

# Репрзу атома H

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

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

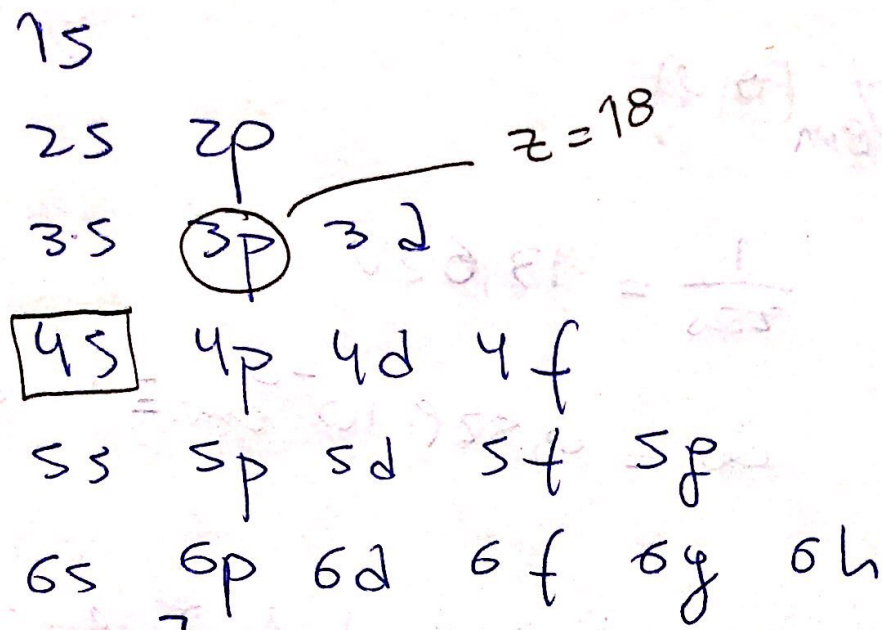
$$a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \approx 0,5 \text{ \AA}$$

$$\begin{aligned} m &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, \dots, m-1 \\ m_l &= -l, \dots, +l \end{aligned}$$

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

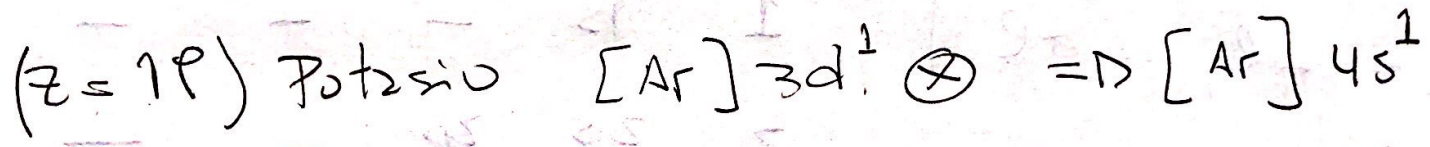
n	l	z(l+1) #(m <sub>l</sub> )	z/2(l+1) cur spin	summa pazara
1	0	1	2	2
2	0	1	2	8
	1	3	6	
3	0	1	2	18
	1	3	6	
	2	5	10	

# Reglas de los diagonales (configuración electrónica)



$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \leftarrow 18 [Ar]$

diagonales!  
 $(1/r_{ij})$



Però, los diagonales tienen su limitación.  
No son infalibles. Donde será y por qué?

5	5	1	0	1
8	5	1	0	4
	0	1	1	
	5	1	0	
	0	1	1	



# Armónicos Esféricos ( $Y_{lm}$ )

$$Y_{l,m} = \left\{ \begin{array}{ccc} Y_{l,-1} & Y_{l,0} & Y_{l,1} \end{array} \right\} \text{ base orb. reales.}$$

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

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

$$Y_{l,0} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta$$

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

$$P_x = \frac{Y_{l,1} + Y_{l,-1}}{\sqrt{2}}$$

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

$$P_z = Y_{l,0}$$

Però y = :

$$\hat{L}_z |Y_{lm}\rangle = m\hbar |Y_{lm}\rangle$$

$$\hat{L}_z P_x = \hbar (Y_{l,1} + Y_{l,-1}) = \hbar (1 + (-1)) Y_{l,1} \cong P_y$$

$P_x, P_y$  no tienen  $\hat{L}_z$  bien definidos. Però

su representació en espai és muy útil.

# Cambio de base

(2)

dato  $(m, l) \rightarrow j$ ?

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

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

dato  $j, m \rightarrow l$ ?

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

$$\text{dato } j \rightarrow l = \begin{cases} j - 1/2 \\ j + 1/2 \text{ } \textcircled{*} \end{cases}$$

$\textcircled{*}$  solo proyección máxima en cuyo caso

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

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

$|l, m_l\rangle$

$|j, m_j\rangle$

$M=1$

$l=0$   
 $s=1/2$

$j=1/2$

$j=1/2$  proy  $m_j = 1/2$

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

$l=0$

$M=2$

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

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

$j=1/2 \rightarrow$   
 $l=1/2-1/2=0$   
 $l=1/2+1/2=1$

$l=1$   
 $s=1/2 \rightarrow j=1/2, 3/2$

$j=3/2 \rightarrow l=j_{max}-1/2=1$

notación  $ML_j$

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

$M=2, j=1/2, l=0, 1$   
 $j=3/2, l=1$  :  $2S_{1/2}, 2P_{1/2}, 2P_{3/2}$



# 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  $L$ :

$\left. \begin{array}{l} + 1/2 \text{ caps llenas} : \text{máx} \\ - 1/2 \text{ caps llenas} : \text{mín} \end{array} \right\} \text{ es el estado de menor energía}$

NOTA: caps llenas  $\Rightarrow L=0$  y  $S=0$

### Problema 3

1)  $(ms)^{-1} (m's)^{-1} \quad l_1 = 0; l_2 = 0 \quad \gamma \text{ en } \neq \text{nivel}$

2)  $(ms)^{-1} (m'p)^{-1} \quad l_1 = 0, l_2 = 1 \quad \gamma \text{ en } \neq \text{nivel}$

1) tempo  $s_1, s_2 \rightarrow l_1 = l_2 = 0$

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

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

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

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

# Problema 4 (carbono, e<sup>-</sup>)

Orbitales C (e<sup>-</sup>): 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>

(6 estados) = 15 configuraciones.

l=1,  $\begin{array}{ccc} \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ -1 & 0 & 1 \end{array}$  MIT ¿cuáles son los del p<sup>1</sup> en m<sub>l</sub> en el fund.?

-1	0	1	M <sub>L</sub>	M <sub>S</sub>
#	---	---	-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 ⇒ 3p  
1

mit c<sub>1</sub>