

1.6 La estructura del átomo.

Aplicaremos la mecánica cuántica al estudio de la estructura atómica interna del átomo, constituido por un núcleo y un conjunto de electrones.

* El átomo de Hidrógeno.

Es el sistema de interés químico más sencillo a tratar (y uno de los pocos que pueden ser resueltos **analíticamente, en forma exacta**). Está integrado por un núcleo de carga $+Ze$ y un único electrón.

La energía potencial $V(r)$ del sistema corresponde en este caso a la **interacción** atractiva de Coulomb **electrón-núcleo**:

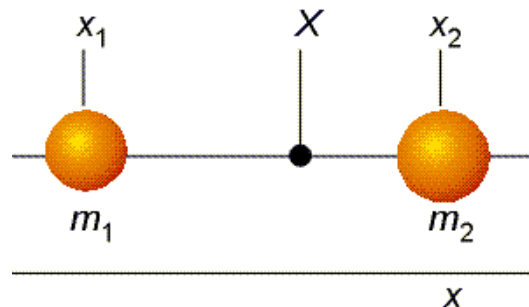
$$V(r) = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

donde r representa la distancia entre el electrón y el núcleo, e la carga del electrón y Z el número atómico.

La **ES** adopta la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_N} \nabla_N^2 \Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E \Psi$$

En primer instancia el cálculo parece complicado, pues la ecuación involucra dos partículas, y por tanto 6 coordenadas cartesianas. Sin embargo **podemos separar el movimiento** en dos ecuaciones:



una para el movimiento de traslación del átomo como un todo

una para el movimiento del electrón relativo al núcleo

- La primer ecuación corresponde al **movimiento de una partícula libre de masa m** (la masa del átomo) en el espacio. Ya se vio como tratar este problema en las clases previas.
- La segunda involucra 3 coordenadas, pero como la **energía potencial es independiente de los ángulos**, la ecuación será separable en una parte radial y otra angular.

La separación del movimiento interno

Una vez que aplicamos la separación mencionada, obtenemos una **ES** para el **movimiento interno** del electrón relativo al núcleo de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + \hat{V} \psi = E \psi$$

donde el **operador de energía potencial** V tiene la forma ya descrita y μ es la **masa reducida del sistema**

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_N}$$

cuyo valor (debido a que la masa del núcleo es casi 2000 veces mayor que la del electrón) **será muy cercano al de m_e** y puede entonces ser reemplazada por ella sin introducir un gran error.

Separaremos ahora la **función de onda del electrón** en sus componentes **radial y angular**.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Entonces la **ES** puede ser separada en dos ecuaciones **independientes**, una que se aplica a la **función radial $R(r)$** y otra que se aplica a la **función angular $Y(\theta, \phi)$**

Parte angular de la ES

Se resuelve en forma idéntica a la ya vista para el movimiento de una **partícula libre rotando alrededor de un punto central**.

Sus **soluciones** son los **armónicos esféricos** apenas estudiados sobre el final del punto 1.5, cuyos estados quedan especificados por los **números cuánticos ℓ y m_ℓ** .

Parte radial de la ES...

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2(rR)}{dr^2} + \hat{V}_{\text{eff}}(rR) = E(rR)$$

\hat{V}_{eff} representa el **operador asociado** a la **energía potencial efectiva** de la partícula definida como:

$$\hat{V}_{\text{eff}}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

La **función de onda radial** describe el movimiento de una **partícula representativa de masa μ** en una región monodimensional donde la energía potencial es \hat{V}_{eff} .



Sugerencia:

Intente llegar a la fórmula anterior empleando la expresión del operador Laplaciano en tres dimensiones en coordenadas esféricas polares aplicada a la función de onda RY .

...Parte radial de la ES: Analicemos V_{eff} :

- 1
$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$
 se origina en la **energía potencial electrostática de Coulomb del electrón en el campo atractivo del núcleo**;
- 2
$$\frac{\ell(\ell + 1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$
 fuerza centrífuga originada en el momento angular del electrón alrededor del núcleo.

Si $\ell=0$, el electrón tiene momento angular nulo y V_{eff} es sólo electrostático.

Si $\ell \neq 0$, el término centrífugo contribuye. Las soluciones con $\ell \neq 0$ serán muy diferentes en las cercanías del núcleo (donde domina el efecto repulsivo de la fuerza centrífuga) respecto al caso con $\ell=0$. Por otra parte a **valores grandes de r , donde predomina la contribución atractiva de Coulomb** las soluciones se volverán más similares entre sí.

Soluciones de la parte radial

Las únicas soluciones aceptables corresponden a **valores enteros del número cuántico n** .

La función de onda radial depende además de ℓ y será de la forma:

$$R = (\text{polinomio en } r) \times (\text{exponencial decrec. en } r)$$

Y ahora en términos de la variable adimensionada ρ

$$\rho = \frac{2Z}{n} \times \frac{r}{a_o}$$

$$a_o = \frac{4\pi\epsilon_o \hbar^2}{m_e e^2}$$

a_o = radio de Bohr.

Para un par de **numeros cuánticos n y ℓ** , la función de onda será:

$$R_{n,\ell} = N_{n,\ell} \rho^\ell L_{n,\ell}(\rho) e^{-\rho/2}$$

donde **$L(r)$ son polinomios asociados de Laguerre** y **N es una constante de normalización.**

Orbitales atómicos y sus energías.

Las funciones de onda que describen el **comportamiento de los electrones de los átomos hidrogenoides** son ejemplos de orbitales atómicos.

Un orbital es una función de onda monoeléctronica que describe la distribución de un electrón en un átomo.

Todos los orbitales hidrogenoides tienen la forma

$$\Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l} Y_{l,m_l}$$

donde **R** es una función radial e **Y** un armónico esférico.



Sugerencia:

Examine la dependencia de las funciones radiales con la distancia al núcleo r .

Notese que los orbitales s , adoptan un valor finito y no nulo en el núcleo.

