



Tarea 3
Entrega: 12/04/2021

Ej. 1: Corrimiento de volumen de isótopo

20 Puntos

En clase se mencionaron los corrimientos de isótopo como correcciones a los niveles energéticos atómicos como resultado de las propiedades del núcleo. Una de esas correcciones es el corrimiento de volumen que resulta del tamaño no nulo del núcleo. En este ejercicio calcularás una corrección de ese tipo.

Considera un electrón en el campo electrostático resultante de un núcleo con carga Ze y número de nucleones A . Si la carga nuclear está distribuida uniformemente en una esfera de radio $R = r_0 A^{1/3}$ con $r_0 \approx 1.2 \times 10^{-15}$ m,

a. muestra que el potencial del electrón está dado por

$$V'(r) = \begin{cases} +\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) & r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} & r \geq R \end{cases}$$

b. Esto resulta en una perturbación al potencial de Coulomb de la forma

$$\Delta V(r) = V'(r) - \left[-\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \right].$$

Encuentra el cambio en la energía debido a esta perturbación. Como $R \ll a_0$, puedes suponer que para $r \leq R$, la función radial es $R_{nl}(r) \approx R_{nl}(0)$.

Ej. 2: Potencial Hartree-Fock para He

20 Puntos

Muestra que la ecuación de Hartree-Fock para el orbital espacial $u_{1s}(r)$ para el estado base de helio tiene la forma

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{2}{r} + \int |u_{1s}(r')|^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] u_{1s}(r) = E_{1s} u_{1s}(r).$$

Evalúa el potencial efectivo de Hartree-Fock

$$\mathcal{V}(r) = -\frac{2}{r} + \int |u_{1s}(r')|^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

usando este orbital obtenido mediante el método de Hartree-Fock

$$u_{1s}(r) = (4\pi)^{-1/2} \left(Ae^{-\alpha r} + Be^{-\beta r} \right)$$

con $A = 2.605$, $B = 2.081$, $\alpha = 1.41$, $\beta = 2.61$. Grafica tus resultados e interprétalos en términos de apantallamiento de la carga nuclear.

Ej. 3: Acoplamientos LS y JJ

20 Puntos

- a. Suponiendo que el tratamiento de acoplamiento LS es adecuado, enlista los términos espectrales posibles ^{2S+1}L que resultan de las siguientes configuraciones electrónicas:
 - a) $ns n's$
 - b) $ns n'p$
 - c) $ns n'd$
 - d) nd^2
 - e) $np n'p n''p$
 - f) np^3
- b. Enlista los términos de estructura fina $^{2S+1}L_J$ correspondientes a los términos del inciso anterior.
- c. Suponiendo que el tratamiento de acoplamiento JJ es adecuado, enlista los términos posibles $(j_1, j_2)_J$ para las siguientes configuraciones electrónicas:
 - a) $np nd$
 - b) $(nl\ 3/2)^2$