Estructura de la Materia, Junio 2018

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

12 de Junio de 2018(1)

Examen de Junio de Estructura de la Materia, grupo A

Nombre y Apellidos:

Firma y DNI:

El examen consta de teoría y problemas. Justifique las respuestas, excepto cuando sean de elección múltiple, o no se tendrán en cuenta. Los problemas sí necesitan respuestas justificadas, como siempre. Hay algunas ayudas al final de los enunciados.

C1 [10 puntos] El protón y el neutrón tienen masas muy parecidas pero no iguales, $m_pc^2 = 938.28\,\text{MeV}, m_nc^2 = 939.57\,\text{MeV}$. Leo en un libro el siguiente comentario: "sería desastroso para la estabilidad de la materia que el protón fuera más pesado que el neutrón". Explique por qué sería desastroso.

C2 [10 puntos] Tres son las interacciones fundamentales en el mundo atómico y subatómico: fuerte (SI), electromagnética (EMI) y débil (WI). Las siguientes reacciones entre partículas elementales son de uno de los tres tipos. Diga de cuál. Escriba a continuación de las reacciones.

a) $\pi^- + p \to \pi^0 + n$,

b) $p + \bar{p} \to \nu_e + \bar{\nu}_e$,

c) $p + \bar{p} \to \pi^+ + \pi^-$,

d) $p + \bar{p} \to \gamma + \gamma$,

C3 [40 puntos] [de Teoría] La estructura fina del átomo de hidrógeno o de los hidrogenoideos es la suma de tres términos: enumere (sólo enumere) esos términos. Explique brevemente pero con sentido el término de las correcciones relativistas a la velocidad del electrón en el estado $|nlm\rangle$ (el valor medio que hay que calcular, a cuántos sumandos da lugar, etc) y cómo modifica dicho término la energía de Bohr correspondiente. No olvide los órdenes de magnitud ni la dependencia en m, si la hubiera. Haga **un=1** comentario curioso. Ayuda: ver abajo.

C4 [40 puntos] [Energía umbral] Encontrar razonadamente (o sea, que algo tiene que decir sobre sistemas de referencia, por lo menos para una reacción) las energías umbrales de las siguientes reacciones, suponiendo que los protones usados como blanco están en reposo. Dejar el resultado en funcion de las masas m_pc^2, m_nc^2, etc de las partículas interactuantes pero dar también la aplicación numérica (con tabla del Griffiths) en MeV.

1) $p + p \to p + p + \pi^+ + \pi^-$,

2) $\pi^- + p \to p + \bar{p} + n$,

P1 [150 puntos] Un modelo atómico describe el átomo como un núcleo central puntual de carga $+Ze$ rodeado de un gas de N electrones y estima que la energía total de los electrones viene dada por la suma de tres términos

$$E_{tot} = A\frac{\hbar^2}{m_e}\int d^3\mathbf{r}[\rho(r)]^m - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3\mathbf{r}\,\frac{\rho(r)}{r} + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3\mathbf{r}_1\int d^3\mathbf{r}_2\,\frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

A estos términos los llamaremos E_K, E_{ext}, E_H, respecticamete. Observándolos cuidadosamente se entiende muy bien su expresión matemática: E_K representa la energía cinética de los electrones siempre y cuando m, una constante positiva, tenga un valor concreto y no otro; E_{ext} es la energía potencial Coulombiana de la nube electrónica atraída por el núcleo cargado; y E_H es la energía de Hartree o de repulsión de los electrones. En estas fórmulas $\rho(r)$ denota el número de electrones por unidad de volumen y depende sólo del módulo de $\mathbf{r}$ pero no de su dirección. El modelo establece que cuando $\rho(r)$ tiene una expresión física sensata, la energía total del **estado fundamental** del átomo **neutro** es proporcional a una potencia del número atómico Z,

$$E_{gs} = -b\,Z^s, \tag{1}$$

donde b es una constante positiva con dimensiones de energía, y s es una constante adimensional.

Aquí empieza el ejercicio. Si $\rho(r)$ viene dada por la función de prueba (muy razonable, por cierto)

$$\rho(r) = C\,e^{-r/R},$$

se pide:

1) Calcular la constante C para que $\rho(r)$ esté normalizada en todo el espacio a N, el número total de electrones. R es una longitud positiva.

