Repaso átomo H

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

$$E_n = -\frac{1}{2a_0}\frac{1}{n^2} \quad ; \quad \frac{1}{2a_0} = 13{,}6\,eV$$

$$a_0 = 0{,}529\; 10^{-8}\,cm \equiv 1\,u.a$$

$n = 1, 2, 3 \dots$
$l = 0, \dots n-1$
$m_l = -l, \dots, +l$

n	l=0 (s)	l=1 (p)	l=2 (d)	l=3 (f)
1	1s	—	—	—
2	2s	2p	—	—
3	3s	3p	3d	—

n	l	2l+1 #(ml)	2(2l+1) con spin	suma para n
1	0	1	2	2
2	0	1	2	8
	1	3	6	
3	0	1	2	18
	1	3	6	
	2	5	10	

Regla de las diagonales (configuración electrónica)

1s

2s 2p $z=18$

3s 3p 3d

$\boxed{4s}$ 4p 4d 4f

5s 5p 5d 5f 5g

6s 6p 6d 6f 6g 6h

$\underbrace{1s^2\ 2s^2}$ $2p^6\ 3s^2\ 3p^6$ ← 18 [Ar]

diagonales!

(1/rij)

(z = 19) Potasio [Ar] $3d^1$ ⊗ ⇒ [Ar] $4s^1$

Pero, las diagonales tienen su limitación.

NO son infalibles. Donde será y porque?

Armónicos Esféricos ($Y_{\ell m}$)

$$Y_{1,m} = \{ Y_{1-1}, Y_{10}, Y_{11} \}$$ busco orb. reales.

$$\mathbb{I} \quad \mathbb{R} \quad \mathbb{I}$$

$$Y_{1-1} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\, e^{-i\varphi} \operatorname{sen}\theta$$

$$Y_{10} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{11} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\, e^{i\varphi} \operatorname{sen}\theta$$

$$\Rightarrow \quad P_x = \frac{Y_{11} + Y_{1-1}}{\sqrt{2}}$$

$$P_y = \frac{i(Y_{11} - Y_{1-1})}{\sqrt{2}}$$

$$P_z = Y_{10}$$

Pero ojo:

$$\hat{\ell}_z |\varphi^{\ell}_{m\ell}\rangle = m\ell |\ell, m\ell\rangle$$

$$\hat{\ell}_z P_x \propto L_z(Y_{11} + Y_{1-1}) = 1 Y_{11} + (-1) Y_{1-1} \neq P_x$$

P_x, P_y no tienen $\hat{\ell}_z$ bien definido. Pero su representación espacial es muy útil.

cambio de base

α

dado $(m, \ell) \rightarrow j$?

$m, \{\ell = 0, \dots, m-1\}, \; s = 1/2$

$$|\ell - s| \leq j \leq (\ell + s)$$

dado $j, m \rightarrow \ell$?

$m, \{j = 1/2, \dots, m - 1/2\}$

dado $j \rightarrow \ell = \begin{cases} j - 1/2 \\ j + 1/2 \; ⊛ \end{cases}$

⊛ salvo proyección máxima en cuyo caso

$$j_{máx} \rightarrow j_{max} - 1/2 = \ell$$

Ejemplo

$|l, m_l\rangle$ | $|j, m_j\rangle$

$\boxed{n=1}$

$l=0$
$s=1/2$ $\to \boxed{j=1/2}$

$j=1/2$ proy máx $\Rightarrow$

$j_{max} - 1/2 = l$

$\to \boxed{l=0}$

$\boxed{n=2}$

$j = 1/2, \dots 2 - 1/2 = 1/2, 3/2$

$l=0$
$s=1/2$ $\to j = 1/2$

$j = 1/2 \to \left| \begin{array}{l} l = 1/2 - 1/2 = 0 \\ l = 1/2 + 1/2 = 1 \end{array} \right.$

$l=1$
$s=1/2$ $\to j = \begin{cases} 1/2 \\ 3/2 \end{cases}$

$j = 3/2 \to l = j_{máx} - 1/2 = 1$

notación nL_j

$n=1, j=1/2, l=0 : 1S_{1/2}$

$n=2, \; j=1/2, l=0,1$
$\quad\quad\; j=3/2, l=1$ $\Big|\; 2S_{1/2}, 2P_{1/2}, 2P_{3/2}$

Reglas de Hund

1) El término con máxima multiplicidad de spin es el fundamental.

2) Dado S, el término con mayor L, es el de menor energía.

3) Dado S y L:

+ 1/2 capa llena : máx J	es el estado de menor energía
− 1/2 capa llena : mín J	

NOTA: capas llenas acoplan a L = 0 y S = 0

Problema 3

1) $(ns)^1 (n's)^1$ $l_1 = 0$; $l_2 = 0$ y en $\neq$ nivel

2) $(ns)^1 (n'p)^1$ $l_1 = 0$, $l_2 = 1$ y en $\neq$ nivel

1) tengo s_1 y s_2 $\Rightarrow$ $l_1 = l_2 = 0$

$$\left. \begin{aligned} J_1 &= l_1 + s_1 = s_1 \\ J_2 &= l_2 + s_2 = s_2 \end{aligned} \right) \quad J_T \in \quad |s_1 - s_2| \leq J_T \leq (s_1 + s_2)$$

Ahora $s = 1/2 \Rightarrow J_T \in (0, 1)$ //

2) $$\left. \begin{aligned} J_1 &= l_1 + s_1 = s_1 = 1/2 \\ J_2 &= l_2 + s_2 = 1 + 1/2 = 3/2 \end{aligned} \right) \quad J_T \in \quad |1/2 - 3/2| \leq J_T \leq (1/2 + 3/2)$$

$J_T \in (1, 2)$ //

Problema 4 (carbono, e^{-})

Carbono $C^{(6e^-)}$: $1s^2 2s^2 2p^2$

$\binom{6\ \text{estados}}{2e^-} = 15$ configuraciones.

mirar cuales son los det. p' estar en el fund.?

$l=1$, $\overline{}$ $\overline{}$ $\overline{}$
-1 0 1

-1	0	1	m_L	m_S
⇅	—	—	-2	0 ⊗
—	⇅	—	0	0 ~
—	—	⇅	$+2$	0 ⊗
↑	↑	—	-1	$+1$ /
↑	↓	—		0 ⊗
↓	↑	—		0 /
↓	↓	—		-1 /
+	—	+	0	$+1$ /
				0 ⊗
				0 /
				-1 /
—	+	+	$+1$	$+1$ /
				0 ⊗
				0 /
				-1 /

$L=2,\ S=0$ ⊗

$L=1,\ S=1$ /

$L=0,\ S=0$ ~

Hund dice $<E$ ⇒ mayor mult de S

⇒ $L=1,\ S=1$

$^{(2S+1)}L \Rightarrow \boxed{^3P}$

mirar cím.

31