

## 4. Mecánica Cuántica y Relatividad

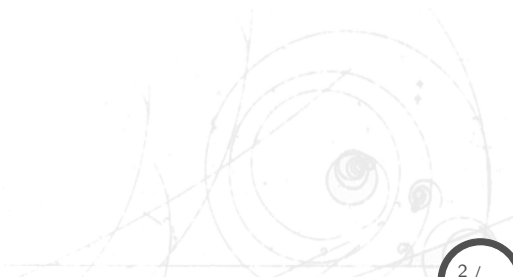
# Contenido: Tema 04

## 4. Mecánica Cuántica y Relatividad

4.1 Naturaleza ondulatoria de la materia

4.2 Cuantización. Electrones confinados. Átomo de hidrógeno

4.3 Momento angular. Espín del electrón. Experimento de Stern-Gerlach



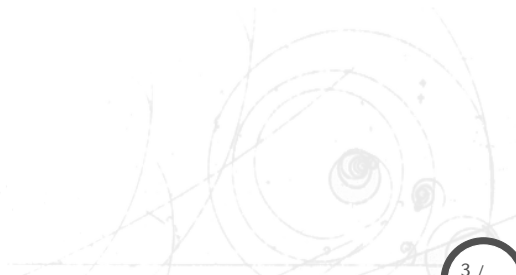
# Contenido: Tema 04

## 4. Mecánica Cuántica y Relatividad

### 4.1 Naturaleza ondulatoria de la materia

### 4.2 Cuantización. Electrones confinados. Átomo de hidrógeno

### 4.3 Momento angular. Espín del electrón. Experimento de Stern-Gerlach



# Fotones y ondas de materia

## Fotón, el cuanto de luz

- La **física cuántica** se evoca al estudio del mundo **microscópico**, en dimensiones del orden de  $10^{-7} - 10^{-10}$  m.
- A esas dimensiones, muchas propiedades se encuentran en cantidades **elementales**, o múltiplos enteros de esas cantidades.
- Tales propiedades se les denota como cantidades **cuantizadas**.
- En 1905, Einstein propone que la luz esta formada por **cuantos** de luz, a los que llama **fotones**.
- El **fotón** presenta las siguientes propiedades:

**Frecuencia:**  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ,

**Energía:**  $E = h\nu$ ,

**Momento:**  $p = \frac{h\nu}{c}$ ,

en donde  $c$  es la velocidad de la luz (300,000 Km/s),  $\lambda$  la longitud de onda, y  $h$  la **constante de Planck**,

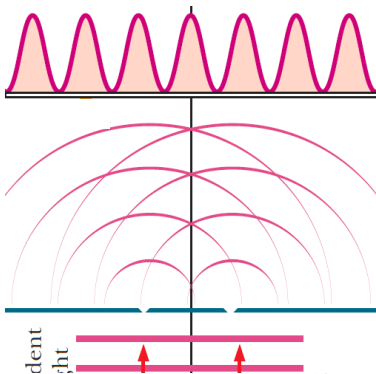
$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4.14 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}.$$

# Fotones y ondas de materia

## Naturaleza dual de la luz

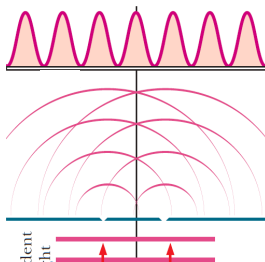
La luz presenta un comportamiento interesante, desde el punto de vista de la física cuántica:

- Puede ser **emitida** o **absorbida**, lo que se explica al estar compuesta por **fotones**, es decir, **partículas**.
- Presenta el fenómeno de **difracción** y puede formar patrones de **interferencia**, es decir, se comporta como **ondas**.



# Fotones y ondas de materia

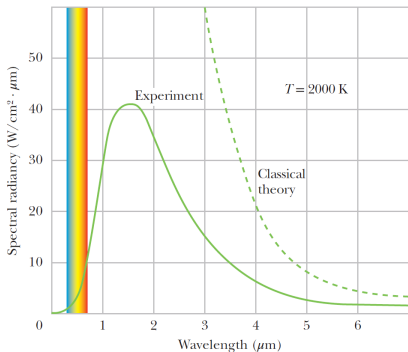
## Naturaleza dual de la luz



- No es posible predecir en que punto en la pantalla será detectado un fotón, son detectados de manera **aleatoria**.
- Si se puede predecir la **probabilidad** relativa de detectar un fotón en un punto específico.
- La **probabilidad** de detección es proporcional al **cuadrado de la amplitud** de la onda.
- Se le conoce a la onda de luz como **onda de probabilidad**.

