

# Tema 10.- Estados cuánticos para átomos polielectrónicos y espectroscopia atómica

- 10.1. Números cuánticos, términos, niveles y estados
- 10.2. Acoplamiento espín-órbita
- 10.3. Efecto Zeeman
- 10.4. Fundamentos de la espectroscopía atómica

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a light blue background with a white swoosh underneath, all contained within a yellow rectangular box.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Números cuánticos, términos, niveles y estados

En la aproximación de electrones independientes la estructura electrónica se construye empleando la aproximación orbital y el Principio Aufbau, rellendo en orden secuencial de energía los distintos orbitales atómicos. Esto asocia una configuración a un elemento en la Tabla Periódica

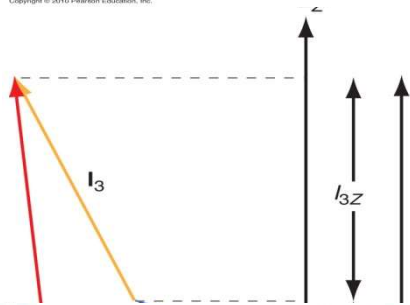


Pero los números cuánticos  $n, l, m_l, m_s$  no son buenos números cuánticos para **caracterizar** los estados de los átomos polielectrónicos porque el hamiltoniano polielectrónico no conmuta con los operadores monoeléctricos

## Operadores polielectrónicos que conmutan con el hamiltoniano polielectrónico

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i, \quad \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.



$$\hat{S}_z = \sum_i \hat{s}_{z,i} \quad \text{and} \quad \hat{S}^2 = \left( \sum_i \hat{s}_i \right)^2$$

$$\hat{L}_z = \sum_i \hat{l}_{z,i} \quad \text{and} \quad \hat{L}^2 = \left( \sum_i \hat{l}_i \right)^2$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Electron–electron

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

$n, l$

$L, S$

$J, M_J$

$J, M_J$

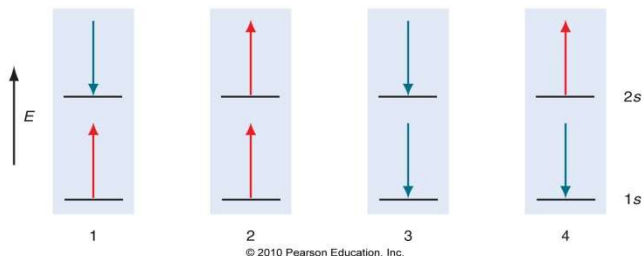
Cartagena99



# Un Término $2S+1L$ es un grupo de estados

## Dependencia de una configuración de L y S

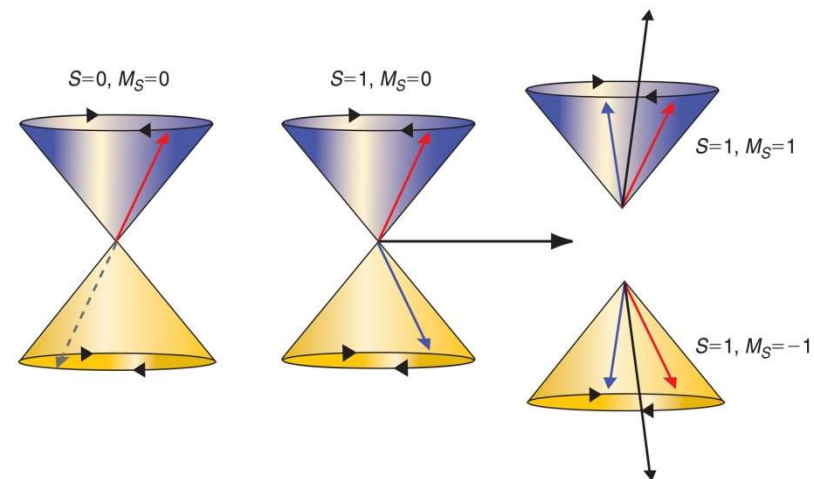
Combinación de espines para He(1s2s)



$$S = 0 \quad \psi_{singlet} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1s(1)2s(2) + 2s(1)1s(2)] \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

$$S = 1 \quad \psi_{triplet} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)]$$

