

Solución EXAMEN #2

Física atómica, molecular y materia condensada

1. Encuentra los valores de los momentos angulares S, L y J de los siguientes estados: 3S_1 , $^2P_{3/2}$, 3D_2 , 5F_5 y $^6H_{5/2}$.

$^A B_c = ^{2S+1} L_J$	$S=(A-1)/2$	L	J=c
3S_1	$(3-1)/2=1$	S=0	1
$^2P_{3/2}$	$(2-1)/2=1/2$	P=1	3/2
3D_2	$(3-1)/2=1$	D=2	2
5F_5	$(5-1)/2=2$	F=3	5
$^6H_{5/2}$	$(6-1)/2=5/2$	H=5	5/2

3. ¿Cuáles son las transiciones permitidas y cuántas y cuales líneas espectrales se observan en las transiciones a) $^1F \rightarrow ^1D$ b) $^2D_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$, c) $^3P \rightarrow ^3S$.

a) $^1F \rightarrow ^1D$

1F y 1D $S=(1-1)/2 \rightarrow S=0$. Por lo tanto se presenta **efecto Zeeman Normal**.

Reglas de Selección

$F(L=3) \rightarrow D(L=2)$, $\Delta L=1 \rightarrow$ Permitida

como $S=0$, entonces $J=L$, $\Delta J=1 \rightarrow$ Permitida

$\Delta M_L=0, \pm 1$

1F $L=3$, $M_L=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$

$$^1D \quad L=2, M_L=0, \pm 1, \pm 2$$

Transiciones permitidas

	Transiciones Permitidas	Líneas espectrales correspondientes $\varepsilon + \Delta M_L \mu_B \mathbf{B}$ donde ε es la energía correspondiente a F no degenerada
$\Delta M_L = 1$	$^1F(M_L=1) \rightarrow ^1D(M_L=2)$ $^1F(M_L=0) \rightarrow ^1D(M_L=1)$ $^1F(M_L=-1) \rightarrow ^1D(M_L=0)$ $^1F(M_L=-2) \rightarrow ^1D(M_L=-1)$ $^1F(M_L=-3) \rightarrow ^1D(M_L=-2)$	Un grupo de 5 líneas <i>coincidentes</i> Que ocurren a $\varepsilon + \mu_B \mathbf{B}$
$\Delta M_L = 0$	$^1F(M_L=2) \rightarrow ^1D(M_L=2)$ $^1F(M_L=1) \rightarrow ^1D(M_L=1)$ $^1F(M_L=0) \rightarrow ^1D(M_L=0)$ $^1F(M_L=-1) \rightarrow ^1D(M_L=-1)$ $^1F(M_L=-2) \rightarrow ^1D(M_L=-2)$	Un grupo de 5 líneas <i>coincidentes</i> Que ocurren a ε
$\Delta M_L = -1$	$^1F(M_L=3) \rightarrow ^1D(M_L=2)$ $^1F(M_L=2) \rightarrow ^1D(M_L=1)$ $^1F(M_L=1) \rightarrow ^1D(M_L=0)$ $^1F(M_L=0) \rightarrow ^1D(M_L=-1)$ $^1F(M_L=-1) \rightarrow ^1D(M_L=-2)$	Un grupo de 5 líneas <i>coincidentes</i> Que ocurren a $\varepsilon - \mu_B \mathbf{B}$