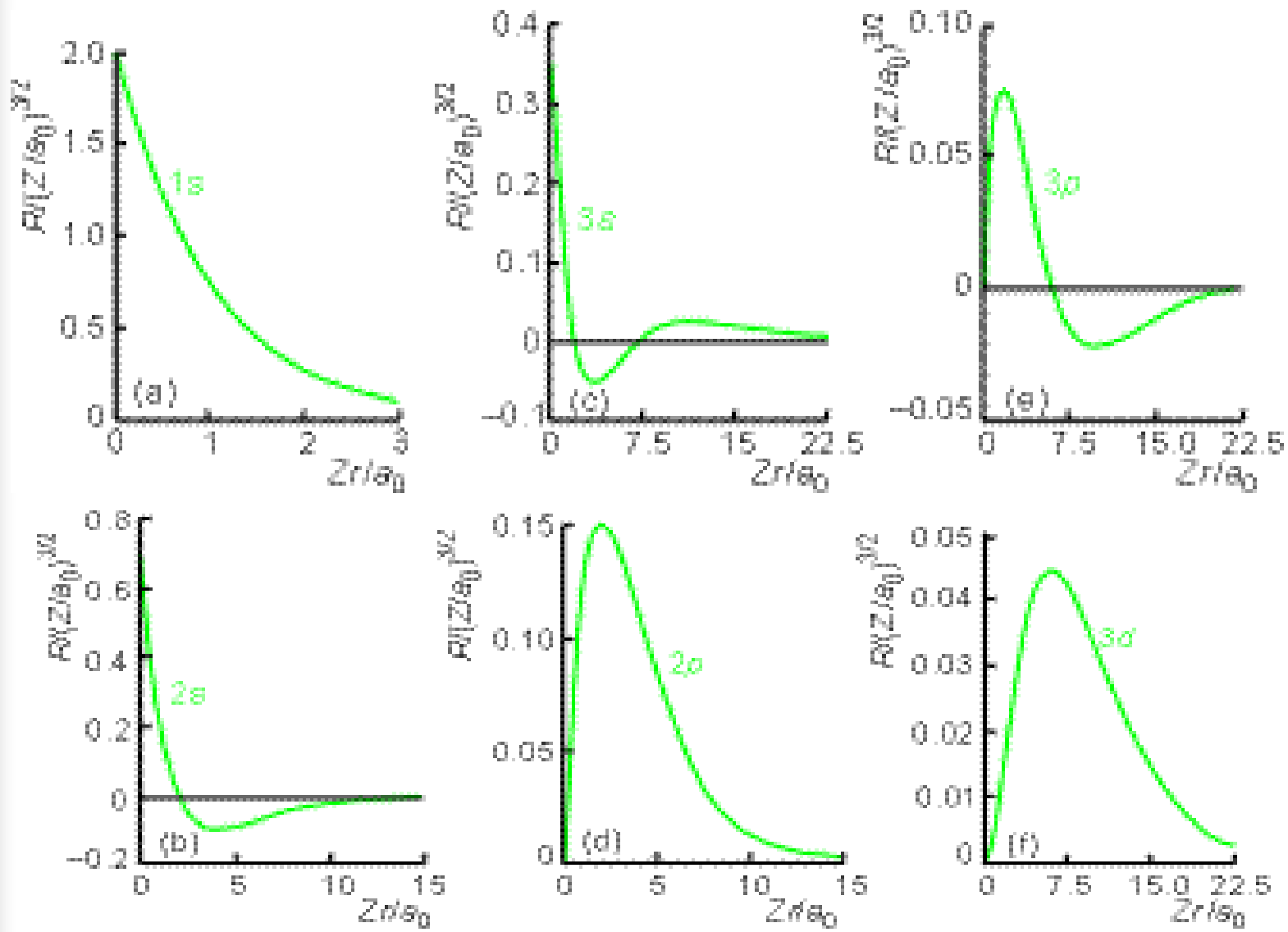
Forma de las funciones radiales.

Orbital n ℓ

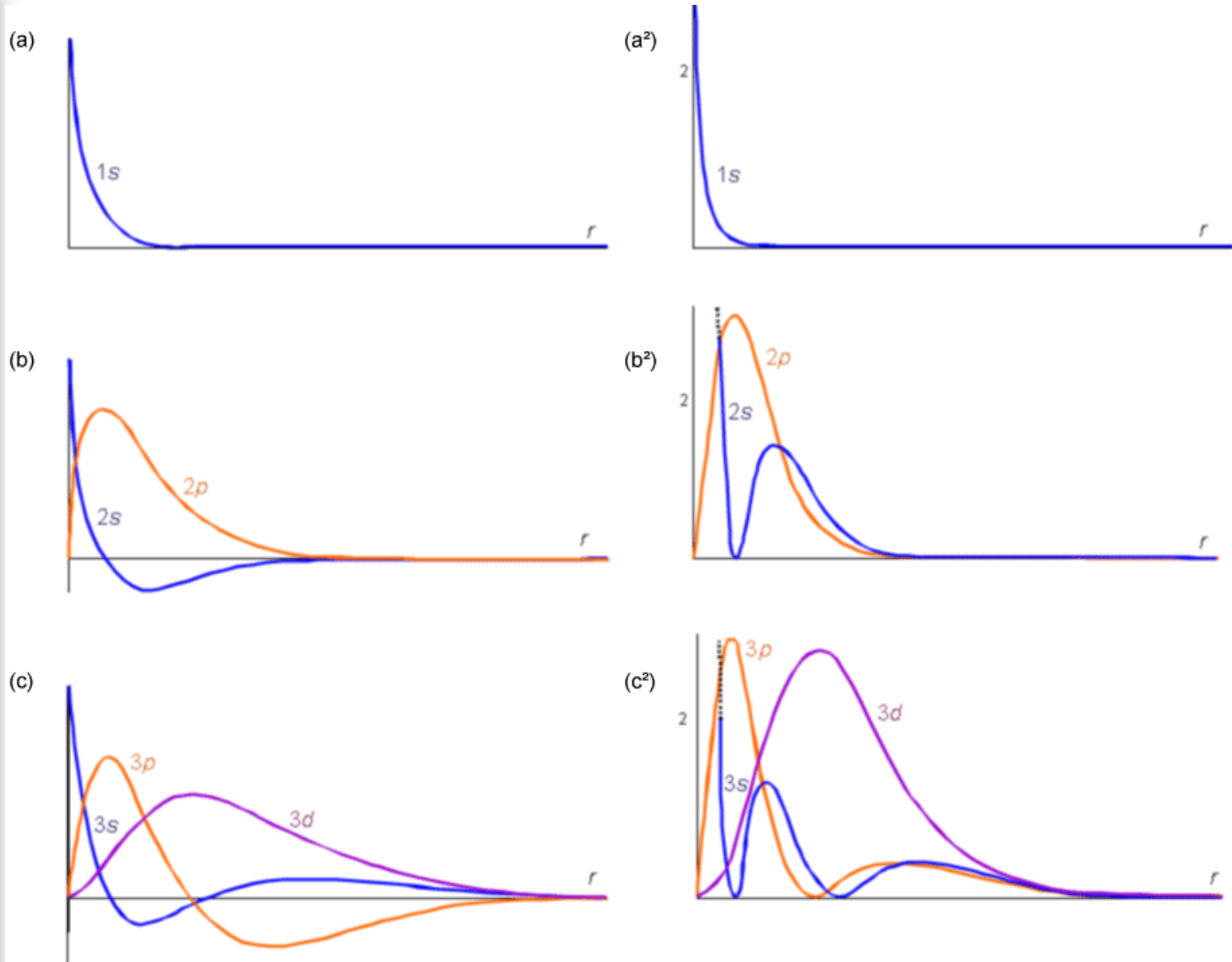
$R_{n,\ell}$

$1s$	1	0	$2\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-1/2\rho}$
$2s$	2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-1/2\rho}$
$2p$	2	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}\rho e^{-1/2\rho}$
$3s$	3	0	$\frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}(6-6\rho-\rho^2)e^{-1/2\rho}$
$3p$	3	1	$\frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}(4-\rho)e^{-1/2\rho}$
$3d$	3	2	$\frac{1}{9\sqrt{30}}\left(\frac{z}{a_o}\right)^{3/2}\rho^2 e^{-1/2\rho}$

FORMA DE LA FUNCION DE ONDA RADIAL Z=1



DENSIDAD DE PROBABILIDAD RADIAL



Los números cuánticos

- Un **orbital hidrogenoide** está caracterizado por **tres números cuánticos**: n , l y m_l .
- Cuando el **estado de un electrón** es descrito por una de estas **funciones de onda**, se dice que el **electrón ocupa ese orbital**.
- l y m_l provienen de la **solución de la parte angular del orbital**. Un electrón en un orbital de número cuántico l tiene **momento angular de magnitud**

$$\sqrt{l(l+1)} \hbar \quad \text{con } l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

el **número cuántico magnético** m_l , indicará que la **componente sobre el eje z del momento angular** vale

$$m_l \hbar \quad \text{con } m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

El tercer **número cuántico** n es llamado **número cuántico principal** y surge de la **solución de la parte radial**