# Fotones y ondas de materia

## Inicios de la Física Cuántica



- Se analiza la **radiación de cuerpo negro**, es decir, la radiación térmica de un cuerpo que solo depende de la temperatura.
- La **radiación espectral**  $S(\lambda)$ , viene dada como:

$$S(\lambda) = \frac{\text{intensidad}}{\text{longitud de onda}}.$$

La predicción de la física clásica para la radiación espectral, para una temperatura viene dada como:

$$S(\lambda) = 2\pi ckT/\lambda^4,$$

la cual **no describe** la observación experimental del **máximo** a una longitud de onda determinada.

# Fotones y ondas de materia

## Inicios de la Física Cuántica

En 1900 Planck propone una formulación para  $S(\lambda)$  que reproduce la observación experimental:

$$S(\lambda) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT}} = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \frac{1}{e^{h\nu/kT}}.$$

La explicación física de la fórmula de Planck fue dada por Einstein:

- La energía de los átomos que forman las paredes del cuerpo negro está **cuantizada**.
- La energía de radiación igualmente está **cuantizada**, en forma de fotones, con energía  $E = h\nu$ .

El comportamiento del máximo de la radiación espectral viene dada por la **ley de Wien**,

$$\lambda_{max} T = 2898 \mu\text{m} \cdot \text{K},$$

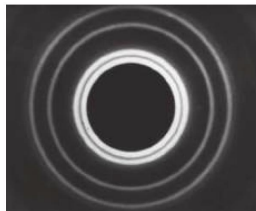
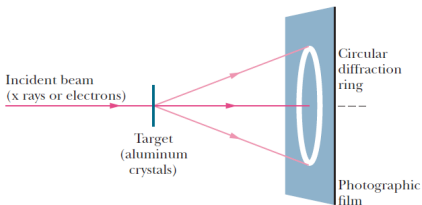
donde se observa que para altas temperaturas la posición de  $\lambda_{max}$  tiende a valores más pequeños.

# Fotones y ondas de materia

## Electrones y onda de materia

- **Luz**: considerada de manera clásica como **onda**, pero muestra características de **partículas**  $\Rightarrow$  **fotones**.
- **Electrones**: son considerados de manera clásica como **partículas**, entonces, por simetría, de Broglie les asigna características de **onda**  $\Rightarrow$  **ondas de materia**,

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \Leftarrow \quad \text{long. de onda de de Broglie.}$$



Otras partículas de nivel atómico, como protones, átomos, y moléculas, también se comportan como **ondas de materia**.

# Fotones y ondas de materia

## Ecuación de Schrödinger

La variable que describe a una **onda de materia** es la **función de onda**  $\Psi(x, y, z, t)$ ,

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-i\omega t} \quad \forall \quad \omega = 2\pi\nu,$$

en donde  $\Psi(x, y, z, t)$  representa una función de onda de **probabilidad**, siendo la norma de  $\psi$ ,

$$|\psi|^2 = \psi\psi^*,$$

proporcional a la **probabilidad** de detectar a una partícula en un volumen pequeño, centrado en el punto  $(x, y, z)$ .

Para determinar la función de onda, se utiliza la **ecuación de Schrödinger**, la cual, para el caso de un movimiento unidimensional en presencia de un potencial  $U(x)$ , viene dada como:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}[E - U(x)]\psi = 0,$$

siendo  $E$  la energía total de la partícula en movimiento.

# Fotones y ondas de materia

## Ecuación de Schrödinger

De la ecuación de Schrödinger, se tiene que  $E - U(x)$  representa la **energía cinética** de la partícula, y si se considera que el potencial de interacción es **constante**,  $U(x) = \text{cte.}$ :

$$E - U = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{\lambda} \right)^2,$$
$$\Rightarrow E - U = \frac{1}{2m} \left( \frac{kh}{2\pi} \right)^2,$$

en donde se ha utilizado el **momento de la onda**  $k = 2\pi/\lambda$ .

