

		Grupo		
Periodo	Aperturas →	1	Hidrogeno	→ Nombre
	Valencia →	+1	H	→ Símbolo
			1.01	→ Peso atómico

Tabla Periódica de los elementos

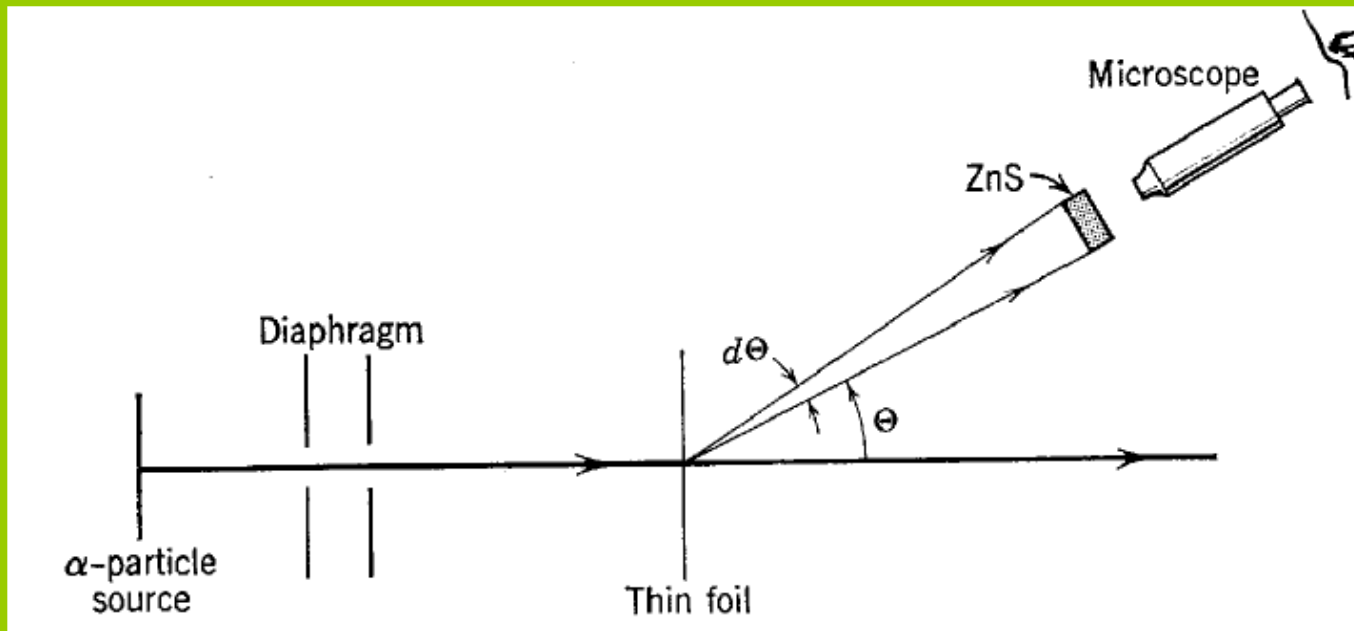
IA																		IIA												IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		VIIIA (0)																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
1	2																	3	4											5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
H	He																	B	C	N	O	F	Ne											Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																						
3	4																	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18											19	20											21	22											23	24											25	26											27	28											29	30											31	32											33	34											35	36											37	38											39	40											41	42											43	44											45	46											47	48											49	50											51	52											53	54											55	56											57	58											59	60											61	62											63	64											65	66											67	68											69	70											71	72											73	74											75	76											77	78											79	80											81	82											83	84											85	86											87	88											89	90											91	92											93	94											95	96											97	98											99	100											101	102											103	104											105	106											107	108											109	110											111	112											113	114											115	116											117	118											119	120											121	122											123	124											125	126											127	128											129	130											131	132											133	134											135	136											137	138											139	140											141	142											143	144											145	146											147	148											149	150											151	152											153	154											155	156											157	158											159	160											161	162											163	164											165	166											167	168											169	170											171	172											173	174											175	176											177	178											179	180											181	182											183	184											185	186											187	188											189	190											191	192											193	194											195	196											197	198											199	200											201	202											203	204											205	206											207	208											209	210											211	212											213	214											215	216											217	218											219	220											221	222											223	224											225	226											227	228											229	230											231	232											233	234											235	236											237	238											239	240											241	242											243	244											245	246											247	248											249	250											251	252											253	254											255	256											257	258											259	260											261	262											263	264											265	266											267	268											269	270											271	272											273	274											275	276											277	278											279	280											281	282											283	284											285	286											287	288											289	290											291	292											293	294											295	296											297	298											299	300											301	302											303	304											305	306											307	308											309	310											311	312											313	314											315	316											317	318											319	320											321	322											323	324											325	326											327	328											329	330											331	332											333	334											335	336											337	338											339	340											341	342											343	344											345	346											347	348											349	350											351	352											353	354											355	356											357	358											359	360											361	362											363	364											365	366											367	368											369	370											371	372											373	374											375	376											377	378											379	380											381	382											383	384											385	386											387	388											389	390											391	392											393	394											395	396											397	398											399	400											401	402											403	404											405	406											407	408											409	410											411	412											413	414											415	416											417	418											419	420											421	422											423	424											425	426											427	428											429	430											431	432											433	434											435	436											437	438											439	440											441	442											443	444											445	446											447	448											449	450											451	452											453	454											455	456											457	458											459	460											461	462											463	464											465	466											467	468											469	470											471	472											473	474											475	476											477	478											479	480											481	482											483	484											485	486											487	488											489	490											491	492											493	494											495	496											497	498											499	500											501	502											503	504											505	506											507	508											509	510											511	512											513	514											515	516											517	518											519	520											521	522											523	524											525	526											527	528											529	530											531	532											533	534											535	536											537	538											539	540											541	542											543	544											545	546											547	548											549	550											551	552											553	554											555	556											557	558											559	560											561	562											563	564											565	566											567	568											569	570											571	572											573	574											575	576											577	578											579	580											581	582											583	584											585	586											587	588											589	590											591	592											593	594											595	596											597	598											599	600											601	602											603	604											605	606											607	608											609	610											611	612											613	614											615	616											617	618											619	620											621	622											623	624											625	626											627	628											629	630											631	632											633	634											635	636											637	638											639	640											641	642											643	644											645	646											647	648											649	650											651	652											653	654											655	656											657	658											659	660											661	662											663	664											665	666											667	668											669	670											671	672											673	674											675	676											677	678											679	680											681	682											683	684											685	686											687	688											689	690											691	692											693	694											695	696											697	698											699	700											701	702											703	704											705	706											707	708											709	710											711	712											713	714											715	716											717	718											719	720											721	722											723	724											725	726											727	728											729	730											731	732											733	734											735	736											737	738											739	740											741	742											743	744											745	746											747	748											749	750											751	752											753	754											755	756											757	758											759	760											761	762											763	764											765	766											767	768											769	770											771	772											773	774											775	776											777	778											779	780											781	782											783	784											785	786											787	788											789	790											791	792											793	794											795	796											797	798											799	800											801	802											803	804											805	806											807	808											809	810											811	812											813	814											815	816											817	818											819	820											821	822											823	824											825	826											827	828											829	830											831	832											833	834											835	836											837	838											839	840											841	842											843	844											845	846											847	848											849	850											851	852											853	854											855	856											857	858											859	860											861	862											863	864											865	866											867	868											869	870											871	872											873	874											875	876											877	878											879	880											881	882											883	884											885	886											887	888											889	890											891	892											893	894											895	896											897	898											899	900											901	902											903	904											905	906											907	908											909	910											911	912											913	914											915	916											917	918											919	920											921	922											923	924											925	926											927	928											929	930											931	932											933	934											935	936											937	938											939	940											941	942											943	944											945	946											947	948											949	950											951	952											953	954											955	956											957	958											959	960											961	962											963	964											965	966											967	968											969	970											971	972											973	974											975	976											977	978											979	980											981	982											983	984											985	986											987	988											989	990											991	992											993	994											995	996											997	998											999	1000											1001	1002											1003	1004											1005	1006											1007	1008											1009	1010										

Terminas Raras Ligendas (TRLA) (Ligendas)		58 Ce 58 140.907647 140.907647	59 Praseodimio 59 140.907647 140.907647	60 Neodimio 60 144.242 144.242	61 Prometio 61 144.91274 144.91274	62 Samario 62 150.358 150.358	63 Europio 63 151.964 151.964	64 Gadolinio 64 157.25 157.25	65 Terbio 65 158.925 158.925	66 Disprosio 66 162.50 162.50	67 Holmio 67 164.930 164.930	68 Erbio 68 167.259 167.259	69 Tulio 69 168.934 168.934	70 Ytterbio 70 173.044 173.044	71 Lutetio 71 174.967 174.967
Terminas Raras Periodas (TRUPA) (Periodas)		90 Torio 90 232.0377 232.0377	91 Protaktinio 91 231.036 231.036	92 Uranio 92 238.02891 238.02891	93 Neptunio 93 237.04817 237.04817	94 Plutonio 94 239.05216 239.05216	95 Americio 95 243.06138 243.06138	96 Curio 96 247.07035 247.07035	97 Berkelio 97 247.06715 247.06715	98 Californio 98 251.07875 251.07875	99 Einsteinio 99 252.08322 252.08322	100 Fermio 100 257.10371 257.10371	101 Mendelevio 101 258.10386 258.10386	102 Nobelio 102 259.10386 259.10386	103 Lawrencio 103 260.10386 260.10386

^a Número total de la muestra más largo.
Para obtener la medida en μm .

Metals		No metals	Semimetals
Aluminum	Plutonium	Hydrogen	
Gold	Potassium	Neon	
Iron	Silver	Helium	
Lead	Vanadium	Argon	
Mercury	Zinc	Krypton	
Nickel		Xenon	
Platinum		Radon	
Steel			Artificials

Experimento de Rutherford, scattering de partículas α



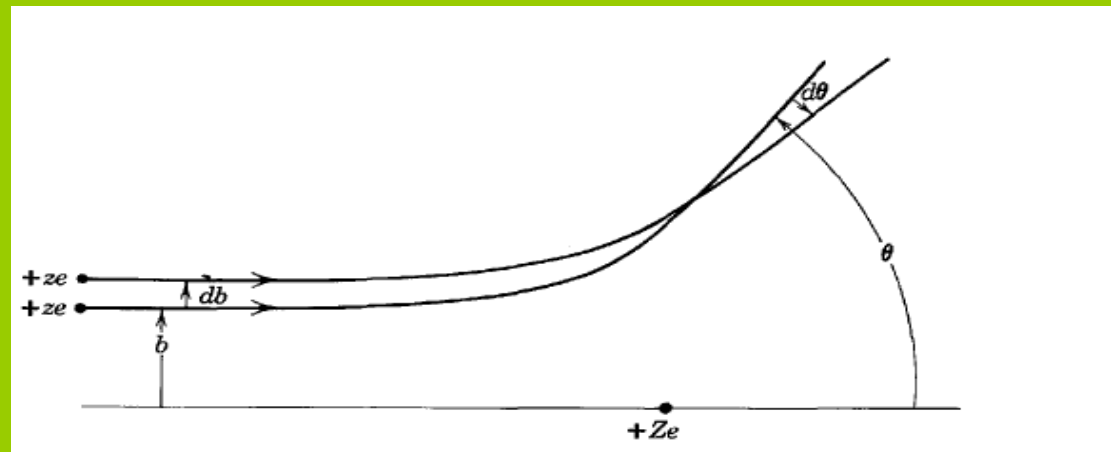
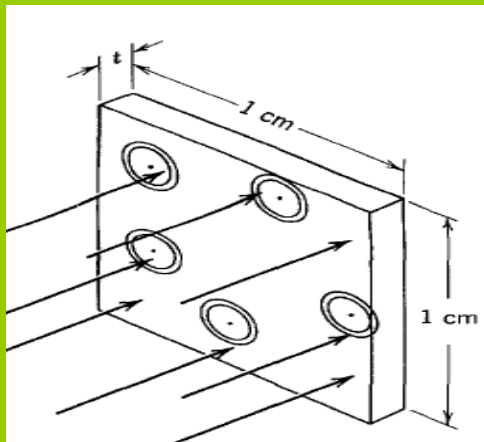
Rutherford , Nobel de Química (1908), por decaimiento en elementos radiativos en “ observé muchas transformaciones en mis experimentos pero ninguna como la propia de Físico a Químico”

Modelos Atómicos Históricos.

