

Estructura de la materia 3

Verano 2024

Serie 1 Átomos multielectrónicos

1. Calcule los valores de expectación $\langle r \rangle$ y $\langle 1/r \rangle$ de los orbitales 1s y 2s del hidrógeno. ¿Cómo se relaciona el primero con el radio de Bohr a_0 ?
2. 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 siguientes términos, expresados en unidades atómicas ($\hbar = m_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$):

$$W_f = W_{mv} + W_D + W_{so};$$
$$W_{mv} = -\frac{P^4}{8c^2}; \quad W_D = \frac{\nabla^2 V}{8c^2}; \quad W_{so} = \frac{1}{2c^2 r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

- (a) Con estas correcciones, demuestre que $[H, \vec{L}] \neq 0$ y $[H, \vec{S}] \neq 0$. Pruebelo explícitamente para el término de acoplamiento spin-órbita.
 - (b) Pruebe ahora que definiendo el momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, el Hamiltoniano sí conmuta con \vec{J} .
 - (c) Discuta la invariancia ante rotaciones del Hamiltoniano respecto al momento angular \vec{L} y a \vec{J} . Considere ambos casos (ignorando y considerando las correcciones relativistas).
3. (a) Sin tener en cuenta el acoplamiento spin-órbita, ¿Cuántos estados de un átomo multielectrónico hay con los números cuánticos n y l dados?
(b) Muestre que el número total de estados con n y l dados permanece igual si se tiene en cuenta el acoplamiento spin-órbita. Ayuda: recuerde que ahora cada l da lugar a dos estados con momento angular total $j = l \pm 1/2$.

4. Calcular el efecto de las correcciones relativistas W_f para el nivel $n = 2$ del átomo de hidrógeno.

- (a) Detallar el efecto de cada término por separado.
- (b) ¿Qué sucede con la degeneración? ¿De qué números cuánticos depende la energía?

5. Las correcciones de estructura fina para el átomo de hidrógeno se pueden refinar aun más agregando un término que considere la interacción del momento magnético del electrón con el momento magnético nuclear, dado por el spin del protón \vec{I} . El Hamiltoniano de esta interacción es

$$H_{HF} = A \vec{I} \cdot \vec{J}$$

donde A es una constante.

- (a) Definimos el momento angular total atómico $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$, tal que $\vec{F}^2|F, m_F\rangle = F(F+1)|F, m_F\rangle$ y $F_z|F, m_F\rangle = m_F|F, m_F\rangle$ (recuerde que $\hbar = 1$). ¿Qué valores puede tomar F ?

- (b) ¿Cómo modifica esta nueva perturbación los subniveles de $n = 2$ del átomo de hidrógeno del ejercicio anterior? Diga en qué base es diagonal la perturbación. ¿Qué sucede con la degeneración de los niveles encontrados en el ejercicio anterior? Preste especial atención a qué valores de F están permitidos para cada subespacio $2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}$.
- (c) Considere ahora que se enciende un campo magnético externo uniforme débil. Se puede describir la interacción de momento magnético total con este campo a través del Hamiltoniano efectivo

$$H_{Zeeman} = \mu_B g_F \vec{B} \cdot \vec{F} = \mu_B g_F B_z F_z.$$

donde μ_B es el magnetón de Bohr y g_F el momento giromagnético. Utilizando teoría de perturbaciones muestre cómo se modifican los niveles de energía de la estructura hiperfina debido a la presencia del campo.

- (d) Considere ahora que el campo externo es fuerte, de modo que las escalas de energía son órdenes de magnitud que las de la estructura hiperfina. Resuelva el problema ahora considerando que en este régimen el campo ya no se acopla con el momento angular total \vec{F} , sino con \vec{J} . Luego de obtener los niveles para el campo fuerte agregue como perturbación la estructura hiperfina.
- (e) Grafique cualitativamente cómo cambian los niveles de energía en función del campo magnético externo.
6. Escriba la configuración electrónica del estado fundamental del átomo de helio (He). Luego, considere las siguientes configuraciones electrónicas del He excitado:

- $(ns)^1(n's)^1$
- $(ns)^1(n'p)^1$

y diga qué terminos espectroscópicos son posibles para cada una.

7. El estado fundamental del rubidio (Rb) 85 es $5^2S_{1/2}$. Sabiendo que el spin nuclear es $I = 5/2$ diga qué valores puede tomar el momento angular total F . Ordene estos valores de forma creciente en la energía considerando la estructura hiperfina. Repita para el estado $5^2P_{3/2}$.

8. Reglas de Hund

- (a) La configuración electrónica del estado fundamental del átomo de carbono (C) es $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$. Escriba todas las configuraciones posibles de los dos electrones de valencia y encuentre los términos espectroscópicos correspondientes. Utilizando las reglas de Hund, especifique cuál es el fundamental.
- (b) Ordene en forma creciente según el valor de la energía los términos espectroscópicos hallados. Para ello, puede consultar la página del NIST¹. Verifique que el término correspondiente al estado fundamental hallado en el ítem anterior es el correcto.
- (c) Repita los ítems anteriores para el oxígeno (O). Interprete la diferencia en el ordenamiento de los tres términos de más baja energía respecto a los del carbono.
- (d) Elija un átomo con 3 electrones de valencia y repita los ítems anteriores.

¹https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html