Sustituyendo lo anterior en la ecuación de Schrödinger, se tiene para el caso de un potencial constante:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0,$$
$$\forall \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E - U)} = k.$$

# Fotones y ondas de materia

## Ecuación de Schrödinger

La **solución** general a la ecuación de Schrödinger con potencial constante es:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

considerando el movimiento en la dirección positiva ( $x > 0$ ), se tiene para la **densidad de probabilidad**:

$$\begin{aligned} |\psi(x)|^2 &= \psi(x)\psi^*(x), \\ |\psi(x)|^2 &= (Ae^{ikx})(Ae^{ikx})^* = A^2 e^{ikx} e^{-ikx}, \\ \Rightarrow |\psi(x)|^2 &= A^2, \end{aligned}$$

es decir, para un **potencial uniforme/constante**, la **densidad de probabilidad** es **constante** ( $|A|^2$ ) para cualquier punto a lo largo del eje  $x$ , indicando que se puede encontrar en cualquier punto del eje.

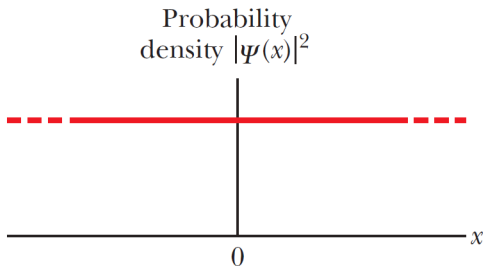
# Fotones y ondas de materia

## Principio de incertidumbre de Heisenberg

El **principio de incertidumbre de Heisenberg** establece que no se puede determinar con precisión ilimitada la **posición**  $\mathbf{r}$  y el **momento**  $\mathbf{p}$  de una partícula **simultáneamente**:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar,$$

en donde  $\hbar = h/2\pi$  y  $\Delta\zeta$  y  $\Delta p_\zeta$  representan las **incertidumbres** intrínsecas de la componente  $\zeta$  de  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{p}$ .



Se tiene un electrón con un **determinado**  $k$ , que representa el **momento**  $p_x$ , con lo cual:

$$\Delta p_x = 0, \\ \therefore \Delta x \rightarrow \infty.$$

# Contenido: Tema 04

## 4. Mecánica Cuántica y Relatividad

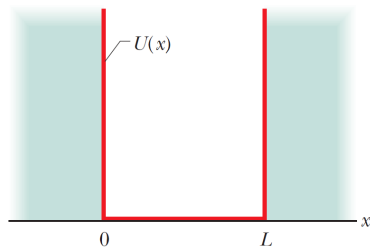
4.1 Naturaleza ondulatoria de la materia

4.2 Cuantización. Electrones confinados. Átomo de hidrógeno

4.3 Momento angular. Espín del electrón. Experimento de Stern-Gerlach

# La función de onda de partículas

Electrones confinados: pozo infinito



Se considera el caso de un **pozo de potencial infinito**, unidimensional, en el cual se tiene:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \forall 0 \leq x \leq L, \\ \infty & \forall x < 0, \\ & \& x > L. \end{cases}$$

Aplicando la **ecuación de Schrödinger** con  $U(x) = 0$ ,

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}[E - U(x)]\psi(x) &= 0, \\ \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2}E\psi(x) &= 0, \end{aligned}$$

siendo  $\psi(x) = 0 \forall x = 0, L$ .

La solución que se obtiene es:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A \text{Sen} \left( \frac{n\pi}{L}x \right) \quad \forall n = 1, 2, \dots \\ &= A \text{Sen} \left( \frac{2\pi}{\lambda_n}x \right), \end{aligned}$$

en donde  $L = n\lambda_n/2$ .

# La función de onda de partículas

Electrones confinados: pozo infinito

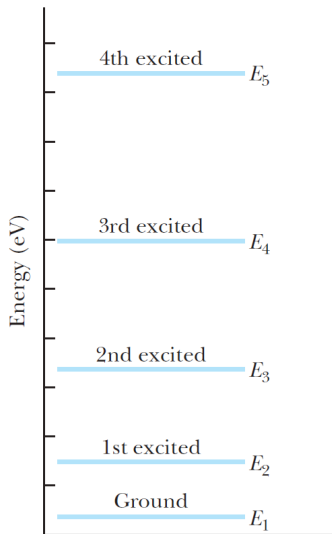
Para el caso de  $E$ , se obtiene el **espectro de energía** relacionado,

$$E_n = \left( \frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \quad \forall \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

siendo  $n$  el **número cuántico** principal.