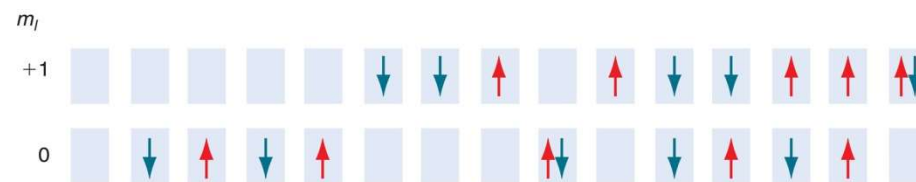
$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha(1)\alpha(2) \text{ or} \\ \beta(1)\beta(2) \text{ or} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \end{array} \right\}$$



Modelo vectorial para estados singlete y triplete de He(1s2s)

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$m_{l1}$	$m_{l2}$	$M_L = m_{l1} + m_{l2}$	$m_{s1}$	$m_{s2}$	$M_S = m_{s1} + m_{s2}$	Term
-1	-1	-2	1/2	-1/2	0	$^1D$
0	-1	-1	-1/2	-1/2	-1	$^3P$
			-1/2	1/2	0	
			1/2	-1/2	0	
0	0	0	1/2	1/2	1	$^3P$
			1/2	1/2	1	$^1D, ^3P, ^1S$
			-1/2	1/2	0	
			1/2	-1/2	0	



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

**TABLE 22.2 STATES AND TERMS FOR THE  $ns^1d^1$  CONFIGURATION**

$m_{l1}$	$m_{l2}$	$M_L = m_{l1} + m_{l2}$	$m_{s1}$	$m_{s2}$	$M_S = m_{s1} + m_{s2}$	Term
0	-2	-2	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right.$	$^3D$
						$^1D, ^3D$
						$^3D$
0	-1	-1	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right.$	$^3D$
						$^1D, ^3D$
						$^3D$
0	0	0	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right.$	$^3D$
						$^1D, ^3D$
						$^3D$
0	1	1	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right.$	$^3D$
						$^1D, ^3D$
						$^3D$
0	2	2	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right.$	$^3D$
						$^1D, ^3D$
						$^3D$

**TABLE 22.3 POSSIBLE TERMS FOR INDICATED CONFIGURATIONS**

Electron Configuration	Term Symbol
$s^1$	$^2S$
$p^1, p^5$	$^2P$
$p^2, p^4$	$^1S, ^1D, ^3P$
$d^3$	$^2P, ^2D, ^4S$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

## REGLAS de HUND

1. El término de más baja energía es el que tiene la máxima multiplicidad de espín.
2. Para términos de misma multiplicidad de espín, el que tenga el mayor momento angular orbital será el de más baja energía.

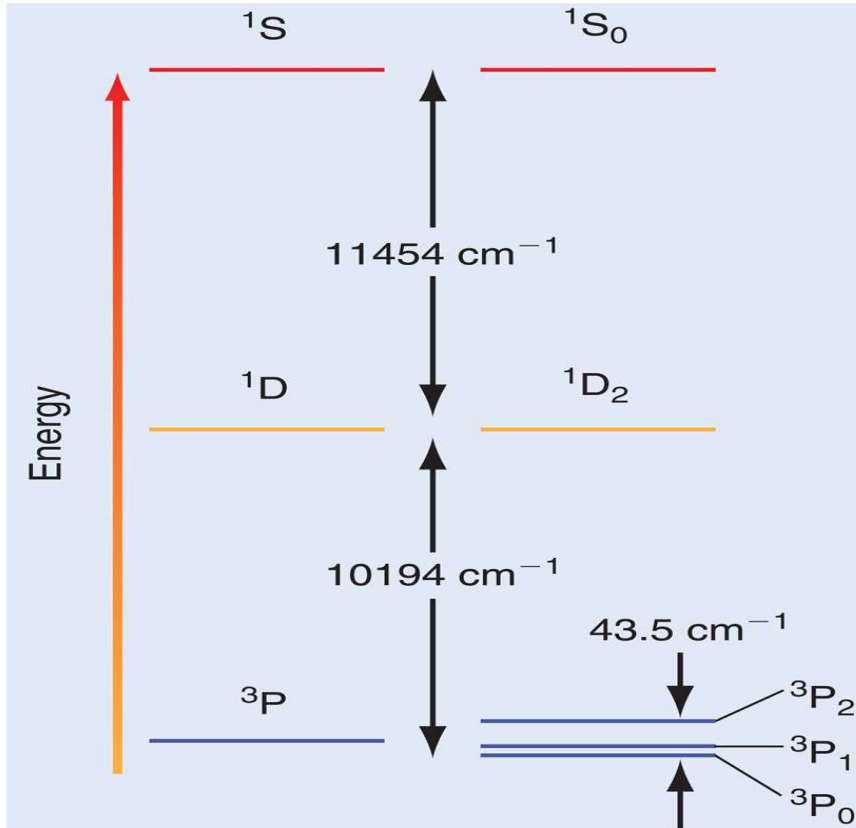
The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The 'C' is significantly larger and partially overlaps the rest of the text. The background behind the text consists of a light blue and orange gradient.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Acoplamiento Espín-órbita



