TEMA 1: ORIGEN Y TIPOS DE MAGNETISMO

Tema 1a:

- La mecánica cuántica
- Operadores
- La ecuación de Schrödinger

enavarro@ucm.es
Dto. de Física de Materiales de la UCM

ANTEDENTES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

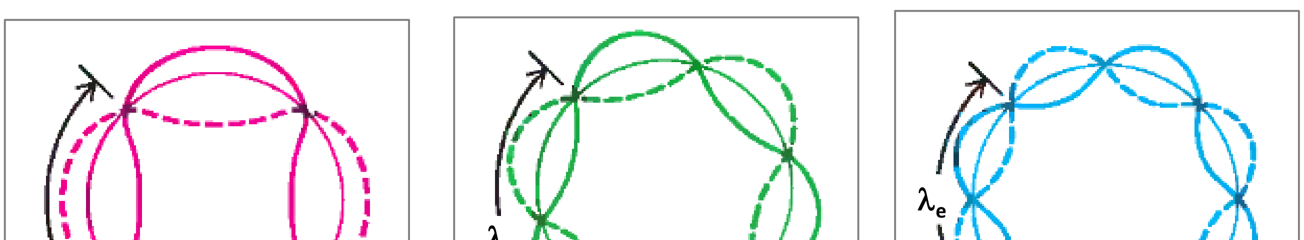
- J. J. **Thomson** (1887) $\Rightarrow$ descubre el electrón.
- **Louis de Broglie** (1924) $\Rightarrow$ Dualidad onda-corpúsculo para la materia:

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v_e}$$

- Postulado de **Bohr** (1913) $\Rightarrow$ El momento angular del e^- está cuantizado en múltiplos de ħ:

$$\left|\vec{L}\right| = |\vec{r} \times \vec{p}| = n\hbar$$

- La hipótesis de De Broglie (1924) junto a la cuantización del momento angular $\Rightarrow$ Las órbitas electrónicas son estados estacionarios con un nº entero de λ_e.

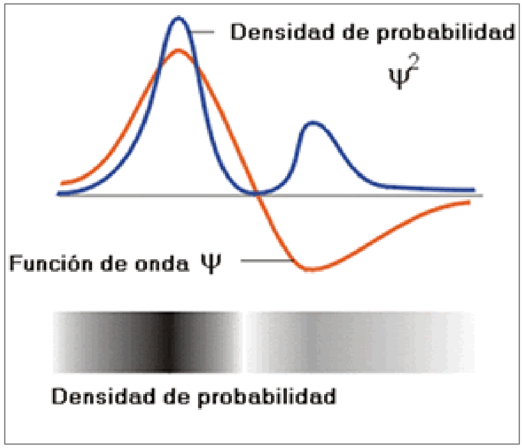


enavarro@ucm.es
Dto. de Física de Materiales de la UCM

LA MECÁNICA CUÁNTICA

- La mecánica cuántica debida a Schrödinger representa al e^- con la función de onda Ψ(r).

- Significado físico de Ψ(r)$\Rightarrow$ La probabilidad de encontrar al electrón en un volumen $\delta^3 r$ es Ψ(r) Ψ^*(r) δ^3r.



- La ecuación básica de **Schrödinger** (1925): juega el papel de las leyes de Newton y de la conservación de la energía en Mecánica clásica:

$$\boxed{\boldsymbol{H}\Psi = \varepsilon\Psi}$$

***H*: Operador Hamiltoniano**.

Ψ: **autofunciones** o **autoestados** o estados estacionarios. (son las soluciones del hamiltoniano).

LA MECÁNICA CUÁNTICA

- Los observables físicos se representan por operadores diferenciales , $\hat{O}$ (las variables físicas adquieren la forma de operadores):

   - Momento lineal:

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla = i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial x}\vec{\imath} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{\jmath} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\right]$$

   - Energía cinética:

$$E_C = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\vec{\imath} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\vec{\jmath} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\vec{k}\right]$$

   - Momento angular:

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \vec{r}\times\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\vec{\imath} + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\vec{\jmath} + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\vec{k}\right]$$

- Los valores permitidos de un observable físico son los **autovalores** y vienen dados por la ecuación:

$$\hat{O}\psi_i = \lambda_i\psi_i$$

λ_i: autovalores

enavarro@ucm.es
Dto. de Física de Materiales de la UCM

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: Ej. OSCILADOR ARMÓNICO

- La energía se convierte en el operador Hamiltoniano:

$$\boldsymbol{H}\Psi = \boldsymbol{\varepsilon\Psi}$$

$$H = \frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\boldsymbol{x}^2 = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}k\boldsymbol{x}^2$$

Conservación **cuántica** de la energía en un oscilador armónico

$$E = E_C + U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

Conservación **clásica** de la energía en un oscilador armónico

enavarro@ucm.es
Dto. de Física de Materiales de la UCM

ESTADOS ELECTRÓNICOS EN UN ÁTOMO

- El tratamiento mecánico-cuántico de los átomos mediante la ec. de Schrödinger permite conocer los estados que pueden ser ocupados por los e^- .