Energía de un átomo Hidrogenoide

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \times \frac{1}{n^2}$$

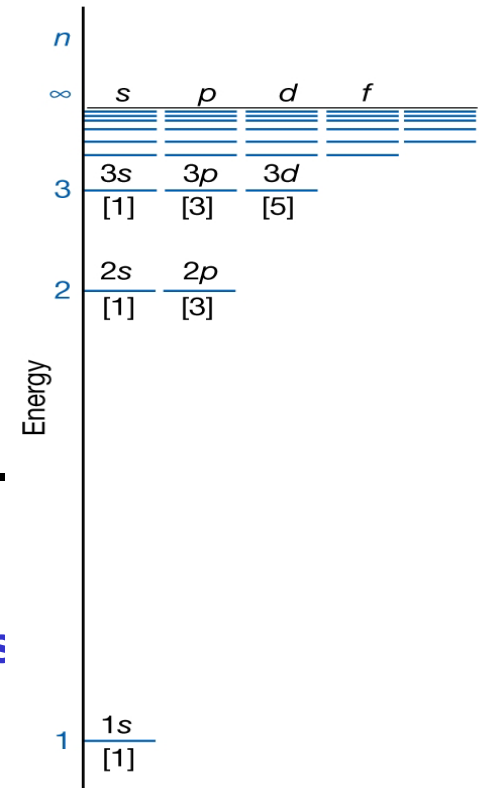
Con $n = 1, 2, \dots$

Si bien **tres números cuánticos** determinan la función de onda, **la energía sólo depende de uno** de ellos. Por tanto los niveles de energía serán **n^2 degenerados** para distintos valores de l y m_l de un **átomo hidrogenoide**.

Definición: el **estado fundamental** del

átomo es el de valor de energía más bajo del electrón y corresponde al estado en que éste está más fuertemente enlazado al núcleo.

- **Momento angular de spin:** es una propiedad intrínseca del electrón no incluida en el tratamiento no relativista. Definir completamente el estado del electrón implica incluir el número cuántico m_s en el tratamiento del átomo.



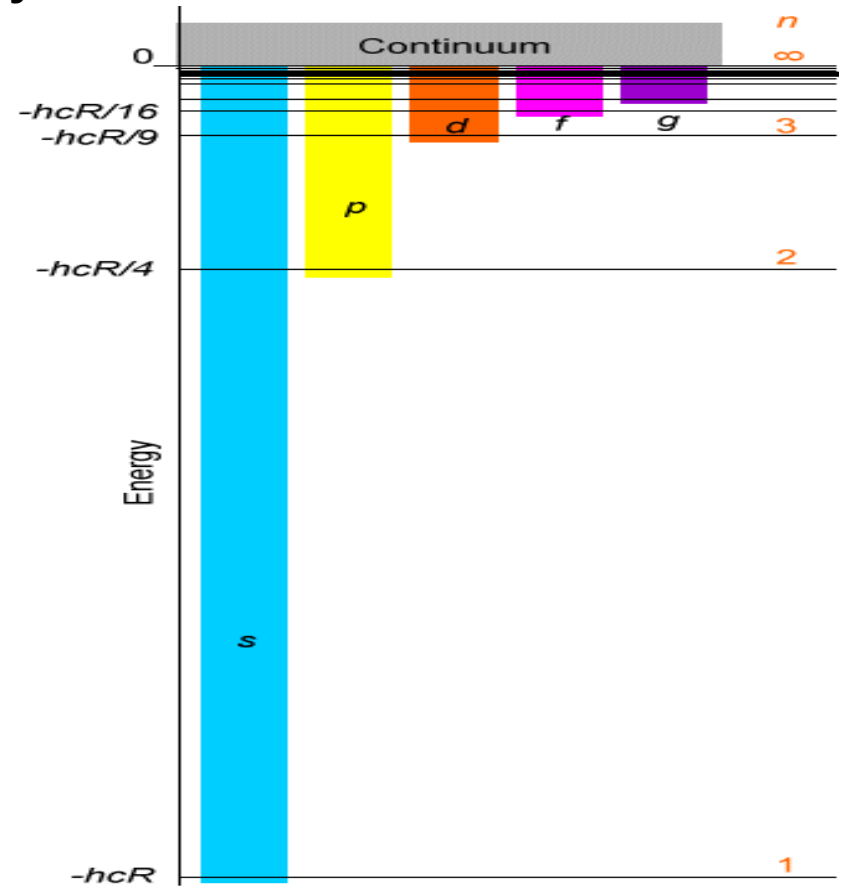
Estados ligados y no ligados

La separación entre niveles es respectivamente directa e inversamente proporcional a Z^2 y a n^2

Los estados más bajos obtenidos poseen energía negativa (son más estables que las partículas H^+ y e^- que componen el átomo separadas al infinito en reposo) y se conocen con el nombre de **estados ligados**.

Hay soluciones positivas de la ES que no están cuantizadas: forman un espectro continuo. Estos estados se denominan **no ligados** (corresponden a la extracción del electrón del átomo).

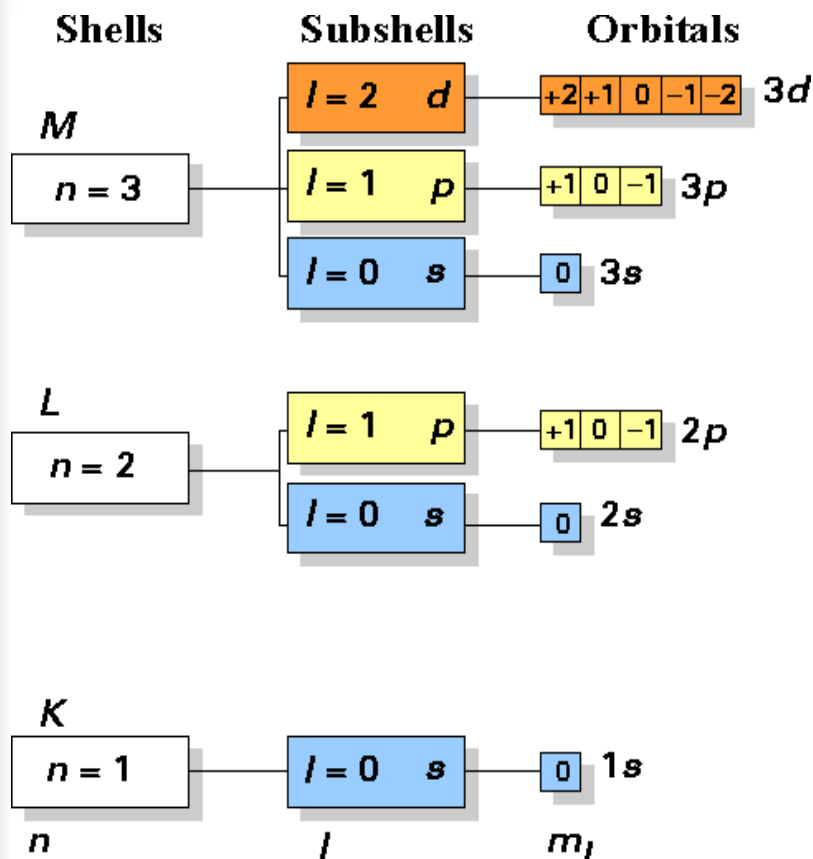
La **energía de ionización I** es la mínima energía requerida para extraer un electrón ligado del átomo desde su estado fundamental.