- **Thomson:** primer modelo, refutado por Rutherford:
- **Rutherford-1911:** scattering de partículas α

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

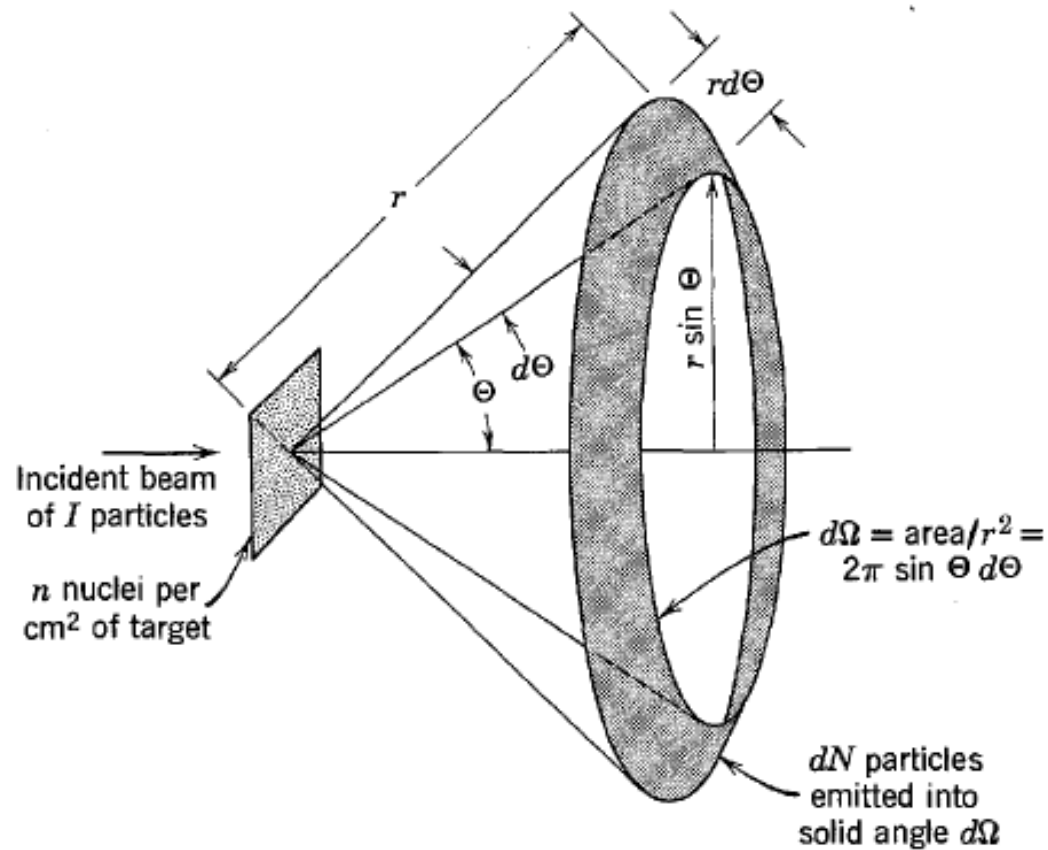
- **Bohr (1913)**



$$N(\Theta) d\Theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2} \right)^2 \frac{I\rho t 2\pi \sin \Theta d\Theta}{\sin^4 (\Theta/2)}$$

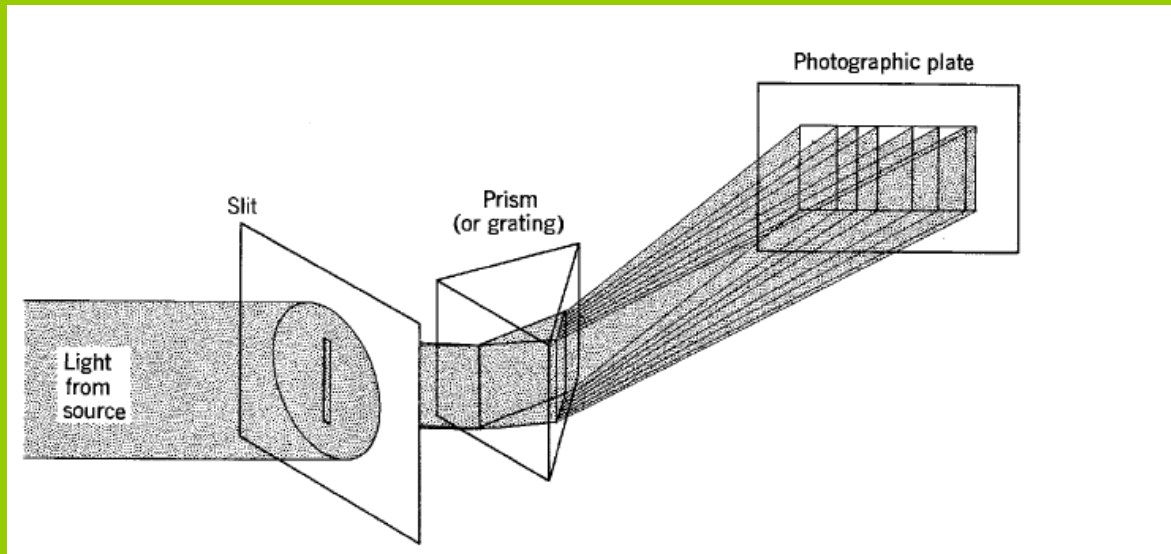
Dependencia angular testada en Ag y Au en rango angular de 5° a 150° (**anillos:** construcción geométrica)

Sección eficaz diferencial



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 (\Theta/2)}$$

Espectro atómico



Una descarga eléctrica atraviesa una región de gas monoatómico. Algunos de sus átomos se excitan y se produce el decaimiento a su estado fundamental. Se emite radiación, se colima y pasa por un prisma (puede ser por una red de difracción también) y se observa el espectro atómico en una placa fotográfica.

ESPECTRO ATÓMICO de hidrógeno

SERIE DE BALMER (1885) (VISIBLE)

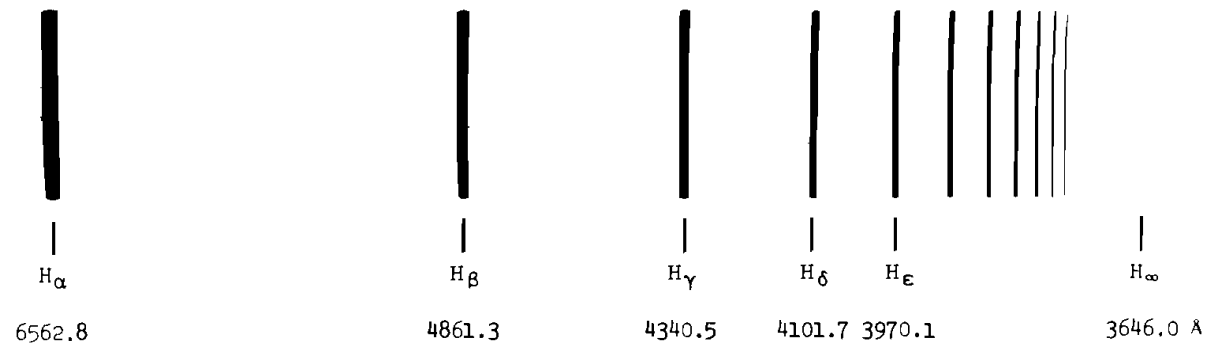


Figure 5.1. The Balmer series of the hydrogen atom.

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

(en Å)

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

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

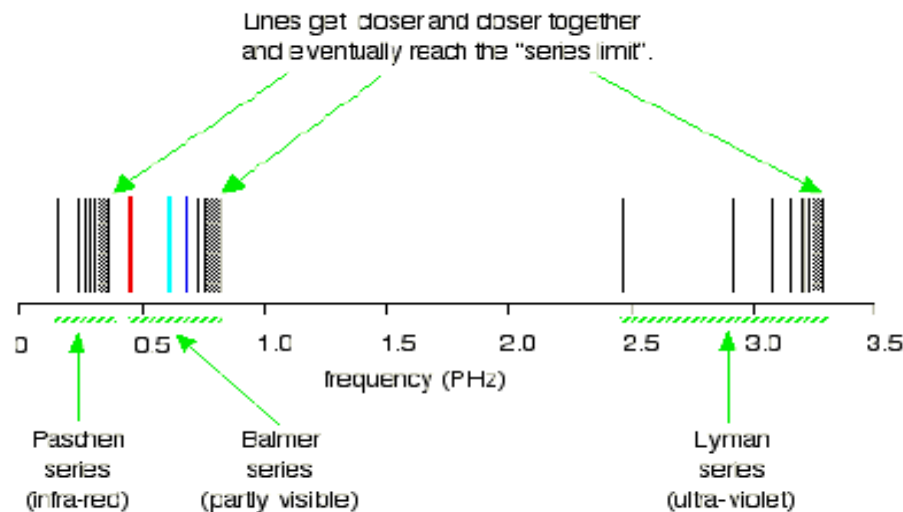


Table 4-1 The Hydrogen Series

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

$$R_H = 10967757.6 \pm 1.2 \text{ m}^{-1}$$

$$\kappa = \frac{1}{\lambda}$$

Postulados de Bohr (1913)

1-Órbitas circulares alrededor del núcleo debido a interacción Coulombiana clásica electrón-núcleo.

2-El electrón se mueve en órbitas cuyo momento angular está cuantizado. Se verifica:

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

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

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

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

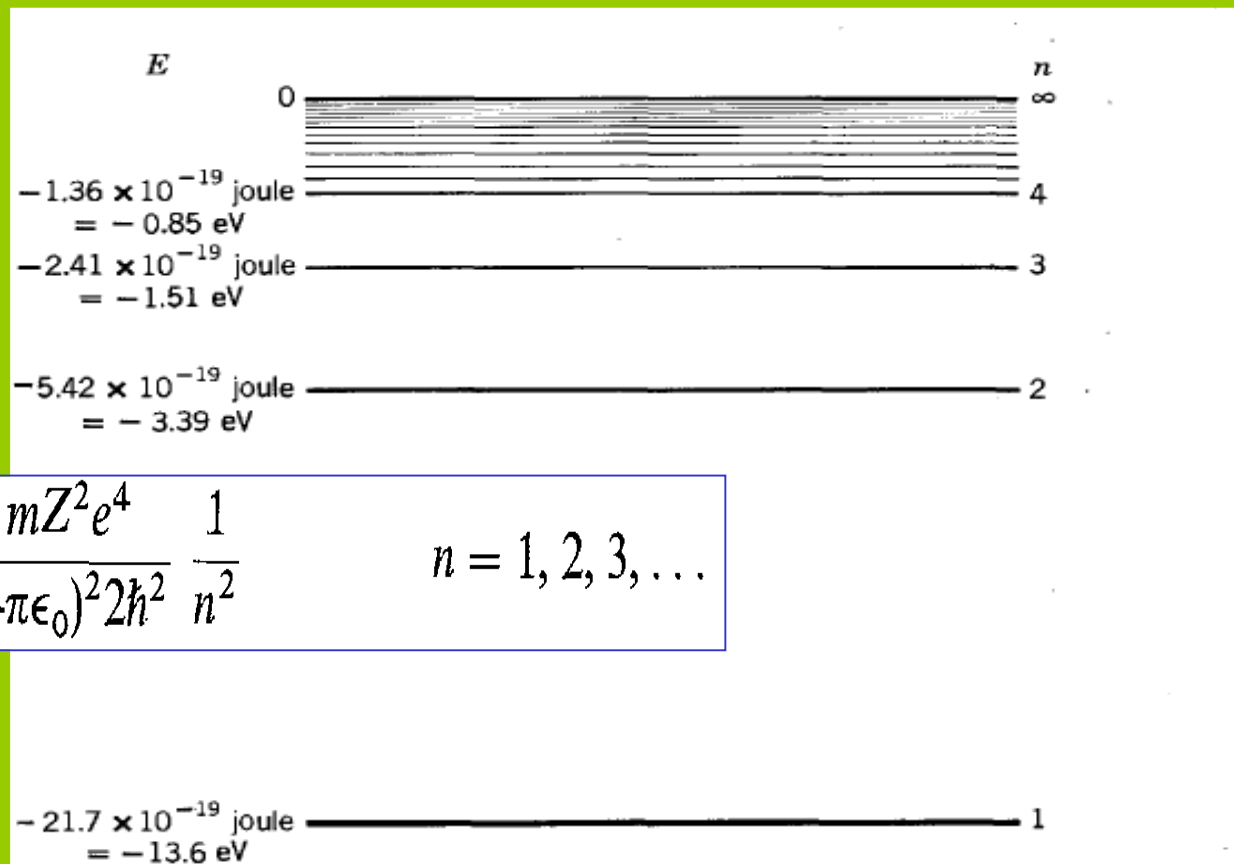
Modelo de Bohr

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

$$mvr = n\hbar$$

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

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



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

Diagrama de niveles de energía del átomo de hidrógeno

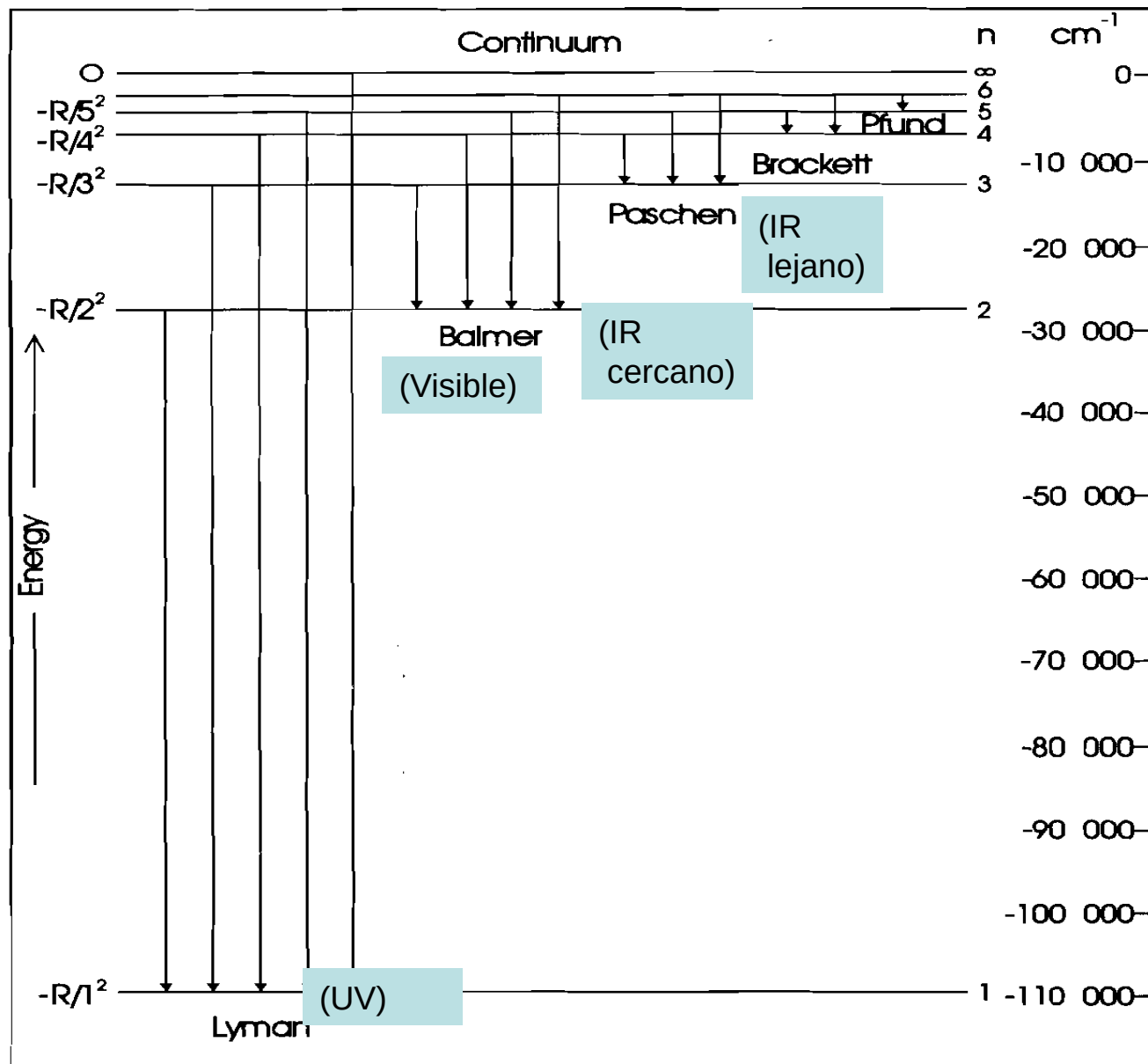


Figure 5.2. Energy levels of the hydrogen atom.

