

## TEMA 1: ORIGEN Y TIPOS DE MAGNETISMO

Tema 1a: Aspectos previos

Tema 1b : Origen del Momento Magnético

Tema 1c: Magnetismo de electrones localizados: Diamagnetismo orbital y  
Paramagnetismo de Curie

Tema 1d: Magnetismo Intenso: Canje y orden magnético

Tema 1e: Magnetismo de electrones deslocalizados

---

### Tema 1a:

- La mecánica cuántica
- Operadores
- La ecuación de Schrödinger
- Estados electrónicos en un átomo
- Notación

## ANTECEDENTES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

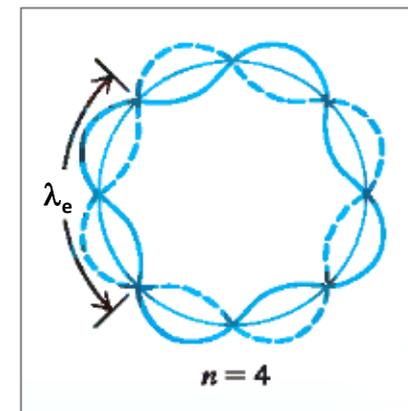
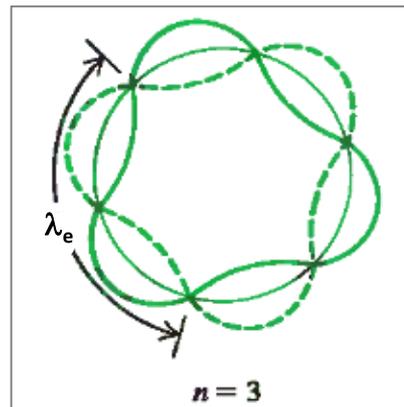
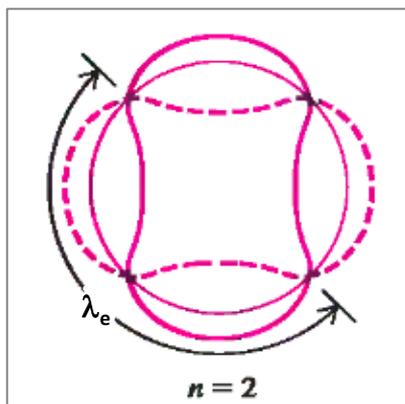
- **J. J. Thomson** (1887)  $\Rightarrow$  descubre el electrón.
- **Louis de Broglie** (1924)  $\Rightarrow$  Dualidad onda-corpúsculo para la materia:

$$\lambda_e = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v_e}$$

- Postulado de **Bohr** (1913)  $\Rightarrow$  El momento angular del  $e^-$  está cuantizado en múltiplos de  $\hbar$ :

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = n\hbar$$

- La hipótesis de De Broglie (1924) junto a la cuantización del momento angular  $\Rightarrow$  Las órbitas electrónicas son estados estacionarios con un  $n^\circ$  entero de  $\lambda_e$ .



## LA MECÁNICA CUÁNTICA

- La mecánica cuántica debida a Schrödinger representa al  $e^-$  con la función de onda  $\Psi(r)$ .
- Significado físico de  $\Psi(r) \Rightarrow$  La probabilidad de encontrar al electrón en un volumen  $\delta^3r$  es  $\Psi(r) \Psi^*(r) \delta^3r$ .
- La ecuación básica de **Schrödinger** (1925): juega el papel de las leyes de Newton y de la conservación de la energía en Mecánica clásica:

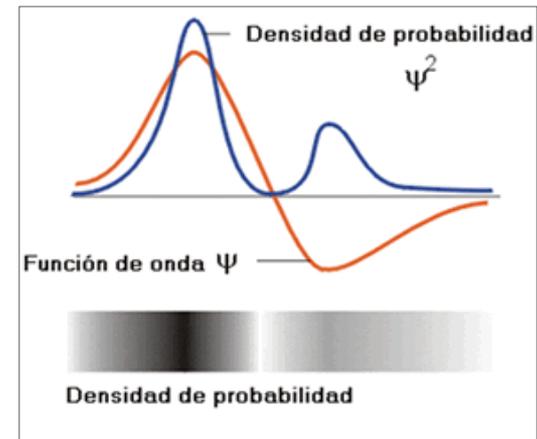
$$H\Psi = \varepsilon\Psi$$

**H: Operador Hamiltoniano.**

$\Psi$ : **autofunciones** o **autoestados** o estados estacionarios.

(son las soluciones del hamiltoniano).

$\varepsilon$ : **autovalores**. Son los niveles de energía.



## LA MECÁNICA CUÁNTICA

- Los observables físicos se representan por operadores diferenciales,  $\hat{O}$  (las variables físicas adquieren la forma de operadores):

- Momento lineal:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla = i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right]$$

- Energía cinética:

$$E_C = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \vec{i} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \vec{j} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{k} \right]$$

- Momento angular:

$$\hat{\mathbf{l}} = \vec{r} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left[ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \vec{i} + \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \vec{j} + \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \vec{k} \right]$$

- Los valores permitidos de un observable físico son los **autovalores** y vienen dados por la ecuación:

$$\hat{O}\psi_i = \lambda_i \psi_i \quad \lambda_i: \text{autovalores}$$

- $\lambda_i$  se calculan resolviendo el determinante:

$$|\hat{O} - \lambda_i I| = 0 \quad \text{donde } I \text{ es la matriz identidad.}$$

## LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: Ej. OSCILADOR ARMÓNICO

- La energía se convierte en el operador Hamiltoniano:

$$H\Psi = \varepsilon\Psi$$

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

Conservación **cuántica** de la energía en un oscilador armónico

$$E = E_C + U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

Conservación **clásica** de la energía en un oscilador armónico

## ESTADOS ELECTRÓNICOS EN UN ÁTOMO

- El tratamiento mecánico-cuántico de los átomos mediante la ec. de Schrödinger permite conocer los estados que pueden ser ocupados por los  $e^-$ .
- Los niveles electrónicos o funciones de onda de **un solo**  $e^-$  están caracterizados por 4 números cuánticos,  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$  y  $m_s$ :

$$|n, \ell, m_\ell, m_s\rangle$$

- **Nº cuántico principal:**  $n=1, 2, 3, \dots$  (capas K:  $n=1$ , L:  $n=2$ , M:  $n=3, \dots$ )
- **Nº cuántico del momento angular orbital o nº cuántico orbital:**  
 $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$  (orbitales s:  $\ell=0$ ; p:  $\ell=1$ ; d:  $\ell=2$ ; f:  $\ell=3; \dots$ )
- **Nº cuántico magnético :**  $m_\ell = -\ell, -(\ell-1), -(\ell-2), \dots, 0, \dots, (\ell-2), (\ell-1), \ell$  ó  
 $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$ . Hay  $(2\ell + 1)$  valores de  $m_\ell$  para cada valor de  $\ell$ .
- **Nº cuántico de espín del  $e^-$  :**  $m_s = \pm \frac{1}{2}$

## ESTADOS ELECTRÓNICOS EN UN ÁTOMO

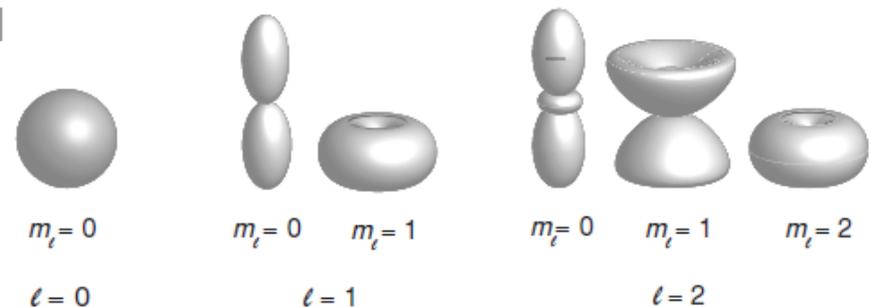
- Los 3 números cuánticos  $n$ ,  $\ell$  y  $m_\ell$  hacen referencia a la función de onda con una **distribución espacial de la carga electrónica** conocida como **orbital**.
- Cada orbital puede acomodar  $2 e^-$  con espines  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ .
- El **Principio de exclusión de Pauli** impide que  $2 e^-$  que están en el mismo estado tengan los mismos 4  $n^{\text{os}}$  cuánticos (dos  $e^-$  no pueden estar en el mismo estado cuántico porque son fermiones).

**Table 4.2.** The hydrogenic orbitals. The number of states per orbital is  $2(2\ell + 1)$

	$n$	$\ell$	$m_\ell$	$m_s$	States
1s	1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
2s	2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
2p	2	1	0, $\pm 1$	$\pm \frac{1}{2}$	6
3s	3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
3p	3	1	0, $\pm 1$	$\pm \frac{1}{2}$	6
3d	3	2	0, $\pm 1$ , $\pm 2$	$\pm \frac{1}{2}$	10
4s	4	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2
4p	4	1	0, $\pm 1$	$\pm \frac{1}{2}$	6
4d	4	2	0, $\pm 1$ , $\pm 2$	$\pm \frac{1}{2}$	10
4f	4	3	0, $\pm 1$ , $\pm 2$ , $\pm 3$	$\pm \frac{1}{2}$	14

**Figure 4.2**

Some hydrogenic orbitals specified by their  $\ell$  and  $m_\ell$  values.



