



Tarea 3  
Entrega: 4 abril 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  $N e^{-\zeta r_1} e^{-\zeta r_2}$ , donde  $N$  es una constante de normalización y  $\zeta$  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: 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  $\zeta$  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

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

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

**Ejercicio 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 : Disprosidio**

**10 Puntos**

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

- a. Dar la configuración electrónica del disprosidio.
- b. Usando las reglas de Hund, determine el estado base para disprosidio (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 Zeeman para un campo perpendicular

**20 Puntos**

En clase estudiamos el efecto Zeeman en conjunción con la interacción hiperfina para estados con  $\ell = 0, I = 1/2, s = 1/2$  con el Hamiltoniano

$$H_{HFZ} = \frac{\mathcal{A}}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} - \frac{\mu_B g_S}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}.$$

Por simplicidad elegimos, que el campo magnético  $\mathbf{B}$  fuera paralelo al eje de cuantización  $Z$ . En este ejercicio resolverás el mismo problema pero ahora considera que, mientras el eje de cuantización sigue siendo el usual eje  $Z$ , el campo magnético es  $\mathbf{B} = B\hat{e}_x$ . De este modo el hamiltoniano resulta ser

$$H_{HFZ} = \frac{\mathcal{A}}{\hbar^2} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} - \frac{\mu_B g_S}{\hbar} S_x B.$$

- Escribe el Hamiltoniano de forma matricial.
- Diagonaliza dicho Hamiltoniano y grafica los eigenvalores.
- ¿Cómo se comparan los eigenvalores obtenidos en este caso respecto a el caso de eje de cuantización y campo paralelos?
- ¿Cómo se comparan los eigenvectores obtenidos en los casos límite de campo fuerte ( $\mathcal{A} \ll \hbar\omega_0$ ) y de campo débil ( $\mathcal{A} \gg \hbar\omega_0$ ), donde  $\omega_0 = \mu/\hbar$ ?

**Ejercicio Extra 1 :** 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.