2) Determinar el valor de m que aparece en E_K por análisis dimensional, o por comparación con el modelo de Thomas-Fermi, o como usted sepa. A es una constante adimensional. Rellene, por favor:

$$\boxed{m = 5/3}$$

3) Con el valor de m obtenido en el apartado anterior, calcular (hay que hacer las integrales, claro está) E_K y E_{ext}. Formato, el de la pizarra,

$$\boxed{E_K = C_1 \frac{N^{5/3}}{R^2} \quad , \quad E_{ext} = -C_2 \cdot \frac{ZN}{R}}$$

siendo $C1$ y $C2$ las constantes positivas

$$\boxed{C_1 = A \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{27}{500} \frac{1}{\pi^{2/3}} \quad , \quad C_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}$$

4) Escribir E_{tot} sabiendo que $E_H = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{5\,N^2}{32R}$ (he calculado yo la energía de Hartree porque era más larga de hacer, se la regalo). Teniendo en cuenta que E_{tot} depende de Z, de N y de R, derivar E_{tot} con respecto a R para determinar su mínimo. Este mínimo será la energía del estado fundamental del gas E_{gs} y R_{min} dará una idea del tamaño de la nube electrónica.

5) Particularizar E_{gs} y R_{min} para el caso de un átomo neutro ($N = Z$), y comprobar si se cumple la ley (1). ¿Coincide la potencia s con la del modelo de Thomas-Fermi?

6) Aplicación numérica: sabiendo que $A = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\frac{\pi^2}{2}$, calcular para el caso de un átomo de carbono E_{gs} en eV así como el tamaño del mismo. Formato: la energía E_{gs} en unidades $e^2/4\pi\varepsilon a_0 = 2\,|E1| = 27.2113\,\text{eV}$, R como un múltiplo de a_0.

P2 [xxx puntos] Acople un electrón s y un electrón p de la configuración electrónica $4s^1 4p^1$, via:

a) acoplamiento LS (o Russell-Saunders)

b) acoplamimneto jj,

e identifique los estados resultantes con los numeros cuánticos ${}^{2s+1}L_J$ en el caso a) y con $[j_1, j_2]_J$ en el b).

c) Utilizando las reglas de Hund, diga en el caso a) cuál es el estado fundamental.

d) Atreviéndose a usar estas mismas reglas para ordenar energéticamente todos los estados (se puede, pruebe) escriba estos de **menor a mayor** energéticamente hablando.

e) Resultará que en ese mismo orden van también los $[j1, j2]_J$, energéticamente hablando, insisto. Escriba el orden de estos pues.

Usted puede necesitar (o no) alguno de los siguientes datos:

En la siguiente lista de armónicos esféricos, θ, φ son los ángulos polar y azimutal, respectivamente, de las coordenadas esféricas. Asterisco significa el complejo conjugado. Las funciones de onda radiales $R_{nl}(r)$ son las del hidrógeno ($Z = 1$), y a_0 es el radio de Bohr.

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \qquad \frac{e^2}{4\pi\varepsilon a_0} = 2\,|E1| = m_e c^2 \alpha^2$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}, \quad Y_1^{-1} = -Y_1^{1*},$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right), \quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi}, \quad Y_2^{-1} = -Y_2^{1*},$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}, \quad Y_2^{-2} = Y_2^{2*}.$$

$$L_+ Y_l^m = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\,\hbar\, Y_l^{m+1}, \quad L_- Y_l^m = \sqrt{l(l+1) + m(-m+1)}\,\hbar\, Y_l^{m-1}.$$

$$R_{10} = 2\, a_0^{-3/2} \exp(-r/a_0),$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}\, a_0^{-3/2}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\exp(-r/2a_0), \quad R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}\, a_0^{-3/2}\frac{r}{a_0}\exp(-r/2a_0),$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}\, a_0^{-3/2}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right)\exp(-r/3a_0)$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nl} = \frac{1}{n^2\, a_0}, \quad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl} = \frac{2}{n^3\,(2l+1)\, a_0^2}, \quad \left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nl} = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1)\, a_0^3}.$$

Estructura de la Materia. June 2018

(a) Suppose that the masses of n and p are interchanged, so that

$$m_p c^2 = 939.57\ \text{MeV}, \quad m_n c^2 = 938.28\ \text{MeV}.$$

In that case, the following reaction is permitted,

$$p \to n + e^+ + \nu_e, \quad \left[\begin{matrix}\text{weak}\\ \text{interaction}\end{matrix}\right],$$

both, kinematically speaking since

$$m_p \geq m_n + m_{e^+} + \cancel{m}_{\nu_e}, \quad (\cancel{m}_{\nu_e} \to 0)$$

and by conservation of baryon number. And not only baryon number, but all the other numbers you may imagine. And if allowed also most possible and probable. Consequences of this reaction are:

1) Hydrogen could not exist ... the positron coming from: $p \to n + \nu_e + e^+$ would react with the electron of the Hydrogen producing

$$e^+ + e^- \to \gamma + \gamma$$

... conclusion... just light.

