Tarea 3.

1. Considerar la parte de un electrón del Hamiltoniano del átomo de helio

$$\begin{aligned} H_0(1, 2) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \\ &= h(1) + h(2) \end{aligned}$$

Demostrar que el valor esperado de este Hamiltoniano de un electrón evaluado para la configuración excitada $1sn\ell$ es el mismo para tripletes y singletes, y es igual a:

$$\langle H_0 \rangle_{1s,n\ell} = \langle h \rangle_{1s} + \langle h \rangle_{n\ell}$$

donde los valores esperados de la derecha se calculan para orbitales de un solo electrón.

2. Cálculo muy sucio de los niveles de energía de los estados $1snp \ ^1P$ de helio. Suponer que la función de onda del electrón $1s$ es puramente hidrogenoide con carga nuclear $Z = 2$, y que la función de onda del electrón np es también hidrogenoide, pero que ve una carga nuclear apantallada $Z' = 1$. Despreciar cualquier otro efecto de la repulsión electrónica. Sin evaluar ninguna integral ¿cuál es la energía de estos estados para $n = 2, 3$ y 4 ? Recordando que el estado base $1s^2 \ ^1S$ de helio tiene una energía de -79.0 eV ¿cuál es la diferencia en energía entre cada uno de estos estados y el estado base? La diferencia de energías experimental es de 21.217 eV para el $2p$, 23.086 eV para el $3p$ y 23.741 eV para el $4p$. ¿Qué tan bueno es este cálculo "sucio"? ¿Cuál es la energía de ionización del primer electrón (esto es, la energía necesaria para hacer $n \rightarrow \infty$)?

3. En el mismo espíritu del ejercicio anterior, calcular la energía del estado doblemente excitado $2s3p \ ^1P$ en helio. ¿Cuál es la diferencia de energía entre este estado y el estado base $1s^2 \ ^1S$? Comparar el resultado con el valor experimental de 63.655 eV . Utilizar la energía de ionización del primer electrón del ejercicio anterior para calcular la energía cinética con la que se desprende un electrón cuando este estado se autoioniza? ¿Cuál es la energía de los estados doblemente excitados $2snp \ ^1P$ con $n = 4$ y 5 ? ¿Cuál es el límite de esta serie de estados autoionizantes ($n \rightarrow \infty$)?