

Tarea 2.

1. Cálculo variacional completo del estado base de helio.

a) Demostrar que la función

$$\psi_{1s}(r, \theta, \phi) = \phi_{1s}^{\mathcal{Z}}(r) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\mathcal{Z}}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-\mathcal{Z}r/a_0)$$

está normalizada.

b) La función en el punto anterior es eigenfunción del Hamiltoniano hidrogenoide con carga nuclear \mathcal{Z} correspondiente al eigenvalor

$$E_{1s} = -\frac{mc^2 \alpha^2 \mathcal{Z}^2}{2}$$

Demostrar que esta energía se puede escribir como:

$$E_{1s} = -\frac{\mathcal{Z}^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0}$$

c) Demostrar que

$$\int \psi_{1s}^*(r, \theta, \phi) \frac{(2 - \mathcal{Z}) e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi_{1s}(r, \theta, \phi) dV = \frac{\mathcal{Z}(2 - \mathcal{Z}) e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$$

d) Emplear el desarrollo:

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2k+1} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \sum_{\mu=-k}^k Y_{k\mu}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{k\mu}(\theta_2, \varphi_2)$$

para calcular la parte angular del valor esperado de $1/r_{12}$. Recordar que $r_{>}$ ($r_{<}$) es la mayor (menor) de las coordenadas radiales de los dos electrones. Demostrar que el único término diferente de cero se obtiene cuando $k = \mu = 0$, resultando:

$$\begin{aligned} & \int \int |\psi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{1s}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2 = \\ & = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^{\infty} r_1^2 dr_1 \int_0^{\infty} r_2^2 dr_2 |\phi_{1s}(r_1)|^2 |\phi_{1s}(r_2)|^2 \frac{1}{r_{>}} \end{aligned}$$

e) Evaluar esta integral radial doble empleando la función radial del punto a. (Sugerencia: Para fijar el valor de $r_>$ en el denominador conviene dividir la integral sobre r_1 en una integral que se evalúa de 0 a r_2 y otra de r_2 a infinito. En el primer intervalo $r_1 < r_2$ mientras que en el segundo intervalo $r_1 > r_2$.)

f) Escribir el valor esperado del Hamiltoniano para estas funciones de onda como sumas de los términos de los incisos anteriores ($2(b) - 2(c) + (e)$). Si se emplea la carga nuclear efectiva \mathcal{Z} como parámetro, calcular el mínimo de este valor esperado. ¿A qué valor de \mathcal{Z} corresponde? ¿Cuánto vale la energía para esta \mathcal{Z} ? ¿Cómo se compara este valor con la energía de amarre experimental para helio $E = -79.0 \text{ eV}$?

2. Los incisos (d) y (e) del ejercicio anterior también sirven para calcular el valor esperado de la repulsión electrón-electrón con funciones hidrogenoides con $Z = 2$. Haciendo esta sustitución ¿cuál es este valor esperado? Si se le suma a la energía $h_1 + h_2$ ¿qué energía se obtendría para el estado base si se utiliza teoría de perturbaciones. (Notar que para este ejercicio no hay que calcular ninguna integral, sólo hay que hacer la sustitución $\mathcal{Z} = 2$ en el resultado 1.e.)