

Estructura de la materia 3

2^{do} Cuat. 2021

Serie 2 Átomos

1. Si se incorporan las correcciones relativistas de orden más bajo al hamiltoniano del átomo de hidrógeno (estructura fina W_f), deben sumarse al hamiltoniano no relativista los términos:

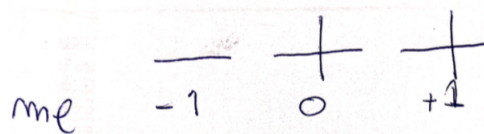
$$W_f = W_{mv} + W_D + W_{so};$$

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

- (a) Con estas correcciones, $[H, \vec{L}] \neq 0$ y $[H, \vec{S}] \neq 0$. Significa esto que el sistema perdió la invariancia rotacional? ¿Existe, en este caso, algún operador relacionado con las rotaciones que conmute con el hamiltoniano?
- (b) Analice cuantitativamente la ruptura de la degeneración en el nivel $n = 2$ del átomo. (Si no desea hacer todas las cuentas, el cálculo completo está efectuado en Quantum Mechanics, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe)
2. Ignorando el acoplamiento espín-órbita, ¿cuál es la degeneración de un estado con L y S dados?. 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 la cantidad total de estados coincide en ambos casos.
3. ¿Qué términos son posibles para las siguientes configuraciones atómicas?
- $(ns)^1(n's)^1$
 - $(ns)^1(n'p)^1$

Regla de Hund

4. La configuración electrónica del estado fundamental del átomo de carbono es $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Encuentre los términos espectrales posibles de acuerdo con las reglas de Hund. Y diga cual es el correspondiente al estado fundamental del Carbono. ¿Cuáles son los determinantes de Slater que pueden participar en la función de onda de ese estado?. Pruebe con el subespacio generado por los estados : $|ab\rangle$ donde $\{a, b = 0, \bar{0}, 1, \bar{1}\}$; representado esquemáticamente en la Figura:



5. Escriba la configuración electrónica correspondiente a cada átomo y halle los términos espectroscópicos posibles. Determine cual es el término espectroscópico correspondiente al estado fundamental en base a las reglas de Hund: Oxígeno, Flúor. Sin hacer cuentas, ¿Por qué el Manganese (Mn, $Z = 25$) atómico es magnético?

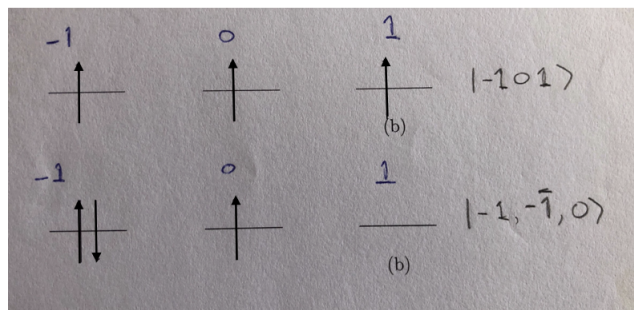
Ejercicios Asterix

1. a) 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 1 s con una carga nuclear efectiva Z^* .

b) Compare el resultado anterior con el que se obtiene de calcular el valor medio de la energía del estado $|1s\alpha 1s\beta\rangle$ para el átomo de He, usando como función 1 s el orbital exacto del átomo He^+ .

Comentario: El orbital 1s exacto del átomo hidrogenoide es: $\phi_{1s} = (Z^3/\pi)^{1/2} e^{-Zr}$. A partir de este orbital, en las pág 366 y siguientes del libro Sakurai (Modern Quantum Mechanics) hay un cálculo explícito de las cantidades J, K .

2. Un átomo de nitrógeno puede tener sus últimos tres electrones en su subcapa $2p$, desapareados o bien solo uno desapareado, como muestra la figura. Encuentre, restringido a los dos casos de la figura, las energías de esos estados. En este contexto, cuál de estos ordenamientos es el de menor energía?. Calcule L^2, S^2 y S_Z de estos estados.



Ayudas:

$$h_{11} = h_{00} = h_{-1,-1}, \quad J_{11} = J_{1,-1} = J_{-1,-1},$$

$$K_{11} = K_{1,-1} = K_{-1,-1}, \quad J_{10} = J_{-10}, \quad K_{10} = K_{-10}$$

donde:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |R_{21}(r) \cdot Y_{1,1}(\theta, \varphi)\rangle, \\ |0\rangle &= |R_{21}(r) \cdot Y_{1,0}(\theta, \varphi)\rangle, \\ |-1\rangle &= |R_{21}(r) \cdot Y_{1,-1}(\theta, \varphi)\rangle \end{aligned}$$

Ayudas

- $\hat{S}^2 = \hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_Z + \hat{S}_Z^2 = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_Z + \hat{S}_Z^2$
- $\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle$