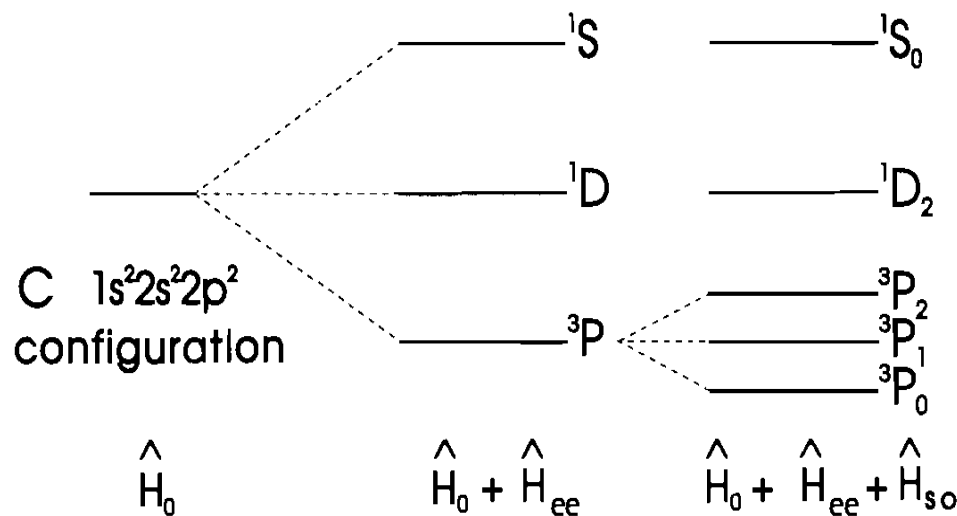
$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{L}^2\psi \approx L(L+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{S}^2\psi \approx S(S+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{J}^2\psi = J(J+1)\hbar^2\psi$$

$$\hat{J}_z\psi = M_J\hbar\psi$$



**Reglas de
selección**

Regla de Hund

- Al llenar orbitales de igual energía, los electrones prefieren acomodarse con spin paralelo

Ejemplo: **3 electrones en el orbital 2p;**

$px^1 py^1 pz^1$ (vs) $px^2 py^1 pz^0$

$(px^2 py^1 pz^0 = px^0 py^1 pz^2 = px^1 py^0 pz^2 = px^2 py^0$

$pz^1 = \dots)$

1era. Regla: mayor proyección de spin ($2S+1$).

2da. Regla mayor Momento angular (L).

3era. Regla Acoplamiento spin órbita.

Cuando varios electrones están descritos por orbitales degenerados, la mayor estabilidad energética es aquella en donde los espines electrónicos están desapareados (correlación de espines):

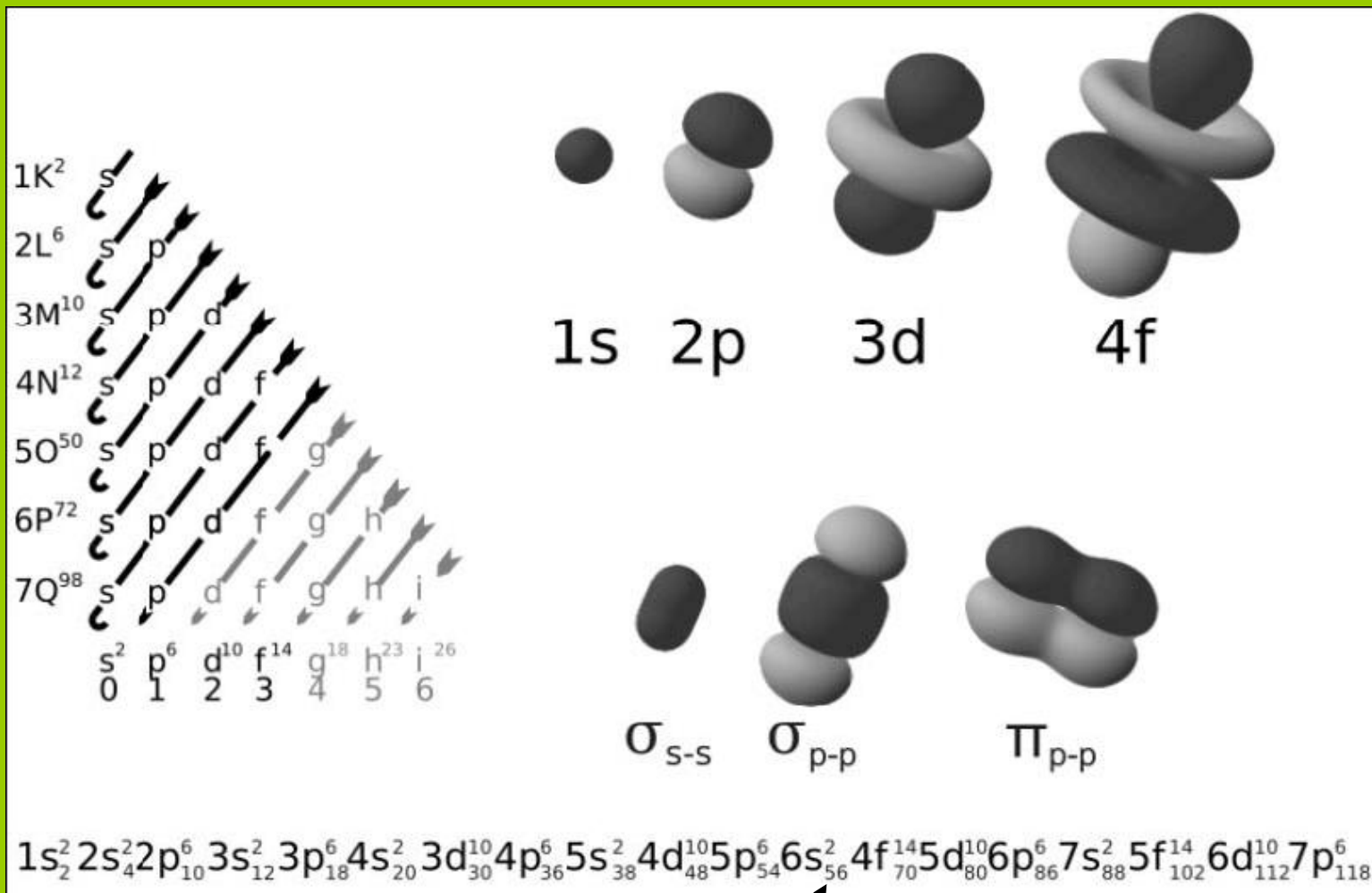
principio de Aufbau

subcapa 2p : 2px, 2py, 2pz.

orbital **2p** hasta seis electrones,

un electrón en cada uno antes que alguno llegue a tener dos.





Columna de gases nobles

REGLA DEL SERRUCHO: $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p \rightarrow 5s \dots$

Configuraciones atómicas p^n y d^n

p^1 : 2P

p^2 : $^1S, ^1D, ^3P$

p^3 : $^2P, ^2D, ^4S$

p^4 : $^1S, ^1D, ^3P$

p^5 : 2P

d^1, d^9 : 2D

d^2, d^8 : $^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F$

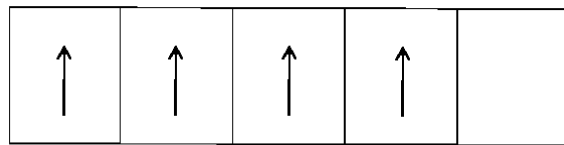
d^3, d^7 : $^2P, ^2D$ (twice), $^2F, ^2G, ^2H, ^4P, ^4F$

d^4, d^6 : 1S (twice), 1D (twice), $^1F, ^1G$ (twice), $^1I, ^3P$ (twice)

