

---

**Práctica de Estructura de la Materia, Univ. Complutense**  
**Grupo A (Felipe Llanes Estrada) Comprobación de la regla de Madelung**

El objetivo de esta práctica es, en un modelo muy ingenuo del átomo de diecinueve electrones, comprobar que en efecto el orbital  $4s$  (Potasio) se ocupa antes que el  $3d$ .

1. Cree un directorio `DATA.DIR` para guardar sus resultados. Compruebe que el archivo `HydrogenWavefunctions.f` contiene las funciones de onda del átomo hidrogenoideo de carga  $Z$  con un cierto apantallamiento, tanto mayor cuanto más alto es el nivel de energía.
2. Abra el archivo `CheckNorms.f` y varíe el número de puntos y el máximo  $r$  de la rejilla de integración. Compílelo junto con el del apartado anterior y ejecute el programa tantas veces como sea necesario variando  $N$ ,  $R_{cut}$  hasta que todos los orbitales estén normalizados a 1 en buena aproximación.
3. Abra el archivo `PaintChargeDistribution.f`, y utilícelo junto con `HydrogenWavefunctions.f` para dibujar las distribuciones radiales de carga de los distintos orbitales. Compruebe que en el directorio `DATA.DIR` se encuentran en efecto los ficheros con los orbitales como función de  $r$ . Dibújelos con el programa `xmgrace`. ¿En qué unidades están expresados los ejes? ¿Por qué factor debe multiplicar cada columna de los ficheros de datos para volver a una unidad del sistema internacional?
4. Modifique `PaintChargeDistribution.f` para guardar la distribución de carga de los primeros 18 electrones. Dibújela. Dibuje también con ella la distribución de probabilidad ( $\times 100$ ) de los orbitales  $3d$ ,  $4s$ .
5. Emplee `Integral3d_or_4s.f` para calcular la integral triple que nos indicaría si el nivel  $3d$  se llena o no antes que el  $4s$ . Decida cuál es el orden de llenado correcto. ¿Cuántos puntos  $N_r$ ,  $N_x$ , y hasta qué distancia  $R_{cut}$  debe integrar para que el error sea despreciable para responder esta pregunta?
6. Si anula  $int_x = 0$  en el programa para ver la carga nuclear sin apantallar, ¿obtiene los resultados esperados según la teoría del átomo hidrogenoideo? Recuerde que  $-|V| = -2|E|$  debido al teorema del virial (la energía cinética, positiva, y no incluida aquí, reduce la energía de ligadura).
7. Dibuje el potencial apantallado para  $l = 0$ ,  $l = 2$ , veces el Jacobiano  $r^2$ .
8. Discuta si los apantallamientos de los distintos orbitales son realistas. ¿Son éstos ortogonales entre sí? ¿Qué mejoras aportaría un cálculo completo de Hartree-Fock?
9. Suma al resultado del programa el cálculo del valor esperado de la energía cinética para el electrón  $4s$  (ó  $3d$ ) y prediga el potencial de ionización del Potasio. El valor experimental es  $4.34 \text{ eV}$ .