

Problemas de Estructura 3

Átomos y Tabla Periódica

1. Calcular las energías de los términos pertenecientes a las configuraciones np^2 , en diferentes iones isoelectrónicos al Helio. Graficar las energías en función de las cargas. Identificar en qué casos se cumple acoplamiento LS y en cuales jj .
2. Calcular las energías de los términos pertenecientes a las configuraciones $3p^2, 4p^2, \dots np^2$ para elementos neutrales (grupo IV) y para iones con carga $q = +1$ (grupo V). Graficar las energías relativas respecto a la energía promedio de la configuración $E_{av} = \frac{\sum_j (2l_j + 1) E_j}{\sum_j (2l_j + 1)}$, en función de E_{av} .
3. Repetir el esquema para las configuraciones $np(n+1)s$ ($2p3s, 3p4s \dots 5p6s$).
4. Listar los términos posibles en una configuración np^3 . Calcular la degeneración total de la configuración (en orden 0), y chequear que coincide con el número de niveles obtenidos.
5. Calcular los estados fundamentales de elementos de diferentes períodos de la Tabla Periódica. Comprobar si se cumple la ley de Hund.
6. Calcular los niveles energéticos de los primeros estados excitados del Na.
7. Realizar un gráfico esquemático de las energías de los términos de los alcalinos (incluyendo hidrógeno).
8. Calcular el *defecto cuántico* para los términos 2S y 2D del Na.