$^3D, ^3F$ (twice), $^3G, ^3H, ^5D$

d^5 : $^2S, ^2P, ^2D$ (three times), 2F (twice), 2G (twice),

$^2H, ^2I, ^4P, ^4D, ^4F, ^4G, ^6S$



m_l

2

1

0

-1

-2

Microestado d^4 ; $M_l=2$,
 $M_s=2$

 $2S + 1$

Name

 $2S + 1$ Name

1

Singlet

6

Sextet

2

Doublet

7

Septet

3

Triplet

8

Octet

4

Quartet

9

Nonet

5

Quintet

10

Decet

$$\begin{aligned} \langle H_{\text{so}} \rangle &= \zeta \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle = \zeta \langle nJM_JLS | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | nJM_JLS \rangle \\ &= \frac{\zeta [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]}{2}. \end{aligned}$$

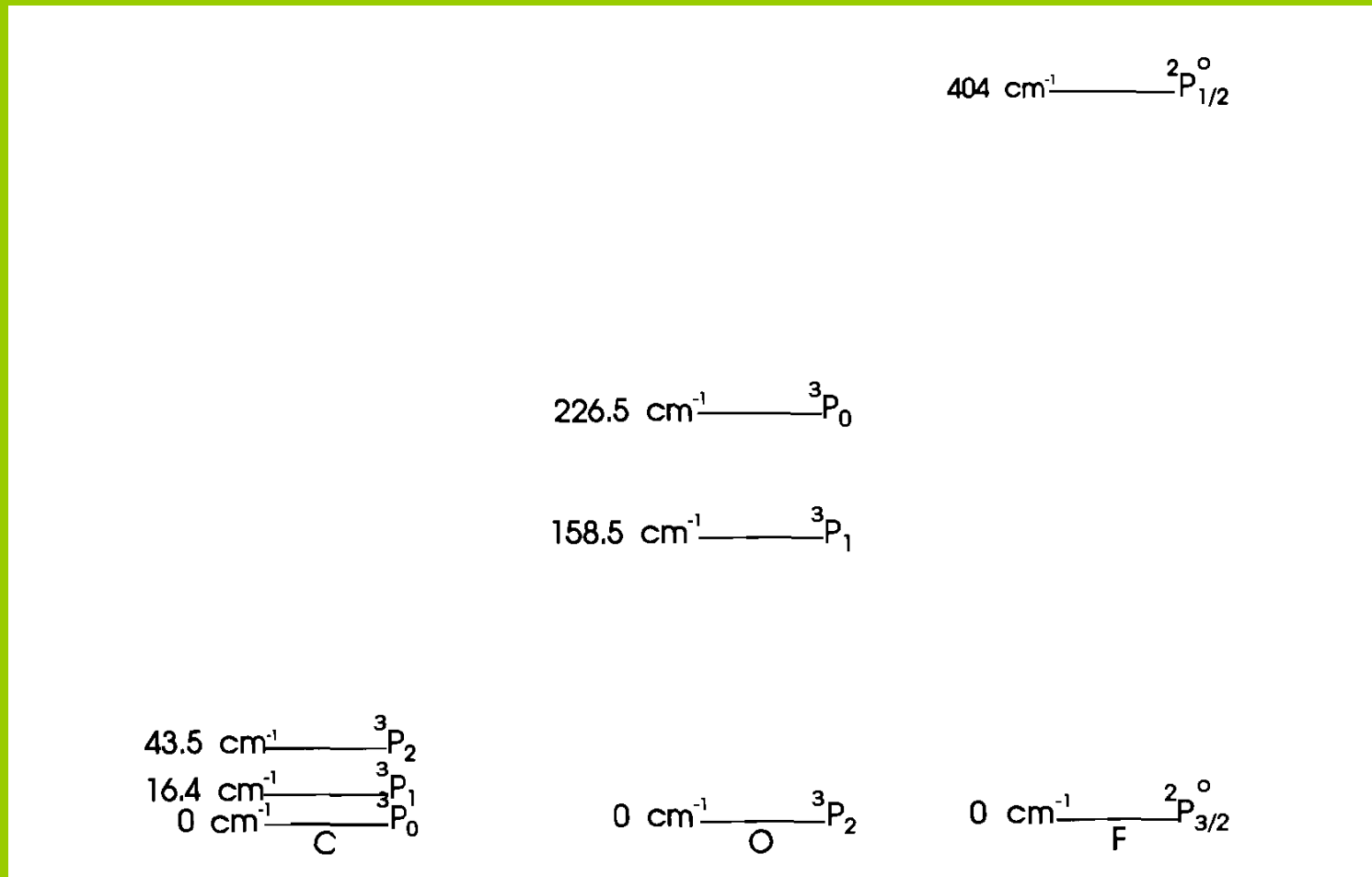
$$E_{J+1} - E_J = \frac{\zeta [(J+1)(J+2) - J(J+1)]}{2} = \zeta(J+1).$$