2) Hydrogen is the fuel of stable long-lived stars. These could not exist either. (our sun)

3) Without hydrogen ($\equiv$ stable protons) there could be no water and probably no biology.

4) Even more, Physicists think that the quotient

$$\frac{m_n c^2}{m_p c^2} = 1.00137841887$$

is not "just another number"... but one that allows our Universe ~~as~~ it is: with a possibility of complex chemistry...

exam answer

(C2) a) $\pi^- + p \to \pi^0 + n$ SI

b) $p + \bar{p} \to \nu_e + \bar{\nu}_e$ WI

c) $p + \bar{p} \to \pi^+ + \pi^-$ SI

d) $p + \bar{p} \to \gamma + \gamma$ EMI

· Reasons:

b) neutrinos are characteristic of WI.

d) photons enter in EMI

a), b): need to decide if strong or weak: one hadrons. look at the quark content:

a): $\pi^- + p \longrightarrow \pi^0 + n$

$\bar{u}d + uud \qquad u\bar{u} \qquad udd$

$d\bar{d}$

LHS: net content in quarks: dud

RHS: $u\cancel{\bar{u}}\,\cancel{u}dd$: udd } udd in any case.

$d\cancel{\bar{d}}/u\cancel{d}d$ udd

LHS & RHS have the same quark content

then SI.

Same reason.

$p + \bar{p} \longrightarrow \pi^+ + \pi^-$

$uud\ \bar{u}\bar{d}\bar{d} \qquad u\bar{d}\ \bar{u}d$

"0" "0".

Notice: $\Lambda \to p^+ + \pi^-$: WI

$uds \qquad \underbrace{uud + \bar{u}d}$

LHS: uds, udd = RHS

The content of quarks in the LHS is not as in the RHS, that is characteristic of WI.

(C3) [clase] [Pero hay unos "básicos"].

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS
DEPARTAMENTO DE FISICA TEORICA
28040 MADRID - ESPAÑA
TELEF. (91) 449 04 78
TELEX: 47273 FFUC - E

(C4) [Particle-theoretic setting]
consider the reaction

$$A+B \to D_1+D_2+\cdots+D_N$$ ↙ product particles

$$p_1 \quad p_2 \quad p_{D_1} \quad p_{D_2} \quad \cdots$$ quadrimomentum

In the system where the particle B is at rest (we need to say that B is heavier than A for ~~A~~ fundamental practical reasons),

$$p_1+p_2=\begin{pmatrix} E_A/c \\ \vec{p} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} m_B c \\ 0 \end{pmatrix}.$$

In the CM system,

$$p_{D_1}+p_{D_2}+\cdots+p_{D_N}=\begin{pmatrix} E_{D_1}/c \\ \vec{q}_1 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} E_{D_2}/c \\ \vec{q}_2 \end{pmatrix}+\cdots+\begin{pmatrix} E_{D_N}/c \\ \vec{q}_N \end{pmatrix}$$

$$\underset{\text{by definition of CM system}}{=}\begin{pmatrix} E_{D_1}/c+E_{D_2}/c+\cdots+E_{D_N}/c \\ \vec{0} \end{pmatrix}$$

[a pesar de que los alumnos digan que sí. Es no]

obviously,

$$p_1+p_2 \neq p_{D_1}+\cdots+p_{D_N}$$

(are in two different reference systems) but

$$(p_1+p_2)^2=(p_{D_1}+\cdots+p_{D_N})^2 \qquad [*]$$

because both, left and right, are Lorentz invariant.
However, E_A is not the threshold energy unless

$$\vec{q}_1=\vec{q}_2=\cdots=\vec{q}_N=0$$

(the outcoming particles have no kinetic energy to move). Under the assumption

$$E_A=E_{threshold},$$

i.e., when

$$\vec{q}_1=\vec{q}_2=\cdots=\vec{q}_N=0,$$

we have that [*] is

or threshold

$$LHS = p_1^2 + p_2^2 + 2p_1p_2 = m_A^2c^2 + m_B^2c^2 + 2E_{min}\cdot m_B$$

$$RHS = (p_{D1} + \dots p_{DN})^2 = \Big(\underbrace{m_{D1}c + m_{D2}c + \dots + m_{DN}c}_{\vec{0}}\Big)^2$$

