

Universidad Nacional de Río Negro

Física Moderna A - 2017

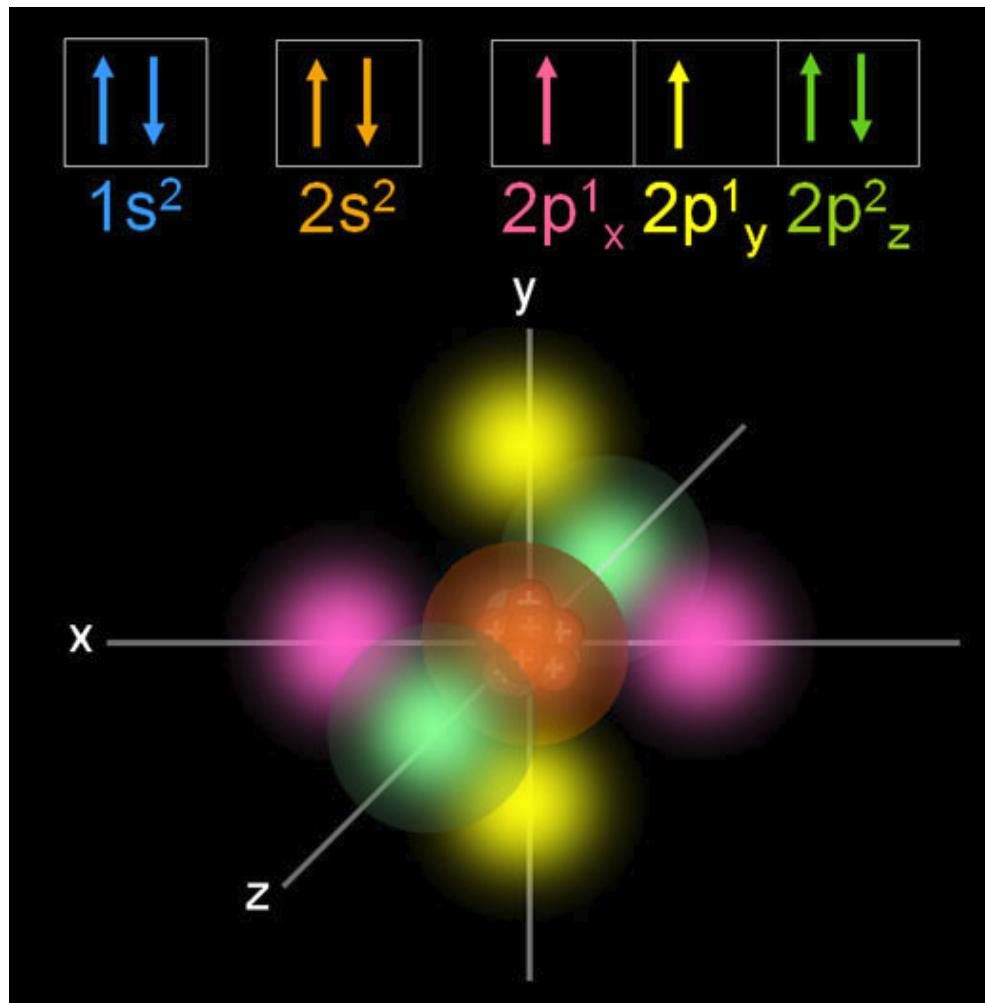
- **Unidad** 06 – átomos multielectrónicos
- **Clase** U06C01
- **Fecha** 22 Junio 2017
- **Cont** Atomos multielectrónicos
- **Cátedra** Asorey
- **Web**

<https://github.com/asoreyh/unrn-moderna-a>



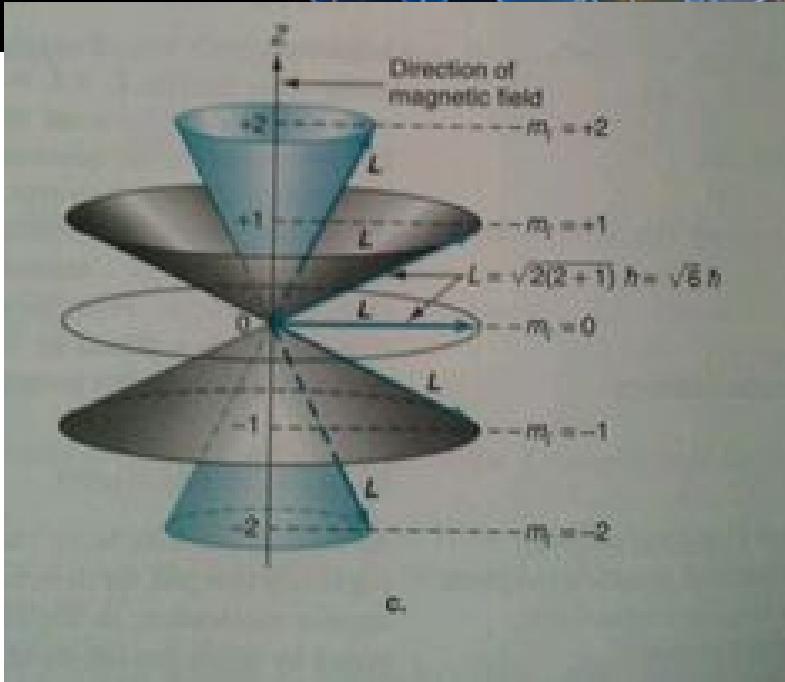
“Los átomos se comportan como átomos, nada más”.
John Gribbin

Unidad 6: Átomos complejos



- La tabla periódica. La ley de Moseley de los rayos X. El momento magnético orbital. El espín del electrón. Momento magnético del espín de electrón.
Apantallamiento. Reglas de Hund. Regla de Madelung. Átomos de muchos electrones.

La dirección



- Ponemos un campo magnético \mathbf{B} en la dirección z.
- L_z es la componente de \mathbf{L} en la dirección z:

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = -l, \dots, l$$

$(2l+1)$ posibles orientaciones

$$L_z \leq |\vec{L}| \text{ (igual si } l=0\text{)}$$

- Por ejemplo,

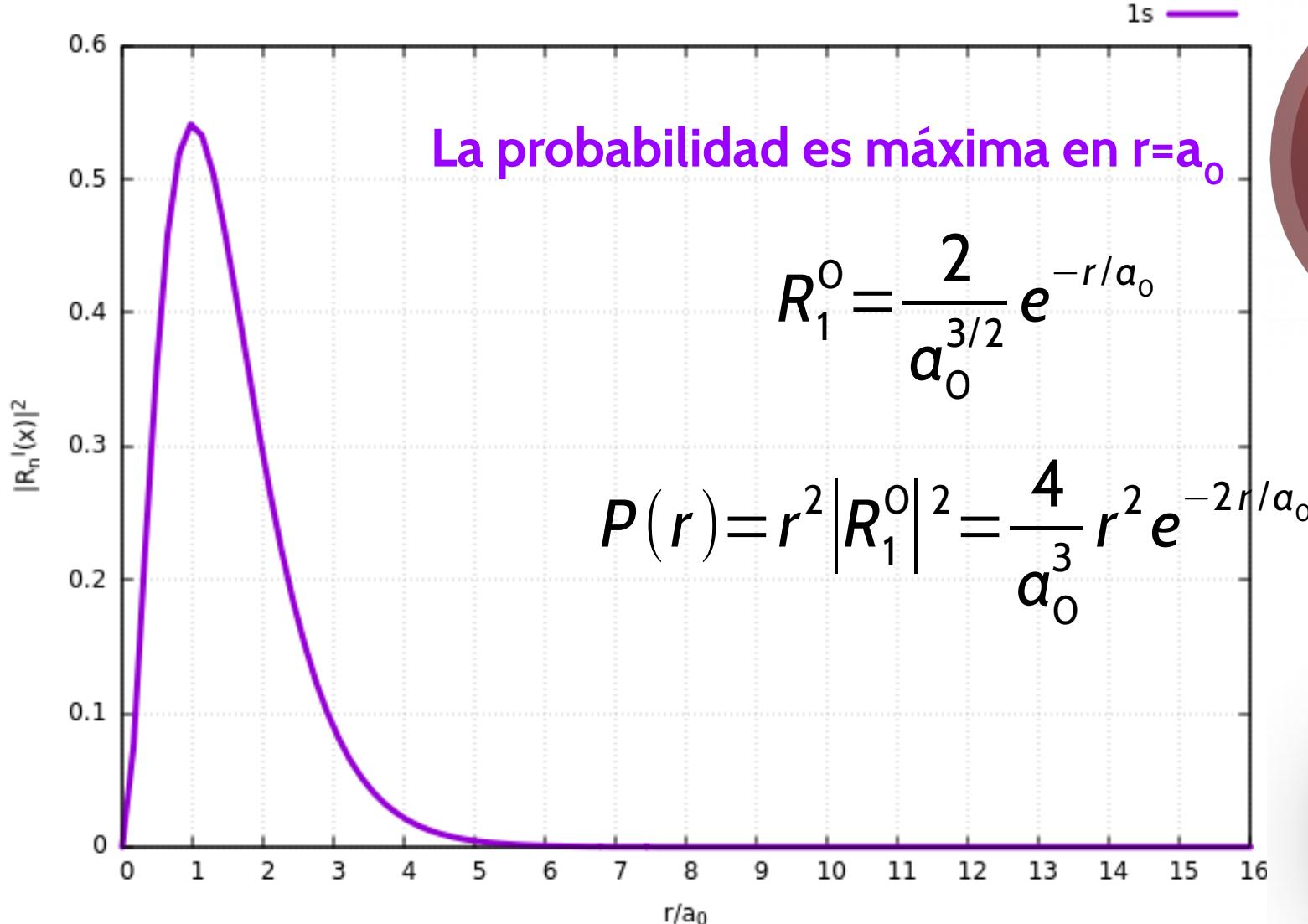
si $l=2, L=\sqrt{6}\hbar \approx 2.45\hbar$ y