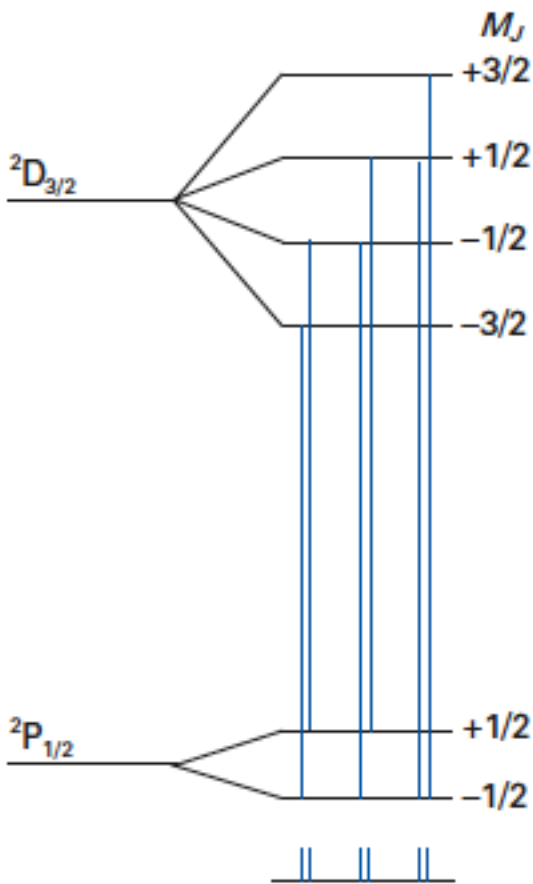
b) $^2D_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ $S=1/2$, por lo que se presenta **efecto Zeeman Anómalo**

$^2D_{3/2}$, $J=3/2$, $M_J=\pm 3/2, \pm 1/2$, $L=2$ factor de lande $g_{3/2}(2,1/2)=4/5$

$^2P_{1/2}$, $J=1/2$, $M_J=\pm 1/2$, $L=1$ factor de lande $g_{1/2}(1,1/2)=2/3$

Entonces, separaciones para $^2D_{3/2}$ son de $4/5\mu_B\mathbf{B}$ y para $^2P_{1/2}$ de $2/3\mu_B\mathbf{B}$

Ver Ejemplo 7.7 del libro



	Transiciones Permitidas
$\Delta M_J=1$	$^2D_{3/2}(M_L=-1/2) \rightarrow ^2P_{1/2}(M_L=1/2)$ $^2D_{3/2}(M_L=-3/2) \rightarrow ^2P_{1/2}(M_L=-1/2)$
$\Delta M_J=0$	$^2D_{3/2}(M_L=1/2) \rightarrow ^2P_{1/2}(M_L=1/2)$ $^2D_{3/2}(M_L=-1/2) \rightarrow ^2P_{1/2}(M_L=-1/2)$
$\Delta M_J=-1$	$^2D_{3/2}(M_L=3/2) \rightarrow ^2P_{1/2}(M_L=1/2)$ $^2D_{3/2}(M_L=1/2) \rightarrow ^2P_{1/2}(M_L=-1/2)$

Las transiciones permitidas forman un patron de 6 líneas en dobletes, un doblete por cada ΔM_J

c) $^3P \rightarrow ^3S$

$S=1$, por lo tanto se presenta el efecto Zeeman Anómalo

Para 3P tenemos que $L=1$, $S=1$, dado que $J=L+S$, $L+S-1$, ... $|L-S|$

$J=2,1,0$, por lo tanto tenemos 3 estados:

3P_2 con $M_J=0,\pm 1, \pm 2$, con separaciones = $g_2(1,1)\mu_B \mathbf{B}$

3P_1 con $M_J=0,\pm 1$, con separaciones = $g_1(1,1)\mu_B \mathbf{B}$

3P_0 con $M_J=0$

Para 3S tenemos que $L=0$, $S=1$, por lo que $L+S=|L-S|=1$, por lo tanto tenemos un estado 3S_1 con $M_J=0,\pm 1$, con separaciones = $g_1(0,1)\mu_B \mathbf{B}$

