

Tarea 4

Entrega: 23 de noviembre de 2023

Problema 1: Primeros estados excitados del átomo de helio

Calcula la energía, a primer orden de aproximación, de los estados excitados del átomo de helio 2^1S , 2^1P , 2^3S y 2^3P . Para hacer este cálculo será necesario obtener explícitamente las integrales de COulomb y de intercambio, J_{nl} y K_{nl} respectivamente. Recuerda que en clase vimos que las energías corregidas están dadas por la expresión

$$E_{nl,\pm} = E_{1n}^{(0)} + E_{nl,\pm}^{(1)} = -\frac{Z^2}{2} \left(1 + \frac{1}{n^2}\right) + J_{nl} \pm K_{nl}.$$

Los niveles de energía quedaban como se ilustra en la siguiente figura:

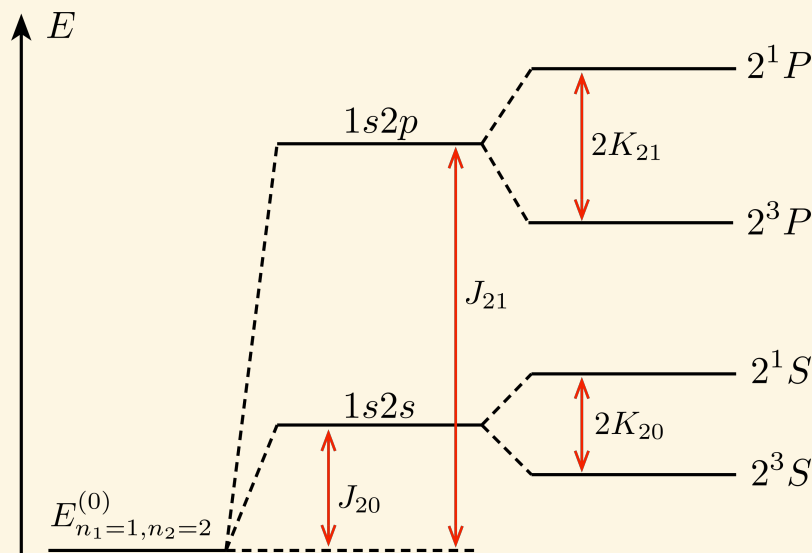


Figura 1: Primeros estados excitados del átomo de dos electrones.

Nota importante: Para resolver este ejercicio puedes usar directamente las integrales que se encontraron en clase para J_{nl} y K_{nl} . Sin embargo, recuerda que éstas quedaban en términos de las variables $r_<$ y $r_>$. Es necesario que expliques con claridad cómo es que estas dos variables se emplean en el cálculo de las integrales, de manera que encuentres una expresión en términos ya no de $r_<$ y $r_>$, sino de r_1 y r_2 (*i.e.*, la coordenada radial de cada electrón). Una vez que hayas dejado este punto claro, las integrales que quedan pueden resolver a mano, o bien, usando cualquier software para hacer la integración. Si decides usar un software, es necesario que especifiques qué programa usaste y que anexes el código al ejercicio.

Problema 2: Extra (valor: +2pt): Configuración electrónica de átomos multielectrónicos

Utilizando el Principio de Aufbau y la Regla de Madelung, construye la configuración electrónica de los siguientes átomos:

- | | | |
|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| (a) Cobre (Cu, $Z = 29$). | (c) Neodimio (Nd, $Z = 60$). | (e) Radón (Rn, $Z = 86$). |
| (b) Arsénico (As, $Z = 33$). | (d) Oro (Au, $Z = 79$). | (f) Neptunio (Np, $Z = 93$). |

Ahora compara tus respuestas con las configuraciones electrónicas reportadas en el libro “Physics of Atoms and Molecules” de B.H. Bransden y C.J. Joachain (en la primera edición de este libro véase la Tabla 7.2 de la página 302). ¿Coinciden tus respuestas con las reportadas en el libro? En los casos en los que no coincidan explica cualitativamente porqué.
