①

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

29 de Mayo de 2019 (1-2)

Examen Final de Estructura de la Materia, grupo A

Nombre y Apellidos:

Firma y DNI:

Justifique las respuestas que lo precisen o no se tendrán en cuenta. Los problemas sí necesitan respuestas justificadas, como siempre. Hay algunas ayudas al final de los enunciados. El examen son 700 puntos.

C1 [10 puntos] Si el electrón tuviera spin 3/2 en lugar de 1/2, ¿cuál sería el número atómico Z de los dos primeros elementos inertes (sólo escriba los números, no se piden cálculos)

Sol: $Z =$ 4 y $Z =$ 20

C2 [30 puntos] ¿Por qué no se observa $S = 3/2$ en el Litio si, a fin de cuentas, tiene tres electrones?

Sol:

C3 [30 puntos] ¿Cuáles de las siguientes partículas o compuestos de partículas son fermiones y cuáles bosones? Conteste a continuación:

a) un núcleo de cabono-13 Fermion

b) un núcleo de deuterio Boson

c) un átomo de Helio-3: ^{3}He Fermion

d) una partícula alpha = nucleus of $^4_2$He = boson

C4 [60 puntos] De las siguientes desintegraciones unas se producen y otras no. Rodear con un círculo las que **no**, indicando la razón. (all masses are in MeV/c²)

[✓ a)] $\Delta^+ \to p + \eta$, $1232 \ngtr 938 + 5488$

[✓ b)] $\Delta^+ \to \Sigma^0 + K^+$, $1232 \ngtr 1192 + 493$

c) $\Sigma^{*+} \to \Sigma^0 + \pi^+$, } These are allowed $1385 \geq 1192.5 + 139,6 = 1332.1$

d) $\Sigma^{*+} \to \Lambda + \pi^+$. $1385 \geq 1115.6 + 139.6 = 1255.2$

P1 [360 puntos] Sea la configuración electrónica nd^2.

30 a) ¿Cuál es la degeneración de esta configuración?

60 b) Uno de los estados permitidos de esta configuración es, por ejemplo, $0\alpha\bar{1}\beta$. La notación es clara: el primer electrón tiene momento magnético orbital 0 y momento magnético de spin 1/2 y el segundo electrón tiene -1 y $-1/2$, respectivamente. En inglés se llama a este producto *single-electron state* pues indica el estado inequívoco de cada electrón.

Listar los posibles ses=*single-electron state* correspondientes a $M_L = 4, 3, 2, 1, 0$ y $M_S = 0$. ¿Cuántos hay? Disponerlos por orden decreciente de M_L.

30 c) Hacer un acoplamiento LS especificando, como en clase, los posibles valores de L, S, J así como la multiplicidad $2J + 1$ y la suma de los $2J + 1$.

∄ el teorema de "conservación de masa"! ¿Qué pamplina es ese? PAMPLINA.
∃ the conservación de energía-momento. Nada más. No masa.
De existir ese theoreme $p+p \to p+p+p+\bar{p}$ no se daría. Y se da!!!

②

30 d) Decir, usando las reglas de Hund, qué termino ${}^{2s+1}L_J$ corresponde al estado fundamental.

30 e) Ordenar de menor a mayor, energéticamente hablando, los posibles términos ${}^{2s+1}L_J$ de la configuración. En este caso las reglas de Hund permiten ordenar todos los términos, no sólo el fundamental.

90 f) Hallar la única combinación lineal (salvo fase global, claro está) de *ses* que corresponde a $L = S = J = 0$. Puede utilizar las tablas de Clebsch-Gordan o los operadores $L\pm$ dados en la ayuda.

60 g) ¿Cuántos determinantes de Slater se necesitan para escribir el estado obtenido en el apartado f? Escribir dos de ellos.

30 h) Hacer un acoplamiento jj especificando $j_1, j_2, J, 2J+1$. ¿Hemos perdido o ganado estados con respecto a la respuesta dada en a)?

C3 [210 puntos] [Thomas-Fermi en átomos neutros] Un átomo neutro cumple $N = Z$, donde N es el número total de electrones y Z el número atómico. Esto quiere decir que en lo que sigue nunca aparece N sino Z.

30 a) La ecuación de Thomas-Fermi proporciona $y(x)$, variable dependiente adimensional, en términos de $x \in [0, \infty)$, variable independiente también adimensional. Sabiendo que dicha ecuación (diferencial) es

$$x^{1/2} y'' = y^{3/2}, \quad x > 0,$$

encontrar una solución **exacta**, distinta de la solución cero, que satisfaga $y(\infty) = 0$. Esta solución ya la encontró Sommerfeld en su momento.

