

PROBLEMAS – PRINCIPIOS DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA – Serie 2

1. Dar una respuesta razonada para el siguiente problema. Para un átomo de H en el estado  $n = 4$  la componente z máxima posible del momento angular orbital es:

a)  $2\hbar$ , b)  $3\hbar$ , c)  $\sqrt{12}\hbar$ , d)  $\sqrt{6}\hbar$

b) Un átomo de Fe tiene la estructura electrónica de estado base  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$ , ¿cuál es la multiplicidad del espín?

2. a) Encuentre los posibles valores del número cuántico L para estados del átomo de carbono que surgen de la configuración electrónica  $1s^2 2s^2 2p^3 d$

b) Encuentre los posibles valores del número cuántico S para estados del átomo de carbono que surgen de la configuración electrónica  $1s^2 2s^2 2p^3 d$

3. a) ¿Qué energía predice la aproximación de electrones independientes para el átomo de Li en su estado base? b) ¿Qué energía predice la teoría de Slater para el átomo de Li en su estado base?

4. Orbitales de Slater. Los orbitales atómicos de Slater están dados por:

$$\varphi_{nlm} = R_n(r) Y_l^m(\theta, \chi)$$

con

$$R_n(r) = N_n r^{n-1} e^{-\zeta r}$$

$$\text{y } \zeta = \frac{Z^*}{n}$$

$Z^*$  es la carga nuclear efectiva del electrón considerado.

- i) Encontrar el factor de normalización de los orbitales en general.
- ii) Calcular el radio más probable, es decir el radio tal que la densidad de probabilidad radial  $P(r) = R_n(r)^2 r^2$  presenta un máximo.
- iii) El método variacional aplicado al He implica la minimización de la energía

$$\langle E \rangle = \int \int \phi^*(1,2) H(1,2) \phi(1,2) d\tau(1) d\tau(2) =$$

$$\int \int 1s'(1) 1s'(2) H(1,2) 1s'(1) 1s'(2) dv(1) dv(2) = \zeta^2 - \frac{27}{8} \zeta$$

Minimize  $\langle E \rangle$  con respecto a  $\zeta$  para obtener el mejor valor de  $\zeta$  y compare con el obtenido con las reglas de Slater para el OA 1s.

5. Las energías experimentales de ionización sucesivas del C son:

$$I_1 = 1090 \text{ kJ/mol}$$

$$I_2 = 2350 \text{ kJ/mol}$$

$$I_3 = 4620 \text{ kJ/mol}$$

$$I_4 = 6230 \text{ kJ/mol}$$

$$I_5 = 37800 \text{ kJ/mol}$$

$$I_6 = 47300 \text{ kJ/mol}$$

Calcular teóricamente, en la aproximación de Slater las diferentes energías y comparar con los resultados experimentales

## 6. MOLÉCULA DIATÓMICA LINEAL.

Vamos a construir una función de onda aproximada del estado fundamental de un sistema diatómico con un solo electrón, como una combinación lineal de dos orbitales atómicos  $\varphi_a$  y  $\varphi_b$

$$\psi = c_a \varphi_a + c_b \varphi_b$$

La energía electrónica asociada es

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$$

a) Encontrar las soluciones  $E_1$  y  $E_2$  en función de:

$$H_{aa} = \langle \varphi_a | \hat{H} | \varphi_a \rangle$$

$$H_{bb} = \langle \varphi_b | \hat{H} | \varphi_b \rangle$$

$$H_{ab} = \langle \varphi_a | \hat{H} | \varphi_b \rangle$$

$$S_{ab} = \langle \varphi_a | \varphi_b \rangle$$

Que satisfaga la condición de que la energía del estado fundamental sea mínima.

Se supone que  $H_{aa} < H_{bb} < 0$ ,  $H_{ab} < 0$  y  $S_{ab} > 0$

b) Mostrar que para  $S_{ab}$  pequeño, se obtiene:

$$E_1 \sim \frac{1}{2} \left( H_{aa} + H_{bb} - \sqrt{(H_{bb} - H_{aa})^2 + 4H_{ab}^2} \right)$$

$$E_2 \sim \frac{1}{2} \left( H_{aa} + H_{bb} + \sqrt{(H_{bb} - H_{aa})^2 + 4H_{ab}^2} \right)$$

c) Mostrar que si  $H_{aa} \sim H_{bb}$  se obtiene

$$E_1 \approx \frac{H_{aa} + H_{ab}}{1 + S_{ab}}$$

$$E_2 \approx \frac{H_{bb} - H_{ab}}{1 - S_{ab}}$$