

## Problemas de Estructura 3

### Transiciones Radiativas

1. Calcular la diferencia energética entre los estados  $2p$  y  $1s$  en H y  $\text{Mo}^{41+}$ . Reproducir esta diferencia en unidades de frecuencia y longitudes de onda.
2. Calcular el elemento de matriz  $\langle \varphi_{1s}(r) | r | \varphi_{2p}(r) \rangle$
3. Expresar el operador  $\hat{z}$  en función de los armónicos esféricos.
4. Calcular la integral angular  $\langle Y_{10} | Y_{10} Y_{21} \rangle$ .
5. Calcular el coeficiente de Einstein de probabilidad de emisión espontánea  $A$ , para la transición  $2p \rightarrow 1s$ , en H y  $\text{Mo}^{41+}$ .
6. Calcular el tiempo que tarda en decaer un electrón excitado en el estado  $2p$  del hidrógeno. Comparar este tiempo con el que tarda en dar una vuelta alrededor del núcleo. Repetir el cálculo para  $\text{Mo}^{41+}$ .
7. Ilustrar con algún ejemplo específico las reglas de selección para transiciones radiativas.
8. Chequear que las unidades sean consistentes en las definiciones dadas de los coeficientes de transición  $A$  y *oscillator strenghts*  $f$ .
9. Calcular los  $f$  para las transiciones
  - (a)  $2p \rightarrow 1s$
  - (b)  $3d \rightarrow 2p$Comparar con los valores dados en bases de datos (confiables !)
10. Calcular los datos atómicos para las transiciones  $2p \rightarrow 1s$ ,  $3d \rightarrow 2p$  y  $3s \rightarrow 2p$ , utilizando el programa AUTOSTRUCTURE. Comparar con los resultados obtenidos en el punto anterior.
11. Comparar las intensidades de las líneas espectrales calculadas en el punto anterior. Justificar las diferencias.
12. Justificar con los ejemplos anteriores la validez de las fórmulas para multipletes  $LS$  hidrogénicos (en a.u.):

$$gf_{ji} = \frac{2}{3} \Delta E_{ij} |\langle \varphi_i(r) | r | \varphi_j(r) \rangle|^2 \frac{\max(l_i, l_j)}{2l_i + 1}$$
$$A_{ji} = \frac{4}{3c^3} (\Delta E_{ij})^3 |\langle \varphi_i(r) | r | \varphi_j(r) \rangle|^2 \frac{l_j + (1 + \Delta l)/2}{2l_j + 1}$$

Recordar que  $\tau = 1 \text{ a.u.} = 2.4189 \times 10^{-17} \text{ s}$ , y sólo se permite  $\Delta l = \pm 1$ .