Corrección del modelo de Bohr por masa nuclear finita

$$\mu = \frac{mM}{m + M}$$

$$\mu v r = n \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\kappa = R_M Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{where } R_M \equiv \frac{M}{m + M} R_\infty \equiv \frac{\mu}{m} R_\infty$$

$$M/m \rightarrow \infty, \quad \longrightarrow \quad R_M \rightarrow R_\infty: \longrightarrow R_H = 10968100 \text{ m}^{-1}$$

Ej: $M/m = 1836$, para H

ÁTOMOS DE HIDROGENOIDES-espectro de un electrón

$\mathbf{S}$ =momento de spin electrónico



Matrices de Pauli

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

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

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

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

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

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

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

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

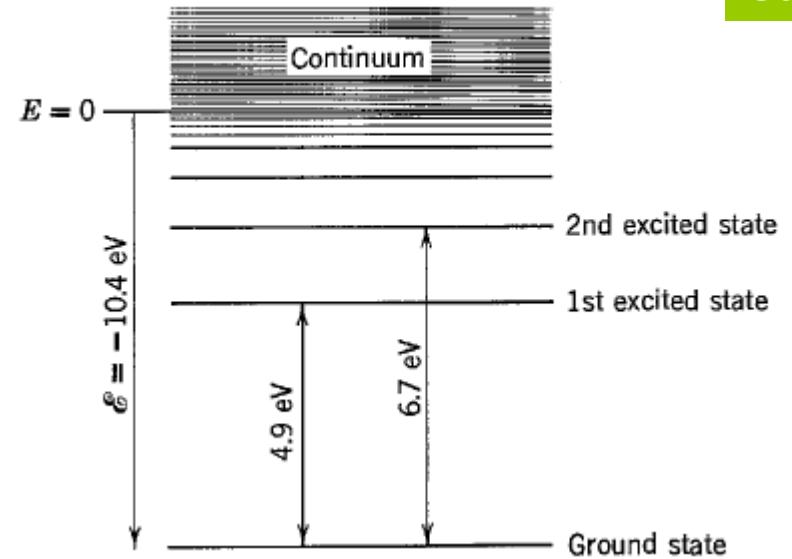
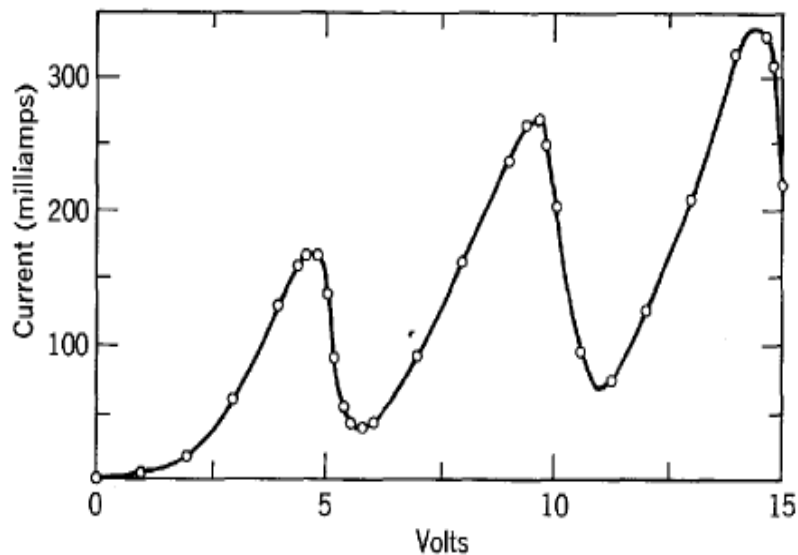
$$\mu = \frac{mM}{m + M}$$

$$R = R_H = 109,677,4212 \text{ cm}^{-1}$$

$$\equiv \frac{M}{m + M} R_\infty \equiv \frac{\mu}{m} R_\infty$$

Experimento de Frank Hertz (1914)

Los niveles energéticos de átomos multielectrónicos también están cuantizados



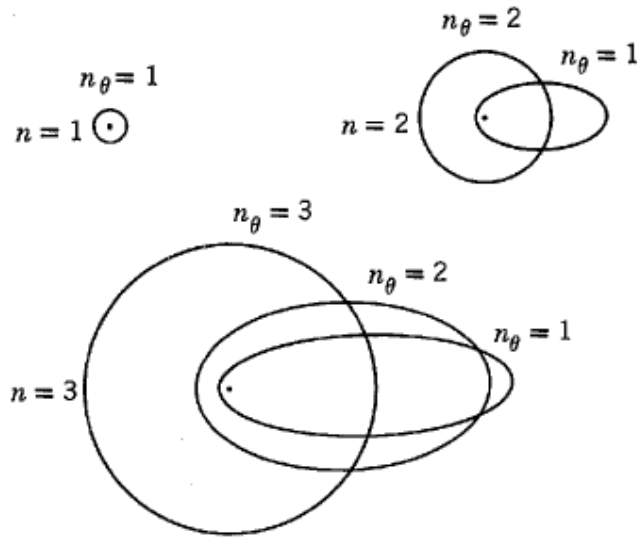
Gas Hg

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 del H en forma **relativística**.

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

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

$$\alpha \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = 7.297 \times 10^{-3} \simeq \frac{1}{137}$$

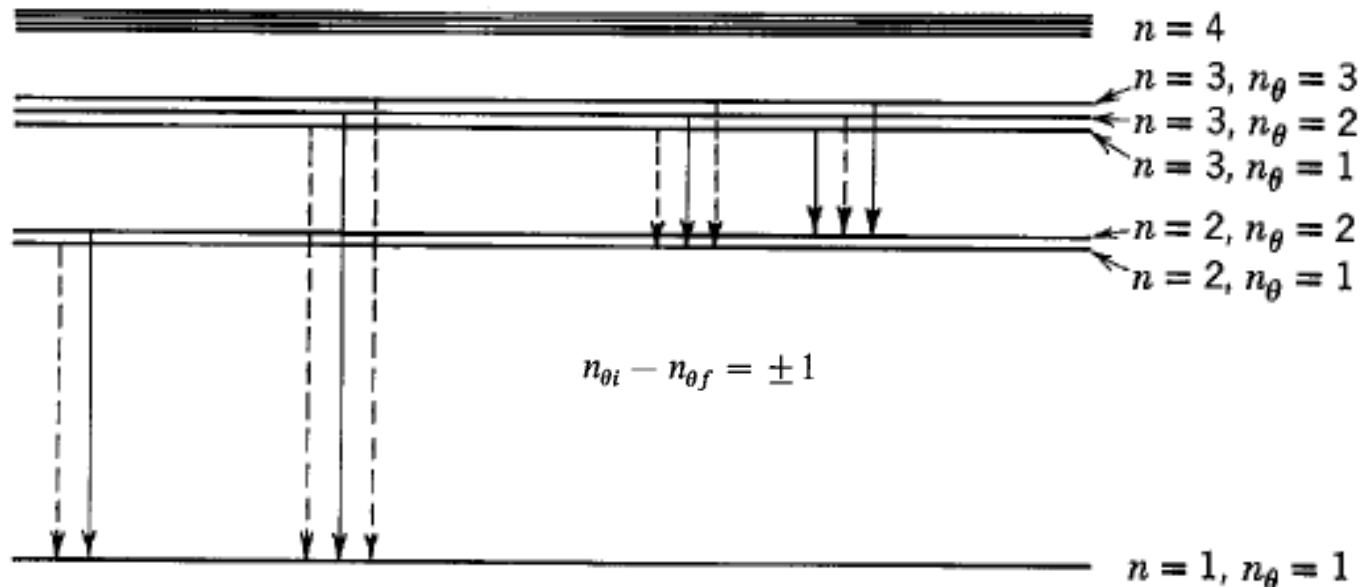
Cuantización de Sommerfeld del momento angular orbital
(descrito en coordenadas polares; permitió evaluar los semiejes de las órbitas elípticas)

$$\oint L d\theta = n_{\theta} h$$
$$\oint p_r dr = n_r h$$

$$L = n_{\theta} \hbar$$

$$n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots$$

Algunas transiciones de hidrógeno, regla de selección n_θ

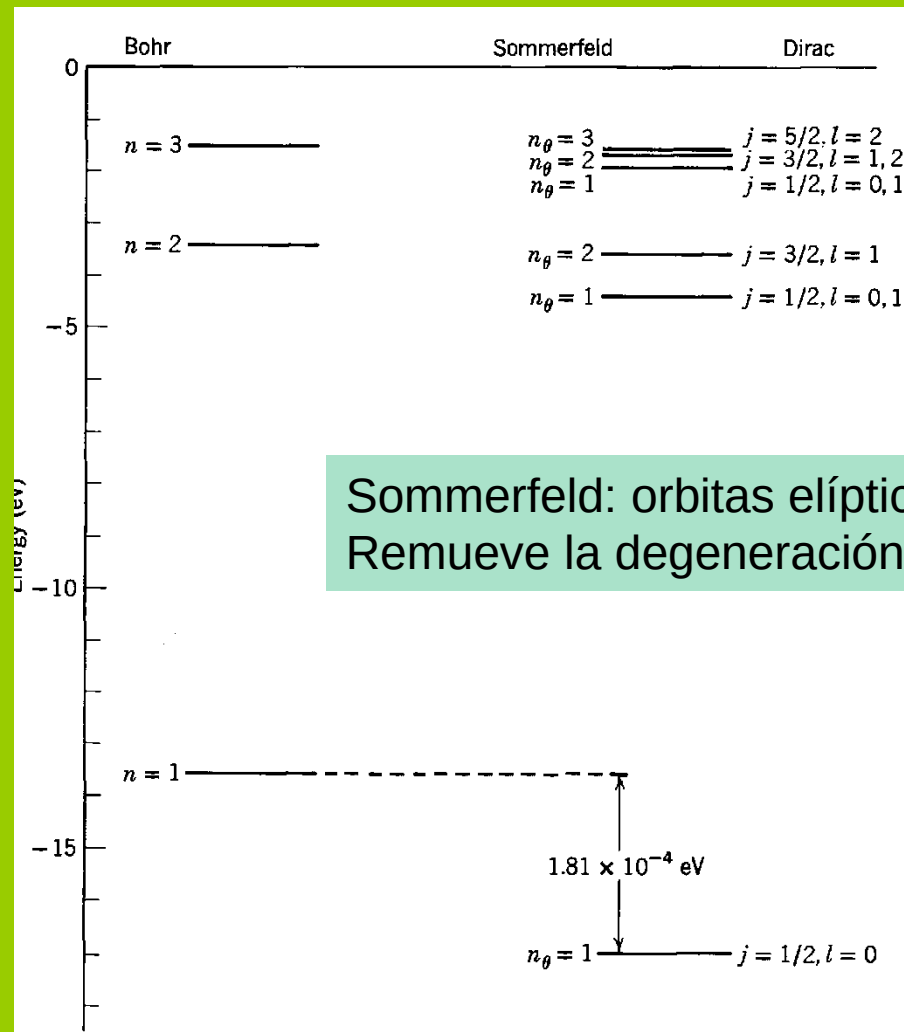


Estructura fina (esquema exagerado a fines de visualización) del átomo de hidrógeno

Las transiciones corresponden a

$$n_{\theta i} - n_{\theta f} = \pm 1$$

Niveles de energía del átomo de hidrógeno



$$n_{\theta i} - n_{\theta f} = \pm 1$$

Sommerfeld: orbitas elípticas, tratamiento clásico.
Remueve la degeneración con correcciones relativistas

Las objeciones al modelo de Sommerfeld se solucionaron con Schrödinger que estableció las bases de la Mecánica Cuántica

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi$$

Schrödinger
Independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

(en una variable)

