Ejercicios de Física Atómica

<u>Tarea 10 (asignada el 18 de octubre):</u>

Usar el método de Hartree para calcular el estado base del helio. Ambos electrones deben estar en el estado 1s. Resumen del método:

Usar como coordenada radial la cantidad $u = Zr/a_0 = 2r/a_0$. Debe ir al menos hasta u=30 para que la función de onda pueda converger bien. Para valores pequeños de u se necesita pasos muy pequeños, del orden de $\Delta u = 10^{-4}$, para describir bien la función potencial. Diseñar una función potencial V(u) que parezca $-Zke^2/r$ para valores pequeños de r, y que parezca $-ke^2/r$ para valores grandes de r. La transición debería estar cerca de u=1. La forma exacta de esta función no interesa mucho, pues este es apenas un punto de partida. Con este potencial se resuelve la ecuación de Schrödinger para el electrón A, con $\ell = 0$, $R(0) = 1$ y $R'(0) \approx -1$. Este electrón A debe estar en el estado 1s (estado base). Hay que encontrar el valor adecuado de la energía para que R(u) sea normalizable (tienda a cero para valores grandes de u). Luego se calcula la función radial de probabilidad P(u) y su integral S(u):

$P(u) = 4\pi\, u^2 R^2$

$$S(u) = const.\int_0^u P(w)dw$$

La manera de implementar esta integral es:

$$S(u_i) = S(u_{i-1}) + const.\ P(u_i)\ (u_i - u_{i-1})$$

La constante es para normalización; se elige de tal manera que S(u)=1 para valores grandes de u. Es conveniente generar gráficas de R(u) y de P(u). Luego se calcula la función “carga encerrada” (la carga eléctrica encerrada dentro de una esfera de radio “u”):

$Q(u)/e = 2 - S(u)$

Una gráfica de esta función debe tender a 2 en valores pequeños de u, y a 1 para valores grandes. Recordando la ley de Gauss y aprovechando la simetría esférica del problema, la carga encerrada permite calcular el campo eléctrico en cualquier “u” (producido por el núcleo y el electrón A) y de ahí el potencial V(u) experimentado por el electrón B:

$$\frac{\Delta V(u)}{E_0} = \frac{Q(u)/e}{u^2}\Delta u$$

La función potencial V(u) se construye eligiendo un valor inicial V(0), grande pero negativo, y luego calculando V paso por paso:

$$V(u_i) = V(u_{i-1}) + \Delta V(u_i)$$

Es conveniente graficar esta nueva función potencial V(u), junto con las dos funciones asintóticas, para ver si se porta bien en los extremos y ajustar adecuadamente el valor V(0). Con esta función potencial se resuelve la ecuación de Schrödinger para el electrón B. Este electrón también debe estar en el estado 1s. Hay que buscar el valor adecuado de la energía. Con esta nueva función R(u) se vuelve a calcular las funciones P(u), S(u) y Q(u) y V(u). En cada iteración se intercambian los papeles de los electrones A y B, pero eso es sólo una caricatura; los electrones no tienen rótulos, son indistinguibles, y están simultáneamente en el mismo estado. El ciclo se repite en la esperanza de que, después de unas 10 iteraciones, las funciones ya no cambien. Durante el proceso se puede tomar nota de los sucesivos valores de E para verificar que convergen hacia un valor final.

Entregar:

Los detalles de la implementación, las gráficas de las funciones en sus versiones finales, el valor final de E (en eV). Busquen también en la literatura la energía del estado base del helio, y su energía de ionización. Y comentarios, conclusiones, quejas y reclamos…