Concepto de capa y subcapa

Todos los orbitales con un **mismo valor de n** constituyen una **capa del átomo**. Usamos la siguiente nomenclatura para orbitales de una **capa**: $n = 1\ 2\ 3\ 4\ \dots$

K L M N



Orbitales con **igual valor de n** y **distinto l** forman **subcapas** distintas, llamadas s, p, d, etc

$l = 0\ 1\ 2\ 3\ \dots(n-1)$

s p d f ...

una capa de número cuántico principal n tendrá n subcapas.

Características de los orbitales del átomo de Hidrógeno.

Orbitales tipo s

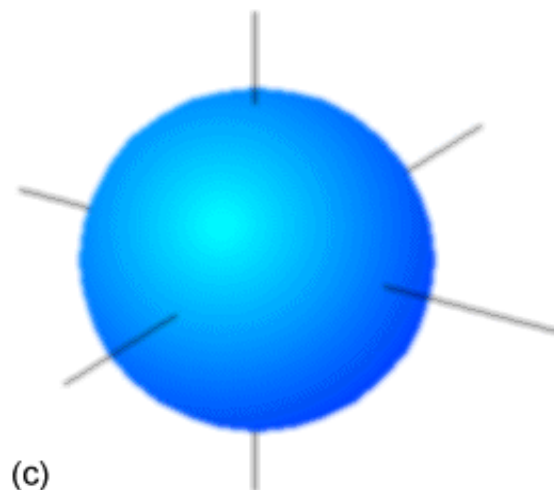
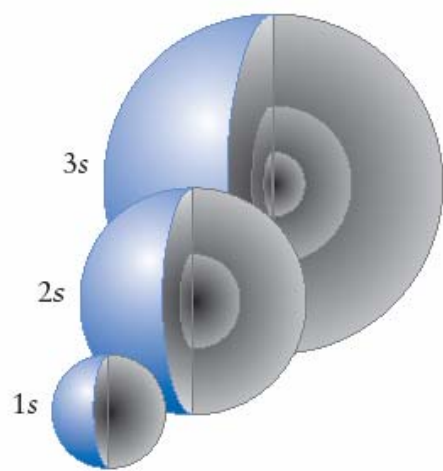
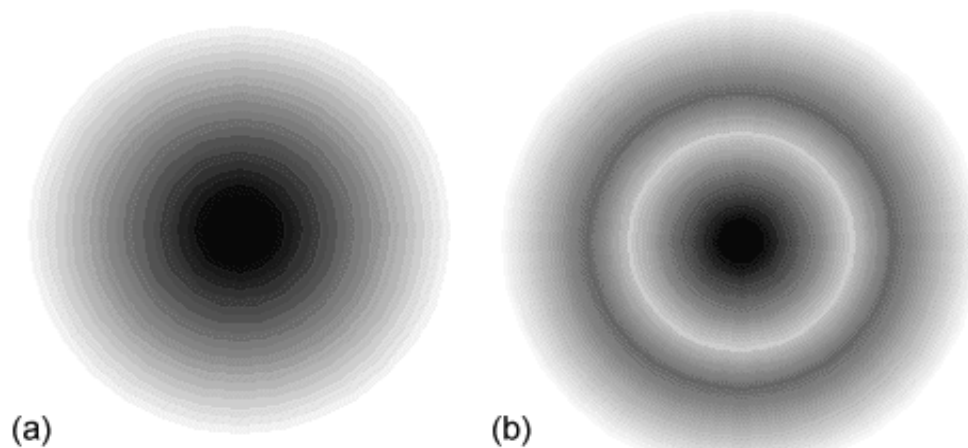
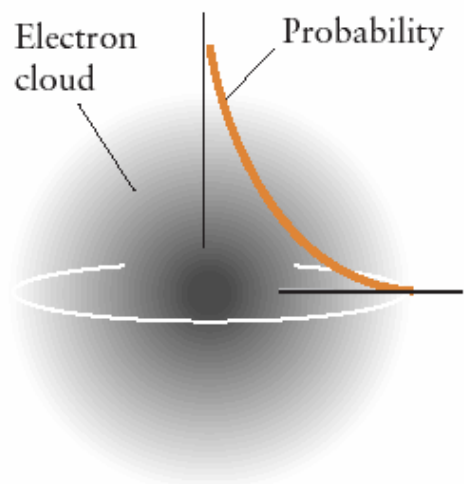
El estado fundamental tiene $n=1$, $l=0$, $m_l=0$. La forma de la **componente radial** del orbital es en este caso:

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-r/a_0}$$

La función total tiene **simetría esférica** (su valor es independiente de los ángulos) y **decae exponencialmente desde el núcleo** ($r=0$). La probabilidad más alta de hallar al electrón se encuentra en la cercanía del núcleo.

Existen diversas formas de representar la **densidad de probabilidad**. Una es por sombreado, donde una mayor densidad de puntos representa mayor probabilidad. La otra es utilizar superficies envolventes que encierran un cierto nivel de probabilidad (90% en general).

Para todos los orbitales de tipo s la **superficie que engloba el 90% de probabilidad de hallar al electrón es una esfera** como la mostrada en la figura (c). Un orbital **1s** (a) difiere de un **2s** (b) en la presencia de una esfera nodal en este último.



Los orbitales s tienen todos ellos simetría esférica, pero difieren entre sí en el número de nodos radiales.

Por ejemplo, el orbital 2s tiene nodos radiales donde el polinomio de Laguerre se anula:

$$L_{2,0} = 2 - \rho = 0 \quad \text{en} \quad \rho = 2$$
$$\Rightarrow \quad r = 2a_0$$

La energía de los orbitales s crece con n, debido a que la distancia promedio del electrón al núcleo aumenta al aumentar el nivel principal.



Sugerencia:

Examinar cual es el valor del radio promedio para un orbital 1s, y un orbital en general.

La función de distribución radial P

Es la **densidad de probabilidad radial** multiplicada por un elemento de volumen dr y da la probabilidad de hallar electrón dentro de un cascarón de radio r y espesor dr :

$$P = 4\pi r^2 \Psi^2$$

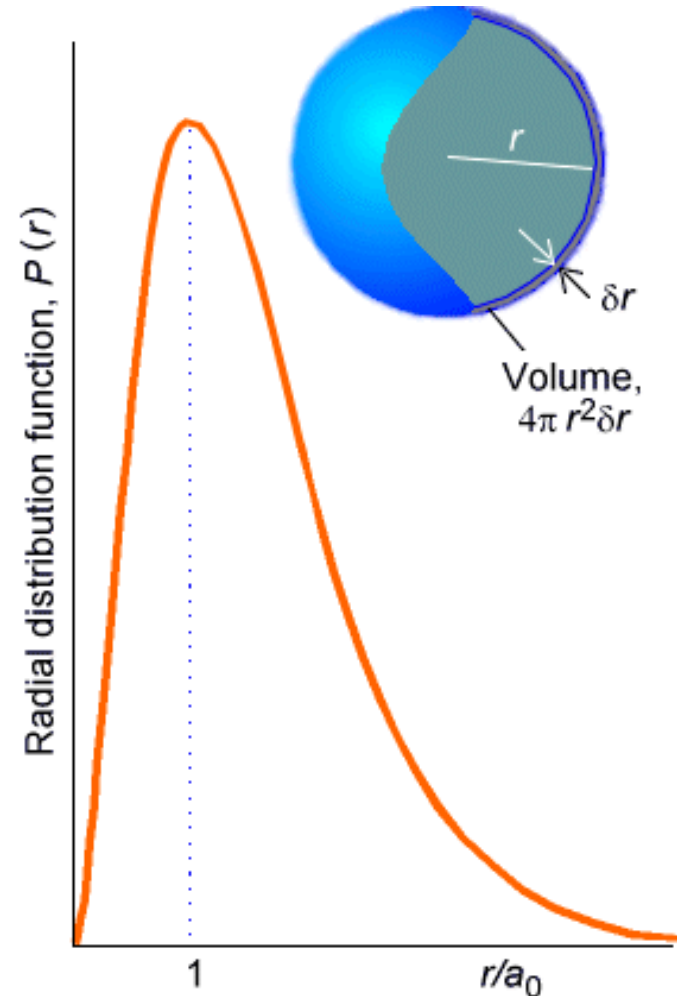
Para un orbital 1s:

$$P \propto r^2 e^{-2r/a_0}$$

P es nula en el origen y en el infinito, con un máximo en un radio intermedio (radio más probable para hallar el electrón).