Por lo tanto tenemos transiciones de los estados

$^3P_2 \rightarrow ^3S_1$, $^3P_1 \rightarrow ^3S_1$, $^3P_0 \rightarrow ^3S_1$

Estados y líneas	ΔM_L	Transiciones Permitidas
$^3P_2 \rightarrow ^3S_1$ Líneas espectrales: 3 tripletes, uno para cada ΔM_L	1	$^3P_2 (M_L=0) \rightarrow ^3S_1 (M_L=1)$ $^3P_2 (M_L=-1) \rightarrow ^3S_1 (M_L=0)$ $^3P_2 (M_L=-2) \rightarrow ^3S_1 (M_L=-1)$
	0	$^3P_2 (M_L=1) \rightarrow ^3S_1 (M_L=1)$ $^3P_2 (M_L=0) \rightarrow ^3S_1 (M_L=0)$ $^3P_2 (M_L=-1) \rightarrow ^3S_1 (M_L=-1)$
	-1	$^3P_2 (M_L=2) \rightarrow ^3S_1 (M_L=1)$ $^3P_2 (M_L=1) \rightarrow ^3S_1 (M_L=0)$ $^3P_2 (M_L=0) \rightarrow ^3S_1 (M_L=-1)$
$^3P_1 \rightarrow ^3S_1$	1	$^3P_1 (M_L=0) \rightarrow ^3S_1 (M_L=1)$

${}^3P_2 \rightarrow {}^3S_1$ Líneas espectrales: 2 dobletes correspondientes a $\Delta M_L = \pm 1$, un triplete para $\Delta M_L = 0$		${}^3P_1 (M_L = -1) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 0)$
	0	${}^3P_1 (M_L = 1) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 1)$ ${}^3P_1 (M_L = 0) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 0)$ ${}^3P_1 (M_L = -1) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = -1)$
	-1	${}^3P_1 (M_L = 1) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 0)$ ${}^3P_1 (M_L = 0) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = -1)$
${}^3P_0 \rightarrow {}^3S_1$ Líneas espectrales: 3 correspondientes a cada ΔM_L	1	${}^3P_0 (M_L = 0) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 1)$
	0	${}^3P_0 (M_L = 0) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 0)$
	-1	${}^3P_1 (M_L = 2) \rightarrow {}^3S_1 (M_L = 1)$

4. Para la molécula H^{+2} evalúa la densidad de probabilidad de un electrón en el punto medio del enlace $R_0/2$ y grafícala en función de la separación entre iones R. Calcula la diferencia entre densidades,

$$\rho_{\pm} = \psi_{\pm}^2 - \frac{1}{2}(\phi^2(r_a) + \phi^2(r_b)), \quad (1)$$

a lo largo de la línea que une los 2 iones. Discute el resultado.

a)

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{[2(1 \pm S)]^{1/2}} (\phi(r_a) \pm \phi(r_b)) \quad (2) \text{ donde S es la integral de traslape}$$

$$S = \langle \phi_A | \phi_B \rangle = \left[1 + \frac{ZR}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{ZR}{a_0} \right)^2 \right] e^{-ZR/a_0} \quad (3)$$

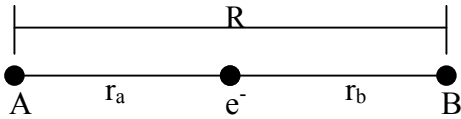
Por lo que la densidad de la probabilidad de un electron es:

$$\psi_{\pm}^2 = \frac{1}{2(1 \pm S)} \left(\phi^2(r_a) + \phi^2(r_b) \pm 2\phi(r_a)\phi(r_b) \right), \quad (4)$$

para el estado 1S tenemos que: $\phi(r_a) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-Zr_a/a_0}$ y $\phi(r_b) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-Zr_b/a_0}$ (5)

sustituyendo las ecs anteriores en (4) tenemos:

$$\psi_{\pm}^2 = \frac{1}{2(1 \pm S)} \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right) \left[e^{-2Zr_a/a_0} + e^{-2Zr_b/a_0} \pm 2e^{-Z(r_a+r_b)/a_0} \right] \quad (6)$$