$$L_z = -2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$$

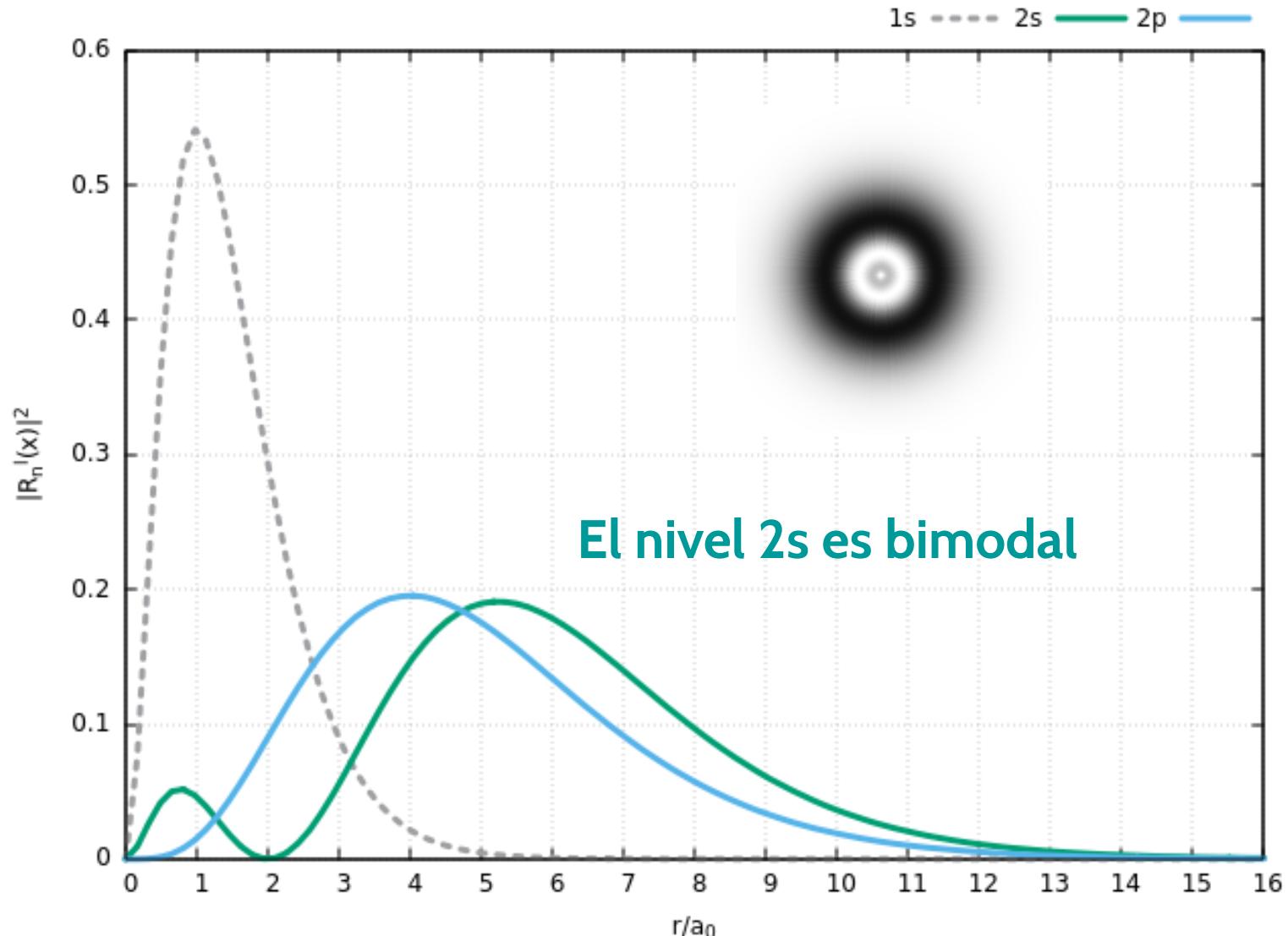
y \vec{L} nunca se alinea con $\hat{\mathbf{z}}$:

$$\cos \theta = \frac{L_z}{L}$$

Probabilidad n=1, nivel 1s



Probabilidad $n=2$, $2s$ y $2p$





Reglas de selección

- Las transiciones donde
 - $S_{mn} = 0 \rightarrow$ **transiciones prohibidas.**
 - $0 < S_{mn} < \text{infinito} \rightarrow$ **transiciones permitidas.**
- En el átomo de hidrógeno, m y n representan a los tres números cuánticos:

$$\int \psi_{n,l,m_l}^* r \psi_{n',l',m_l'} dV \neq 0$$

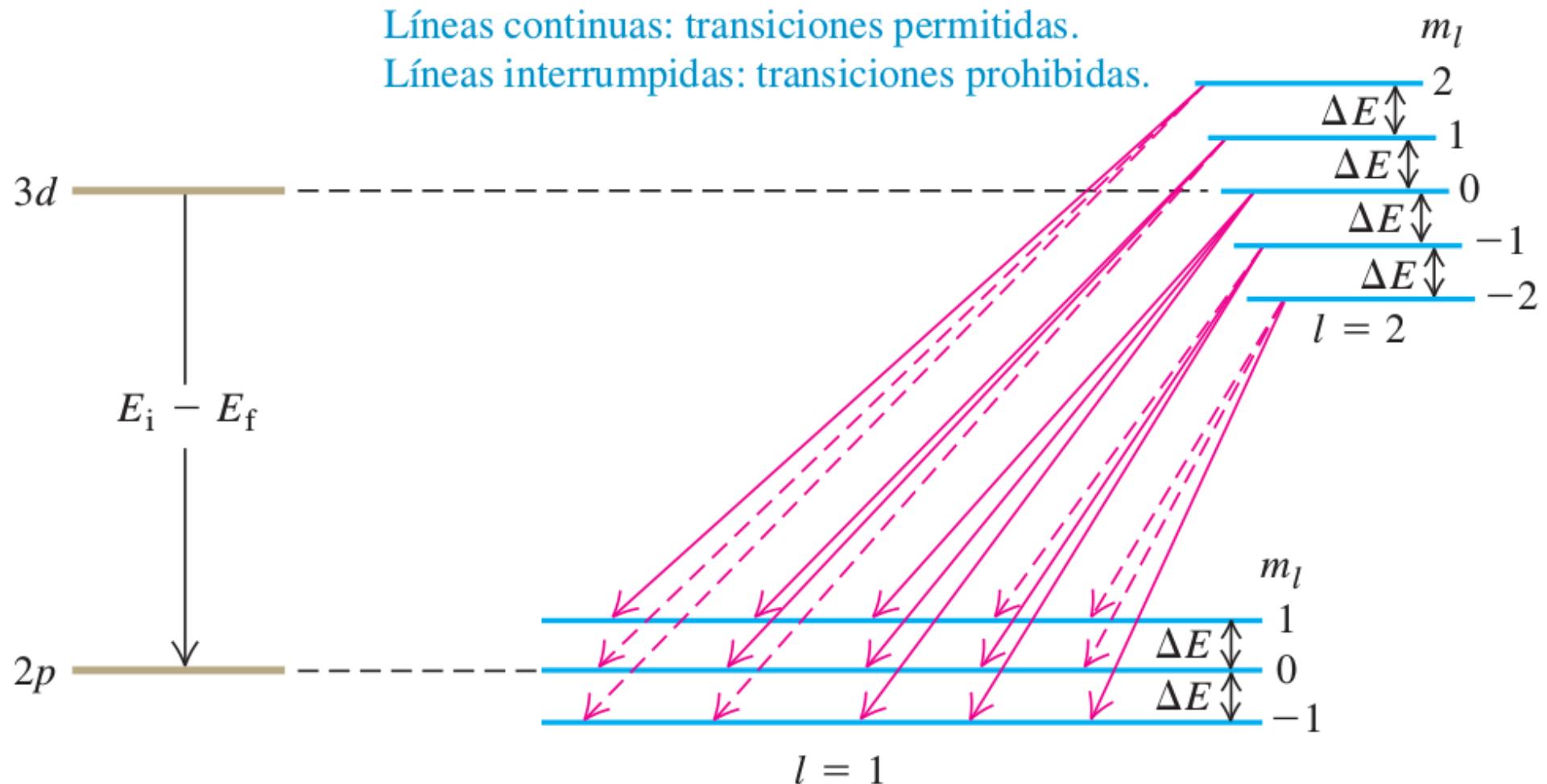
- Como el momento angular debe conservarse:

$$L_\gamma = \pm \hbar \text{ entonces}$$

$$\Delta l = \pm 1$$

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

Transiciones permitidas y prohibidas





Efecto Zeeman

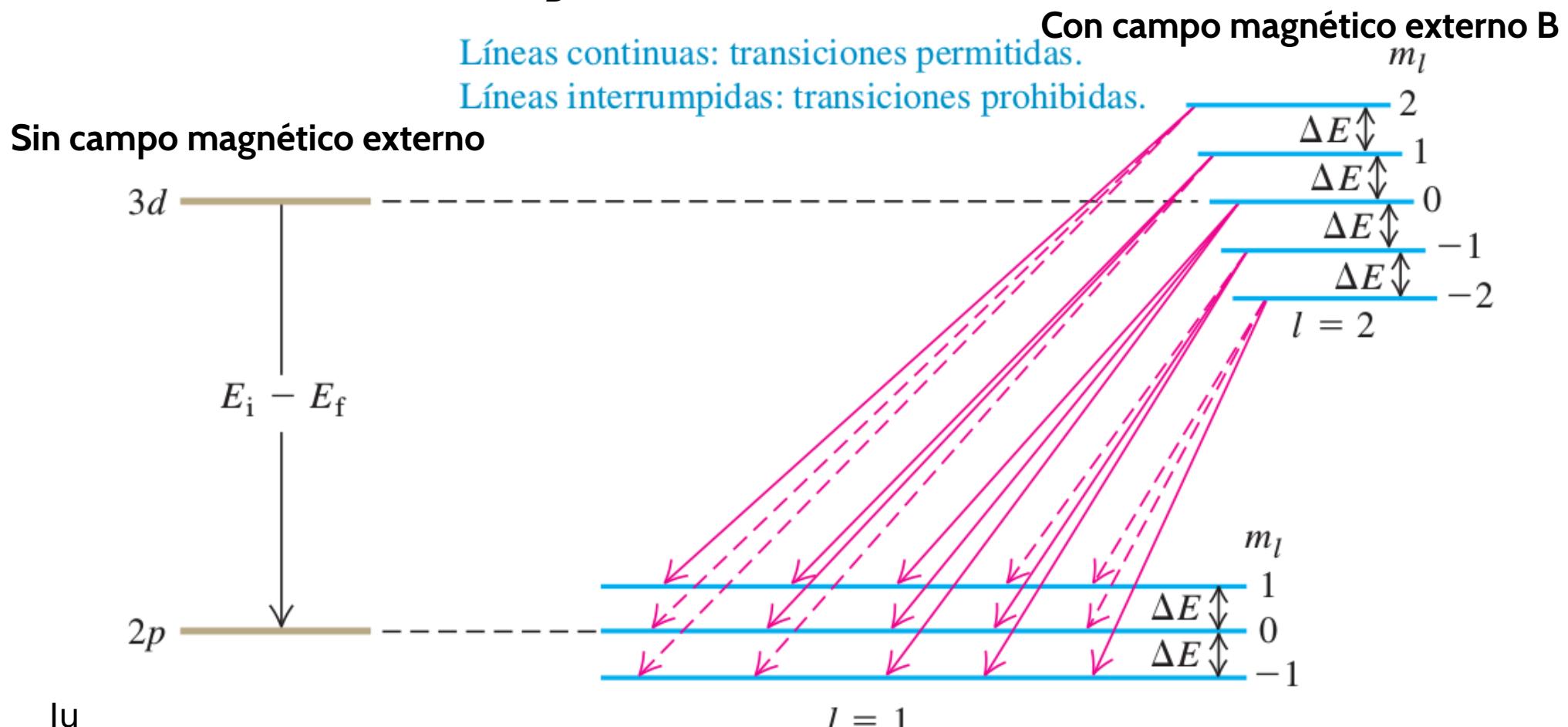
- Los estados del átomo de hidrógeno están degenerados:
- la energía sólo depende de n , para un dado n , hay