- El estado con el nivel mas bajo ( $n = 1$ ) corresponde al **estado base**.
- Cualquier otro estado ( $n > 1$ ) se le conoce como **estado excitado**.
- Para pasar de un estado a otro, se requiere de la **absorción** o **emisión** de un **fotón**,

$$h\nu = \Delta E = E_m - E_n \quad \forall \quad m, n \in \mathbb{Z}.$$



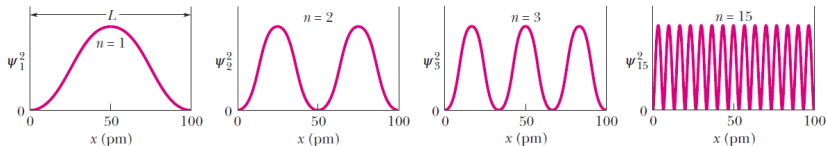
# La función de onda de partículas

Electrones confinados: pozo infinito

La **probabilidad**  $p(x)$  de que el electrón sea detectado en una posición  $x$  dentro del potencial es:

$$p(x) = |\psi_n(x)|^2 dx \leftarrow \text{probabilidad,}$$

$$\forall |\psi_n(x)|^2 = A^2 \text{Sen}^2 \left( \frac{n\pi}{L} x \right) \leftarrow \text{densidad de probabilidad,}$$



Conforme  $n$  **crece**, se observa que la **probabilidad** comienza a mostrarse más uniforme a lo largo del pozo de potencial, tendiendo a un comportamiento **clásico**, lo que se conoce como **principio de correspondencia**.

# La función de onda de partículas

## Electrones confinados: pozo infinito

Si se deseara determinar la probabilidad en un rango determinado del pozo de potencial, se tiene:

$$\begin{aligned} p(x)_{x_1 \rightarrow x_2} &= \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx, \\ &= \int_{x_1}^{x_2} A^2 \text{Sen}^2 \left( \frac{n\pi}{L} x \right) dx. \end{aligned}$$

Si se considera al pozo en su **totalidad**, se tiene que la **probabilidad** de determinar la posición de un electrón dentro del pozo es:

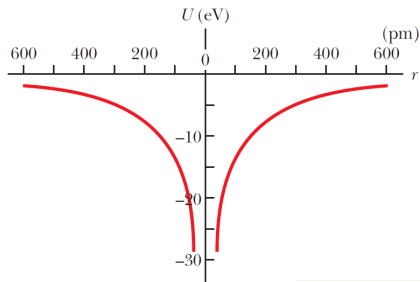
$$\begin{aligned} \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx &= 1, \\ \int_0^L A^2 \text{Sen}^2 \left( \frac{n\pi}{L} x \right) dx &= 1, \end{aligned}$$

lo cual arroja para la constante  $A = \sqrt{2/L}$ , siendo que el proceso se le conoce como **normalización** de la función de onda.

# La función de onda de partículas

## El átomo de hidrógeno

El **átomo de hidrógeno**, constituido por un electrón atrapado por el potencial coulombiano generado por el protón, representa un problema de una partícula atrapada en un **pozo de potencial 3D**.



El **potencial** al cual está atrapado el electrón es:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

y al ser introducido en la ec. de Schrödinger, se obtiene una ecuación diferencial para cada variable esférica, siendo la energía para el caso de la variable **radial**,

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad \forall n = 1, 2, \dots$$

$$E_n = -\frac{2.180 \times 10^{-18} \text{ J}}{n^2} = -\frac{13.61 \text{ eV}}{n^2},$$

es decir, la energía del átomo de hidrógeno está **cuantizada**.

# La función de onda de partículas

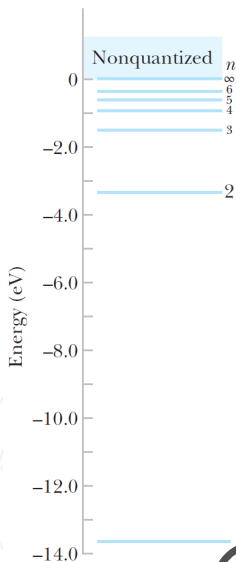
## El átomo de hidrógeno

La energía del átomo de hidrógeno cambia al absorber o emitir luz (fotones),

$$\begin{aligned} h\nu &= \Delta E = E_{high} - E_{low}, \\ &= -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left( \frac{1}{n_{high}^2} - \frac{1}{n_{low}^2} \right). \end{aligned}$$

En el **espectro de energía** del hidrógeno:

- El nivel más bajo,  $n = 1$ , es el **estado base**.
- Los niveles de energía tienen val. **negativos**.
- Los niveles se **acercan** entre sí progresivamente conforme  $n$  crece.
- $E = 0$  para  $n \rightarrow \infty$ .
- Si  $E > 0$ , entonces el electrón ya no está **ligado** al protón.



