Física Atómica y Materia Condensada

Semestre 2020-1

Prof: Asaf Paris Mandoki

Ayud: Manuel Mendoza López

Tarea 3
Entrega: 8 octubre 2019

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 $Ne^{-\zeta r_1}e^{-\zeta r_2}$, 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 $\rho(r) = -e|\psi(r)|^2 = -\frac{e\zeta^3}{\pi}e^{-2\zeta r}$ tiene la forma

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

Nota 1: puede aprovechar que $\nabla^2\phi(r) = \rho(r)/\epsilon_0$.

Nota 2: Aquí usamos que la distribución de probabilidad de un solo electrón es $|\psi(r)|^2 = \int |\psi(r, r_2)|^2 \, d^3r_2 = 4\pi \int_0^\infty |\psi(r, r_2)|^2 r_2^2 \, dr_2 = \frac{\zeta^3}{\pi}e^{-2\zeta r}$.

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 : Excepciones a la Regla de Madelung **15 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

- [Cu] = [Ar]$4s^1 3d^{10}$
- [Pd] = [Kr]$5s^0 4d^{10}$
- [Ag] = [Kr]$5s^1 4d^{10}$

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

Ejercicio 3 : Azufre **15 Puntos**

a. Encuentre la configuración electrónica de azufre usando el principio "Aufbau" y la regla de Madelung.

b. Construya una tabla como la que hicimos en clase para carbono para encontrar los símbolos de término.

c. 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 4 : Disprosio **10 Puntos**

El disprosio 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.

a. Dar la configuración electrónica del disprosio.

b. Usando las reglas de Hund, determine el estado base para disprosio (no es necesario que dibuje toda la tabla, puede usar el atajo).

Ejercicio 5 : Aproximaciones para efecto Zeeman **10 Puntos**

En clase encontramos el comportamiento de los niveles de energía hiperfinos del estado base de hidrógeno al aplicar un campo magnético. Los niveles que obtuvimos fueron

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{\mathcal{A}}{4} + \hbar\omega_0 \\
E_2 &= \frac{\mathcal{A}}{4} - \hbar\omega_0 \\
E_3 &= -\frac{\mathcal{A}}{4} + \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2} \\
E_4 &= -\frac{\mathcal{A}}{4} - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2}
\end{aligned}$$

Muestre que esta solución coincide con las obtenidas en clase en el límite de campo fuerte ($\mathcal{A} \ll \hbar\omega_0$) y en el límite de campo débil ($\mathcal{A} \gg \hbar\omega_0$) usando una expansión en serie.

Ejercicio 6 : Efecto Stark Lineal **20 Puntos**

Para el átomo de Hidrógeno, los estados (usando la notación $|n, l, m\rangle$) $|2, 0, 0\rangle$, $|2, 1, 1\rangle$, $|2, 1, 0\rangle$ y $|2, 1, -1\rangle$ son degenerados. A primer orden en teoría de perturbaciones para el caso degenerado debemos diagonalizar la matriz $-\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}$ escrita en esta base.

a. Escribe y diagonaliza esta matriz para el caso en que $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \hat{e}_z$. ¿Cuáles son los eigenvectores y eigenvalores? ¿Cómo es la dependencia de los eigenvalores respecto a $\mathcal{E}_0$?

b. ¿Qué ocurre en el caso en que $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \hat{e}_x$?
Hint: Escribe $\hat{e}_x$ en términos de los vectores de la base esférica $\hat{e}_{+1}$ y $\hat{e}_{-1}$.

Nota: Usa las reglas de selección para saber cuáles elementos de matriz son nulos y cuáles no. No es necesario que calcules explícitamente los elementos de matriz que no se anulan; puedes dejarlos indicados.