$$= (Mc)^2$$

with

$$M \equiv m_{D1} + m_{D2} + \dots + m_{DN}$$

Then

$$E_A \geq E_{min} \equiv \frac{M^2c^2 - m_A^2c^2 - m_B^2c^2}{2m_B}$$

Application to the reactions

1) $p + p \to p + p + \pi^+ + \pi^-$, 2) $\pi^- + p \to p + \bar{p} + n$

1) $M = 2m_p + 2m_{\pi^+}$ ($m_{\pi^+} = m_{\pi^-}$ OJO)

$$E_{min} = \frac{c^2}{2m_p}\left[(2m_p + 2m_{\pi^+})^2 - 2m_p^2\right]$$

$$= \frac{c^2}{2m_p}\left[2m_p^2 + 4m_{\pi^+}^2 + 8m_pm_{\pi^+}\right]$$

$m_{\pi^+} = 139.569 \frac{MeV}{c^2}$

$$= c^2\left[m_p + \frac{2m_{\pi^+}^2}{m_p} + 4m_{\pi^+}\right]$$

$= 1538.07$ MeV

$\simeq 1538$ MeV

2) $m_nc^2 = 939.573$ MeV

$\pi^- + p \to p + \bar{p} + n$

$$E_{min} = \frac{c^2}{2m_p}\left[(2m_p + m_n)^2 - m_\pi^2 - m_p^2\right]$$

$$= c^2\left[\frac{3}{2}m_p + 2m_n + \frac{1}{2m_p}(m_n^2 - m_\pi^2)\right]$$

$= 8746.62$ MeV

(P1) 1) $\rho(r) = C e^{-r/R}$

$$N = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\, \rho(r)$$

$$= C \cdot 4\pi \int_0^\infty dr\, \underline{\underline{r^2}}\, e^{-r/R}$$

angles

$$= C \cdot 4\pi R^3 \int_0^\infty \frac{dr}{R} \cdot \left(\frac{r}{R}\right)^2 e^{-r/R}$$

$$= C\ 4\pi R^3 \underbrace{\int_0^\infty du \cdot u\ u^2 e^{-u}}_{=2}, \quad u \equiv \frac{r}{R}$$

$$= C\ 8\pi R^3$$

Then $N = C\, 8\pi R^3$ or $\boxed{C = \frac{N}{8\pi R^3}}$

Y no $N = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\, |\rho|^2 = N$

$\rho \neq \psi$ = función ondas

El que hace números lo sabe

[Obviously, from $N = \int d^3\vec{r}\, \rho$,

$$[\rho] = L^{-3}$$

since [exponentials] = 1 dimensionless

and $[C] = L^{-3}$, as expected

L

The potential energy

$$E_{ext} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \underbrace{\int d^3\vec{r}\, \frac{\rho(r)}{r}}$$

this part has dimensions L^{-1} as expected.

Integrals

$$\int_0^\infty dx\, e^{-ax} = \frac{1}{a}, \quad a > 0$$

$$\int_0^\infty dx\, x e^{-ax} = \frac{1}{a^2}$$

$$\int_0^\infty dx\, x^2 e^{-ax} = \frac{2}{a^3}$$

$$\int_0^\infty dx\, x^3 e^{-ax} = \frac{3!}{a^4}, \quad \int_0^\infty dx\, x^4 e^{-ax} = \frac{4!}{a^5}$$

Solución.

$$\int d^3\vec r\, \frac{\rho(r)}{r} = 4\pi \int_0^\infty dr\, r\rho(r)$$

$$= 4\pi C_1 \int_0^\infty dr\, r\, e^{-r/R}$$

$$= 4\pi C R^2 \int_0^\infty \frac{dr}{R}\left(\frac{r}{R}\right) e^{-r/R}$$

$$= 4\pi C_1 R^2 \underbrace{\int_0^\infty du\, u\, e^{-u}}_{=1}$$

$$= 4\pi C R^2$$

pongo C1 hasta el final, no substituyo...

$$= \underline{8\pi C R^3} \cdot \frac{1}{2R}$$

$N = 8\pi C R^3$

$$= \frac{N}{2R}.$$

Then, $\boxed{E_{ext} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{N}{2R}}$,

$$\boxed{E_{ext} = -C_2 \frac{ZN}{R} \qquad C_2 = \frac{1}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}$$

nunca se hace.
no se pone $\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}$

C_2 is a positive constant.