$$d = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \text{ estados.}$$

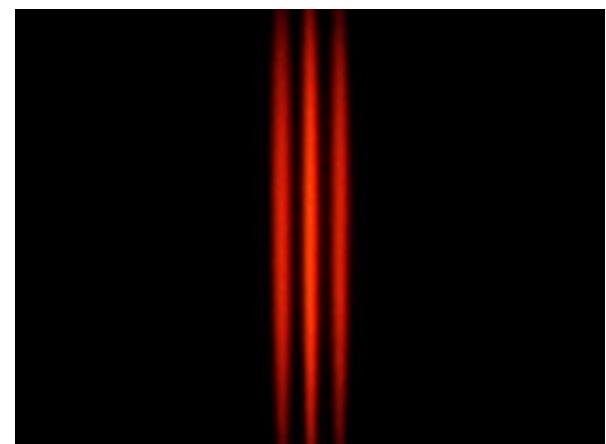
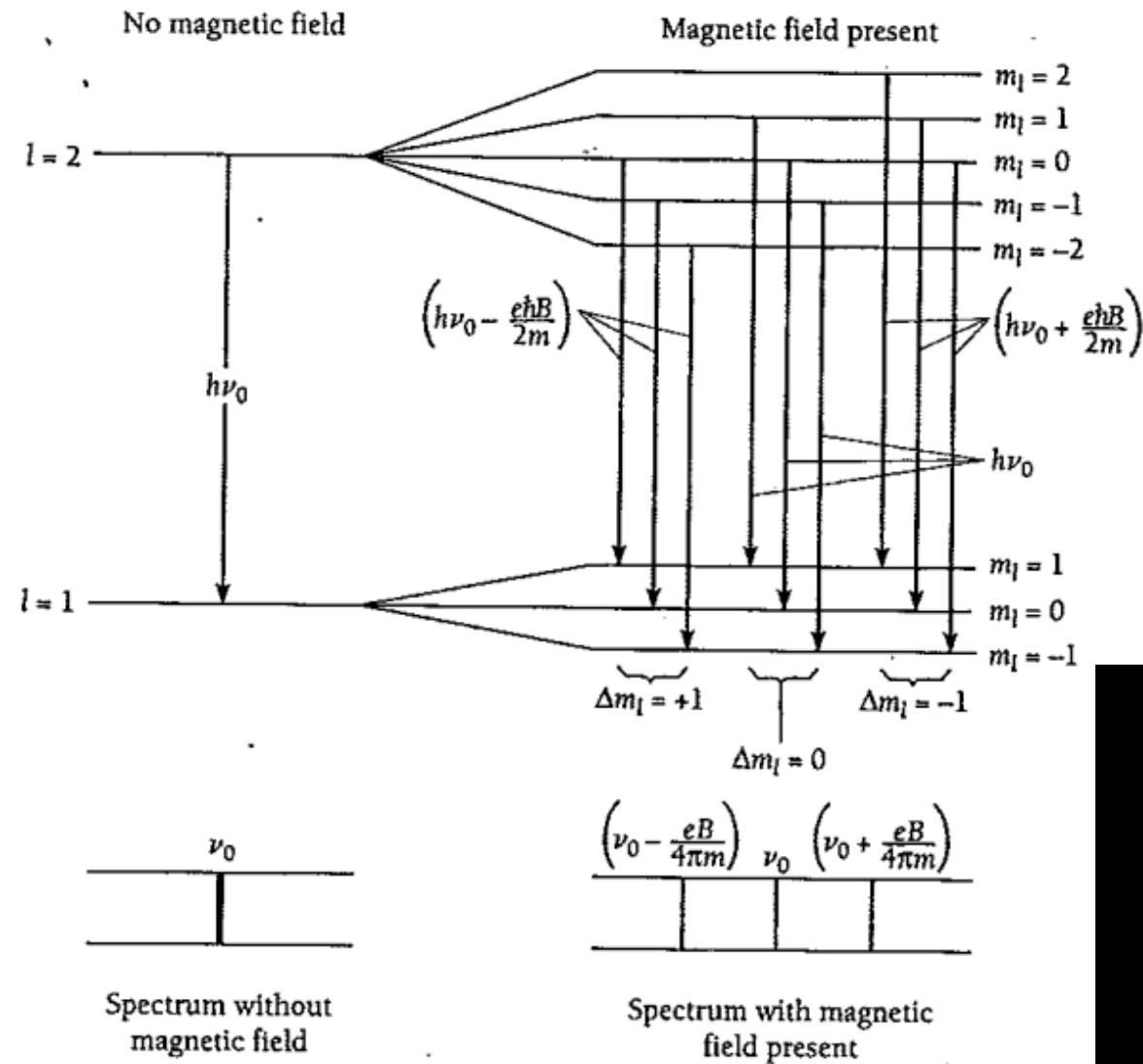
- Para un dado l , hay $(2l+1)$ orbitales, caracterizados por m_l .
- En presencia de un campo magnético externo, los niveles de energía se desdoblan en $(2l+1)$ líneas con energías diferentes ← Efecto Zeeman

Efecto Zeeman

$\Delta E = m_l \mu_B |\vec{B}|$, donde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ es el **magnetón de Bohr**
 $\mu_B = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$



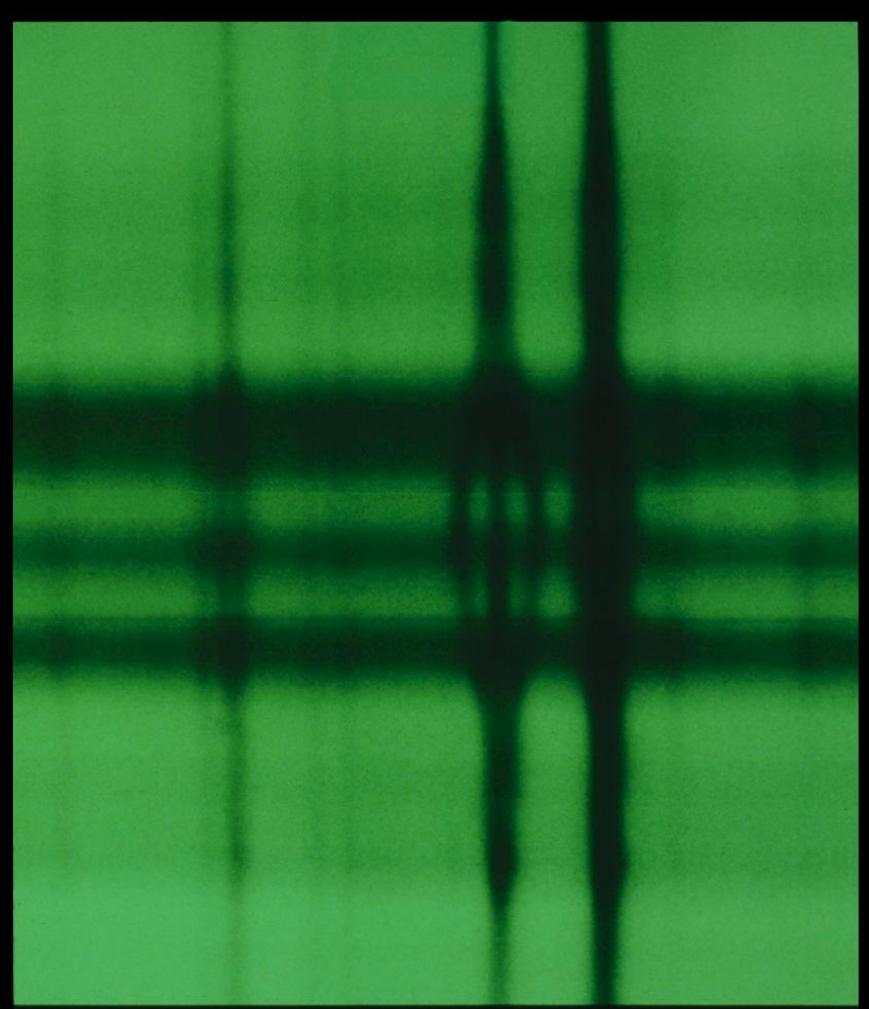
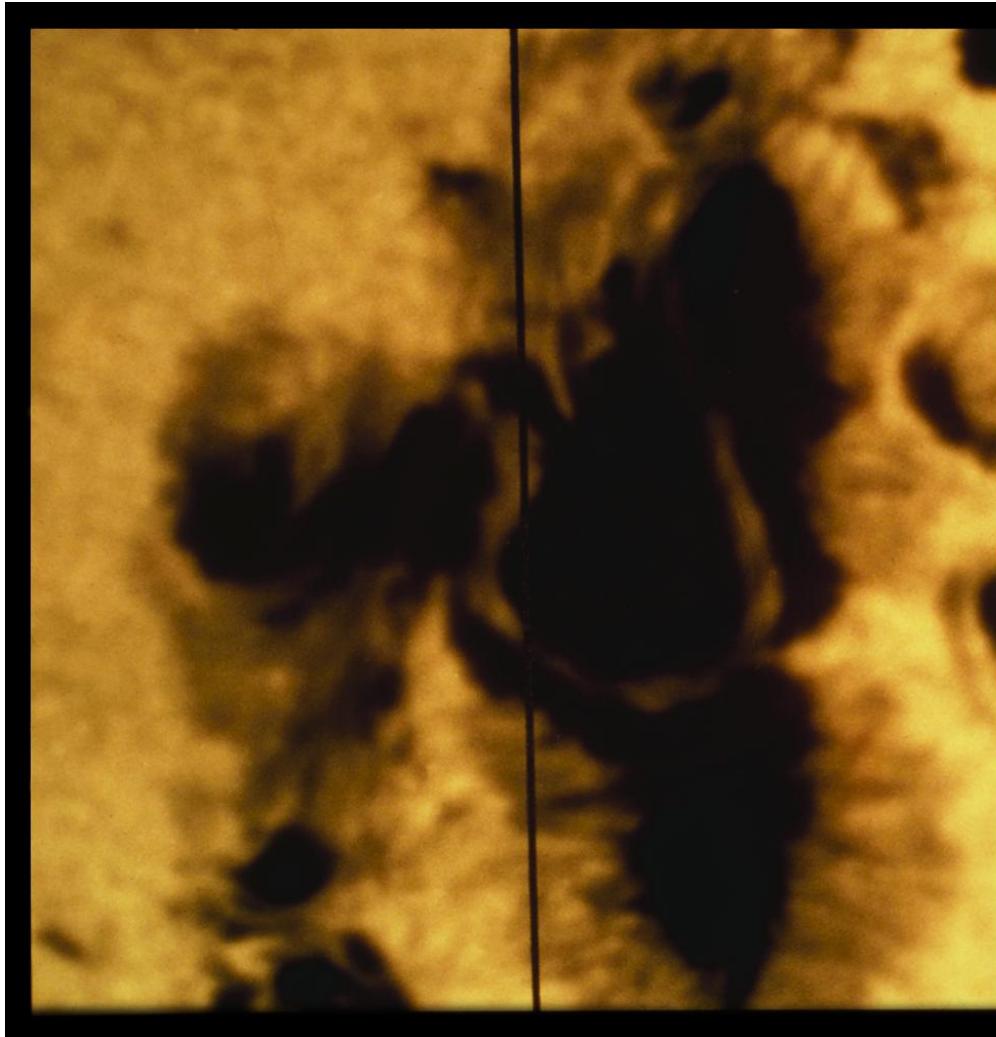
Desdoblamiento (splitting) de niveles y líneas