Intervalo de Landé



Valores permitidos de J: L+S, L+S-1, | L-S|

Splitting de los multipletes mas bajos de C, O, F (Landé)



C: $1s^2, 2s^2, 2p^2$

O: $1s^2, 2s^2, 2p^4$

F: $1s^2, 2s^2, 2p^5$

$2S+1L_J$

Efecto Zeeman

$$\boldsymbol{\mu}_L = \gamma \mathbf{L}.$$

$$|\mathbf{L}| = [L(L + 1)]^{1/2} \hbar$$

$$|\boldsymbol{\mu}_L| = -\left(\frac{e\hbar}{2m_e}\right) \sqrt{L(L + 1)} = -\mu_B \sqrt{L(L + 1)},$$

$$\boldsymbol{\mu}_S = g_e \gamma \mathbf{S} = g_e \left(\frac{-\mu_B}{\hbar}\right) \mathbf{S},$$

$$g_e = 2.0023$$

Campo \mathbf{B} externo

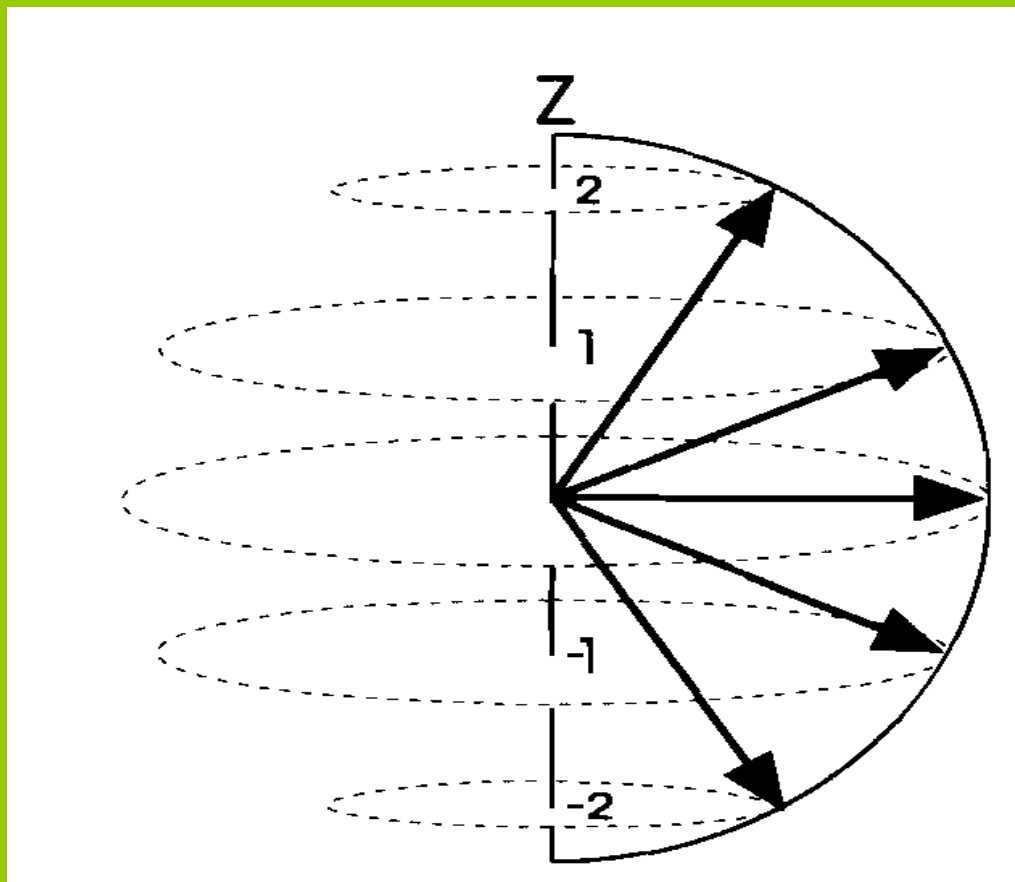
$$\hat{H}' = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Momento magnético nuclear:

$$\boldsymbol{\mu}_I = \gamma_I \mathbf{I} = g_I \frac{\mu_N}{\hbar} \mathbf{I}$$

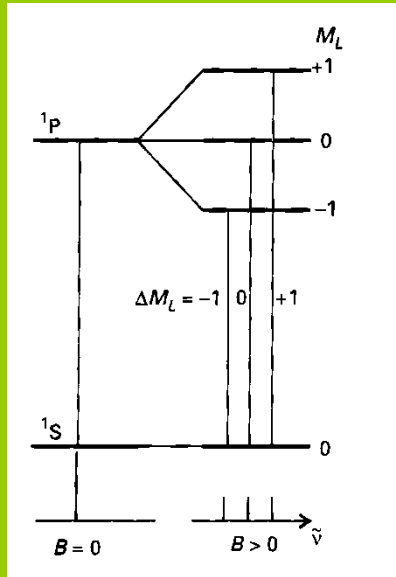
$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

$$\nu = \frac{\Delta(\mu \cdot B)}{\hbar}$$



ZEEMAN normal (**singletes**)
para sistema de muchos electrones

$$H^{(1)} = -m_z \mathcal{B} = -\gamma_e (l_{z1} + l_{z2} + \dots) \mathcal{B} = -\gamma_e L_z \mathcal{B}$$



$${}^1P \rightarrow {}^1S$$

Intervalo: $\mu_L B$
Independiente de L

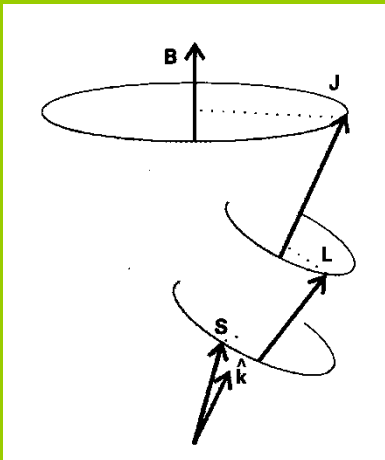
$$\Delta M_L = \pm 1$$

Luz polarizada perpend a **B**

$$\Delta M_L = 0$$

Luz polarizada paralela a **B**

EFEECTO ZEEMAN ANOMALO



$$H^{(1)} = -\mathbf{m}_{\text{orbital}} \cdot \mathbf{B} - \mathbf{m}_{\text{spin}} \cdot \mathbf{B} = -\gamma_e (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}$$

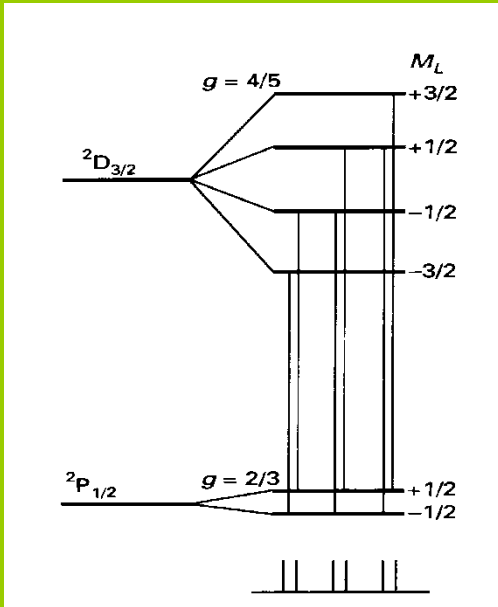
(el momento de **spin** es no nulo)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_J &= \left[\boldsymbol{\mu}_S \cdot \frac{\mathbf{J}}{|\mathbf{J}|^2} + \frac{\boldsymbol{\mu}_L \cdot \mathbf{J}}{|\mathbf{J}|^2} \right] \mathbf{J} \\ &= \left[\gamma(g_s \mathbf{S} + \mathbf{L}) \cdot \frac{\mathbf{J}}{|\mathbf{J}|^2} \right] \mathbf{J},\end{aligned}$$

