

Estructura de la Materia 3

Serie 1: Átomos

1. Mostrar que la suma $\sum_J(2J + 1)$ sobre todos los valores posibles del número J para un par de números cuánticos L y S es igual al producto $(2L + 1)(2S + 1)$. Cuál es el significado físico de este producto?
2. i) Despreciando la interacción spin-orbita, determinar el número de términos espectrales posibles para un átomo de carbono excitado con configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p 3d$; ii) calcular el estado fundamental de los átomos con configuración electrónica $4d 5s^2$ (Y) y $4d^2 5s^2$ (Zr) (Las capas cerradas no se escriben explícitamente. Asumir L como el mayor posible consistente con la regla de Hund y el principio de Pauli); iii) el átomo de manganeso ($Z=25$) posee en su estado fundamental una subcapa la cual está exactamente ocupada a la mitad con 5 electrones. Escribir la configuración electrónica y el estado fundamental de átomo.
3. a) Mediante la utilización de la regla de Hund y los acoplamientos de momentos orbitales y de spin, determinar los términos espectrales posibles de los átomos con número atómico $Z = 2$ (He), 3 (Li), 8 (O) y 15 (P). A cuál de ellos corresponde el estado fundamental?
b) Encontrar dos átomos que admitan un estado fundamental con multiplicidad triplete. Discutir.
4. Cuántos electrones poseen aquellos átomos en los cuales, en el estado fundamental, las capas siguientes están ocupadas:
 - a) las capas K y la L, la subcapa $3s$ y por la mitad la subcapa $3p$;
 - b) las capas K, la L y la M, las subcapas $4s$, $4p$ y $4d$;
 - c) qué elementos son éstos?
5. Mostrar que para una capa cerrada nl , $L = S = 0$.
6. Escribir los términos de las siguientes configuraciones e indicar en cada caso cuál de ellos es el de menor energía:
 - a) ns ; b) np^3 ; c) $np^2 n's$; d) np^5 ; e) $nd^2 n'p$; f) $nd n'd$

7. Escribir en una tabla los estados electrónicos individuales de los electrones (configuraciones) y halle el término espectral de más baja energía para los átomos *Si*, *Cl* y *As*.

8. Para los átomos *S*, *Ca*, *Fe* y *Br*: escribir las configuraciones electrónicas que necesariamente pertenecen al término espectral del estado fundamental, indicando el número de electrones no apareados. En cada caso, halle dicho término espectral.

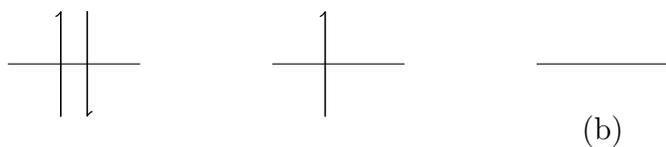
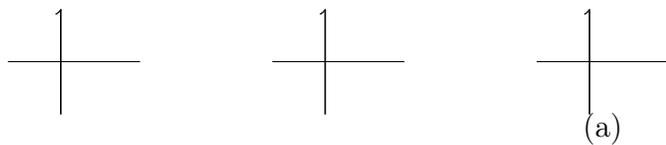
9. Qué valores poseen *S*, *L* y *J* para los términos:

$${}^1S_0, {}^2S_{1/2}, {}^1P_1, {}^3P_2, {}^3F_4, {}^5D_1, {}^1D_2 \text{ y } {}^6F_{9/2}.$$

10. Dada la configuración electrónica nd^2 . Existe o no el término espectral 1F_3 ? (No es necesario que halle todos los términos espectrales).

11. Puede haber un estado triplete cuando los números cuánticos orbitales de dos electrones son idénticos? Justificar la respuesta.

12. Un átomo de nitrógeno puede tener sus últimos tres electrones en su subcapa *p*, desapareados o bien solo uno desapareado, como muestra la figura. Encuentre el número de electrones que puede intercambiarse en cada caso y las energías de Coulomb e intercambio en cada caso. Diga en este contexto cuál de estos ordenamientos es el de menor energía.



13*. Si se incorporan las correcciones relativistas de orden más bajo al hamiltoniano del átomo de hidrógeno (estructura fina W_f), deben sumarse al hamiltoniano no relativista los términos: $W_f = W_{mv} + W_D + W_{so}$

$$W_{mv} = -\frac{1}{8c^2} \hat{p}^4$$

$$W_{dw} = \frac{-1}{8c^2} \nabla^2 V$$

$$W_{so} = \frac{-1}{8c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\hat{L} \cdot \hat{S}}{r^2}$$

a). Analice cuantitativamente la ruptura de la degeneración en el nivel $n = 2$ del átomo de Hidrógeno. (el cálculo completo está en Quantum Mechanics, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe)

b). Verifique que con estas correcciones: $[H, \vec{L}] \neq 0$ y $[H, \vec{S}] \neq 0$. Significa esto que el sistema perdió la invariancia rotacional? Existe, en este caso, algún operador relacionado con las rotaciones que conmute con el hamiltoniano?