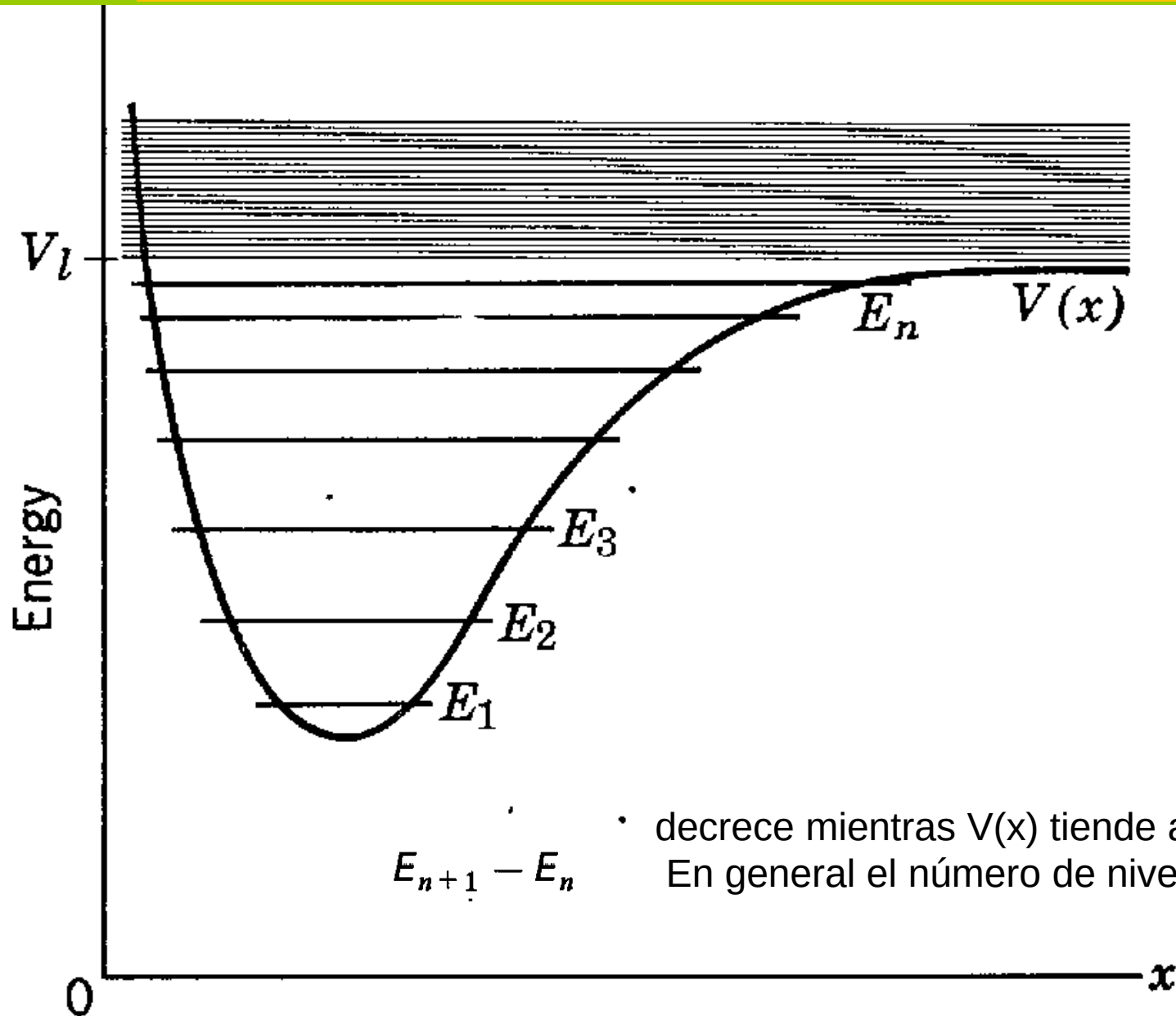
Schrödinger
Dependiente del tiempo

Para velocidades del electrón del orden de la velocidad de la luz, valen los mismos postulados considerando:

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2} + V$$

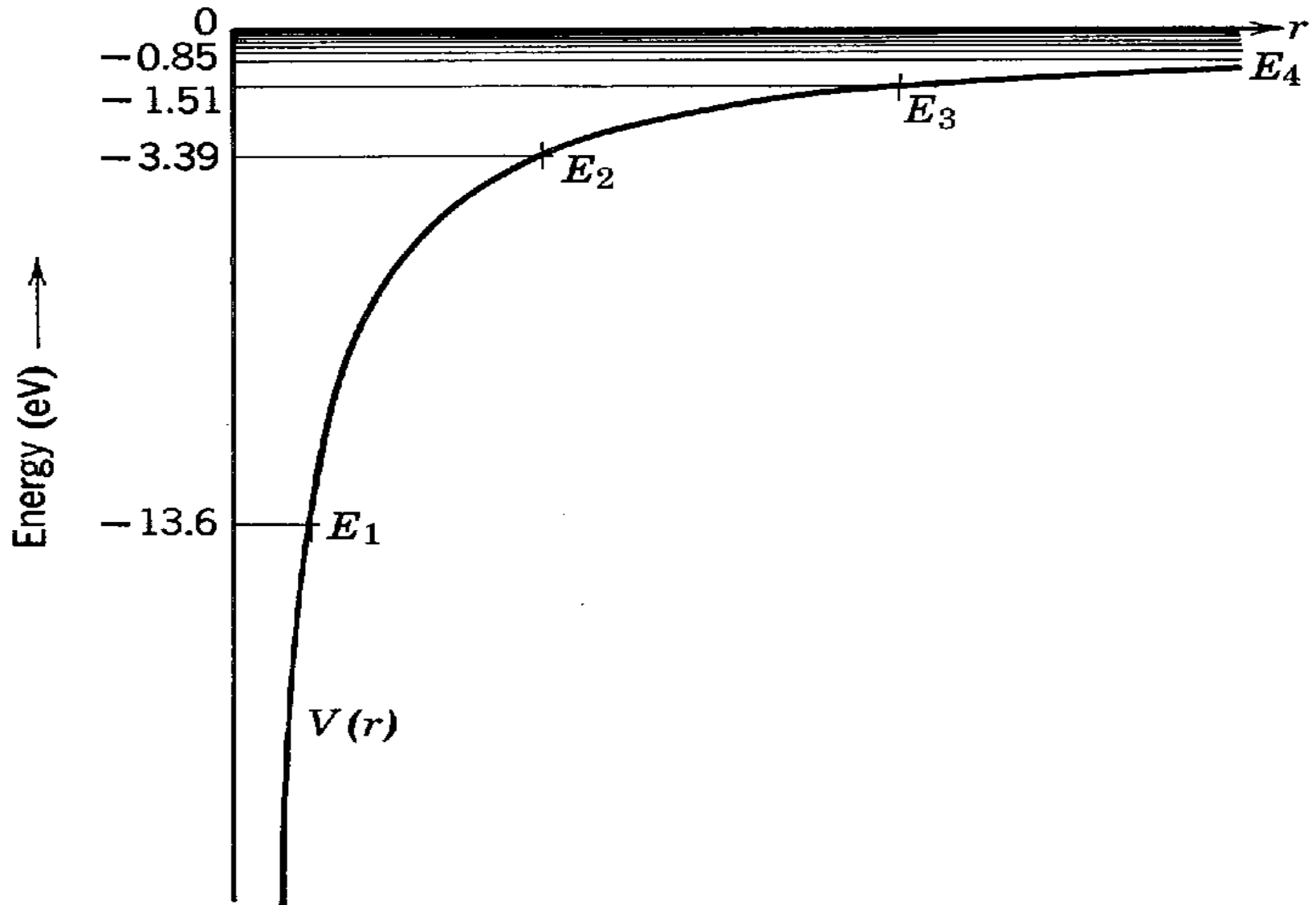
DIRAC

Niveles de energía para un dado potencial $V(x)$



$E_{n+1} - E_n$ • decrece mientras $V(x)$ tiende a V_l .
En general el número de niveles es finito

Potencial de Coulomb y autovalores de energía para los estados ligados del átomo hidrogenoide



Números cuánticos atómicos

Número cuántico principal; $n=1,2,3....$

Número cuántico orbital, $l=0, 1, ... (n-1)$

Número cuántico magnético,

$$m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$$

Spin, $m_s = \pm 1/2$.

s subshell	p subshell	d subshell	f subshell
$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$m_l = 0$	$m_l = -1, 0, +1$	$m_l = -2, -1, 0, +1, +2$	$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$
One s orbital	Three p orbitals	Five d orbitals	Seven f orbitals
2 s orbital electrons	6 p orbital electrons	10 d orbital electrons	14 f orbital electrons

Principio de correspondencia

- 1- Los resultados cuánticos coinciden con los clásicos en el límite de n muy grande
- 2- Las reglas de selección se cumplen para todo n .

$$E_i - E_f = (n_i - n_f)h\nu.$$

Table 4-2 The Correspondence Principle for Hydrogen

n	ν_0	ν	% Difference
5	5.26×10^{13}	7.38×10^{13}	29
10	6.57×10^{12}	7.72×10^{12}	14
100	6.578×10^9	6.677×10^9	1.5
1,000	6.5779×10^6	6.5878×10^6	0.15
10,000	6.5779×10^3	6.5789×10^3	0.015

Momento angular y spin

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

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

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

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

$$L_+ = L_x + iL_y$$

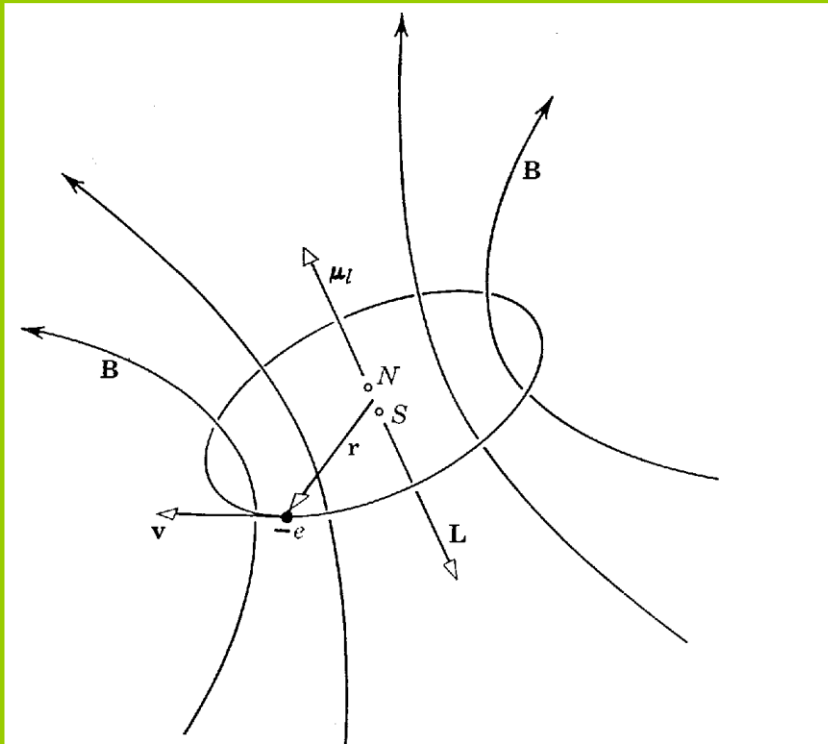
$$L_- = L_x - iL_y$$

Funciones de spin:

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

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

Modelo de momento angular asociado al movimiento orbital de electrón



Tratamiento clásico

$$\mu_l = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} L$$

$$\mu_l = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} L$$

Tratamiento Cuántico

$$\mu_l = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} L = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \sqrt{l(l+1)} \hbar = g_l \mu_b \sqrt{l(l+1)}$$

$$\mu_{l_z} = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} L_z = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} m_l \hbar = -g_l \mu_b m_l$$

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

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

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

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

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

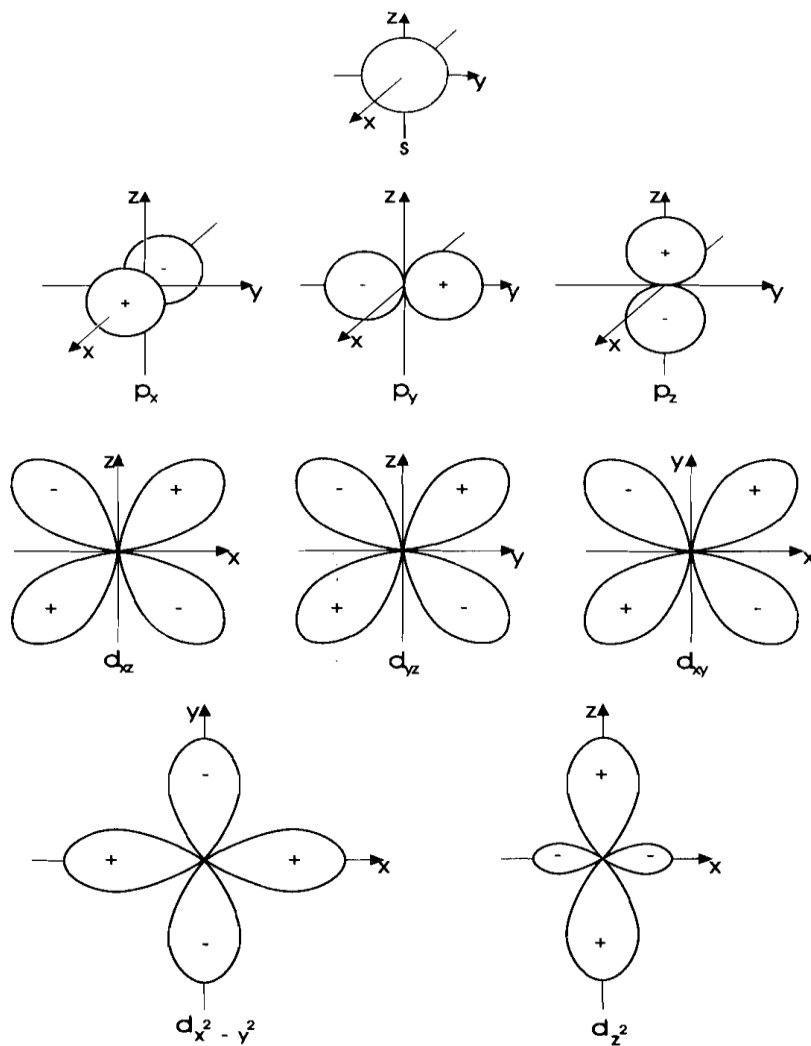
$$\mu_{l_z} = -g_l\mu_b m_l$$

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

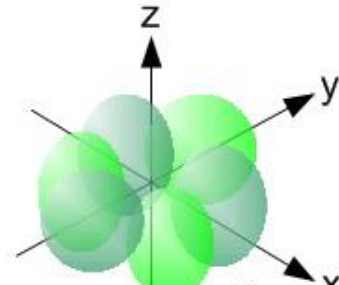
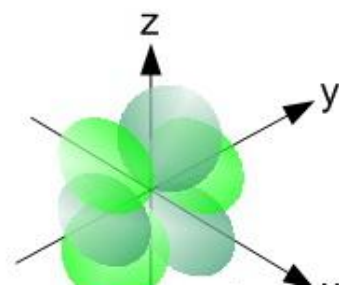
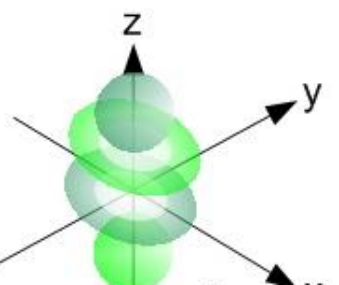
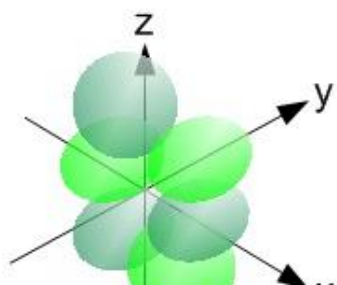
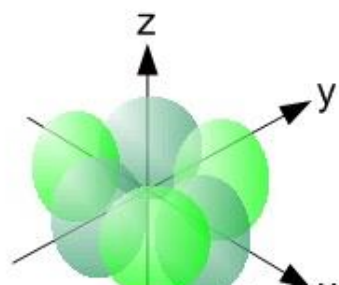
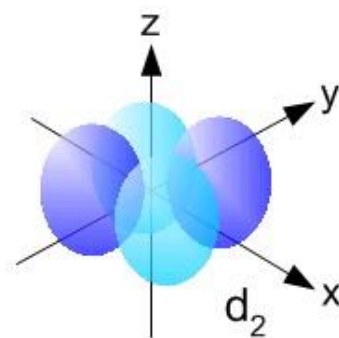
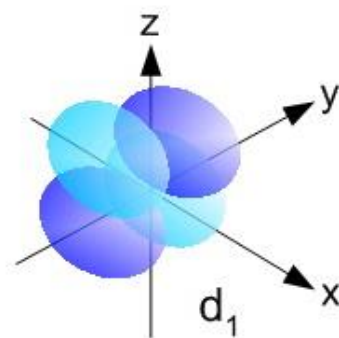
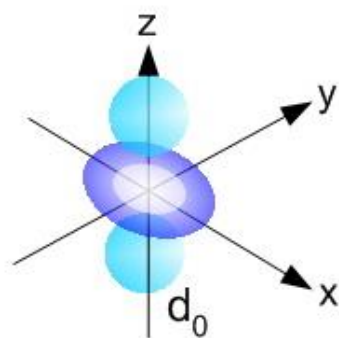
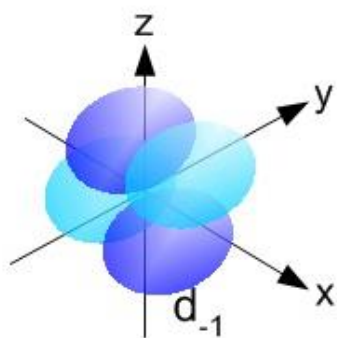
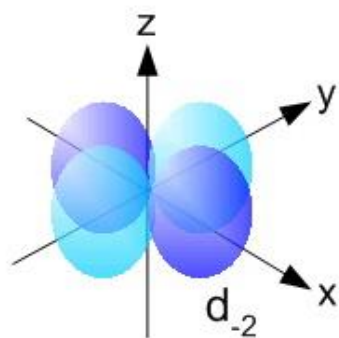
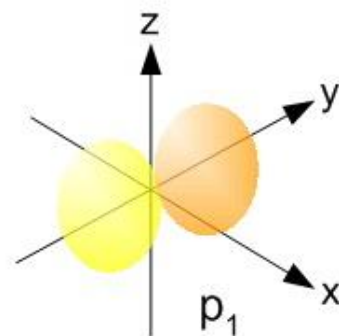
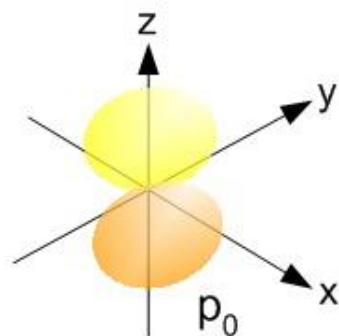
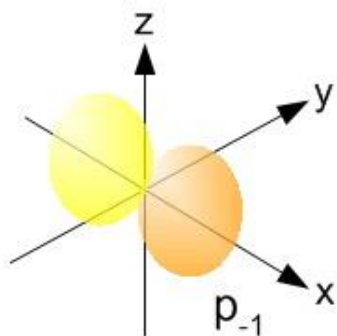
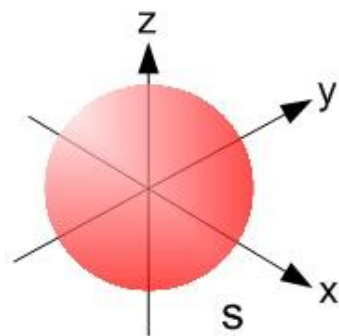
$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, +l-1, l$$

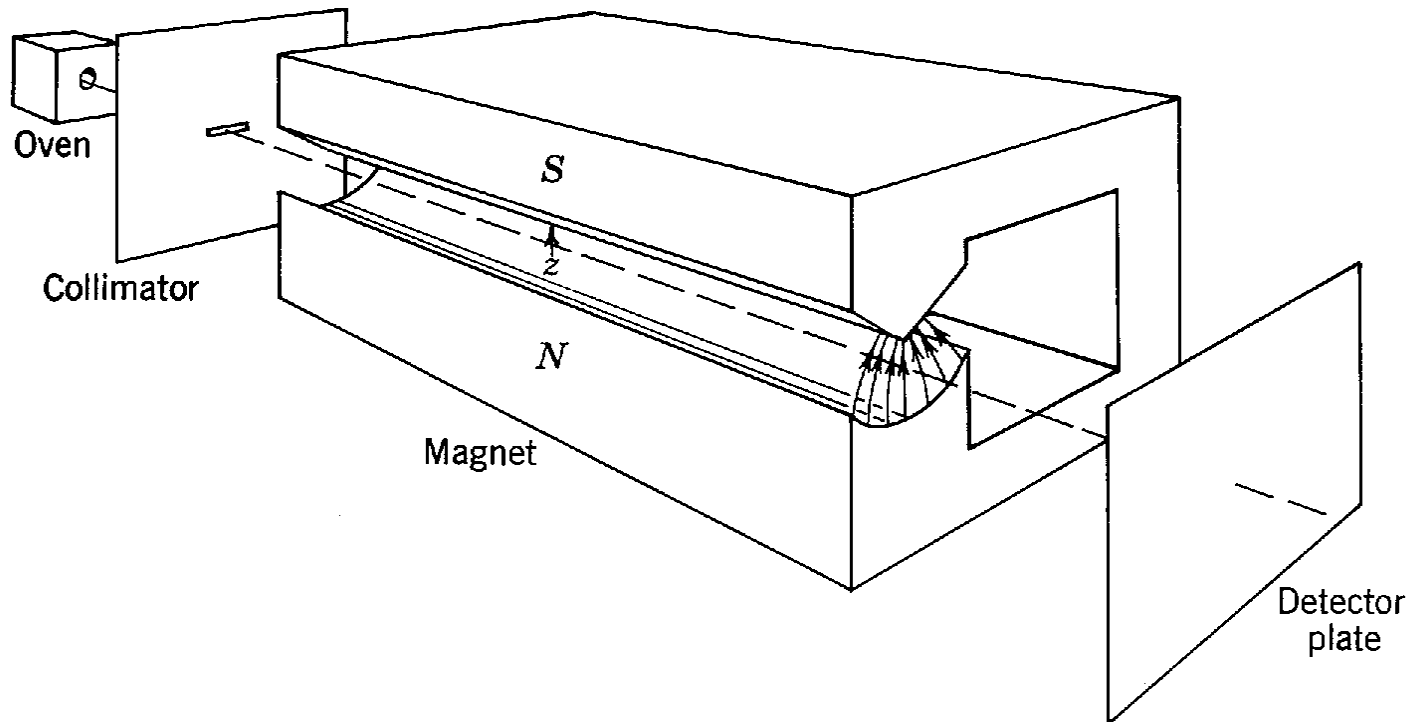
PARTE ANGULAR DE LOS ORBITALES 1s, 2p, 3d



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



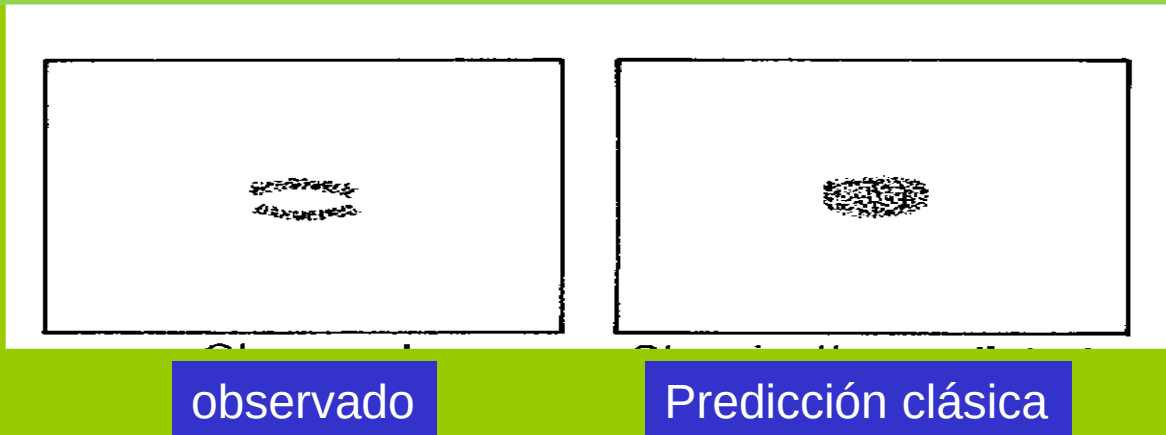
Experimento de Stern-Gerlach (1922): componente Z el momento dipolar magnético de átomos de Ag. (haz de átomos de Ag. atravesando un campo magnético **no uniforme**)



Experimento de Stern-Gerlach (1922) :

Buscaba determinar componente z el momento dipolar magnético de átomos de Ag. (haz de átomos de Ag atravesando un campo magnético *no uniforme*).

Se observan 2 componentes discretas en direcciones $+z$ y $-z$.



observado

Predicción clásica

1927: Phillips y Taylor repiten el experimento para haz de hidrógeno y hallan lo mismo: hay otro momento angular intrínseco.

Años más tarde se explica con el SPIN electrónico.

Spin electrónico

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$
$$S_z = m_s\hbar$$

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{g_s\mu_b}{\hbar} \mathbf{S}$$
$$\mu_{s_z} = -g_s\mu_b m_s$$

$m_s = -1/2, +1/2$	$s = 1/2$	$s = 1/2$
--------------------	-----------	-----------

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -\mu_{s_z} B \\ &= g_s\mu_b m_s B \\ &= \pm g_s\mu_b B/2\end{aligned}$$

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 orbital $\mathbf{l}$

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

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

Atracción COULOMBIANA
entre electrón y núcleo

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

orden de magnitud de la energía necesaria
para invertir el dipolo para 1 electrón en el
átomo de hidrógeno

$$\Delta E \approx 2 \mu_B = 1,16 \times 10^{-3} \text{ eV}$$

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

(átomo de hidrógeno)

Recordar expresiones útiles en el tratamiento spin-orbital

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} + 2 \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = (\mathbf{J} \cdot \mathbf{J} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{S})/2$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = (J^2 - L^2 - S^2)/2$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

$$\overline{\Delta E} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

Teoría de Dirac

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

ÁTOMO DE MUCHOS ELECTRONES

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

$$\psi = \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$$

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

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

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

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

(derivación adecuada: EQR
(electrodinámica cuántica relativista))

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

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

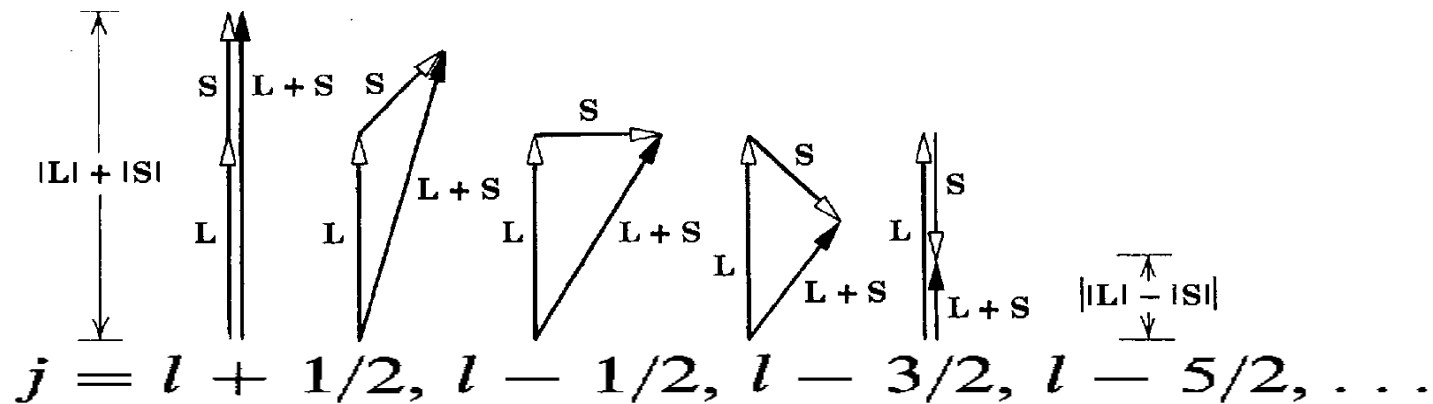
$\mathbf{j}$ conmuta con $\mathbf{H}$
(cte de movimiento)

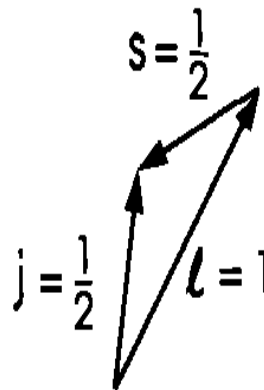
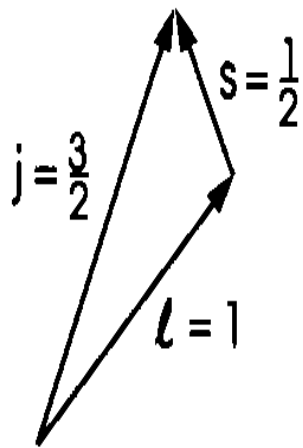
$$J_z = L_z + S_z$$

$$J_z = m_j \hbar$$

j^2 y j_z **Sí** conmutan con $\mathbf{H}$

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





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

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

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

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

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

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

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

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

Coeficientes de Glebsh Gordan

Representación desacoplada:

Ejemplo:
electrones p

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

Producto de funciones angular y spin de un
electrón: **6** funciones


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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Representación en estados acoplados y desacoplados

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

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

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

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

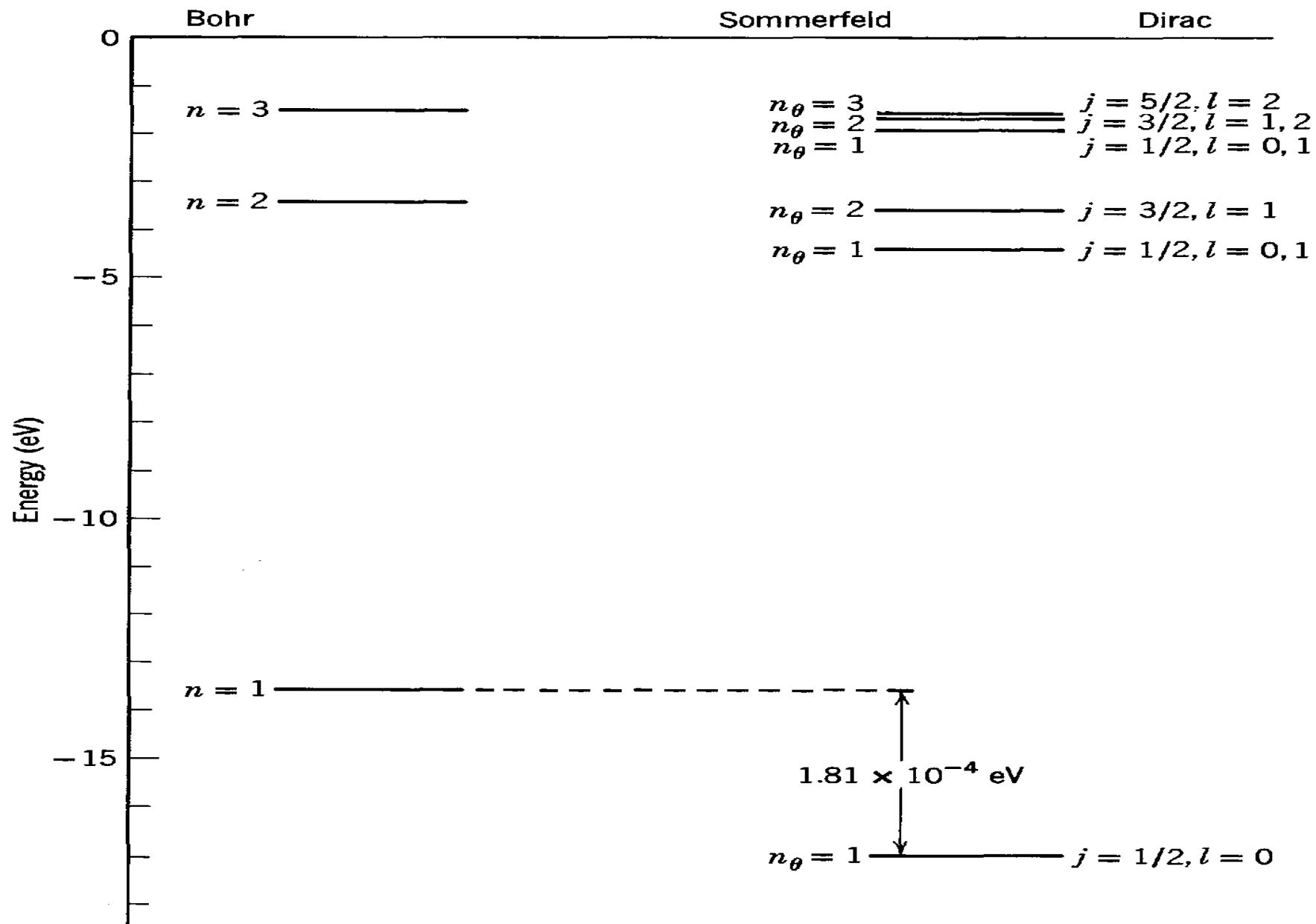
$$\xi \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{\xi(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)}{2}.$$

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

J^2 conmuta con H

Tratamiento relativista de DIRAC
de los niveles del átomo de
hidrógeno

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



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

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

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

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

Table 5.4. One-electron and Multi-electron Atoms

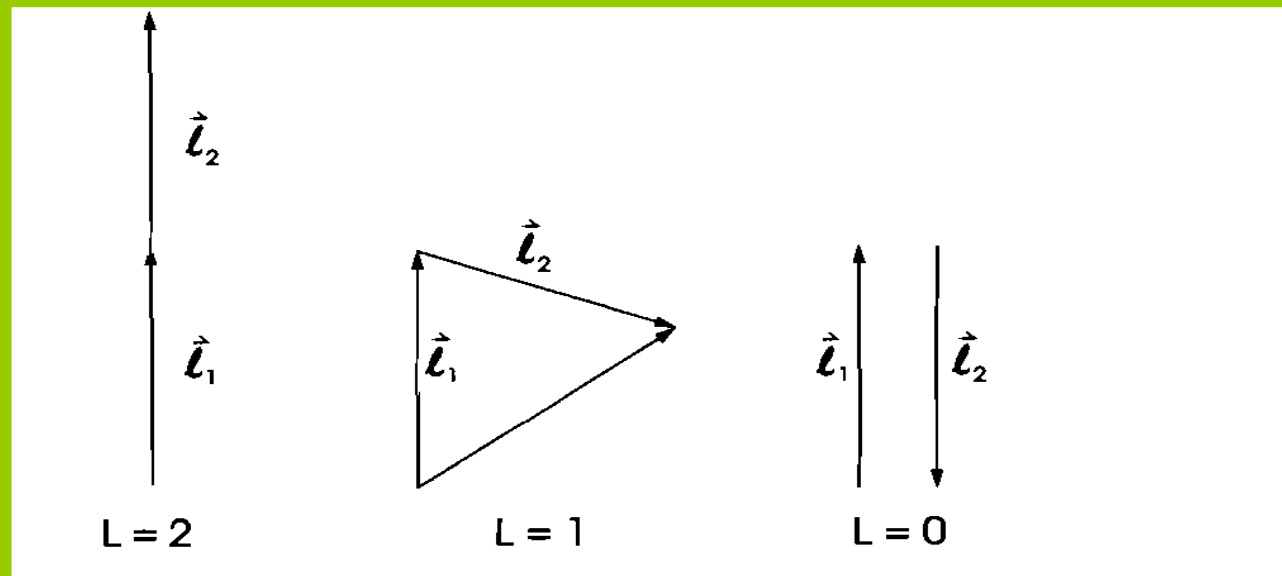
Multi-electron Atoms	One-electron Atoms
$\hat{L}^2\psi = L(L + 1)\hbar^2\psi$	$\hat{l}^2\psi = l(l + 1)\hbar^2\psi$
$\hat{L}_z\psi = M_L\hbar\psi$	$\hat{l}_z\psi = m_l\hbar\psi$
$\hat{S}^2\psi = S(S + 1)\hbar^2\psi$	$\hat{s}^2\psi = s(s + 1)\hbar^2\psi$
$\hat{S}_z\psi = M_S\hbar\psi$	$\hat{s}_z\psi =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

$$2S+1 L,$$

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

$$\chi_1 = p_1 \alpha$$

$$\chi_2 = p_0 \alpha ;$$

$$\chi_3 = p_{-1} \alpha ;$$

$$\chi_4 = p_1 \beta ;$$

$$\chi_5 = p_0 \beta ;$$

$$\chi_6 = p_{-1} \beta$$

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.

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

M_S		1	0	-1
M_L	2		① $\uparrow\downarrow$ — —	
	1	② $\uparrow$ — $\uparrow$ —	③ $\uparrow$ — $\downarrow$ — ⑥ $\downarrow$ — $\uparrow$ —	⑦ $\downarrow$ — $\downarrow$ —
	0	④ $\uparrow$ — — $\uparrow$	⑤ $\uparrow$ — — $\downarrow$ ⑧ $\downarrow$ — — $\uparrow$ ⑩ — $\uparrow\downarrow$ —	⑨ $\downarrow$ — — $\downarrow$
	-1	⑪ — — $\uparrow$ — $\uparrow$	⑫ — — $\uparrow$ — $\downarrow$ ⑬ — — $\downarrow$ — $\uparrow$	⑭ — — $\downarrow$ — $\downarrow$
	-2		⑮ — — $\uparrow\downarrow$	

2da fila

O	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
F	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$
Ne	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$

3era fila

		short version
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$[\text{Ne}]3s^2$
S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$	$[\text{Ne}]3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$
Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^2$	$[\text{Ne}]3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^2$

Orbitales d

																1 H											2 He
3 Li	4 Be																	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne				
11 Na	12 Mg																	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar				
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr										
↑ s block		↑ d block										↑ p block															

Llenado de: 4s

3d

4p

Sc $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$

Ti $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$

V $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$

Cr $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$

Mn $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

Fe $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

Co $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$

Ni $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$

Cu $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Zn $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$

Acoplamiento Spin órbita

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

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

Valores permitidos

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

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

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

J, **L**² y **S**²
conmutan con H

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

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

Reglas de Hund

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

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

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

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

$pz^1 = \dots)$

Función de spin simétrica, significa, función espacial antisimétrica, electrones más distanciados → menor energía

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

2da. Regla para idéntica multiplicidad de SPIN, mayor estabilidad a mayor Momento angular (L). (ej, 2 electrones p; $^3P < (^1D, ^1S)$)

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.

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6$

3era Regla de HUND

ACOPLAMIENTO SPIN ORBITA

Degeneración:

$$\Omega_J = 2J+1$$

Tercera Regla de Hund: Dada cierta configuración y un término de ella, el desdoblamiento espín-orbital se dará, tal que:

- Los estados de menor J serán los de menor energía si la configuración contiene menos de la mitad de los electrones posibles en la subcapa incompleta.
- Los estados con la menor J serán los de mayor energía si la configuración tiene la mitad o más de los electrones en su nivel abierto.

Finalmente en presencia de un campo magnético tiene lugar un desdoblamiento adicional.

ZEEMAN

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

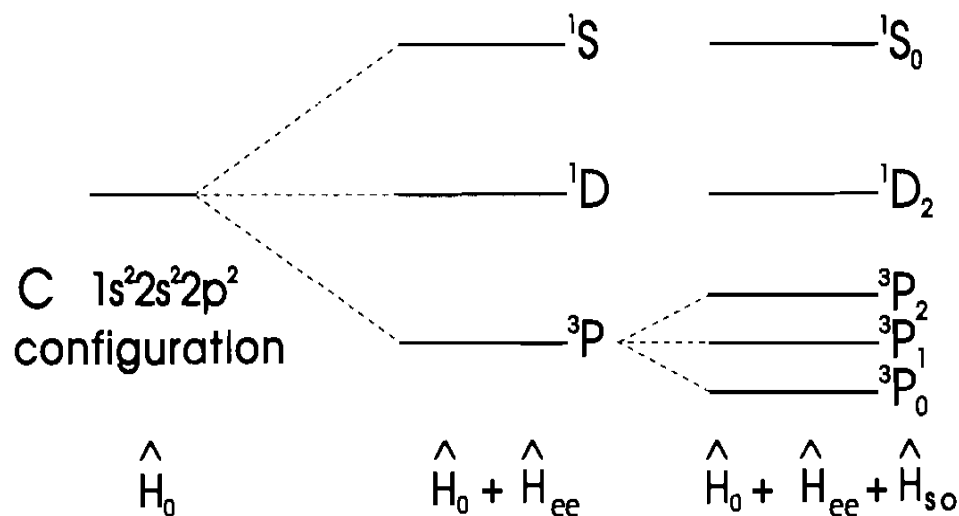
$$\hat{H}\psi = E\psi$$

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

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

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

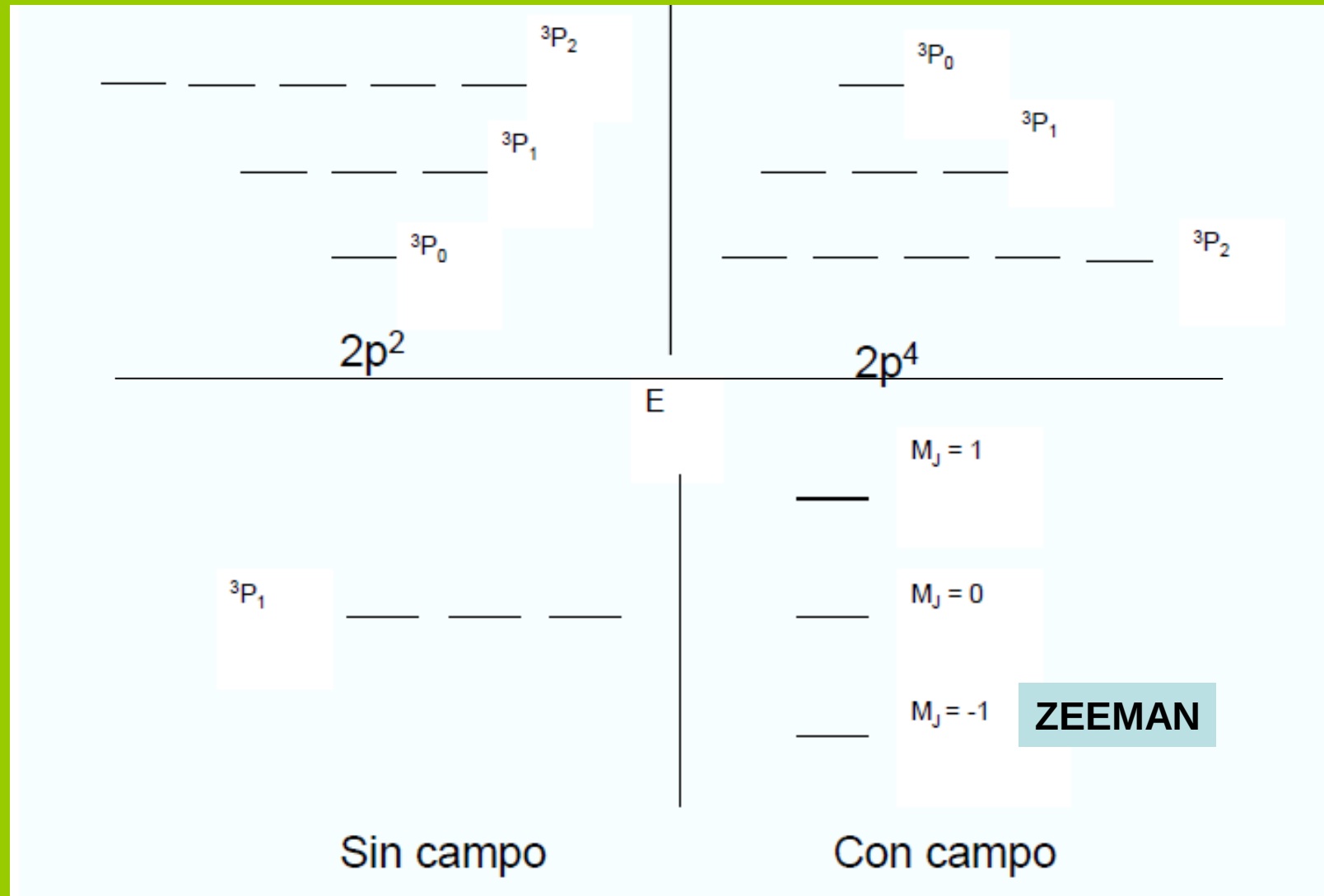
$$\hat{J}_z\psi = M_J\hbar\psi$$



**Reglas de
selección**

**(Russell-
Saunders rules)**

Configuración con menos y **más** de la mitad de los electrones en la capa



Elementos de transición

1 H																2 He	
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr

↑

s block

K

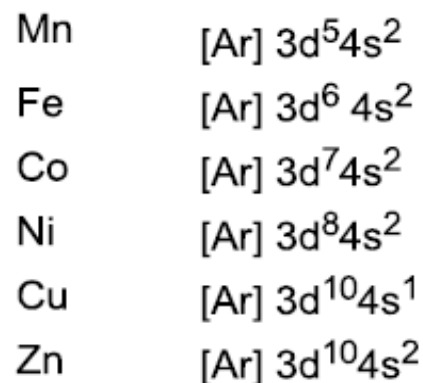
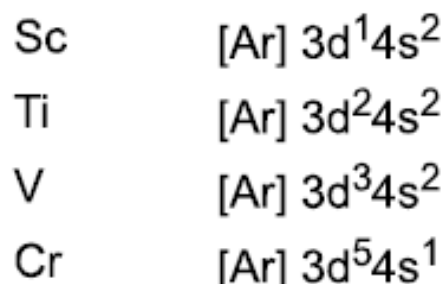
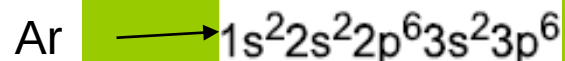
Ca

↑

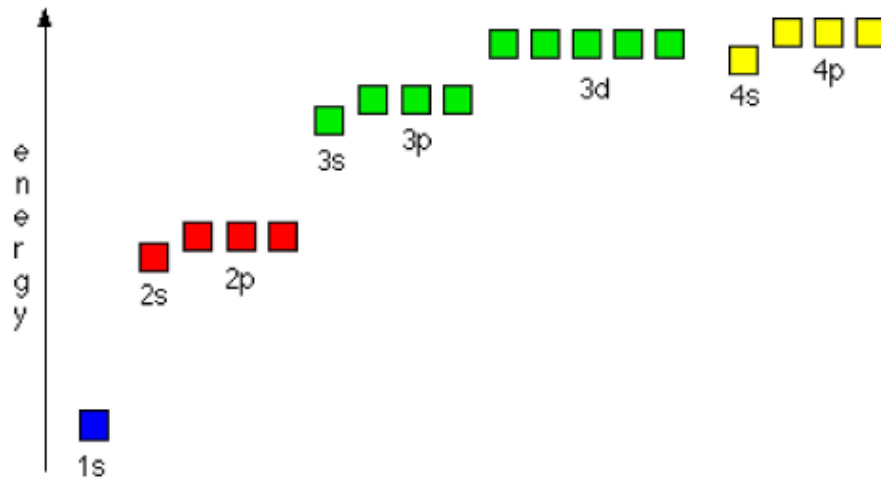
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

↑

block



Resumen de energías orbitales hasta 4p



La interacción entre electrones y núcleo es fundamental para entender cómo se llenan las capas

1- hasta **Ar** :

☺ (3era fila de la T.P)

2- **K y Ca** :

☺ (4ta fila)

																1 H													2 He
3 Li	4 Be															5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne								
11 Na	12 Mg															13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar								
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr												
↑ s block		↑ d block										↑ p block																	

3- **d-block**: **Cr** y **Cu** el diagrama 3d apenas mayor que 4s deja de ser determinante. El balance entre la repulsión e-e, la atracción electrón núcleo y el gap 3d-4s hace más favorable que el e⁻ adicional vaya al 3d.

Transition Metals and the Aufbau Principle

J. Chem Educ.

L. G. Vanquickenborne, K. Pierloot, and D. Devoghel

University of Leuven, Celestijnenlaan 200F, B-3001 Heverlee-Leuven, Belgium

Volume 71 Number 6 June 1994 469

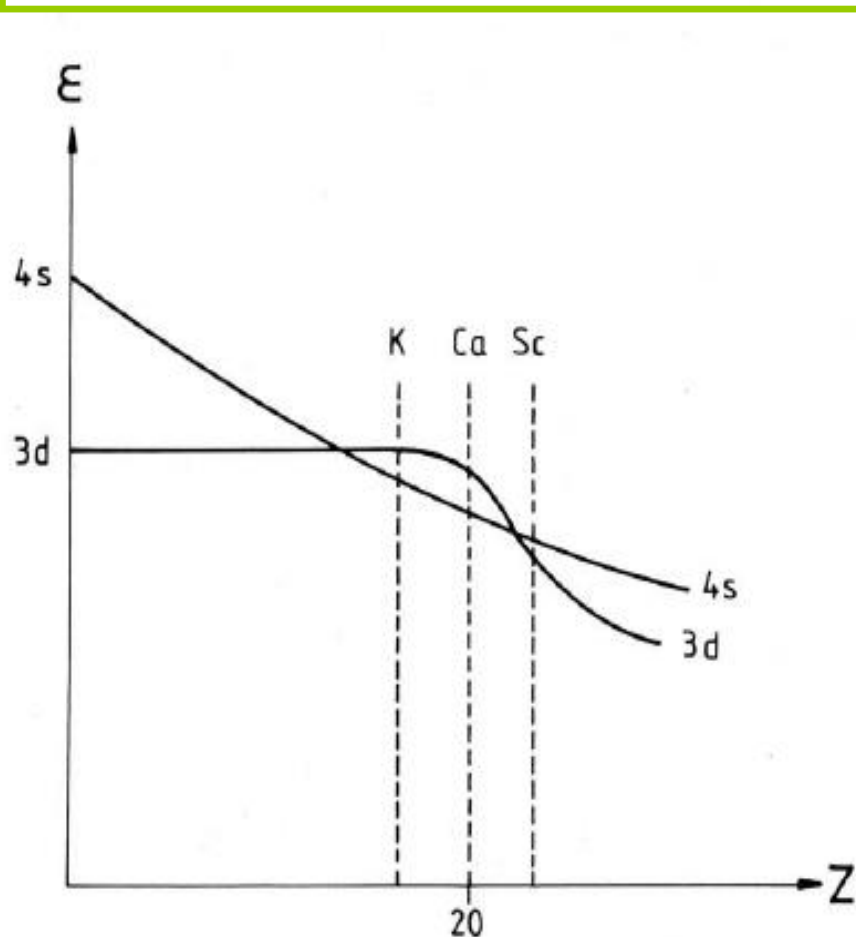


Figure 1. Schematic and partial orbital energy (ϵ)-diagram as a function of nuclear charge (Z) for the neutral atoms.

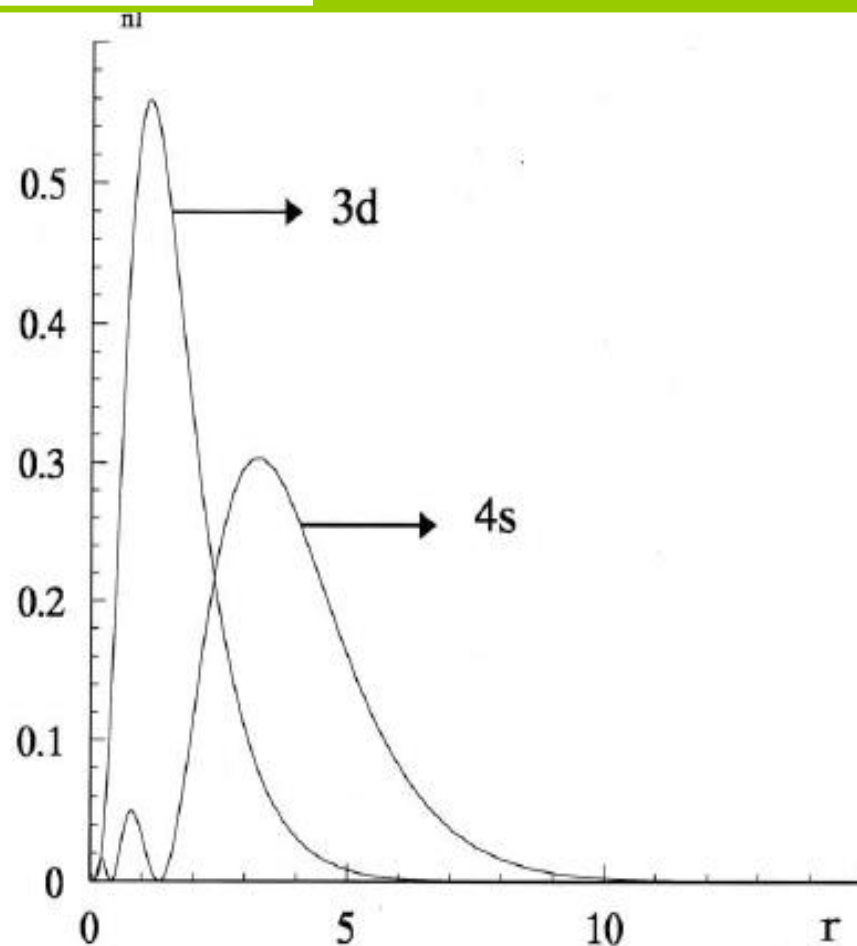


Figure 2. Probability density to find an electron at a given distance from the nucleus in a 3d, and a 4s orbital of the scandium atom (in the $4s^2 3d^1$ configuration); all quantities are in atomic units.

The Full Story of the Electron Configurations of the Transition Elements

W. H. Eugen Schwarz

Theoretical Chemistry, University Siegen, 57068 Siegen, Germany
schwarz@chemie.uni-siegen.de

J. Chem Educ. Vol, 87 (2010) 444

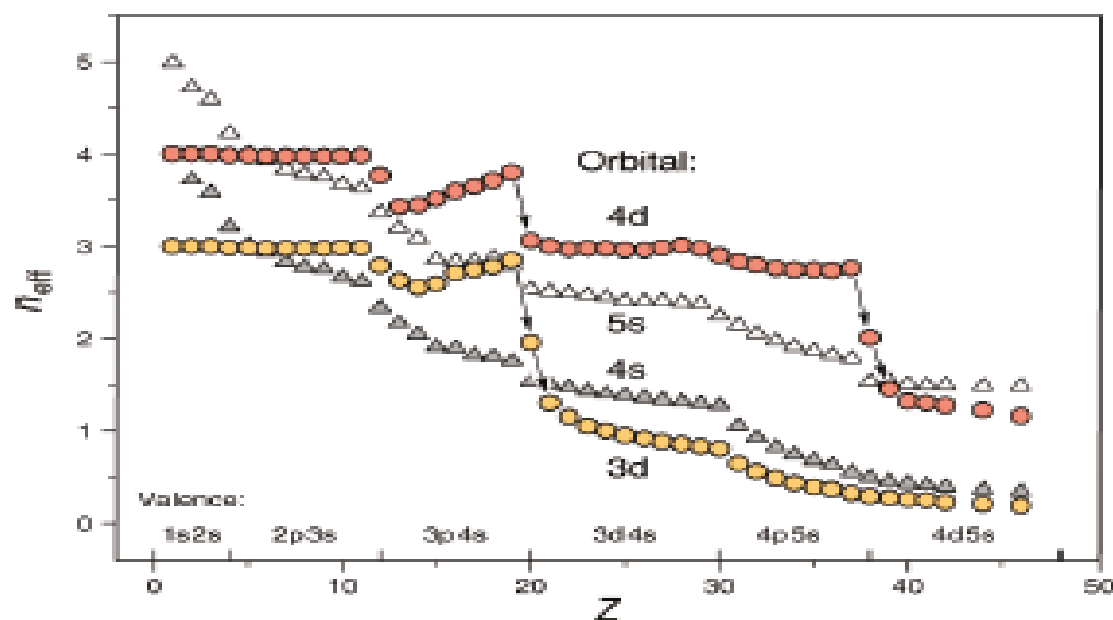
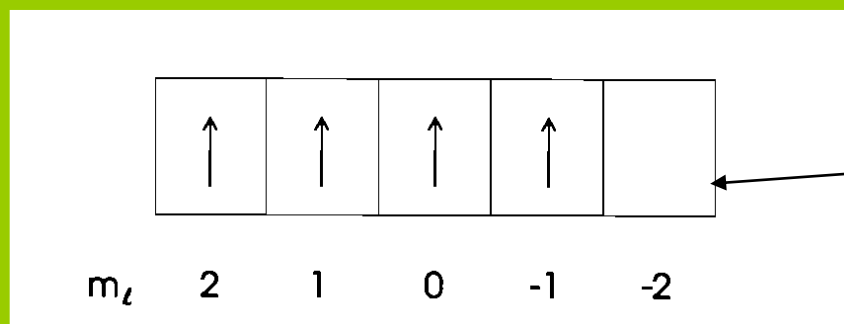


Figure 1. Energetic d-orbital collapse (indicated by arrows) of free neutral atoms at the beginning of the transition rows. Z is the nuclear charge; the orbital symbols above the abscissa indicate shell² closing (4s and 5s are filled up twice, before and after the intermediate d filling). The orbital energies ε are represented by the effective quantum numbers $n_{\text{eff}} = 1/(\sqrt{|\varepsilon|/13.606 \text{ eV}})$.³ The orbital radii vary similarly; for details, see ref 4.

