



Tarea 3
Entrega: 16 octubre 2018

Ejercicio 1 : El estado base de Helio

30 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 Demuestre 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 para Helio

15 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 $1s2p$.

- Escriba los kets espaciales que representan los estados posibles que resultan de esa configuración (deberían de ser dos).
- Escriba los símbolos de término resultantes en la forma ^{2S+1}L . Para esto sólo necesita notar los valores espín S y momento angular orbital L totales.

Ejercicio 3 : Excepciones a la Regla de Madelung

20 Puntos

A pesar de que la regla de Madelung funciona extremadamente bien para saber la configuración electrónica del estado base de muchos elementos, existen algunas excepciones a esta regla. Estas son algunas de ellas

- $[\text{Cu}] = [\text{Ar}]4s^13d^{10}$
- $[\text{Pd}] = [\text{Kr}]5s^04d^{10}$
- $[\text{Ag}] = [\text{Kr}]5s^14d^{10}$

¿Cuál debería de ser la configuración electrónica de estos elementos si cumplieran la regla de Madelung?

Ejercicio 4 : Azufre

20 Puntos

- Encuentre la configuración electrónica de azufre usando el principio “Aufbau” y la regla de Madelung.
- Construya una tabla como la que hicimos en clase para carbono para encontrar los símbolos de término.
- Ordene los símbolos de término de mayor a menor energía usando las reglas de Hund para encontrar el símbolo de término del estado base del azufre.

Ejercicio 5 : Disproso

15 Puntos

El disproso ha sido recientemente el foco de intensa investigación debido la posibilidad de utilizarlo para crear “ferrofluídos” cuánticos. Este ejercicio puede iluminar por qué esto ocurre.

- Dar la configuración electrónica del disproso.
- Usando las reglas de Hund, determine el estado base para disproso (no es necesario que dibuje toda la tabla, puede usar el atajo).