Para el orbital 1s el máximo de P aparece en $r=a_0$.

Para un orbital 2s el máximo aparece en $r=5.2a_0$, mostrando numéricamente la expansión del átomo a medida que su energía crece.



Orbitales tipo p

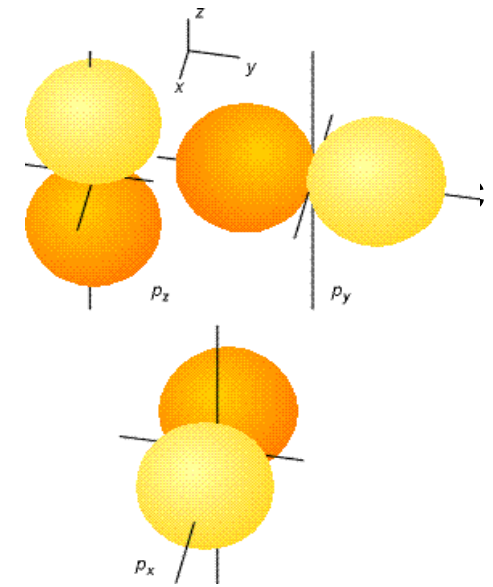
Un orbital p tiene momento angular orbital ℓ no nulo. Esto afecta la forma de la función de onda en la zona cercana al núcleo (vale 0 en $r = 0$; los orbitales con $\ell > 0$ tienen probabilidad nula de hallar al electrón en el núcleo, debido al predominio de la componente repulsiva en la energía potencial efectiva).

Para $\ell = 1$ existen 3 estados posibles con $m_\ell = 0, 1$ y -1 (distintas orientacio-

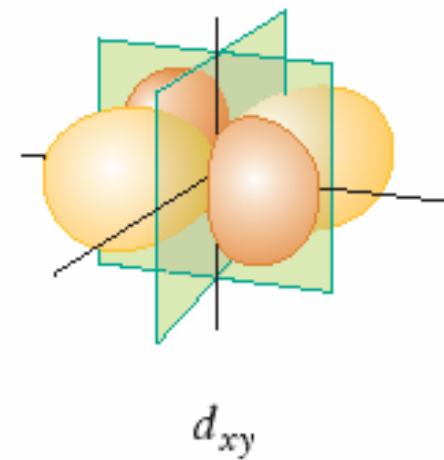
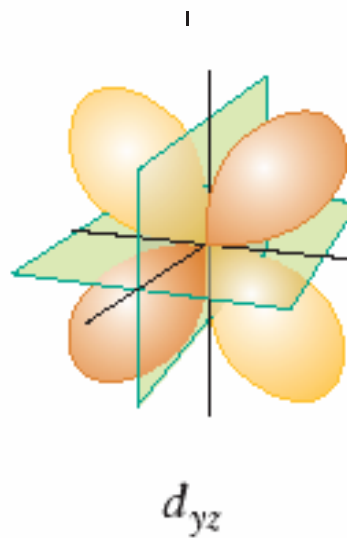
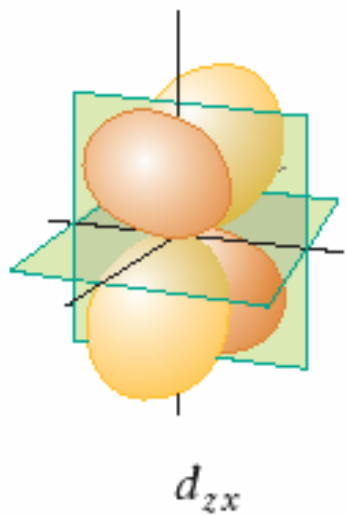
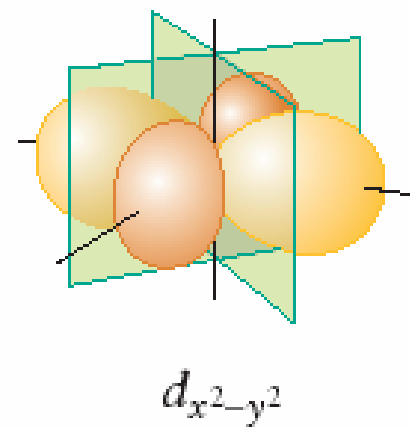
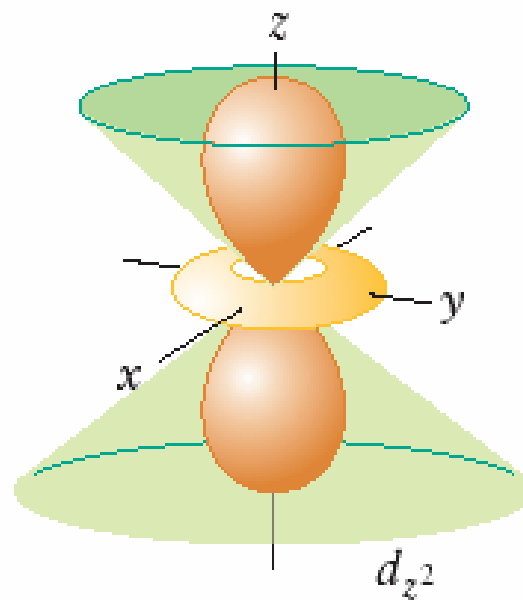
iones del momento angular total al-

rededor del eje z). Para $m_\ell = 0$, la proyección del momento sobre el eje z vale 0, y los máximos de probabilidad estarán a 0 y 180° . La función de onda se anula en 90° , entonces el plano nodal es el x-y.

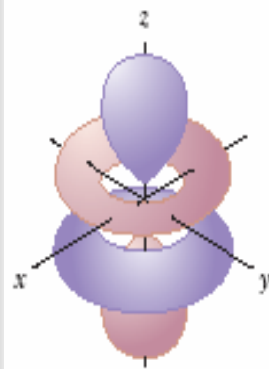
Los orbitales con $m_\ell = +1$ y -1 tienen componente del momento angular alrededor del eje z. El cero de amplitud estará en 0 y 180° y un máximo en 90° , es decir en el plano x-y.