# La función de onda de partículas

## El átomo de hidrógeno

Para describir la **función de onda** del electrón en el átomo de hidrógeno, se requieren de **tres números cuánticos**:

Símbolo	Nombre	Valores
$n$	núm. cuántico <b>principal</b>	$1, 2, 3, \dots$
$l$	núm. cuántico <b>orbital</b>	$0, 1, 2, \dots, n - 1$
$m_l$	núm. cuántico <b>orb. magnético</b>	$-l, -(l - 1), \dots, (l - 1), l$

- Un set específico de números cuánticos  $(n, l, m_l)$  identifica la **función de onda** de un estado particular.
- El número cuántico **principal**,  $n$ , determina la energía del estado.
- El número cuántico **orbital**,  $l$ , es una medida del momento angular asociado a ese estado.
- El número cuántico **orbital magnético**,  $m_l$ , se relaciona con la orientación en el espacio del momento angular.
- Para el caso del **estado base**,  $n = 1$ , se tiene:  $l = 0$ ,  $m_l = 0$ .

# La función de onda de partículas

El átomo de hidrógeno: estado base

La **función de onda** del átomo de hidrógeno en el **estado base** es:

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}e^{-r/a} \quad \forall \quad E_1 = -13.60 \text{ eV},$$

$$\& \quad a = 0.5291772 \times 10^{-10} \text{ m} \Leftarrow \text{radio de Bohr.}$$

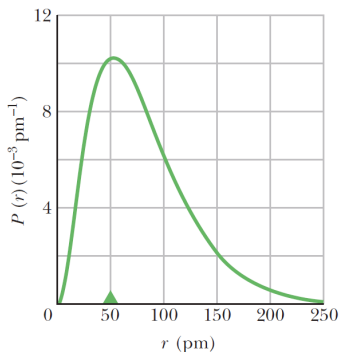
La probabilidad de detectar al electrón en un elemento de volumen  $dV$  a una distancia  $r$  desde el centro del átomo es:

$$\begin{aligned} P(V)dV &= |\psi(r)|^2 dV = |\psi(r)|^2 (4\pi r^2) dr, \\ \Rightarrow P(r)dr &= \frac{4}{a^3} e^{-2r/a} r^2 dr, \\ \therefore P(r) &= \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}, \end{aligned}$$

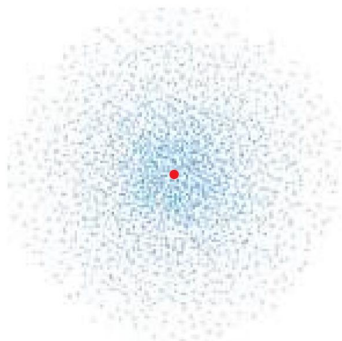
describiendo  $P(r)$  la **densidad radial de probabilidad**.

# La función de onda de partículas

El átomo de hidrógeno: estado base



La **densidad de probabilidad radial** del átomo de hidrógeno en el **estado base** muestra que la distancia más probable es alrededor del **radio de Bohr**,  $r \sim 0.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ .



La **probabilidad volumétrica**,  $|\psi(r)|^2$ , del estado base cae exponencialmente conforme la distancia  $r$  desde el núcleo se incrementa.

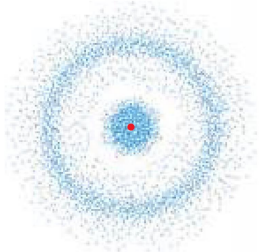
# La función de onda de partículas

El átomo de hidrógeno: estados excitados

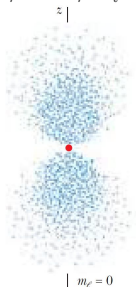
Para un **estado excitado** del átomo de hidrógeno, en particular  $n = 2$ , se tienen las siguientes posibilidades para los otros números cuánticos:

$n$	$l$	$m_l$
2	0	0
2	1	-1
2	1	0
2	1	+1

$n = 2, l = 0, m_l = 0$



$n = 2, l = 1, m_l = 0$



$n = 2, l = 1, m_l = \pm 1$



## 4. Mecánica Cuántica y Relatividad

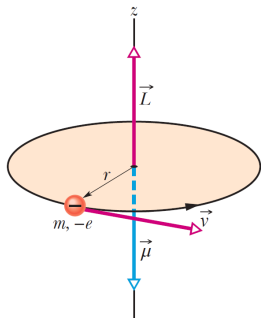
4.1 Naturaleza ondulatoria de la materia