The kinetic energy

$$E_K = A\frac{\hbar^2}{m_e}\int d^3\vec r\, \rho^m$$

where

$[E_K] = E$ = energy
$[A]$ = dimensionless = 1 (said in the exam)
$\left[\frac{\hbar^2}{m_e}\right] = E \times L^2$
$\left[\int d^3\vec r\, \rho^m\right] = L^3 \cdot L^{-3m}$,

or

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS
DEPARTAMENTO DE FISICA TEORICA
28040 MADRID-ESPAÑA
TELEF. (91) 449 04 78
TELEX: 47273 FFUC-E

$$\left[\int d^3\vec{r}\, \rho^m\right] = L^3 L^{-3m} = \frac{E}{EL^2} = L^{-2} \implies \boxed{m = \frac{5}{3}}$$

El que ponga $m = \frac{2}{3}$ llega a R_{min} ($Z=N$) = ni ne peñita. lo que le decidera de que apruebe mal

calculate then

$$E_K = A\frac{\hbar^2}{m_e}\int d^3\vec{r}\,\rho^{5/3}$$

solution:

$$\int d^3r\,\rho^{5/3} = 4\pi C^{5/3}\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-\frac{5r}{3R}}$$

$$= 4\pi C^{5/3} R^3 \int_0^\infty \frac{dr}{R}\left(\frac{r}{R}\right)^2 e^{-\frac{5}{3}\frac{r}{R}}$$

we resubs C (por ligereza de escritura)

$$= 4\pi C^{5/3} R^3 \underbrace{\int_0^\infty du\, u^2 e^{-\frac{5}{3}u}}_{=2\left(\frac{3}{5}\right)^3}$$

$$= 8\pi C^{5/3} R^3 \left(\frac{3}{5}\right)^3$$

$$= 8\pi\left(\frac{N}{8\pi}\right)^{5/3}\frac{1}{R^2}\left(\frac{3}{5}\right)^3$$

$$C = \frac{N}{8\pi R^3}$$

$$= \frac{27}{500\,\pi^{2/3}}\frac{N^{5/3}}{R^2}.$$

Then

$$E_K = A\frac{\hbar^2}{m_e}\frac{27}{500\,\pi^{2/3}}\frac{N^{5/3}}{R^2} \quad \text{or}$$

$$\boxed{E_K = C_1\frac{N^{5/3}}{R^2} \quad \text{with} \quad C_1 \equiv A\frac{\hbar^2}{m_e}\frac{27}{500\,\pi^{2/3}}}$$

Finally

$$E_H = \frac{5}{32}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{N^2}{R}$$

as I have calculate.

The total energy is then

$$E = E_K + E_{ext} + E_H$$

$$= C_1\frac{N^{5/3}}{R^2} - C_2\frac{ZN}{R} + C_3\frac{N^2}{R} \qquad [*]$$

with C_1, C_2, C_3 positive constants (with units) defined as

$$C_1 \equiv \frac{\hbar^2}{m_e} A \, \frac{27}{500\pi^{2/3}} \,,$$

$$C_2 \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2}$$

$$C_3 \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{5}{32}$$

Observe that now, E is now E(R)

The ground state energy is the result of minimizing E(R) with respect to R.

$$\frac{dE}{dR} = -2C_1\frac{N^{5/3}}{R^3} + C_2\frac{ZN}{R^2} - C_3\frac{N^2}{R^2}$$

which gives ($\frac{dE}{dR}=0$ gives R_{min})

$$R_{min} = \frac{2C_1 N^{2/3}}{C_2 Z - C_3 N}.$$

$$\left[\ \frac{dE}{dR} = 0 = \frac{N}{R^2}\left[-2C_1\frac{N^{2/3}}{R} + C_2 Z - C_3 N\right]\ \right]$$

substituted $R=R_{min}$ in $E(R)$ is obtained E_{gs},

$$E_{\substack{\text{ground}\\\text{state}}} \equiv E(N,Z) = -\frac{1}{4}\frac{N^{1/3}}{C_1}(C_2 Z - C_3 N)^2$$