Efecto Zeeman en el Sol

$$\Delta f = \frac{\Delta E}{h} = 5.788 \times 10^{-5} B \text{ eV}$$



- Qué NO es:
 - NO es “giro” de la partícula sobre su eje.
 - NO es como la rotación de la Tierra.
- Qué SI es:
 - Propiedad física de las partículas elementales
 - Las partículas tienen un momento angular intrínseco
 - Este momento angular intrínseco (espín) está cuantizado → s
 - Para cada tipo de partícula, el espín es el mismo:

$$s = \frac{k}{2}, k \in \mathbb{N} \rightarrow S_z = \pm s \hbar \rightarrow S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$



Espín - estadística

- El electrón (y protón, neutrón, muón,...), espín $s=\frac{1}{2}$:

$$s_e = \frac{1}{2}, \rightarrow S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar \rightarrow S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

- Otras partículas pueden tener otros. P. ej, fotón, $s=1$

$$s_e = 1, \rightarrow S_z = \pm 1 \hbar \rightarrow S = \sqrt{2} \hbar$$

(recordar reglas de selección para emisión de un fotón)

- En general, para partículas con masa (núcleos atómicos)

$$S_z = (-s \dots + s) \hbar$$



Principio de exclusión

- Los electrones en los átomos se identifican por sus correspondientes números cuánticos n, l, m_l y s .
- **Principio de exclusión:** “En un átomo, no pueden existir dos electrones con el mismo conjunto de números cuánticos” (*Pauli, 1925*).
- Las partículas con
 - espín semientero → obedecen principio de exclusión → Fermiones (Estadística de Fermi)
 - espín entero → pueden ocupar el mismo estado cuántico → Bosones (Estadística de Bose) → láser, He superfluido, ...

Números cuánticos y degeneración

Nombre	Símbolo	Valores posibles	Magnitud física asociada
Principal	n	1, 2, 3, ...	Energía
Orbital	l	0, 1, ..., n-1	Magnitud del momento angular orbital
Magnético	m_l	-l, -l+1, ..., 0, ..., l	Dirección del momento angular orbital
Espín	s	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	Espín (momento angular intrínseco)

- Por lo tanto, según el principio de exclusión, **la cantidad de electrones que puede acomodar un estado es**

$$d_{n,l,m_l,s} = 1$$

$$d_{n,l,m_l} = 2$$

$$d_{n,l} = 2(2l+1)$$

$$d_n = 2n^2$$

Jun 22, 2017

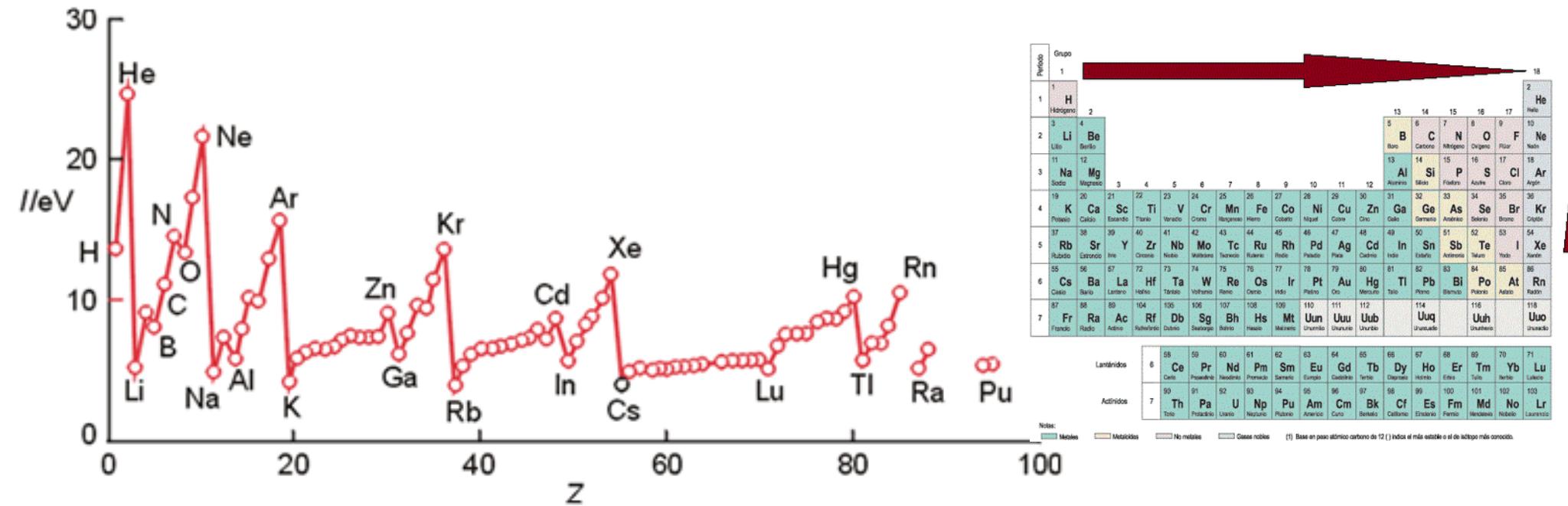
Estado (capa)	Degeneración	Total	Configuración
$n=1$ (K)	2	2	$1s^2$
$n=2$ (L)	8	10	$2s^2 2p^6$
$n=3$ (M)	18	28	$3s^2 3p^6 3d^{10}$
$n=4$ (N)	32	60	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$
$n=5$ (O)	50	110	$5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 5g^{18}$
$n=6$ (P)	72	182	$6s^2 6p^6 6d^{10} 6f^{14} 6g^{18} 6h^{22}$