$$H^{(1)} = -g_J \gamma_e \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}$$

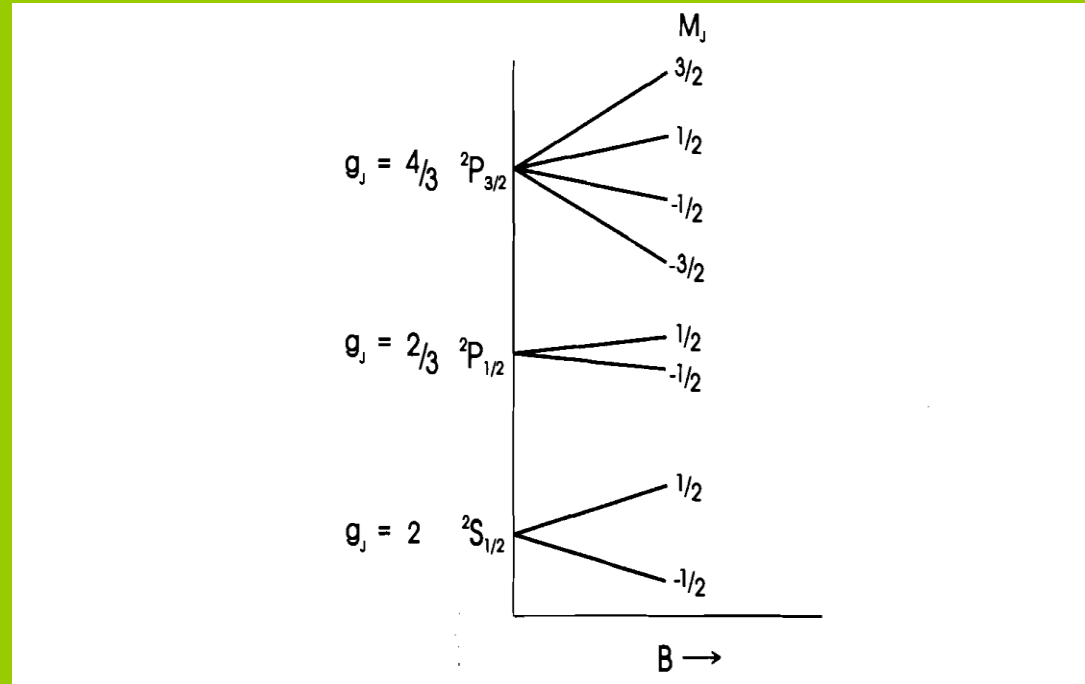
$$\begin{aligned}H^{(1)} &= -\gamma_e (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \\ &= -\gamma_e \left\{ 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right\} \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}\end{aligned}$$

Zeeman normal



$$\nu_L = \frac{\mu_B B}{h}$$

Zeeman (anómalo) para los primeros 3 estados de un alcalino



$$E_{M_J} = \langle \hat{H}' \rangle = -\langle \boldsymbol{\mu}_J \cdot \mathbf{B} \rangle = g_J \frac{\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} \rangle = g_J \frac{\mu_B B}{\hbar} \langle J_z B_z \rangle = g_J \mu_B M_J B,$$

Poca utilidad en espectroscopía atómica pq depende de J

Bibliografía

- 1- Eisberg R., Resnick R. Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles. 1985
- 2- Peter Bernat , Spectra Of Atoms And Molecules Oxford 1995
- 3- P. A. M. Dirac The Principles of Quantum Mechanics International Series of Monographs on Physics 1967