

Física Atómica y Materia Condensada

Semestre 2018-2

Prof: Asaf Paris Mandoki

Ayud: Manuel Mendoza López



Tarea 3

Entrega: 23 febrero 2018

Ejercicio 1 : El estado base de Helio

25 Puntos

En este ejercicio encontrará la energía de el estado base de helio usando el método variacional.

- a. Suponga que la función de onda para el estado base $1s^2$ es el producto de dos funciones hidrogenoides $1s$. Es decir, suponga que tiene la forma $N e^{-\zeta r_1} e^{-\zeta r_2}$, donde N es una constante de normalización y ζ es un parámetro variacional equivalente a Z'/a donde Z' es una carga efectiva del núcleo. Muestre que $N = \zeta^3/\pi$ de acuerdo a la condición de normalización

$$(4\pi)^2 \int_0^\infty \int_0^\infty N^2 e^{-2\zeta r_1} e^{-2\zeta r_2} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 = 1$$

- b. Muestre que la energía cinética promedio de **cada** electrón es $(\hbar^2/2m)\zeta^2$ y la energía potencial promedio de **cada** electrón es $-Ze^2\zeta/4\pi\epsilon_0$.
- c. Muestre que la energía promedio de repulsión mutua es $\frac{5\zeta e^2}{32\pi\epsilon_0}$ usando el siguiente método:

- I Muestre que el potencial electrostático $\phi(r)$ al que está sujeto una carga, debido a la distribución de carga dada por $\rho(r_2) = -e|\psi(r_2)|^2 = -\frac{e\zeta^3}{\pi}e^{-2\zeta r_2}$ tiene la forma

$$\phi(r) = \frac{e}{4\pi r \epsilon} \left(1 - (\zeta r + 1)e^{-2\zeta r} \right).$$

Nota: puede aprovechar que $\nabla^2\phi(r) = \rho(r)/\epsilon_0$.

- II Calcule el valor esperado de la energía debido a este potencial.

- d. La energía puede ser obtenida al sumar los términos obtenidos en los incisos anteriores. Minimice la energía en función de ζ para encontrar un valor aproximado de la energía del estado base de Helio. Compare el valor obtenido con el valor experimental de 79 eV.

Ejercicio 2 : Símbolo de término

5 Puntos

En clase discutimos que una configuración electrónica puede dar origen a varios niveles de energía distintos que etiquetamos usando símbolos de término. En este ejercicio escribiremos el símbolo de término para la configuración $1s2p$.

- a. Escriba los kets espaciales que representan los estados posibles que resultan de esa configuración (deberían de ser dos).
- b. Escriba los símbolos de término resultantes.