La tabla periódica

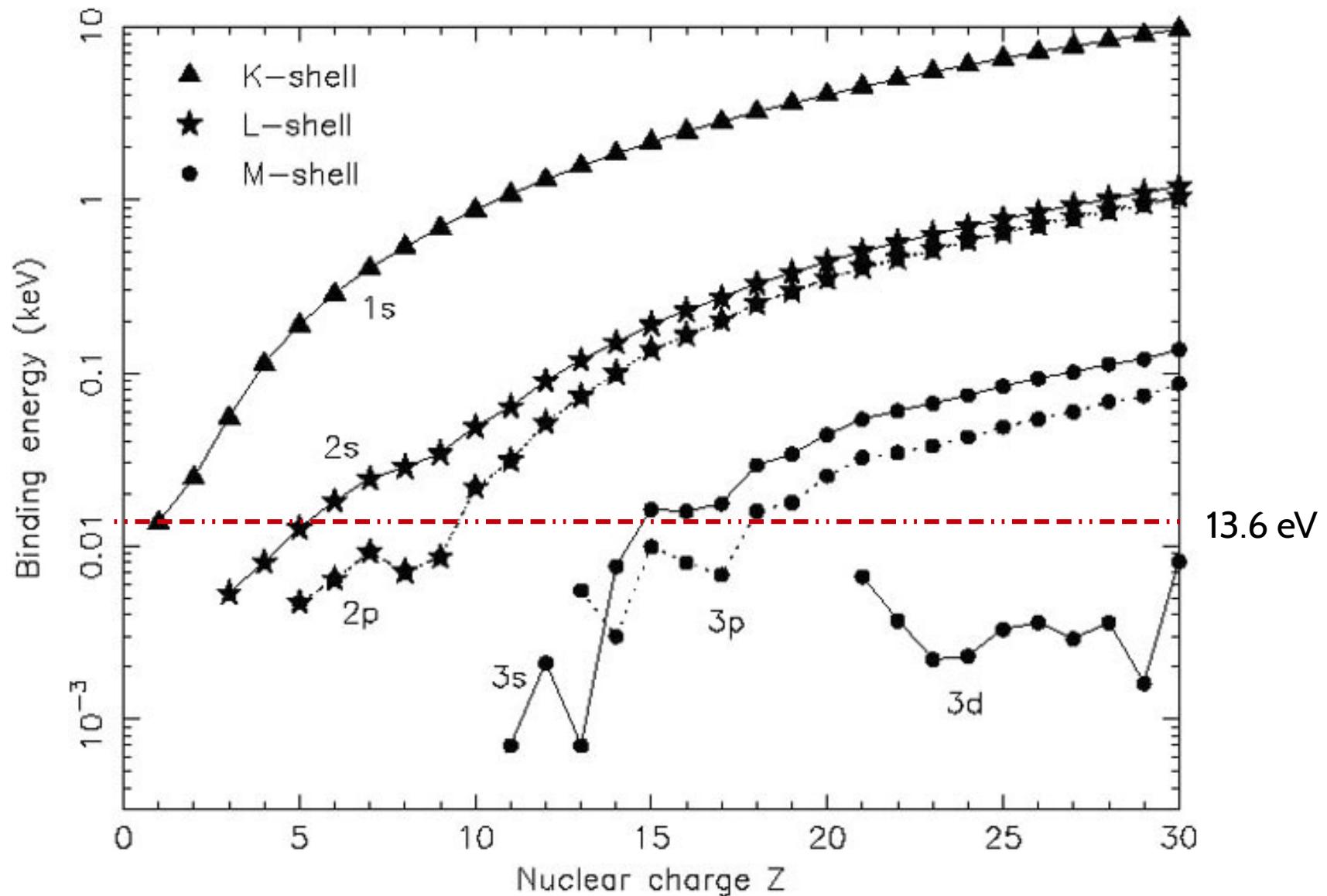
- Tres reglas muy sencillas:
 - Un sistema de partículas es estable cuando la energía total está en un mínimo
 - El estado de cada electrón estará definido por un conjunto único de números cuánticos $|n, l, m_s\rangle$
 - La actividad química se basa en la facilidad de liberar o tomar electrones
- En los átomos, cada electrón interactúa con el núcleo, y los electrones también interactúan entre si
- Electrones mismo $n \rightarrow$ distancias similares al núcleo \rightarrow potencial similar
 \rightarrow estructura de capas: $n=1 \rightarrow K; n=2 \rightarrow L; n=3 \rightarrow M, \dots$
- Electrones mismo n y $l \rightarrow$ igual energía orbital \rightarrow subcapa
- Los electrones internos están más ligados y apantallan la carga total del núcleo. Los externos interactúan con una carga neta menor

Energía de ionización

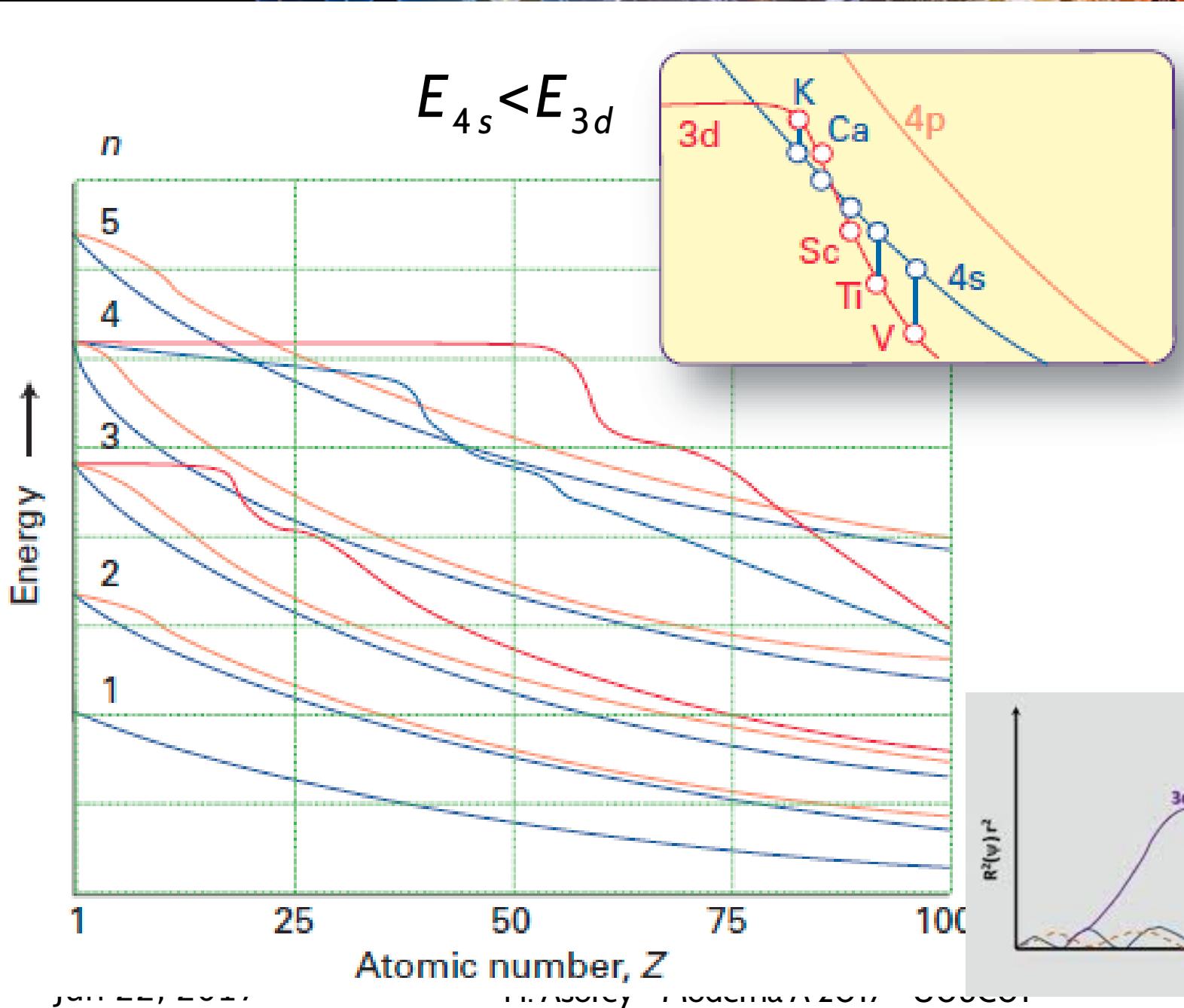


- Subcapas cerradas (llenas) → momento orbital total (orbital y espín) cero
- Capa cerrada → los electrones están muy ligados → poca interacción química
- Los orbitales s están más ligados que los orbitales d y f.

