

QUIMICA FISICA II. CURSO 2003-2004, GRUPOS A Y B. SERIE 05.

Teoría atómica: átomos multielectrónicos

- Muestra que los determinantes $|1s\bar{1}s|$ y $|1s\bar{1}s2s|$ son funciones propias del operador $\hat{S}_z = \sum_i \hat{s}_{zi}$.
- Razona, empleando la aproximación orbital como guía, qué magnitud de cada una de estas parejas es mayor (en caso de que alguna de ellas lo sea): (a) la energía del estado fundamental del He o la del Li^+ ; (b) el potencial de ionización del K o el del K^+ ; (c) la longitud de onda de absorción máxima que se puede obtener partiendo de los estados fundamentales del H y del He^+ ; (d) el potencial de ionización del Cl^- o la afinidad electrónica del Cl.
- Busca en http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd los niveles de menor energía del átomo neutro de Li y empléalos para encontrar transiciones electrónicas que puedan caer en la región del visible (aproximadamente $14\text{--}23 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$) y cumplan las reglas de selección $\Delta S = 0$, $\Delta J = 0, \pm 1$ y $\Delta L = 0, \pm 1$. Trata de interpretar con estos datos el espectro que encontrarás en <http://achilles.net/~jtalbot/data/elements/>.
- Encuentra los multipletes y niveles correspondientes a la configuración electrónica fundamental del átomo de carbono, y emplea las reglas de Hund para predecir su orden de energías. Busca en http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd los 10 primeros niveles de energía, y comprueba si tu predicción es correcta. Observa también el diferente orden de magnitud de las separaciones entre distintos niveles, distintos términos, y distintas configuraciones electrónicas.
- Encuentra los multipletes y niveles, identificando el fundamental, para la configuración excitada del átomo de He $1s2s$.
- Empleando la siguiente tabla y las reglas de Hund, determina cuáles son los niveles fundamentales de los átomos neutros del primer y segundo periodos ($Z = 1 - 10$). Calcula la degeneración de cada uno de ellos, e identifica los correspondientes a estados paramagnéticos.

Configuración	Términos	Configuración	Términos
$ns^2/np^6/nd^{10}/\dots$	1S	$nl^1/nl^{(2(2l+1)-1)}$	2L
np^2/np^4	$^1S, ^1D, ^3P$	np^3	$^2P, ^2D, ^4S$
nd^2/nd^8	$^1S, ^1D, ^1G, ^3P, ^3F$	nd^3/nd^7	$^2P, ^2D(2), ^2F, ^2G, ^2H, ^4P, ^4F$
nd^4/nd^6	$^1S(2), ^1D(2), ^1F,$ $^1G(2), ^1I, ^3P(2), ^3D,$ $^3F(2), ^3G, ^3H, ^5D$	nd^5	$^2S, ^2P, ^2D(3), ^2F(2), ^2G(2),$ $^2H, ^2I, ^4P, ^4D, ^4F, ^4G, ^6S$

Li				C			
Configuración	Término	J	E/cm^{-1}	Configuración	Término	J	E/cm^{-1}
$1s^22s$	2S	1/2	0.00	$2s^22p^2$	3P	0	0.00
$1s^22p$	2P	1/2	14903.66			1	16.40
		3/2	14904.00			2	43.40
$1s^23s$	2S	1/2	27206.12		1D	2	10192.63
$1s^23p$	2P	1/2	30925.38		1S	0	21648.01
		3/2	30925.38	$2s2p^3$	5S	2	33735.20
$1s^23d$	2D	3/2	31283.08	$2s^22p3s$	3P	0	60333.43
		5/2	31283.12			1	60352.63
$1s^24s$	2S	1/2	35012.06			2	60393.14
$1s^24p$	2P	1/2	36469.55		1P	1	61981.82
		3/2	36469.55				