© 2010 Pearson Education, Inc.

$$\hat{H}_{so} \text{ \& } \hat{L} \hat{S}$$

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

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## REGLAS de HUND

1. El término de más baja energía es el que tiene la máxima multiplicidad de espín.
2. Para términos de misma multiplicidad de espín, el que tenga el mayor momento angular orbital será el de más baja energía.
3. El orden energético de los niveles de un término está determinado por los siguientes criterios:
  - a) Si la subcapa está semillena o más, el nivel de más alto  $J$  es el de más baja energía.
  - b) Si la subcapa está menos de semillena, el nivel de más bajo  $J$  es el de más baja energía.

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, teal-colored font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a background of light blue and orange geometric shapes, including a large, faint '99' watermark.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# EFECTO ZEEMAN

Para el problema monoelectrónico

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} ; |\vec{\mu}_l| = -\frac{e h}{4\pi m_e} \sqrt{l(l+1)} = \beta_e \sqrt{l(l+1)}$$

$$E_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} B L_z ; \hat{H}_B = \frac{\beta_e}{h/2\pi} B \hat{L}_z$$

$$(\hat{H} + \hat{H}_B) \Psi = E \Psi ; \quad \hat{H}_B \Psi = \beta_e B m_l \Psi$$

Para el problema polielectrónico

$$\hat{H}_R = -\hat{\mu} \hat{B} = -(\hat{\mu}_l + \hat{\mu}_s) B = \frac{\beta_e B}{h/2\pi} (\hat{J}_z + \hat{S}_z)$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

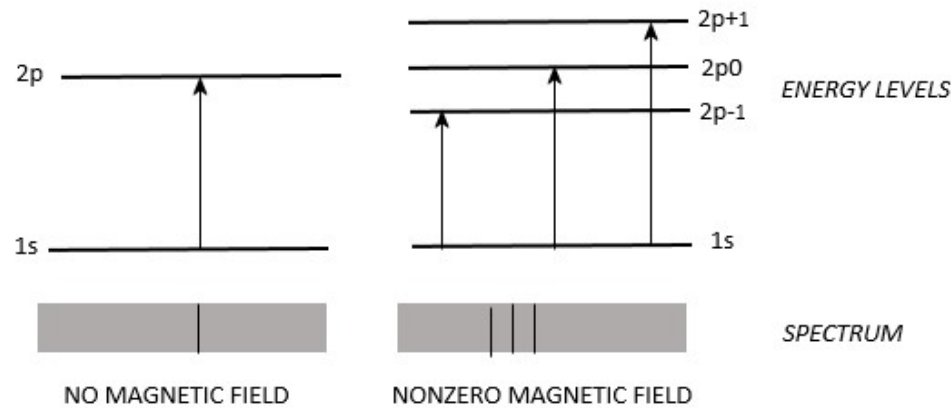
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Factor de Landé