- Los niveles electrónicos o funciones de onda de **un solo e^-** están caracterizados por 4 números cuánticos, $\mathrm{n}, \ell, \mathrm{m}_\ell$ y m_s:

$$\left| \boldsymbol{n}, \boldsymbol{\ell}, \boldsymbol{m}_{\boldsymbol{\ell}}, \boldsymbol{m}_{\boldsymbol{s}} \right\rangle$$

  - **Nº cuántico principal**: n=1, 2, 3…. (capas K: n=1, L: n=2, M: n=3,….)

  - Nº cuántico del momento angular orbital o **nº cuántico orbital:** ℓ = 0, 1, 2, 3,…..(n-1) (orbitales s: ℓ=0; p: ℓ=1; d: ℓ=2; f: ℓ=3;…)

  - **Nº cuántico magnético** : $m_\ell = -\ell, -(\ell-1), -(\ell-2), \ldots, 0, \ldots (\ell-2), (\ell-1), \ell$ ó $m_\ell = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots, \pm\ell$. Hay $(2\ell+1)$ valores de m_ℓ para cada valor de ℓ.

enavarro@ucm.es
Dto. de Física de Materiales de la UCM

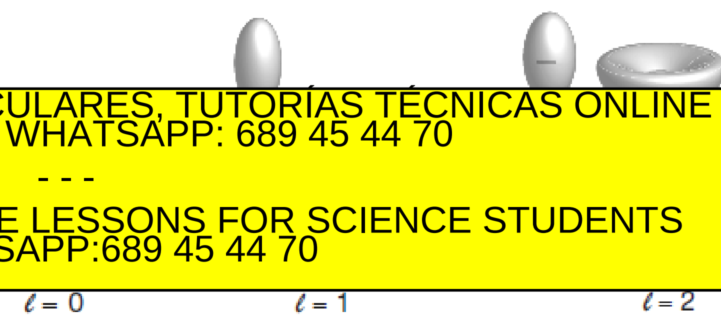
ESTADOS ELECTRÓNICOS EN UN ÁTOMO

- Los 3 números cuánticos n, ℓ y m_ℓ hacen referencia a la función de onda con una **distribución espacial de la carga electrónica** conocida como **orbital**.
- Cada orbital puede acomodar 2 e^- con espines $m_s = \pm\frac{1}{2}$.
- El **Principio de exclusión de Pauli** impide que 2 e^- que están en el mismo estado tengan los mismos 4 nºs cuánticos (dos e^- no pueden estar en el mismo estado cuántico porque son fermiones).

Table 4.2. The hydrogenic orbitals. The number of states per orbital is $2(2\ell+1)$

	n	ℓ	m_ℓ	m_s	States
$1s$	1	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	2
$2s$	2	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	2
$2p$	2	1	$0, \pm1$	$\pm\frac{1}{2}$	6
$3s$	3	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	2
$3p$	3	1	$0, \pm1$	$\pm\frac{1}{2}$	6
$3d$	3	2	$0, \pm1, \pm2$	$\pm\frac{1}{2}$	10
$4s$	4	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	2
$4p$	4	1	$0, \pm1$	$\pm\frac{1}{2}$	6
$4d$	4	2	$0, \pm1, \pm2$	$\pm\frac{1}{2}$	10
$4f$	4	3	$0, \pm1, \pm2, \pm3$	$\pm\frac{1}{2}$	14

Figure 4.2
Some hydrogenic orbitals



enavarro@ucm.es
Dto. de Física de Materiales de la UCM

ESTADOS ELECTRÓNICOS EN UN ÁTOMO

- Las funciones de onda son autofunciones de los operadores de momento angular orbital $\hat{\ell}^2$ y $\hat{\ell}_z$:

$$\hat{\ell}^2 \left|n,\ell,m_l,m_s\right\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2$$ donde: $\ell(\ell+1)\hbar^2$ son los autovalores de $\hat{\ell}^2$

$$\hat{\ell}_z\left|n,\ell,m_l,m_s\right\rangle = m_\ell\hbar$$ donde: $m_\ell\hbar$ son los autovalores de $\hat{\ell}_z$