Properties

$$RE = C_1\frac{N^{5/3}}{R} - C_2 ZN + C_3 N^2$$

as in [*] in pg 7

$$= \frac{\cancel{C_1} N^{5/3}}{2\cancel{C_1} N^{2/3}}(C_2 Z - C_3 N) - C_2 ZN + C_3 N^2$$

$$= \frac{N}{2}(C_2 Z - C_3 N) - C_2 ZN + C_3 N^2$$

$$= -\frac{C_2}{2} ZN + \frac{C_3}{2} N^2$$

$$= \frac{1}{2}(C_3 N - C_2 Z)N \,.$$

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FISICA
28040 MADRID-ESPAÑA
TELEF. (91) 449 04 78
TELEX: 47273 FFUC-E

$$E_{gs} = -\frac{1}{2}\frac{(C_3 N - C_2 Z)^2 N}{2C_1 N^{2/3}}$$

$$= -\frac{1}{4}\frac{N^{1/3}}{C_1}(C_2 Z - C_3 N)^2$$

L

For a neutral atom $(Z=N)$,

$$\boxed{E_{gs} = -\frac{1}{4}\frac{(C_2-C_3)^2}{C_1} Z^{7/3}, \quad R_{min} = \frac{2C_1}{C_2-C_3}\frac{1}{Z^{1/3}}.}$$

notice that when $(Z=N)$, $E_{gs} = -\left[\begin{smallmatrix}\text{a positive}\\ \text{const}\end{smallmatrix}\right] Z^{7/3}$, with $7/3$ as in a TF model.

Numerical application (me escollo para los alumnos, lo creen muy fácil y ay! no lo saben hacer!!!!).

$\frac{(C_2-C_3)^2}{C_1}$ is a number times $\frac{\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2}{\frac{\hbar^2}{m_e}}$,

$\frac{C_1}{C_2-C_3}$ is a number times $\frac{\frac{\hbar^2}{m_e}}{\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)}$

From fundamental formulae, such as

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\hbar c} \;,\; a_0 \equiv \frac{\hbar}{m_e c\alpha}$$

one deduces that

$$\frac{\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2}{\frac{\hbar^2}{m_e}} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} = 2|E_H|$$

$$\frac{\frac{\hbar^2}{m_e}}{\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)} = a_0.$$

and then $(Z=N)$ and $A = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3} \frac{\pi^2}{2}$,

$$E_{gs} = -\frac{15125}{41472}\left(\frac{3}{\pi^2}\right)^{1/3} Z^{7/3} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} = -6.673\, Z^{7/3}\, eV,$$

$$R_{min} = \frac{216}{1375}(3\pi)^{2/3} Z^{-1/3} a_0 = 0.7009\, Z^{-1/3} a_0,$$

that in the core of carbon $(Z=6)$ is

$$\boxed{\begin{array}{l} E_{gs} = -436.500\, eV \\ R_{min} = 0.3857\, a_0 \end{array}}$$

This is an upper limit to the ground state energy.

(P2) This is not a problem of composition of angular momenta but also of degeneration and **counting** of states.

$4s^1 4p^1$ is s^1p^1: two non-equivalent electrons.

electron 1		electron 2	
[2 states]	x	[6 states]	= 12 states.
$l_1=0$		$l_2=1$	

$L = l_1+l_2, \ldots |l_1-l_2| = 1$, $M_L = 1, 0, -1$

$S = 1, 0$

a) LS coupling

L	S	J	$2J+1$	sum of $2J+1$
1	1	2, 1, 0	5, 3, 1	9
1	0	1	3	3
				12 states.

terms of the configuration: $^3P_2$, $^3P_1$, $^3P_0$, $^1P_1$

alumnos míos: se cuenten estados. No es solo componer "momentos angulares".

b) jj coupling

$j_1 = l_1 + s_1 = 0 + 1/2 = 1/2$

$j_2 = |l_2 + s_2|, \dots |l_2 - s_2| = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$

j_1	j_2	J	$2J+1$	sum of $2J+1$
1/2	3/2	2, 1	$\boxed{5, 3}$	8
1/2	1/2	1, 0	$\boxed{3, 1}$	4
				12

Terms: notation: $[j_1, j_2]_J = [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]_0, [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]_1, [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]_2, [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]_1$

c) Hunds rules: ground state $^3P_0$

d) Same rules say that

1st rule $(^3P) < {}^1P$ ← without specifying an order yet

2nd rule $(P) = (P)$ not effective here

3rd rule $\underbrace{^3P_0 < {}^3P_1 < {}^3P_2}_{\text{orders these terms}} < {}^1P_1$

e) Same order is $[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]_0 < [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]_1 < [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]_2 < [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]_1$