Problemas de Estructura 3
Iones hidrogénicos

Parte A: Cálculos Analíticos

Elegir dos términos de algún ión hidrogénico (uno de los términos debe ser con $l = 0$).

1. Comprobar que la función de onda correspondiente a cada término es solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente.
2. Dibujar la función de onda.
3. Chequear si las funciones son ortonormales.
4. Analizar el comportamiento asintótico y en el origen.
5. Calcular los valores medios $\langle r^k \rangle$, para $k = -3, -2, -1, 0, 1$ y 2.
6. Verificar si se cumple la condición de Kato y la regla de Oppenheimer.
7. Comprobar si se cumple el teorema del Virial.
8. Resolver la separación de estructura fina de los niveles.
9. Comparar las energías con la que se obtiene solucionando en forma exacta la ecuación de Dirac.
10. Realizar un esquema con las transiciones permitidas entre los multipletes correspondientes.
11. Comprobar si la transformada de Fourier de la función radial es solución de la ecuación de Schrödinger en el espacio de los momentos.

Parte B: Soluciones Expandidas

Comprobar si las soluciones expresadas en los siguientes términos coinciden con las funciones dadas en la parte anterior:

1. Expansión en Polinomios de Laguerre asociados.
2. Expresión en términos de la hipergeométrica ${}_1F_1$.
3. Expansión en orbitales de Slater.
4. Solución de un problema variacional con una base compuesta por 4 Gaussianos de la forma $e^{-\alpha r^2}$.

Parte C: Soluciones Numéricas

Comprobar si las siguientes soluciones numéricas coinciden con las soluciones analíticas

1. Solución numérica de la ecuación diferencial correspondiente.
2. Solución por diagonalización directa del Hamiltoniano.

Parte D: Programas de Estructura Atómica

Comparar las soluciones y sus propiedades dadas por los siguientes programas computacionales, con las soluciones analíticas

1. AUTOSTRUCTURE (Badnell)
2. DEMORAD (Salvat)
3. HF (Fischer)