

Problemas de Estructura 3

Iones con dos electrones

1. Preguntas de Repaso

- (a) Realizar un gráfico de las energías de los niveles correspondientes a las configuraciones $1s2s$ y $1s2p$ del He.
- (b) Calcular las transiciones posibles entre estos niveles.
- (c) Calcular los valores medios $\langle (r_1 - r_2)^2 \rangle$ para un sistema de dos partículas en el cual una se encuentra en el estado $\varphi_a(r)$ y la otra en $\varphi_b(r)$. Asumir que estas partículas son
 - i. Partículas idénticas
 - ii. Fermiones, estado $S = 0$
 - iii. Fermiones, estado $S = 1$
- (d) Realizar un dibujo esquemático de las energías de los términos del He (hasta $L = 3$). Incluir en el gráfico las energías en orden 0, sin repulsión interelectrónica.

2. Calcular las energías de los términos $1s^2$ ($1S$), $1s2s$ (2^1S), $1s2s$ (2^3S), $1s2p$ (2^1P), $1s2p$ (2^3P), para el Helio y para otro ión de la serie isoelectrónica. Realizar una tabla esquemática resumiendo los resultados. Las aproximaciones a utilizar son:

- (a) Modelo de partícula independiente (producto de funciones hidrogenoides, omitiendo la repulsión interelectrónica)
- (b) Producto de funciones hidrogenoides con carga efectiva $Z_{eff} = Z - 0.3$.
- (c) Producto de funciones $1s$ (no apantallada) y nl (completamente apantallada).
- (d) Producto de funciones hidrogenoides con potencial efectivo $V_{eff}(r)$.

3. Interacción interelectrónica

Se definen los términos de interacción interelectrónica como

$$J_{\alpha,\beta} = \int |\varphi_{\alpha}(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{r_{12}} |\varphi_{\beta}(\vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$K_{\alpha,\beta} = \int \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \varphi_{\beta}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \varphi_{\alpha}(\vec{r}_2) \varphi_{\beta}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

- (a) Calcular la integral $J_{1s,1s}$, y por medio de ella, calcular la energía del estado fundamental del Helio, utilizando como base un producto de funciones hidrogénicas.

Ayuda: Esta integral está resuelta en el libro de Griffiths (entre otros varios).

- (b) Calcular las integrales $J_{1s,2s}$, $J_{1s,2p}$, $K_{1s,2s}$ y $K_{1s,2p}$. Calcular las energías de los niveles $1s2s$ y $1s2p$, asumiendo una base de producto de estados hidrogénicos.

Ayuda: Estas integrales están resueltas en el libro de Bransden y Joachain (entre otros).

- (c) Las integrales J y K tienen simples expresiones analíticas para funciones Gaussianas. Encontrarlas.

4. Agregar en la tabla de resultados, los que se obtienen de cálculos que emplean:

- (a) Método variacional (parámetro variacional: la carga).
 (b) Método variacional (combinación de Gaussianos $\chi_i(r) = e^{-\alpha_i r^2}$, con $\alpha_1 = 0.298073$, $\alpha_2 = 1.242567$, $\alpha_3 = 5.782948$, $\alpha_4 = 38.474970$, para el $1s2s$. (Elegir un sólo caso adicional, con parámetros a elección propia).

5. Repetir los resultados para diferentes iones isoelectrónicos al Helio (comenzando con H^- y sólo para el estado fundamental). Comparar los resultados en una tabla con los obtenidos utilizando

- (a) Funciones de Byron y Joachain
 (b) Funciones de Chandrasekhar
 (c) Método Hartree–Fock
 (d) Tablas de Bunge (He)
 (e) Programa AUTOSTRUCTURE