Configuraciones atómicas p^n y d^n

p^1 : 2P	d^1, d^9 : 2D
p^2 : $^1S, ^1D, ^3P$	d^2, d^8 : $^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F$
p^3 : $^2P, ^2D, ^4S$	d^3, d^7 : $^2P, ^2D$ (twice), $^2F, ^2G, ^2H, ^4P, ^4F$
p^4 : $^1S, ^1D, ^3P$	d^4, d^6 : 1S (twice), 1D (twice), $^1F, ^1G$ (twice), $^1I, ^3P$ (twice)
p^5 : 2P	$^3D, ^3F$ (twice), $^3G, ^3H, ^5D$
	d^5 : $^2S, ^2P, ^2D$ (three times), 2F (twice), 2G (twice), $^2H, ^2I, ^4P, ^4D, ^4F, ^4G, ^6S$



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

Multiplicidad de spin

$2S + 1$	Name	$2S + 1$	Name
1	Singlet	6	Sextet
2	Doublet	7	Septet
3	Triplet	8	Octet
4	Quartet	9	Nonet
5	Quintet	10	Decet

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

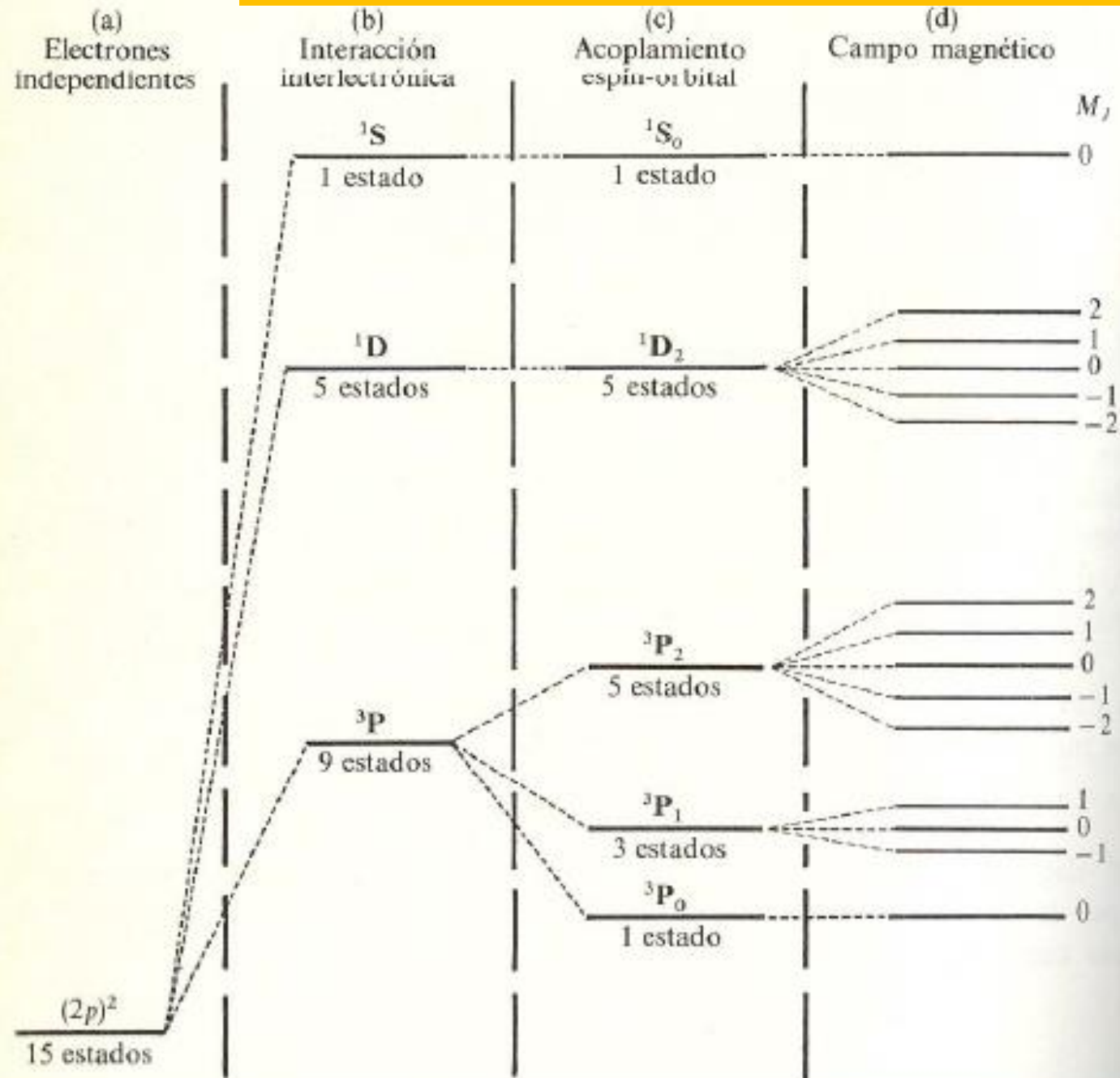
$$E_{J+1} - E_J = \frac{\zeta [(J+1)(J+2) - J(J+1)]}{2} = \zeta(J+1).$$

Intervalo de Landé

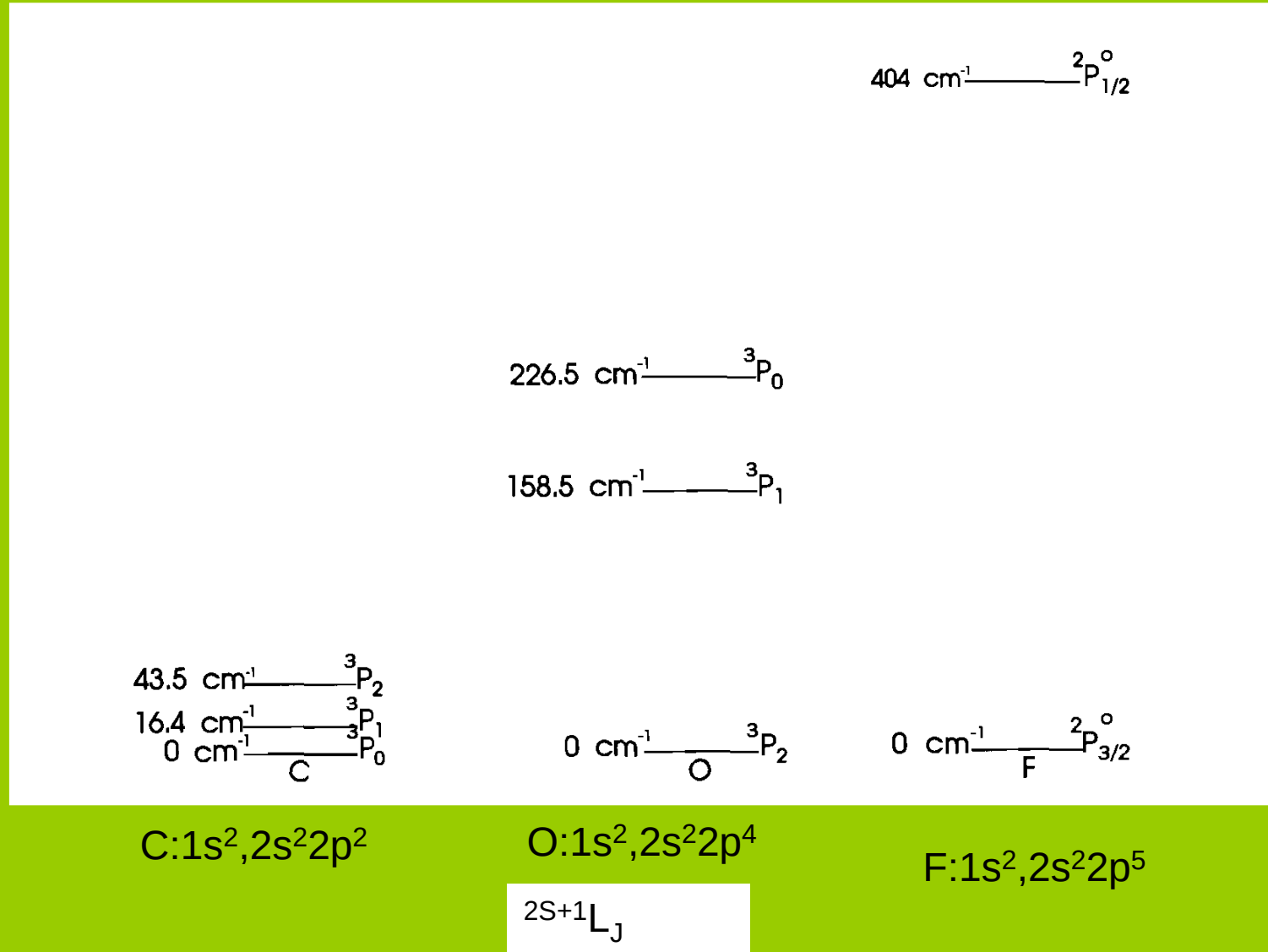


Valores permitidos de J: $L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$

Volviendo al átomo de carbono, $2p^2$



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



Efecto Zeeman

Definición de momentos magnéticos: orbital, spin, nuclear

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

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

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

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

$$g_e = 2.0023$$

Campo **B** externo

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

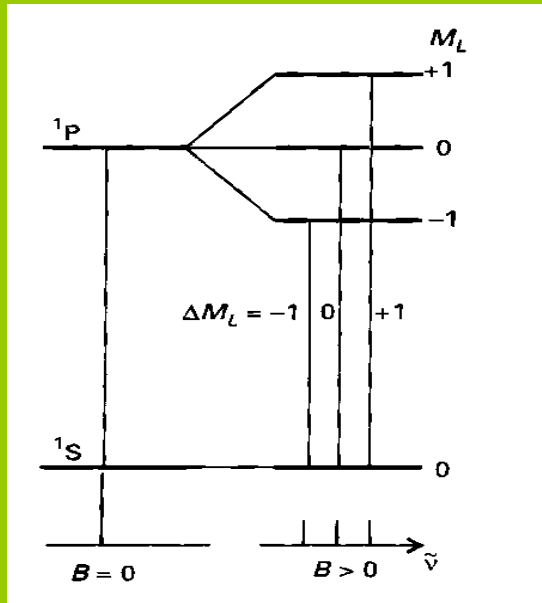
Momento magnético nuclear:

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

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

$$\nu = \frac{\Delta(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})}{h}$$

Interacción spin-órbita



$$^1P \rightarrow ^1S$$

$$\Delta M_L = \pm 1$$

$$\Delta M_L = 0$$

Intervalo: $\mu_L B$

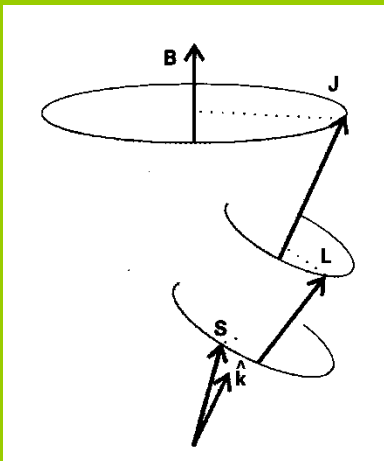
Independiente de L

Luz polarizada perpend a **B**

Luz polarizada paralela a **B**

EFFECTO ZEEMAN ANOMALO

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



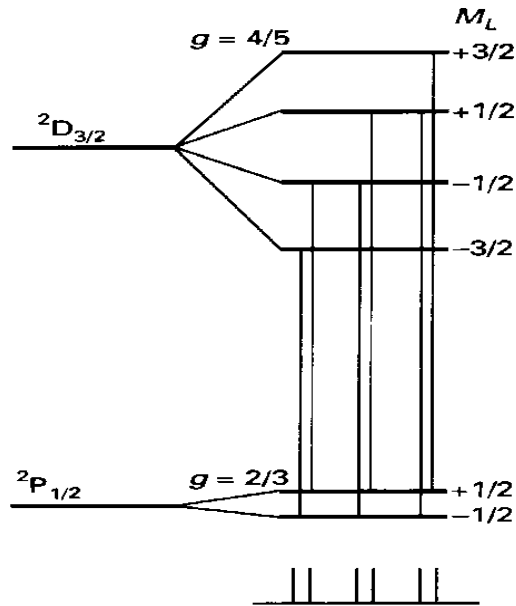
$$H^{(1)} = -\mathbf{m}_{\text{orbital}} \cdot \mathbf{B} - \mathbf{m}_{\text{spin}} \cdot \mathbf{B} = -\gamma_e (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}$$

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

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

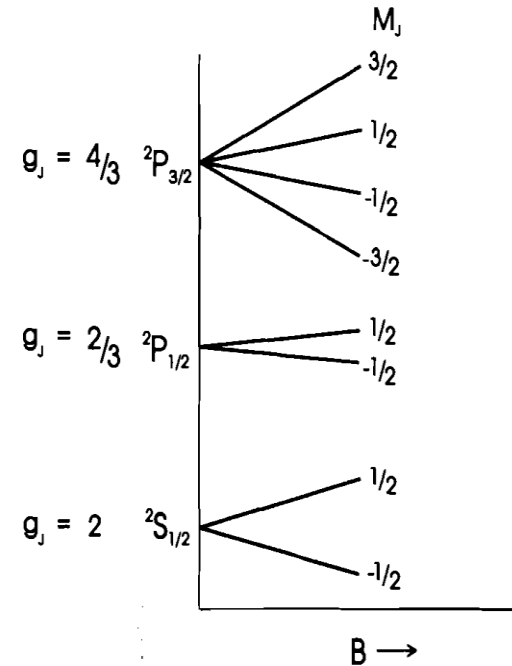
$$\begin{aligned}H^{(1)} &= -\gamma_e (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \\ &= -\gamma_e \left\{ 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right\} \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}\end{aligned}$$

Zeeman normal $S=0$ (singletes)



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

Zeeman (anómalo, $S \neq 0$) 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 porque 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

4- L. G. Vanquickenborne, K. Pierloot, and D. Devoghel,
Transition Metals and the Aufbau Principle J. Chem. Educ.
Volume 71 No. 6, 469 (1994)

5- W. H. Eugen Schwarz, The Full Story of the Electron Configurations of
The Transition Elements. J. Chem. Educ. Vol. 87 No. 4 , 444 (2010).