

# TAREA # 4

Física atómica, molecular y materia condensada

Entrega 24 de marzo de 2010 antes de la clase

1. Escribe el Hamiltoniano del átomo de Litio (Li) con número atómico  $Z=3$ . Encuentra la energía del átomo despreciando las interacciones electrón electrón. Escribe la función de onda como un producto de orbitales hidrogenoides.
2. Considera la siguiente función de onda para el átomo de Helio (He),  $\psi = \phi(1)\phi(2)$ , en donde  $\phi(1) = (\zeta^3/\pi)^{1/2}e^{-\zeta r_1}$ , y  $\phi(2) = (\zeta^3/\pi)^{1/2}e^{-\zeta r_2}$ , donde  $\zeta$  es un parámetro. Encuentra la energía del estado base optimizando el parámetro  $\zeta$  para obtener la energía más baja. Calcula las energías de la primera y segunda ionizaciones.
3. Escribe el determinante de Slater para el átomo de Berilio (Be),  $1s^2 2s^2$ . Encuentra las expresiones de las integrales de los potenciales Coulombianos y de intercambio. Encuentra las expresiones de la energía en términos de la aproximación de Hartree-Fock.
4. Con anterioridad se mostró que los números atómicos de los gases raros estaban dados por:

$$Z(\text{He}) = 2(1^2) = 2$$

$$Z(\text{Ne}) = 2(1^2 + 2^2) = 10$$

$$Z(\text{Ar}) = 2(1^2 + 2^2 + 2^2) = 18$$

$$Z(\text{Kr}) = 2(1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2) = 36$$

$$Z(\text{Xe}) = 2(1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2) = 54$$

$$Z(\text{Rn}) = 2(1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 + 4^2) = 86$$

Explica CLARAMENTE el origen de este esquema en términos de la teoría atómica.

5. Encuentra los valores de los momentos angulares  $S$ ,  $L$  y  $J$  de los siguientes estados:  $^1S_0$ ,  $^3P_2$ ,  $^2D_{3/2}$ ,  $^5F_5$  y  $^6H_{5/2}$ .