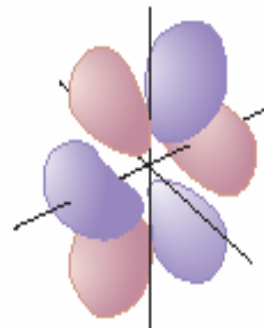
Orbitales tipo d



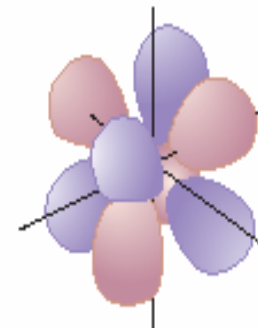
Orbitales tipo f



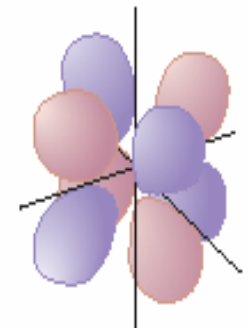
$$5z^3 - 3zr^2$$



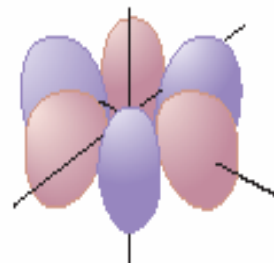
$$5xz^2 - xr^2$$



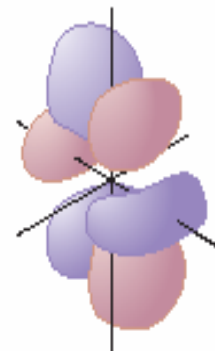
$$zx^2 - zy^2$$



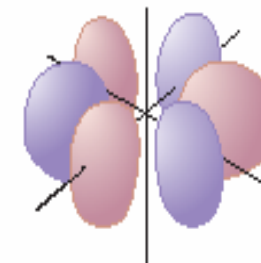
$$xyz$$



$$y^3 - 3yx^2$$



$$5yz^2 - yr^2$$



$$x^3 - 3xy^2$$

✧ Átomos Polieletrónicos: método Hartree-Fock

Si el átomo tiene **más de un electrón**, la aparición de **términos de interacción electrónica** en el Hamiltoniano ya no permite hallar soluciones en forma analítica. El uso de **aproximaciones se vuelve necesario**.

¿Se podría considerar a los electrones como **partículas independientes** (un Hamiltoniano sin interacciones e-e)? En ese caso la **función de onda polieletrónica** se expresaría como **producto de funciones que dependen de las coordenadas de un sólo electrón (OA)**:

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots) = \Psi(r_1) \cdot \Psi(r_2) \cdot \Psi(r_3) \cdots$$

Sin embargo, el **error** que produciría una aproximación tan gruesa sería **significativo**.

Hartree y Fock proponen usar una aproximación más moderada que **considera a cada electrón moviéndose en un campo de energía potencial electrostática promedio (potencial efectivo) generado por los restantes electrones y el núcleo**.

Esto se conoce con el nombre de **aproximación de Hartree-Fock**



¿Dónde se introduce la aproximación?

La **energía potencial exacta** que tiene la forma

$$V_{exacto} = \sum_i \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_i \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right)$$

se transforma en

$$V_{HF} = \sum_i \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_i V_{i,eff}(r_i)$$

Al expresar el **operador de energía potencial repulsiva** como **suma de términos que dependen de la posición de un solo electrón** es posible escribir el **Hamiltoniano total** como **suma de Hamiltonianos monoeléctricos...**

... y **resolver la ES** para cada **Hamiltoniano monoeléctrico** obteniendo una función propia por cada Hel que depende de las coordenadas de un sólo electrón (**orbital atómico, OA**).

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \phi(r_i) + \boxed{V_{\text{eff}}(r_i)} \phi(r_i) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \phi(r_i) = E_i \phi(r_i)$$

Ahora bien, esta “sencilla” expresión oculta aún un problema adicional: **calcular el campo promedio generado por los restantes electrones implica conocer sus posiciones promedio** (i.e.: sus **funciones de onda**) pero estas funciones son las soluciones a la ES que estamos buscando.

El error introducido en el cálculo **cuando no se toman en cuenta las interacciones instantáneas** entre los electrones se conoce con el nombre de **error de correlación electrónica**.

Esto obliga a hallar la solución de la ES **mediante un proceso iterativo** conocido con el nombre de **proceso del campo autoconsistente (SCF, self-consistent field)**.

El proceso SCF consiste de los siguientes pasos:

- 1 *se elige el conjunto de funciones mono-electrónicas de partida (initial guess: OA hidrogenoides) con el que se construyen los primeros operadores de energía potencial efectiva.*
- 2 *se resuelven las ES monoeléctricas para cada electrón.*
- 3 *con el nuevo conjunto de funciones de onda logrado, se mejora el operador efectivo de energía potencial*
- 4 *se resuelve nuevamente las ES monoeléctricas para obtener un conjunto de valores de energía orbital y un conjunto de funciones mono-electrónicas mejoradas (orbitales del átomo poli-electrónico).*
- 5 *se repiten los pasos 3 y 4 hasta lograr la convergencia respecto a un umbral establecido (en ese momento el proceso SCF converge).*

Configuración electrónica atómica y Principios de construcción.

Configuración electrónica: serie específica de **orbitales ocupados** en un átomo o molécula.

Configuración de capa cerrada: cuando los **electrones se disponen de a pares, un par por cada orbital.**

Configuración de capa abierta: cuando **existen electrones solitarios (electrones desapareados)** en uno o más orbitales.

Hasta aquí se vio que mediante la **aproximación de HF** es posible obtener **funciones de onda** que describen el **comportamiento de cada electrón** individual en un átomo polielectrónico (**orbitales atómicos aproximados**).

Para poder **predecir propiedades del átomo** es necesario sin embargo conocer la **función de onda polielectrónica, que escribiremos como Determinante de Slater.**

La función de onda polielectrónica: Determinantes de Slater.

Todas las **propiedades del átomo** dependen del módulo al cuadrado de la **función de onda polielectrónica**.

A nivel cuántico las **partículas idénticas** son indistinguibles (**principio de indistinguibilidad microscópica**) por lo tanto las **propiedades** de un sistema **no deben modificarse al intercambiarlas entre sí**. Esto implica que **la función de onda total sea simétrica** (la función no cambia) **o antisimétrica** (la función cambia su signo) **al intercambio**.

Experimentalmente se determinó que la función de onda es **antisimétrica** para **fermiones** (electrones y protones) **simétrica** para **bosones** (por ej. fotones).

El **determinante de Slater** es una **función de onda polielectrónica antisimétrica** obtenida a partir de los **orbitales**.

A partir de ella es posible demostrar el **principio de exclusión de Pauli**.

Según el enunciado del **principio de Pauli**, los 4 números cuánticos de dos electrones no pueden ser idénticos.

Si n , l y m_l son iguales (estos números cuánticos definen la parte espacial de cada orbital) entonces el número cuántico magnético de spin m_s debe ser diferente.

Veamos la base física de este principio.

Si la función de onda total del sistema polielectrónico debe ser antisimétrica, no es posible construirla como simple producto de orbitales (recuerde que si bien dentro de la aproximación de HF obtiene OAs, es la función de onda polielectrónica la que determina las propiedades del sistema).

Para cumplir con la condición de antisimetría la función de onda electrónica tiene que tener una forma más complicada que la correspondiente a un simple producto de orbitales atómicos: adopta entonces la forma conocida como **determinante de Slater**:

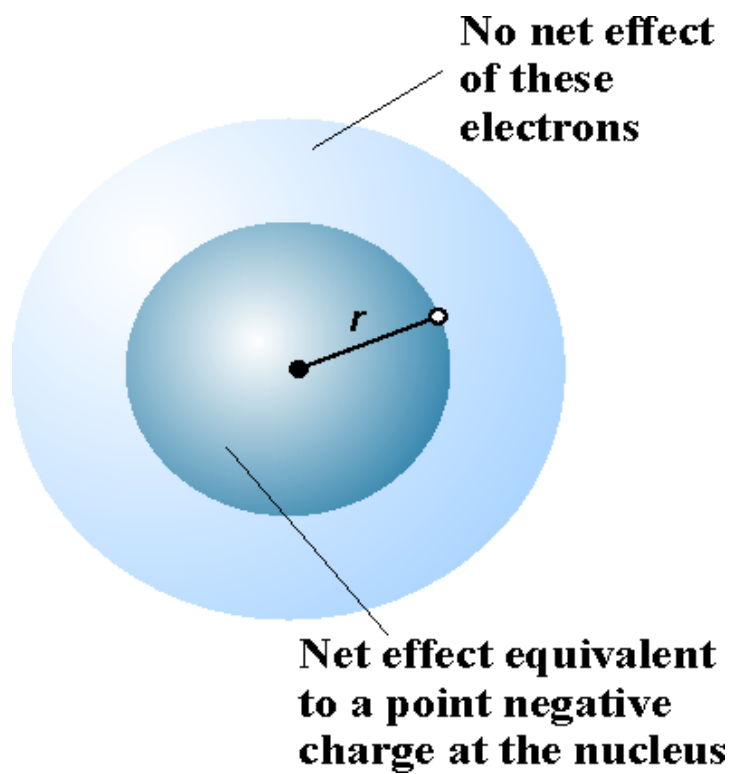
$$\psi(r_1, r_2, r_3, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_2(r_1) & \dots & \phi_N(r_1) \\ \phi_1(r_2) & \phi_2(r_2) & \dots & \phi_N(r_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(r_N) & \phi_2(r_N) & \dots & \phi_N(r_N) \end{vmatrix}$$

Note que en el determinante de Slater, si dos electrones tienen los cuatro números cuánticos idénticos, entonces dos filas del determinante serán iguales.

Un determinante con dos filas o columnas iguales tiene un valor igual a cero. Por tanto si la función de onda total vale cero para esta situación, eso implica que la probabilidad de que la misma ocurra es nula, demostrando así el principio de Pauli.

Una mirada más profunda sobre los efectos de apantallamiento y penetración.

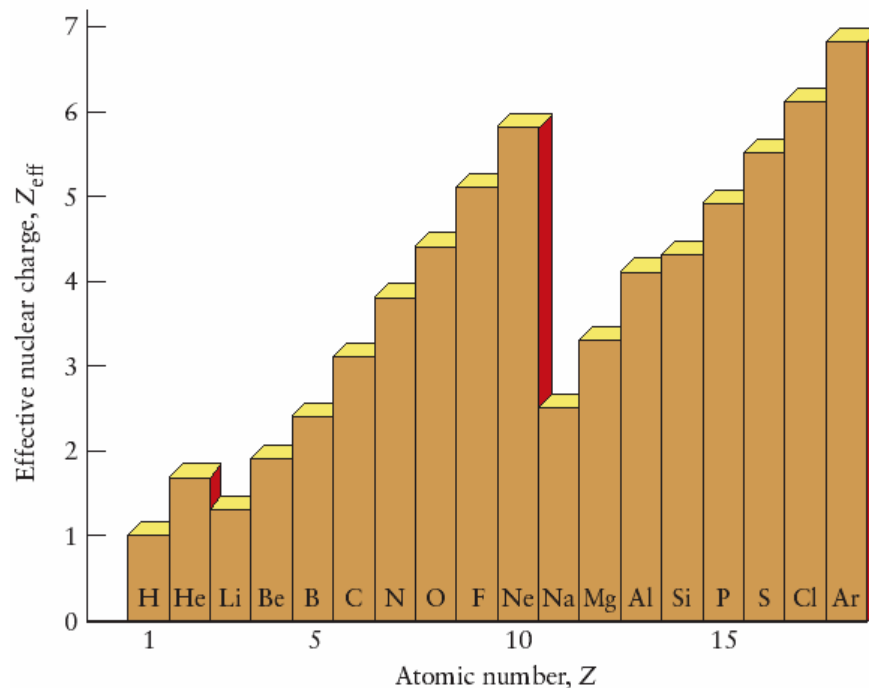
A diferencia de lo ya señalado para los átomos hidrogenoides, en el caso de los átomos poli-electrónicos las sub-capas de un mismo nivel no tienen la misma energía (i.e.: un orbital 2s tendrá energía menor que la de los orbitales 2p). Esto se explica en función de dos efectos: **apantallamiento y penetración**.



El hecho de que exista más de un electrón en el átomo hace que la carga nuclear que los electrones más externos “ven” esté parcialmente neutralizada por los electrones interpuestos (carga nuclear apantallada).

El número atómico real es entonces reducido en una cantidad llamada **constante de apantallamiento σ**

$$Z_{eff} = Z - \sigma$$



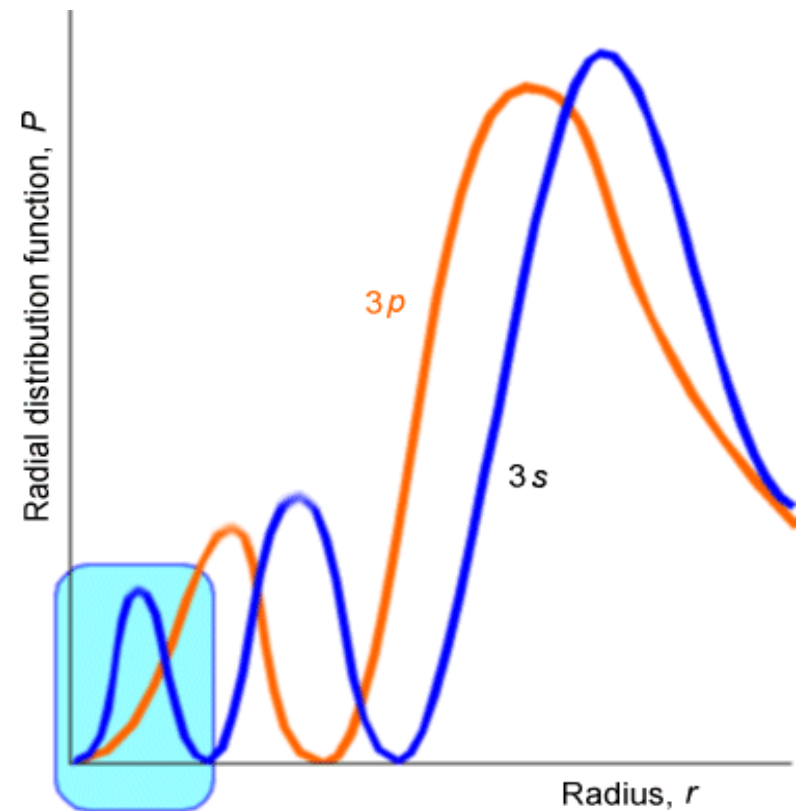
El número atómico efectivo es diferente para los orbitales s y p de una misma capa. Esto se debe a la propia distribución radial de cada tipo de orbital.

Naturalmente, los electrones más internos serán más estables por ser atraídos más fuertemente por una carga nuclear mayor, y los más externos tendrán una energía mayor.

Esto explica la existencia de diferencias energéticas entre electrones ubicados en orbitales diferentes de un mismo nivel, pero no su ordenamiento.