4.2 Cuantización. Electrones confinados. Átomo de hidrógeno

4.3 Momento angular. Espín del electrón. Experimento de Stern-Gerlach

# Momento angular, espín del electrón

Átomos: momento angular y magnetismo



De manera general, se puede considerar que una partícula cargada negativamente: posee :

- **Momento angular  $L$ .**
- **Momento dipolar magnético  $\mu$ .**

siendo ambos perpendiculares al plano de la trayectoria.

Para el caso de electrones confinados, como en un átomo, cada estado cuántico tiene asociado lo siguiente:

- Momento angular **orbital** y momento dipolar magnético **orbital**.
- **momento angular de espín** y **momento dipolar magnético de espín**, ambos intrínsecos al electrón.

# Momento angular, espín del electrón

Átomos: momento angular y magnetismo

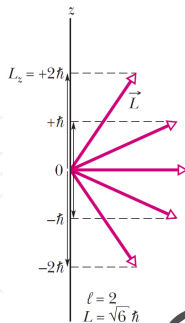
Num. cuántico	Símbolo	Valores
Principal	$n$	1, 2, 3, ...
Orbital	$l$	0, 1, 2, ..., $n - 1$
Magnético orbital	$m_l$	0, $\pm 1$ , $\pm 2$ , ..., $\pm l$
Espín	$s$	$1/2$
Magnético de espín	$m_s$	$\pm 1/2$

- El **momento angular orbital  $\mathbf{L}$**  esta **cuantizado**, con magnitud dada por:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad \forall l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad \& \quad \hbar = h/2\pi,$$

- No es posible conocer la dirección específica de  $\mathbf{L}$ , pero se puede determinar los valores de la **componente  $L_z$** ,

$$L_z = m_l \hbar \quad \forall m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$



# Momento angular, espín del electrón

Átomos: momento angular y magnetismo

Clásicamente, una partícula cargada moviéndose en órbita, genera un dipolo magnético, dado por:

$$\boldsymbol{\mu}_{orb} = -\frac{e}{2m}\mathbf{L},$$

para el caso de un electrón, se tiene que el **momento dipolar orbital magnético**  $\boldsymbol{\mu}_{orb}$  está **cuantizado**,

$$\mu_{orb} = \frac{e}{2m}\sqrt{l(l+1)}\hbar,$$

obteniéndose para la proyección en el eje  $z$ ,

$$\mu_{orb,z} = -m_l \frac{e\hbar}{2m} = -m_l \mu_B,$$

en donde se ha definido el **magnetón de Bohr**,

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m} = \frac{e\hbar}{2m} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}.$$

# Momento angular, espín del electrón

Átomos: momento angular y magnetismo

Un electrón posee un **momento angular de espín** intrínseco  $\mathbf{S}$ , en donde su magnitud está **cuantizada**,

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad \forall \quad s = 1/2,$$

obteniéndose para la proyección en el eje  $z$   $S_z = m_s\hbar$ , siendo  $m_s$  el número cuántico **magnético de espín** que puede tener solo dos valores,

$$m_s = +s = +1/2 \quad \leftarrow \quad \text{espín arriba,}$$

$$m_s = -s = -1/2 \quad \leftarrow \quad \text{espín abajo.}$$

Igualmente, se asocia un **momento dipolar magnético de espín**  $\mu_s$ ,

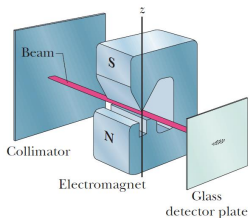
$$\mu_s = -\frac{e}{m}\mathbf{S} \quad \forall \quad \mu_s = \frac{e}{m}\sqrt{s(s+1)}\hbar,$$

teniendo una componente en el eje  $z$  definida, dada por:

$$\mu_{s,z} = -2m_s\mu_B.$$

# Momento angular, espín del electrón

## Experimento de Stern-Gerlach: espín del electrón



$$\therefore F_z = -\frac{dU}{dz} = \mu_z \frac{dB}{dz}.$$

En el **experimento de Stern-Gerlach** se tiene:

- Un rayo **colimado** de átomos de plata (Ag).
- El rayo pasa entre los polos de un electroimán, con  $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ , **deflectando** los átomos cuando está activado:

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \Rightarrow U = -\mu_z B,$$

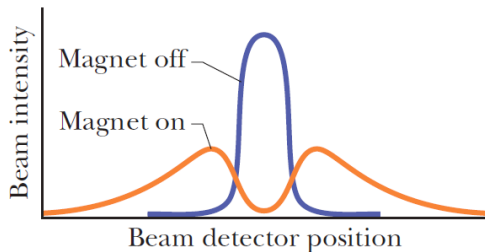
- Cuando el electroimán está **apagado**, los átomos de Ag se depositan en un solo **punto**, y cuando está **prendido** se deben **dispersar** verticalmente, debido a un rango de valores de  $\mu_z$ :

$$\begin{aligned}\mu_z &= -\mu \text{ hacia } \mathbf{abajo} \text{ en } z, \\ \mu_z &= +\mu \text{ hacia } \mathbf{arriba} \text{ en } z.\end{aligned}$$

# Momento angular, espín del electrón

## Experimento de Stern-Gerlach: espín del electrón

Lo que realmente se observa es lo siguiente:



- Se detectan **dos regiones** equidistantes del centro que concentran la mayoría de los átomos detectados.
- $\mu_z$  **no presenta** cualquier valor entre  $-\mu$  y  $+\mu$  de manera continua.
- Por tanto,  $\mu_z$  está **cuantizado**:

$$\mu_{s,z} = -2(+1/2)\mu_B = -\mu_B \quad \& \quad \mu_{s,z} = -2(-1/2)\mu_B = +\mu_B,$$

- Lo cual da como resultado para la **fuerza de deflexión**:

$$F_z = -\mu_B (dB/dz) \quad \& \quad F_z = +\mu_B (dB/dz).$$

# Momento angular, espín del electrón

## Principio de exclusión de Pauli

### Principio de exclusión de Pauli

Dos electrones confinados en una misma región **no** pueden tener exactamente los mismos **números cuánticos**.

- El principio de exclusión aplica para cualquier partícula subatómica con **espín  $s=1/2$** .
- En un átomo no se puede tener dos electrones ( $s = 1/2$ ) con los **mismos** valores de  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  y  $m_s$ ; deben de diferir **al menos** en uno.
- Considerando como ejemplo dos electrones en una **trampa unidimensional**, en donde sólo se requiere del número  $n$ , además de  $m_s = +1/2$  o  $m_s = -1/2$ , se tienen dos posibilidades:
  - Los dos electrones tienen **diferente** valor de  $n$ .
  - Ambos electrones tienen el **mismo** valor de  $n$ , pero **diferente** valor de  $m_s$ :  $m_{s,1} = +1/2$  y  $m_{s,2} = -1/2$ .

# Momento angular, espín del electrón

## Principio de exclusión de Pauli

Considerando el mismo sistema unidimensional, pero con más electrones, en donde los **números cuánticos** que pueden variar son  $n$  y  $m_s$ :

- Los **niveles de energía** se van poblando desde el más **bajo**.
- Se comienza con  $m_s = +1/2$  en **ese nivel**, y se sigue con  $m_s = -1/2$  en el **mismo nivel**.
- Al **saturarse** el nivel, se pasa al siguiente y se **repite** el proceso hasta que se **terminen** los electrones disponibles.

- Un nivel completo es uno **ocupado** y uno que sólo tiene un electrón está **parcialmente ocupado**.

Por ejemplo, para un sistema de 6 electrones ( $e^-$ ), el estado base será:

$n$	$m_s$	Ocp. $n$	Total $e^-$
1	$+1/2$	1	1
1	$-1/2$	2	2
2	$+1/2$	1	3
2	$-1/2$	2	4
3	$+1/2$	1	5
3	$-1/2$	2	6

# Momento angular, espín del electrón

## Átomos en la tabla periódica

- Los **números cuánticos**,  $n, l, m_l, m_s$ , identifican a los **estados cuánticos** de electrones individuales en un sist. multi-electrónico.
- Todos los estados con el mismo  $n$  forman una **capa electrónica**.
- Todos los estados con el mismo valor de  $n$  y  $l$  forman una **subcapa**.
- Para cada  $n$ , existen  $n$  diferentes valores de  $l$ , desde 0 hasta  $n - 1$ , siendo que cada  $l$  se le asigna una letra:

$$l = 0 \rightarrow s, \quad l = 1 \rightarrow p, \quad l = 2 \rightarrow d, \quad l = 3 \rightarrow f, \dots$$

- Para cada  $l$ , existen  $2l + 1$  posibles valores de  $m_l$ , desde  $-l$  hasta  $l$ .
- Para cada  $m_l$ , existen dos posibles valores de  $m_s$ :  $+1/2$  y  $-1/2$ .
- Por tanto, existen  $2(2l + 1)$  diferentes valores en una **subcapa**.
- Con lo cual, se obtienen  $2n^2$  estados en total para una cierta **capa electrónica**  $n$ .