en el punto medio del enlace tenemos que $r_a = r_b = R/2$

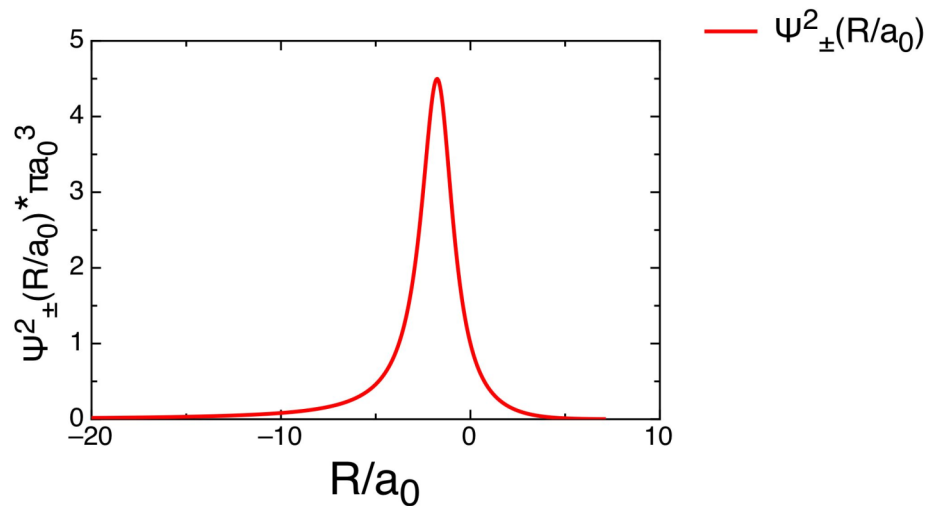
Sustituyendo r_a y r_b en 5 tenemos:

$$\psi_{\pm}^2 = \frac{1}{2(1 \pm S)} \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right) \left[e^{-2Zr_a/a_0} + e^{-2Zr_b/a_0} \pm 2e^{-Z(r_a+r_b)/a_0} \right] \quad (7)$$

$$\psi_{\pm}^2 = \frac{1}{2(1 \pm S)} \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right) \left[2e^{-R/a_0} \pm 2e^{-R/a_0} \right] \quad (8)$$

$$\psi_{+}^2 = \frac{2}{(1+S)} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right) \left[e^{-2Zr_a/a_0} \right], \quad \psi_{-}^2 = 0 \quad (9)$$

Graficando ψ_{+}^2



b)

$$\rho_{\pm} = \psi_{\pm}^2 - \frac{1}{2}(\phi^2(r_a) + \phi^2(r_b)),$$

A lo largo de la línea que une a los puntos tenemos $r_a + r_b = R_0$, $Z=1$

Sustituyendo $\psi_{\pm}^2$ del inciso anterior (ec. 4) :

$$\rho_{\pm} = \frac{1}{2(1 \pm S)} \{ \phi^2(r_a) + \phi^2(r_b) \pm 2\phi(r_a)\phi(r_b) \} - \frac{1}{2} \{ \phi^2(r_a) + \phi^2(r_b) \}$$

$$\rho_{\pm} = \rho_{\pm} = \frac{1}{2(1 \pm S)} \{ \mp S [\phi^2(r_a) + \phi^2(r_b)] \pm 2\phi(r_a)\phi(r_b) \}$$

$$\rho_{\pm} = \frac{1}{1 \pm S} \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right) \left\{ \mp \frac{S}{2} [e^{-2r_a/a_0} + e^{-2r_b/a_0}] \pm e^{-Z(r_a+r_b)/a_0} \right\}$$

$$\rho_{+} = \frac{1}{1+S} \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right) \left\{ e^{-Z(r_a+r_b)/a_0} - \frac{S}{2} [e^{-2r_a/a_0} + e^{-2r_b/a_0}] \right\}$$

$$\rho_{-} = -\frac{1+S}{1-S} \rho_{+}$$

La diferencia de densidad representa la modificación de la distribución del electrón causada por solapamiento (constructivo o destructivo).