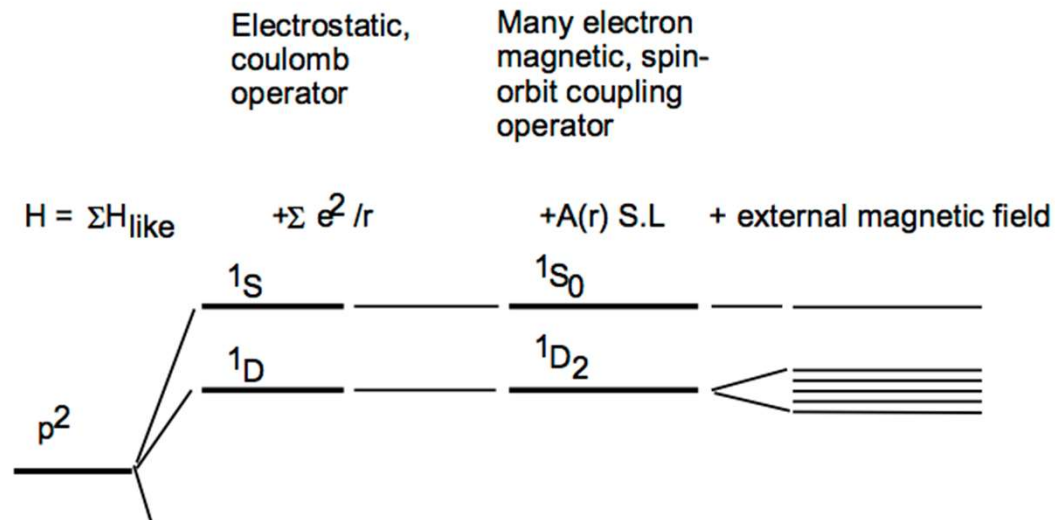
$\mu_B = \frac{e h}{4\pi m_e}$



## THE ZEEMAN EFFECT



## Desdoblamiento de niveles por las interacciones



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

3P0

Configurations

Terms

Levels

States

# Principios de Espectroscopía Atómica

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

$$\tilde{\nu} = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n_{initial}^2} - \frac{1}{n_{final}^2} \right) = R_H \left( \frac{1}{n_{initial}^2} - \frac{1}{n_{final}^2} \right)$$

Copyright © 2010 Pearson Education, Inc.