# Momento angular, espín del electrón

Átomos en la tabla periódica

## Neón (Ne)

- Ne tiene **10** electrones en su estructura electrónica,

$$n = 1 \Rightarrow l = 0 = s \ \& \ m_l = 0 \ \text{con} \ m_s = +1/2, -1/2, \\ \therefore \text{capa cerrada } 1s^2.$$

$$n = 2 \Rightarrow l = 0 = s \ \& \ m_l = 0 \ \text{con} \ m_s = +1/2, -1/2, \\ \therefore \text{capa cerrada } 2s^2.$$

$$n = 2 \Rightarrow l = 1 = p \ \& \ m_l = -1, 0, 1 \ \text{con} \ m_s = +1/2, -1/2, \\ \therefore \text{capa cerrada } 2p^6.$$

- Por tanto, Ne tiene de **conf. electrónica**:  $1s^2 2s^2 2p^6$ .
- En **capas cerradas**, las proyecciones en  $z$  del momento orbital angular y de espín angular se **cancelan** cada una entre ellas.
- Su densidad de probabilidad es **esféricamente** simétrica.
- Al no tener electrones libres, el Ne es químicamente **inerte**.

# Momento angular, espín del electrón

Átomos en la tabla periódica

## Sodio (Na)

- Na tiene **11** electrones en su estructura electrónica.
- 10 electrones de Na permanecen en **capas cerradas** ( $1s^2 2s^2 2p^6$ ), con un momento angular **cero**, mientras que:

$$n = 3 \Rightarrow l = 0 = s \quad \& \quad m_l = 0 \quad \text{con} \quad m_s = +1/2,$$

$\therefore$  capa abierta  $3s^1$ .

- Por tanto, Na tiene de **conf. electrónica**:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ .
- El **momento angular** de Na se debe al electrón en  $3s$ , de naturaleza puramente de **espín**.
- Al tener un electrón libre, el Na es químicamente **activo**.

# Momento angular, espín del electrón

Átomos en la tabla periódica

## Cloro (Cl)

- Cl tiene **17** electrones en su estructura electrónica.
- 10 electrones de Na permanecen en **capas cerradas** ( $1s^2 2s^2 2p^6$ ), con **7** por distribuir:

$$n = 3 \Rightarrow l = 0 = s \quad \& \quad m_l = 0 \quad \text{con } m_s = +1/2, -1/2,$$

$$\therefore \text{capa cerrada } 3s^2,$$

$$n = 3 \Rightarrow l = 1 = p \quad \& \quad m_l = -1, 0, 1 \quad \text{con } m_s = +1/2, -1/2$$

$$\therefore \text{capa abierta } 3p^5.$$

- Por tanto, Cl tiene de **conf. electrónica**:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ .
- El Cl presenta una **vacancia** en donde se puede acomodar un electrón libre.
- Al tener una vacancia libre, el Cl es químicamente **activo**.

# Momento angular, espín del electrón

Átomos en la tabla periódica

## Hierro (Fe)

- Fe tiene **26** electrones en su estructura electrónica.
- 18 electrones de Na permanecen en **capas cerradas** ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ ), con **8** por distribuir:

$$n = 3 \Rightarrow l = 2 = d \ \& \ m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \ \text{con} \ m_s = +1/2, -1/2,$$

$$\therefore \text{capa abierta } 3d^6,$$

$$n = 4 \Rightarrow l = 0 = s \ \& \ m_l = 0 \ \text{con} \ m_s = +1/2, -1/2,$$

$$\therefore \text{capa abierta } 4s^2,$$

- Por tanto, Fe tiene de **conf. electrónica**:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ .
- La conf. electrónica con  $3d^6 4s^2$  prevalece, ya que presenta **menor energía** en comparación con la distribución  $3d^8$ .