Energía de ligadura de los electrones



Energía de ligadura



La tabla periódica



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H Hidrógeno 1.008																	He Helio 4.0026...
2	Li Litio 6.94	Be Berilio 9.0121...																Ne Neón 20.1797
3	Na Sodio 22.989...	Mg Magnesio 24.305																Ar Argón 39.948
4	K Potasio 39.0983	Ca Calcio 40.078	Sc Escandio 44.955...	Ti Titanio 47.867	V Vanadio 50.9415	Cr Cromo 51.9961	Mn Manganes 54.938...	Fe Hierro 55.845	Co Cobalto 58.933...	Ni Níquel 58.6934	Cu Cobre 63.546	Zn Cinc 65.38	Ga Galio 69.723	Ge Germanio 72.63	As Arsénico 74.921...	Se Selenio 78.971	Br Bromo 79.904	Kr Kriptón 83.798
5	Rb Rubidio 85.4678	Sr Estroncio 87.62	Y Ittrio 88.905...	Zr Circonio 91.224	Nb Niobio 92.906...	Mo Molibdeno 95.95	Tc Tecnecio (98)	Ru Rutenio 101.07	Rh Rodio 102.90...	Pd Paladio 106.42	Ag Plata 107.86...	Cd Cadmio 112.414	In Indio 114.818	Sn Estaño 118.710	Sb Antimonio 121.760	Te Telurio 127.60	I Yodo 126.90...	Xe Xenón 131.293
6	Cs Cesio 132.90...	Ba Bario 137.327	57-71	Hf Hafnio 178.49	Ta Tantalo 180.94...	74 Wolframio 183.84	75 Renio 186.207	76 Osmio 190.23	77 Ir Indio 192.217	78 Pt Platino 195.084	79 Au Oro 196.96...	80 Hg Mercurio 200.59	81 Tl Talio 204.38	82 Pb Plomo 207.2	83 Bi Bismuto 208.98...	84 Po Polonio (209)	85 At Astato (210)	Rn Radón (222)
7	Fr Francio (223)	Ra Radio (226)	89-103	104 Rutherfordio (267)	105 Dubnio (268)	106 Seaborgio (271)	107 Bohrio (272)	108 Hassio (270)	109 Mt Meitnerio (276)	110 Ds Darmstadio (281)	111 Rg Roentgenio (280)	112 Cn Copernicio (285)	113 Nh Nihonium (284)	114 Fl Flerovio (289)	115 Mc Moscovium (288)	116 Lv Livermorio (293)	117 Ts Tennessee (294)	Og Oganesson (294)
				57 La Lantano 138.90...	58 Ce Cerio 140.116	59 Pr Praseodimio 140.90...	60 Nd Neodimio 144.242	61 Pm Prometio (145)	62 Sm Samario 150.36	63 Eu Europio 151.984	64 Gd Gadolino 157.25	65 Tb Terbio 158.92...	66 Dy Disprosio 162.500	67 Ho Holmo 164.93...	68 Er Erbio 167.259	69 Tm Tulio 168.93...	70 Yb Iterbio 173.054	71 Lu Lutecio 174.96...
				89 Ac Actinio (227)	90 Th Torio 232.03...	91 Pa Protactinio 231.03...	92 U Uranio 238.02...	93 Np Neptunio (237)	94 Pu Plutonio (244)	95 Am Americio (243)	96 Cm Curio (247)	97 Bk Berkelio (247)	98 Cf Californio (251)	99 Es Einstenio (252)	100 Fm Fermio (257)	101 Md Mendelevio (258)	102 No Nobelio (259)	103 Lr Lawrencio (262)

La tabla periódica extendida



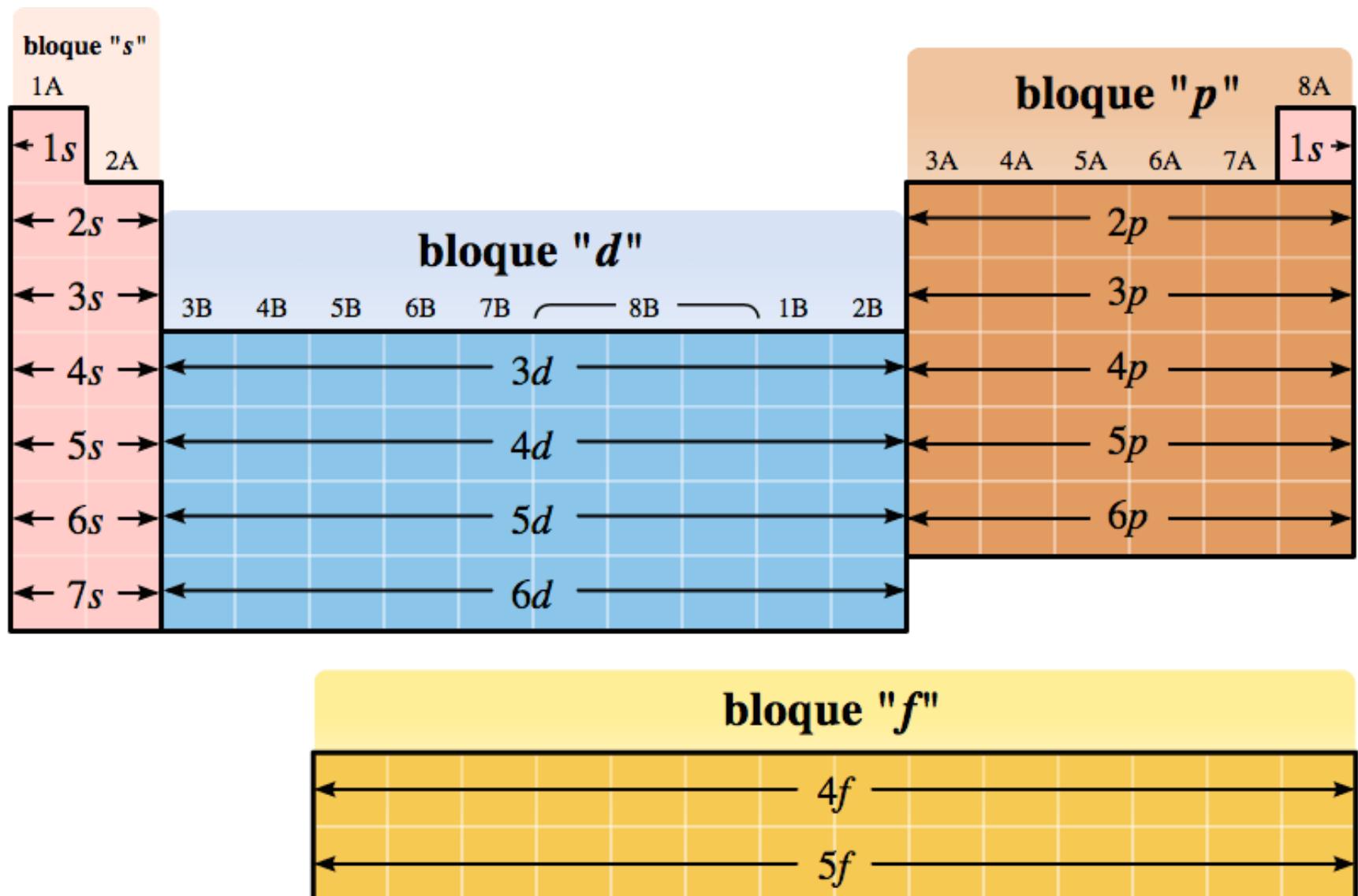
	s ¹	s ²																			p ¹	p ²	p ³	p ⁴	p ⁵	p ⁶																								
1	1 H	2 He																			5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne																								
2	3 Li	4 Be																			13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar																								
3	11 Na	12 Mg																			d ¹ 21	d ² 22	d ³ 23	d ⁴ 24	d ⁵ 25	d ⁶ 26	d ⁷ 27	d ⁸ 28	d ⁹ 29	d ¹⁰ 30																				
4	19 K	20 Ca																			31 Sc	32 Ti	33 V	34 Cr	35 Mn	36 Fe	37 Co	38 Ni	39 Cu	40 Zn																				
5	37 Rb	38 Sr																			41 Y	42 Zr	43 Nb	44 Mo	45 Tc	46 Ru	47 Rh	48 Pd	49 Ag	50 Cd																				
6	55 Cs	56 Ba																			51 In	52 Sn	53 Sb	54 Te	55 I	56 Xe	57 Lu	58 Hf	59 Ta	60 W	61 Re	62 Os	63 Ir	64 Pt	65 Au	66 Hg	67 Tl	68 Pb	69 Bi	70 Po	71 At	72 Rn								
7	87 Fr	88 Ra	g ¹ 121	g ² 122	g ³ 123	g ⁴ 124	g ⁵ 125	g ⁶ 126	g ⁷ 127	g ⁸ 128	g ⁹ 129	g ¹⁰ 130	g ¹¹ 131	g ¹² 132	g ¹³ 133	g ¹⁴ 134	g ¹⁵ 135	g ¹⁶ 136	g ¹⁷ 137	g ¹⁸ 138	58 Ac	59 Th	60 Pa	61 U	62 Np	63 Pu	64 Am	65 Cm	66 Bk	67 Cf	68 Es	69 Fm	70 Md	71 No	72 Lr	73 Rf	74 Db	75 Sg	76 Bh	77 Hs	78 Mt	79 Ds	80 Rg	81 Cn	82 Nh	83 Fl	84 Mc	85 Lv	86 Ts	87 Og
8	119 Uue	120 Ubn	121 Ubu	122 Ubb	123 Ubt	124 Ubq	125 Ubp	126 Ubh	127 Ubs	128 Ubo	129 Ube	130 Utn	131 Utu	132 Utb	133 Utt	134 Utp	135 Uth	136 Uts	137 Uto	138 Ute	139 Uqn	140 Uqu	141 Uqb	142 Uqt	143 Uqq	144 Uqp	145 Uqh	146 Uqs	147 Uqo	148 Uqe	149 Upn	150 Upu	151 Upb	152 Upt	153 Upq	154 Upp	155 Uph	156 Ups	157 Upo	158 Upe	159 Uhn	160 Uhu	161 Uh	162 Uhq	163 Uhp	164 Uhhs	165 Uho	166 Uhs	167 Uho	168 Uhs
9	169 Uhe	170 Usn	171 Usu	172 Usb	173 Ust	174 Usq	175 Usp	176 Ush	177 Uss	178 Uso	179 Use	180 Uon	181 Uou	182 Uob	183 Uot	184 Uop	185 Uoh	186 Uos	187 Uoo	188 Uoe	189 Uen	190 Ueu	191 Ueb	192 Uet	193 Ueq	194 Uep	195 Ueh	196 Ues	197 Ueo	198 Uee	199 Bnn	200 Bnb	201 Bnt	202 Bnq	203 Bnp	204 Bnh	205 Bns	206 Bno	207 Bne	208 Bun	209 Buu	210 Bub	211 Buq	212 Bup	213 Buh	214 Bhs	215 Bno	216 Bne	217 Bun	218 Buo