# ESTADOS ELECTRÓNICOS EN UN ÁTOMO

- Las funciones de onda son autofunciones de los operadores de momento angular orbital  $\hat{l}^2$  y  $\hat{l}_z$ :

$$\hat{l}^2 |n, l, m_l, m_s\rangle = l(l + 1)\hbar^2 \quad \text{donde: } l(l + 1)\hbar^2 \text{ son los autovalores de } \hat{l}^2$$

$$\hat{l}_z |n, l, m_l, m_s\rangle = m_l \hbar \quad \text{donde: } m_l \hbar \text{ son los autovalores de } \hat{l}_z$$

- También lo son del momento angular de espín:

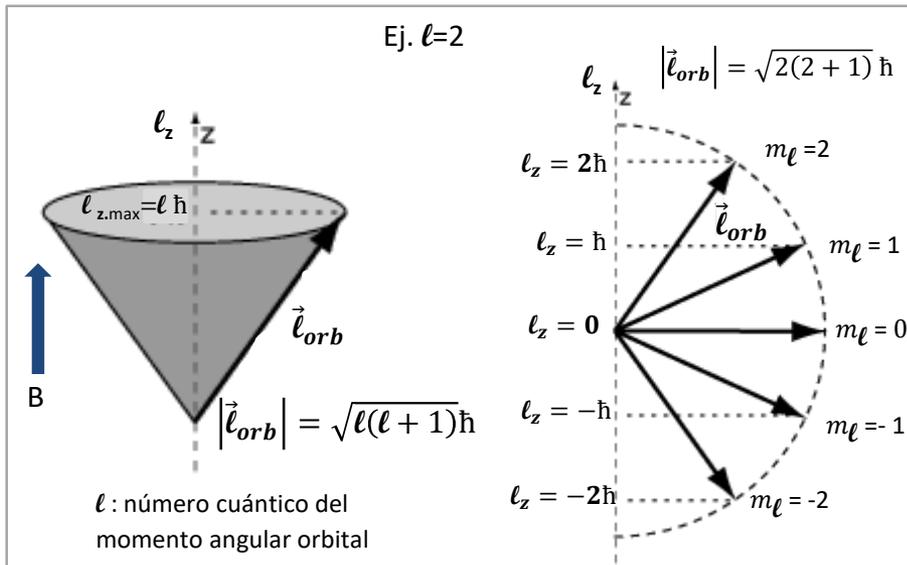
$$\hat{s}^2 |n, l, m_l, m_s\rangle = s(s + 1)\hbar^2 \quad \text{donde: } s(s + 1)\hbar^2 \text{ son los autovalores de } \hat{s}^2$$

$$\hat{s}_z |n, l, m_l, m_s\rangle = m_s \hbar \quad \text{donde: } m_s \hbar \text{ son los autovalores de } \hat{s}_z$$

**Momento angular orbital del electrón:**

$$|\vec{l}_{orb}\rangle = \sqrt{l(l + 1)} \hbar$$

$$l_z = m_l \hbar \quad l_{z,max} = l \hbar \quad (m_l = l)$$



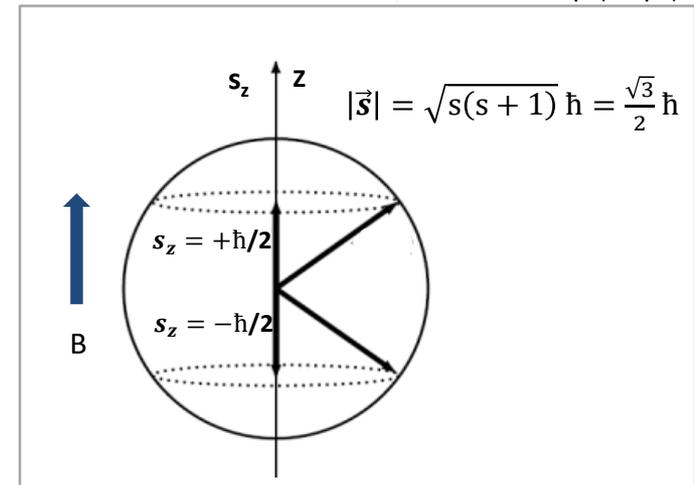
**Momento angular espín del electrón ( $s=1/2$ ):**

$$|\vec{s}\rangle = \sqrt{s(s + 1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

$$s_z = \pm \hbar/2 \quad (m_s = \pm 1/2)$$

Su nº cuántico de espín:  $s=1/2$  (para un e-)

con 2 estados de espín:  $m_s = \pm 1/2 \leftrightarrow |\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$



## NOTACIÓN QUE VAMOS A UTILIZAR

### Para el momento angular de un solo electrón:

- $\ell$  = nº cuántico del momento angular orbital.
- $s$  = nº cuántico del momento angular intrínseco o de espín. Para el electrón,  $s=1/2$ .
- $j$  = nº cuántico del momento angular total.

### Para el momento magnético de un solo electrón:

- $m_\ell$  = nº cuántico magnético del momento magnético orbital.
- $m_s$  = es el número cuántico magnético del momento magnético de espín.  $m_s = \pm 1/2$ .

### Para el momento angular de multielectrones o iones:

- $L$  = nº cuántico del momento angular orbital.
- $S$  = nº cuántico del momento angular intrínseco o de espín.
- $J$  = nº cuántico o del momento angular total.

Momento magnético:  $\mu$

Momento magnético orbital:  $\mu_{\text{orb}}$

Momento magnético de espín:  $\mu_{\text{espín}}$  o  $\mu_s$

Estos números cuánticos pueden ser enteros o fraccionarios excepto  $\ell$  y  $L$  que son siempre nº enteros.