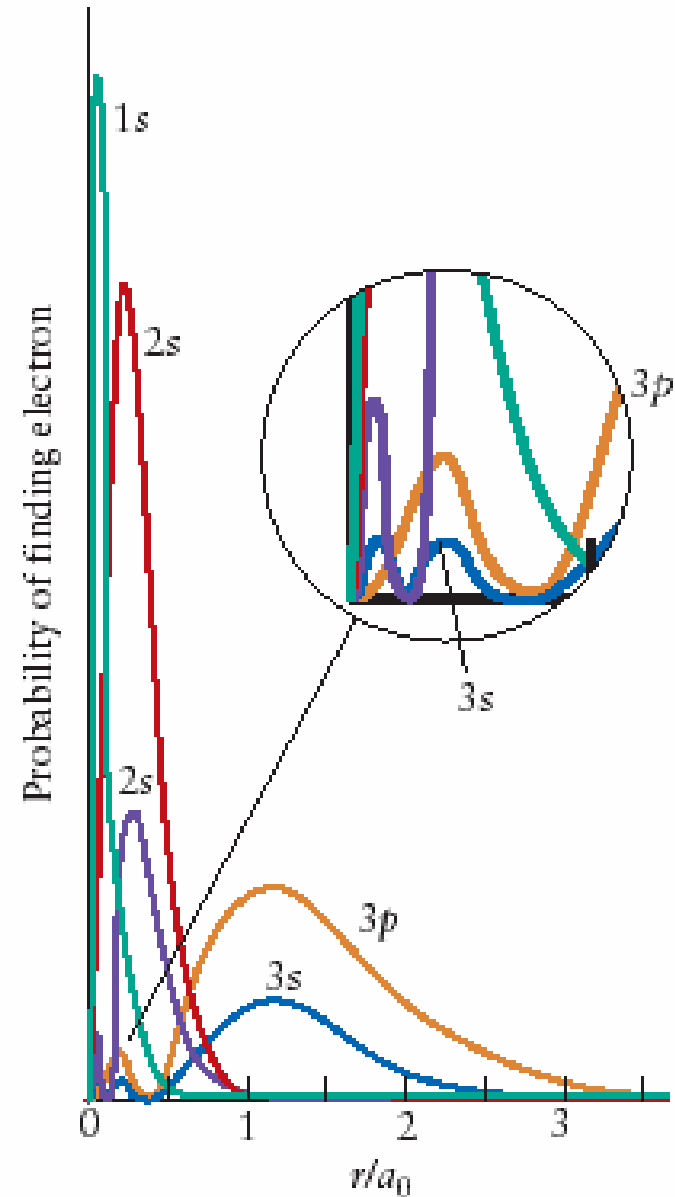
Para lograr explicar porqué un electrón 2s es más estable que un 2p y no a la inversa, debemos recurrir al concepto de **penetración de las funciones de onda** electrónicas, que nos indica cuáles serán los electrones más internos.

Los electrones ubicados en **orbitales s** tienen alta probabilidad de ubicarse en regiones cercanas al núcleo. Los electrones en **orbitales p** tienen probabilidad nula en $r=0$. Así un electrón s experimentará menos apantallamiento que un electrón p de la misma capa (efecto que recibe el nombre de **penetración orbital**).



Ambos efectos combinados son responsables por la pérdida de degeneración dentro de un nivel cuántico n ($s < p < d$).

Los orbitales dentro de una misma sub-capa continúan siendo degenerados pues tienen las mismas características radiales.



Otros principios de construcción y su base física.

Teniendo en cuenta lo anterior, las reglas de construcción (**principio de Aufbau**) indican que dentro de un mismo nivel se llenará primero un orbital s, luego los 3 orbitales p degenerados, y así sucesivamente.

La función de onda poli-electrónica bajo la forma de determinante de Slater **recupera** parte de la correlación electrónica perdida: la **correlación de spin**: si dos electrones tienen spin orientado en paralelo, no pueden ocupar la misma posición en el espacio. Sin embargo no hay restricciones particulares cuando los estado de spin de dos electrones son antiparalelos.

La observación anterior hace que al llenarse una sub-capa degenerada (por ej., la 2p) los electrones se dispongan de a uno con sus momentos de spin orientados paralelos (**regla de Hund y correlación de spin**).

Con las reglas anteriores es posible derivar la configuración de cada átomo de la Tabla Periódica, en estado neutro o ionizado.

Multiplicidad de un estado electrónico

Hemos visto hasta ahora que al construir la configuración electrónica la disposición de los electrones que es más baja en energía es aquella que coloca electrones de una misma sub-capa degenerada con estados de spin paralelo.

Una configuración con spin paralelo tiene momento total de spin diferente a una configuración de spin antiparalelo, y también distinta energía.

Así como cada electrón tiene un valor de spin asociado, el átomo poli-electrónico tiene un momento angular de spin total, correspondiente a la suma de los momentos individuales.

Si el átomo tiene configuración de capa cerrada, el momento de spin total vale cero (se anula par a par de electrones) y esa disposición corresponde a un **singulete**.

S
i en cambio el átomo posee uno o más electrones paralelos desapareados (configuración de capa abierta), el momento de spin total será $1/2$, $3/2$, etc, y ese estado recibe el nombre de **doblete**, **tripleto**, etc.

La **multiplicidad** de un átomo o molécula se calcula como

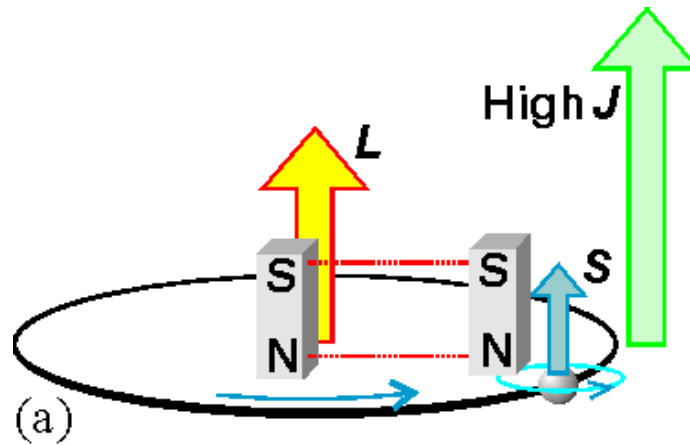
$$\text{Multiplic.} = (2S + 1)$$

Donde **S** es el valor total de spin angular para una configuración electrónica dada.

Para S=0	$2S+1 = 1 \Rightarrow$	Singulete
Para S=1/2	$2S+1 = 2 \Rightarrow$	Doblete
Para S=1	$2S+1 = 3 \Rightarrow$	Triplete

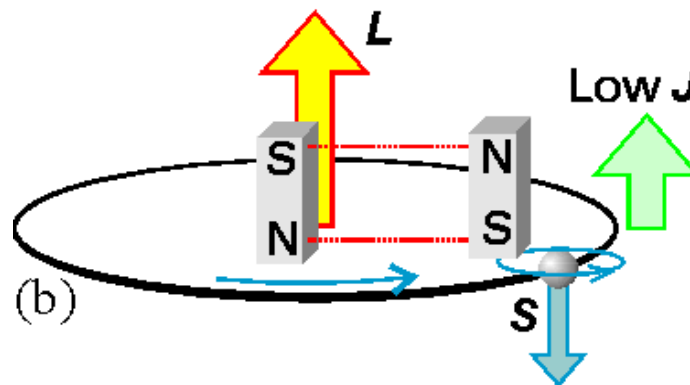
Acoplamiento spin-orbita

Toda carga en movimiento genera un campo magnético. Así tendremos momentos magnéticos asociados a los estados de spin electrónico y a los distintos momentos angulares orbitales que estos electrones puedan adoptar.



La interacción entre estos dos momentos magnéticos se llama **acoplamiento spin-órbita**.

La fuerza de esta interacción y su efecto sobre la energía de los distintos niveles depende de las orientaciones relativas de ambos momentos magnéticos, por ende, de las orientaciones de los respectivos momentos angulares.



Así tendremos un estado de **spin alto** (interacción menos favorable, de mayor energía) y otro de **spin bajo**.