Bloques

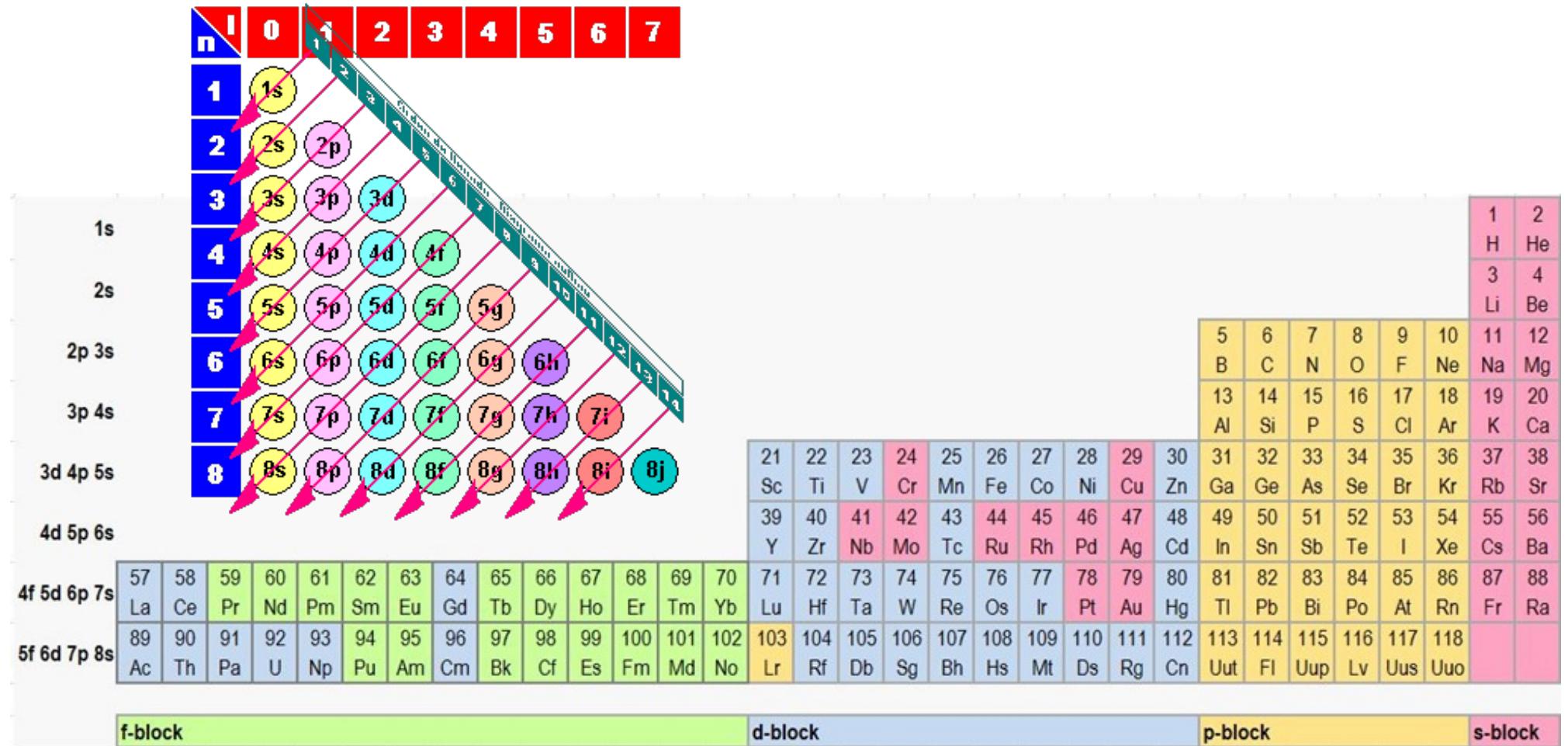
bloque s
bloque p
bloque d
bloque f
bloque g

- En términos de energía creciente, el potasio y el calcio deberían ser:
 $K: [Ar] 3d^1$ $Ca: [Ar] 3d^2$, pero son $K: [Ar] 4s^1$ $Ca: [Ar] 4s^2$
- Elementos de transición (d) y transición interna (f)
 - todos tiene la misma configuración externa
 - Escandio: $(3s^2 3p^6 4s^2) 3d$
 - Itrio: $(4s^2 4p^6 5s^2) 4d$
 - Lantánidos: $(5s^2 5p^6 6s^2) 4f$
 - Actínidos: $(6s^2 6p^6 7s^2) 4f$
 - van completando las subcapas d y f, sin apenas cambios en el comportamiento químico

Veamos la tabla

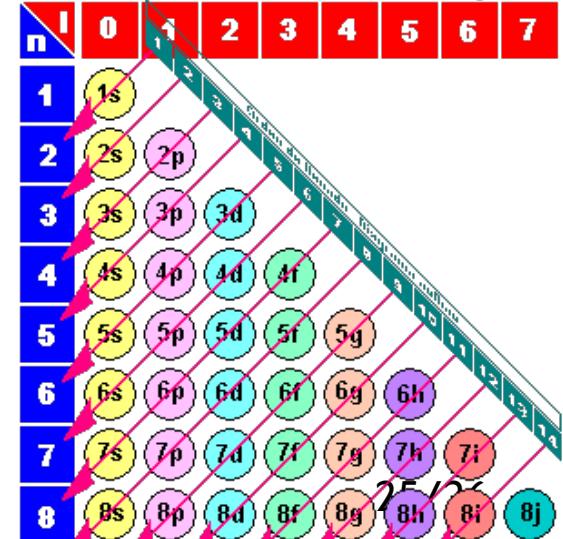


Ordenamiento por energía



Reglas de Hund

- Reglas semi-empíricas para predecir el ordenamiento:
 - 1) El término con la máxima multiplicidad se encuentra en la energía más baja
 - 2) Para una multiplicidad dada, el término con el mayor valor de L , se encuentra en la más baja energía.
 - 3) En átomos con menos de la mitad de capas llenas, el nivel con el valor más bajo de $J=L+S$, se encuentra en la más baja energía.
- Regla empírica →
Regla de las diagonales
 $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d\dots$





“Los átomos se comportan como átomos, nada más”



“That's all Folks!”