- También lo son del momento angular de espín:

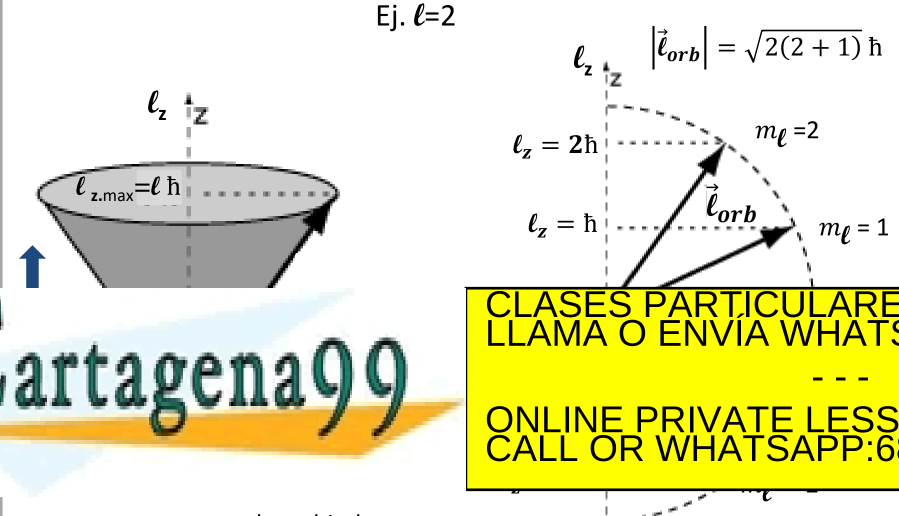
$$\hat{s}^2 \left|n,l,m_l,m_s\right\rangle = s(s+1)\hbar^2$$ donde: $s(s+1)\hbar^2$ son los autovalores de $\hat{s}^2$

$$\hat{s}_z\left|n,l,m_l,m_s\right\rangle = m_s\hbar$$ donde: $m_s\hbar$ son los autovalores de $\hat{s}_z$

Momento angular orbital del electrón:

$$\left|\vec{\ell}_{orb}\right| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$$

$$\ell_z = m_\ell\hbar \qquad \ell_{z,max} = \ell\hbar \quad (m_\ell = \ell)$$



momento angular orbital

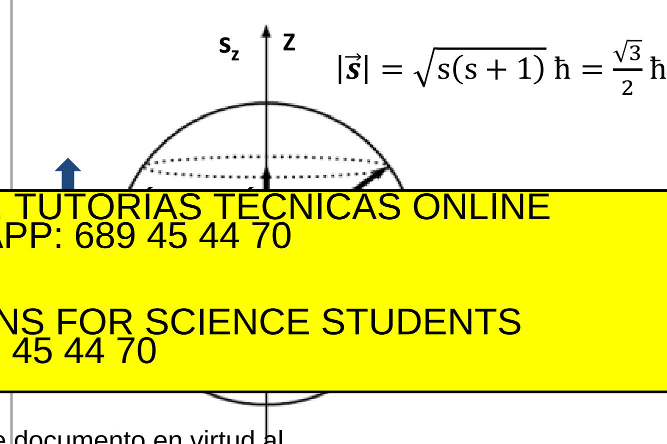
Momento angular espín del electrón (s=1/2):

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

$$s_z = \pm\hbar/2 \quad (m_s = \pm 1/2)$$

Su nº cuántico de espín: s=1/2 (para un e-)

con 2 estados de espín: $m_s = \pm 1/2 \leftrightarrow \left|\uparrow\right\rangle$ y $\left|\downarrow\right\rangle$



NOTACIÓN QUE VAMOS A UTILIZAR

Para el momento angular de un solo electrón:

- ℓ = nº cuántico del momento angular orbital.
- ***s*** = nº cuántico del momento angular intrínseco o de espín. Para el electrón, s=1/2.
- ***j*** = nº cuántico del momento angular total.

Para el momento magnético de un solo electrón:

- m_ℓ = nº cuántico magnético del momento magnético orbital.
- m_s= es el número cuántico magnético del momento magnético de espín. $m_s=\pm 1/2$.

Para el momento angular de multielectrones o iones:

- ***L***= nº cuántico del momento angular orbital.
- ***S***= nº cuántico del momento angular intrínseco o de espín.
- ***J***= nº cuántico o del momento angular total.

Momento magnético: μ
Momento magnético orbital: μ_{orb}
Momento magnético de espín: $\mu_{espín}$ o μ_s