

Estructura de la materia 3
Serie 1- Sistemas atómicos
Cátedra Marta Ferraro.
1^{er} cuatrimestre de 2006

1. Muestre que para un sistema de N electrones interactuantes en un potencial central $V(r)$, se satisfacen las siguientes propiedades para los operadores impulso angular orbital total, de espín total, y el operador de paridad P :

$$\text{i) } [H, L]=0; \quad \text{ii) } [H, S]=0; \quad \text{iii) } [H, P]=0; \quad \text{iv) } [L, P]=0$$

2. Analice cuantitativamente la ruptura de la degeneración en el nivel $n=2$ del átomo de hidrógeno debida a las correcciones de estructura fina W_f .

$$W_f = W_{mv} + W_D + W_{so};$$

$$W_{mv} = -\frac{P^4}{8c^2}; \quad W_D = \frac{\nabla^2 V}{8c^2}; \quad W_{so} = \frac{1}{2c^2 r} \frac{dV}{dr} \bar{L} \cdot \bar{S} \quad (\text{en au.})$$

3. Verifique que para 3 electrones en una subcapa p acoplados a $S=3/2$, necesariamente el impulso angular orbital resultante es $L=0$ (analice el efecto de los operadores L_x , L_y y L_z sobre las posibles funciones totalmente antisimétricas que puede formar).
- a) Ignorando el acoplamiento espín-órbita, ¿cuál es la degeneración de un estado con L y S dados? Analice las distintas posibilidades para $Z=8$ (Oxígeno).
- b) Aceptando que en realidad los niveles de energía son degenerados respecto del impulso angular total J , ¿cuál es la degeneración del estado con J dado? Verifique que el total de estados coincide en ambos casos.

4. ***Las autofunciones del Hamiltoniano atómico tienen paridad bien definida.***

- a) Analice las consecuencias de esta propiedad sobre valores medios y elementos de matriz de operadores escalares, vectoriales y pseudovectoriales.
- b) En particular, deduzca que el estado fundamental de los átomos es tal que $\langle \vec{p} \rangle = 0$ (momento dipolar eléctrico).

5. ¿Es cierto que en átomos multielectrónicos los estados con igual n pero distinto l no están degenerados? ¿Por qué? Justifique.

6. ¿Qué términos espectrales son posibles para las siguientes configuraciones atómicas?
 $(ns)(n's)$; $(ns)(n'p)$; $(ns)(n'd)$

7. Regla de Hund

- a) La configuración del estado fundamental del átomo de carbono es $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Encuentre los términos espectrales posibles y su ordenamiento en energía de acuerdo con las reglas de Hund. Relacionarlo con los ejercicios 8 y 9 de la Serie 0. ¿Cuáles son los determinantes de Slater que participan en la función de onda de ese estado?
- b) De acuerdo con la configuración electrónica correspondiente a cada átomo, halle los términos espectroscópicos posibles compatibles con la misma y determine el correspondiente al estado fundamental en base a las reglas de Hund, para Nitrógeno, Oxígeno, y Flúor.
- c) ¿Por qué el Manganeso (Mn, $Z=25$) atómico es magnético?

8. Calcule la energía media de los estados $|1s\alpha 1s\beta\rangle$ y $|1s\alpha 2s\alpha\rangle$ para el átomo de He. Compare la energía de intercambio y de Coulomb "ganadas" en el segundo caso con la energía "perdida" por promover un electrón al nivel 2s.

$$\phi_{1s} = (Z^3 / \pi)^{1/2} e^{-Zr} \quad \phi_{2s} = (Z^3 / 8\pi)^{1/2} (1 - Zr/2) e^{-Zr/2}$$

9. Determine aproximadamente la energía del estado fundamental del átomo de He (mejor dicho, hallar una cota superior a su valor) usando el principio variacional y aproximando la función de onda por dos funciones 1s con una carga nuclear efectiva Z^* .
10. Al estudiar el átomo de He no se ha considerado la configuración $(2s)^2$. ¿Por qué? Justifique cuantitativamente.
- a) ¿Es cierto que para un mismo nivel n , los niveles del para-helio (He no magnético) están más altos que los del ortho-helio (He magnético) debido al carácter desestabilizante de la interacción magnética entre los espines de los electrones?
11. Efecto Stark: Considere el átomo de hidrógeno en un campo eléctrico externo estático uniforme:
- i) Verifique que a primer orden en teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger (RSPT) el nivel fundamental no se altera pero sí el primer nivel excitado, rompiéndose parcialmente la degeneración. ¿Cuál es el signo de esa variación? Interprete físicamente. Obtenga una expresión para la polarizabilidad atómica.
- ii) Utilice el principio variacional de Ritz y la función de prueba $\phi(r) = N \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|)$ (se usaron unidades atómicas), es decir permitiendo un desplazamiento de la distribución electrónica respecto del centro atómico. Halle una ecuación para el desplazamiento que minimice la energía. A partir de ese resultado realice una estimación de la polarizabilidad del átomo de hidrógeno.