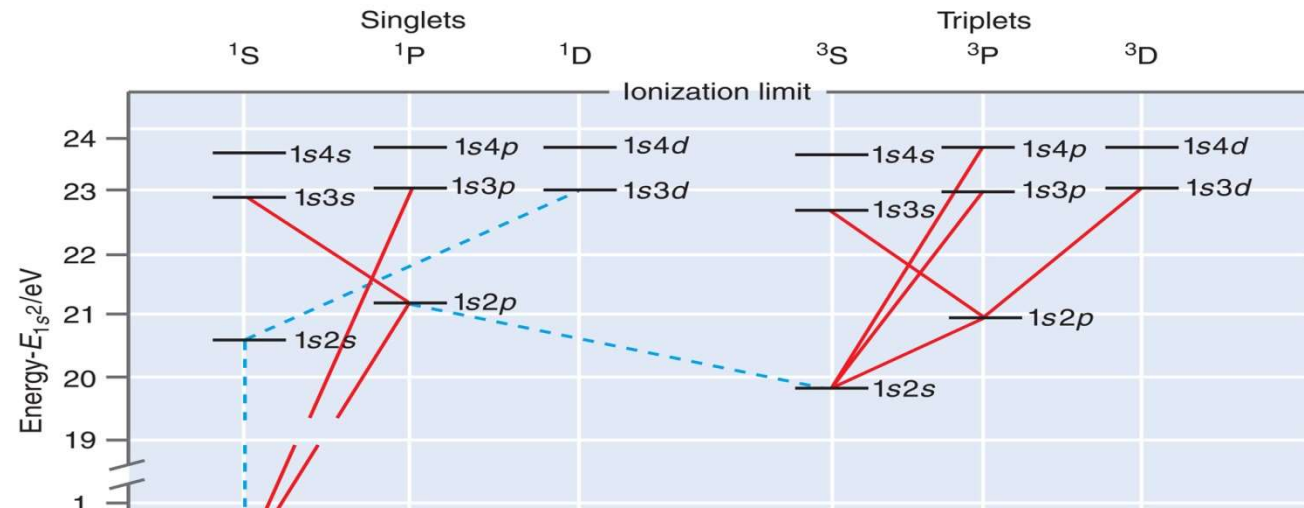
## Reglas de Selección

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta L = 0, \pm 1$$

$$\Delta S = 0$$

$$\Delta J = 0, \pm 1$$



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

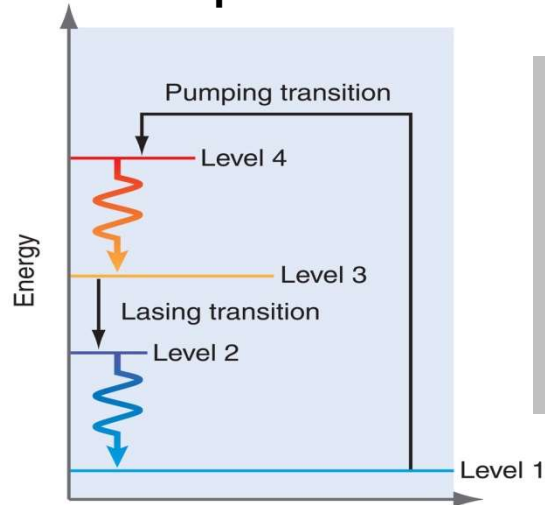
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

# LASER de He-Ne

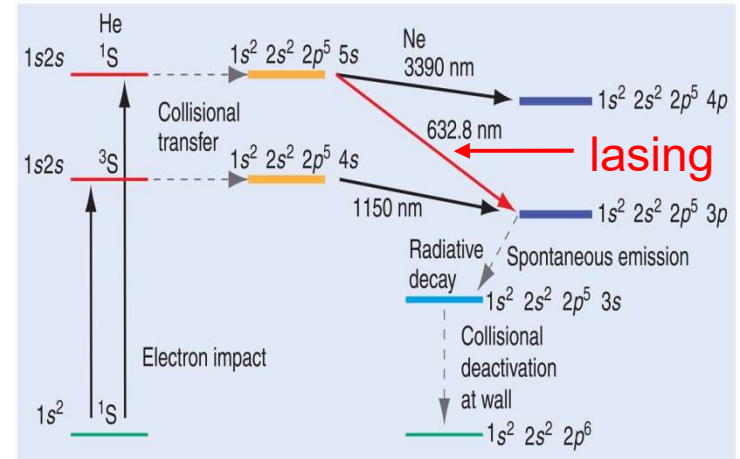
Esquema de 4 Niveles que permite una **inversión de población**



## Propiedades

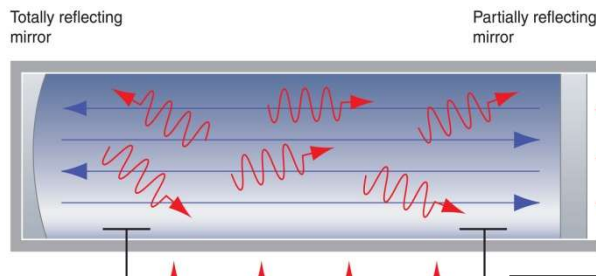
- **Direccionalidad**
- **Monocromaticidad**
- **Brillantez**
- **Coherencia (espacial y temporal)**

Transiciones en el láser de He-Ne



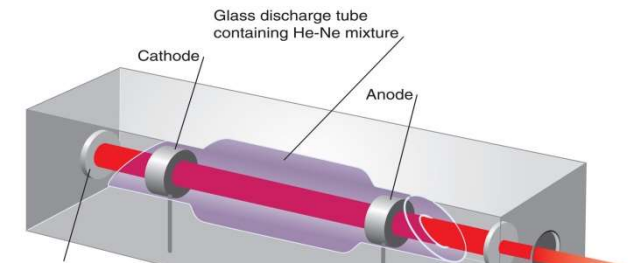
© 2010 Pearson Education, Inc.

La longitud de las líneas dan cuenta de la población de un nivel



Un láser es una fuente de fotones coherentes

Diagrama de un láser de He-Ne



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

como una cavidad resonante óptica

Cartagena99

© 2010 Pearson Education, Inc.