30 b) Las siguientes son algunas fórmulas vistas en clase. Denotando por $\rho(r)$, el número de electrones por unidad de volumen del modelo de TF, vimos que

$$\phi = C_1 \rho^{2/3} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0\, r}\, y(x), \qquad r = b\, x, \qquad b \equiv 0.885\, Z^{-1/3} a_0, \qquad y(0) = 1.$$

Aquí C_1 es una constante con dimensiones **que no depende de** Z. Déjela así, no hace falta saber más de ella; ϕ es el potencial efectivo sobre un electrón, e la carga del electrón, x e $y(x)$ son adimensionales y **tampoco dependen de** Z. Sólo b, que tiene dimensiones de longitud, depende de Z como se indica arriba; a_0 es el radio de Bohr. Por último, $\rho(r)$ está normalizada y cumple

$$Z = 4\pi \int_0^\infty dr\, r^2 \rho(r),$$

por tratarse de un átomo neutro.

Haciendo uso del resultado obtenido en a) mostrar que, cuando $r \to \infty$,

$$\rho \sim \text{const} \times \frac{1}{r^m},$$

determinando el valor de la potencia m. La const multiplicativa no importa.

Esta solución asintótica es poco realista pues los experimentos y las soluciones obtenidas resolviendo Schrödinger indican que $\rho_{\text{exper}}(r)$ cae a cero en el infinito como una exponencial, pero esto es TF, y ρ cae como una potencia.

60 + 50
$\langle r\rangle$ $\langle r^2\rangle$
c) Calcular la dependencia del valor medio de la distancia del electrón al núcleo $\langle r\rangle$ con Z, y lo mismo para $\langle r^2\rangle$. Debe usted obtener que

$$\langle r\rangle = \text{const}\ a_0\, B_1 Z^a.$$

No importa ni la const ni que usted factorice a_0 (regalo UCM porque C_1 no se ha definido), pero debe calcular el valor de a, así como que B_1 viene dado por la integral

$$B_1 \equiv \int_0^\infty dx\, x^d y^{3/2}.$$

Note que el número d exponente de x^d, lo tiene que determinar usted cuando calcule $\langle r\rangle$. Lo importante es que B_1 es una constante numérica, que se hallaría con Maple si nos interesara. En el caso

$$\langle r^2\rangle = \text{const } a_0^2\, B_2\, Z^c,$$

precise la definición de la integral B_2 (¿es parecida a B_1?) y halle el exponente c en Z^c.

40

d) Determinar explícitamente $\langle r^n\rangle$ cuando $n \geq 3$, justificando el resultado a la vista de las integrales $B_3, B_4, \ldots$.

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.

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \qquad \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} = 2\,|E1| = m_e c^2\alpha^2.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

(c) In chemistry, the first two inert elements are Helium and Neon, that is (Selection = 1/2)

He: $1s^2$

Ne: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$

If Selection = 3/2 would be

$1s^4 \longrightarrow Z = \boxed{4}$

$1s^4\ 2s^4\ 2p^{12} \longrightarrow Z = 4+4+12 = \boxed{20}$

For total p:

$$\begin{matrix} 1 & & 3/2 \\ 0 & \times & 1/2 \\ -1 & & -1/2 \\ & & -3/2 \end{matrix} = 12 \text{ possibilities for each electron}$$

L

(C2:) most probable state of lithium is ground state: Li : $\underbrace{1s^2}\, 2s^1$

shell 1s is complete so $S=0$.

Then $S_{total} = 0 + 1/2$ (from electron in 2s) $= 1/2$.

The reason is : complete shells or subshells have $S=0$.

Same reason: Pauli's principle is violated to have $S=3/2$

[of course, this is not the case if lithium is in the (rare, very odd, ever at all?) $1s^1 2s^1 2p^1$. Then $S = 3/2$ is possible.

(C3) The proton (p) has spin 1/2, it is a fermion.
The neutron (n) has spin 1/2 too.

a) ^{13}C : 13 protons & neutrons.
The total spin is a half integer (13/2 or 11/2 or, ...whatever). A fermion.

composition of 13 particles of spin 1/2

b) Deuterium $= {}^2_1H$

2 particles spin 1/2 is $S_{total} = 1$ or 0

A boson

c) Atom of ^3He are 5 particles (3 in the nucleus, two electrons outside) so a fermion.

d) α particle = nucleus of ${}^4_2He$: 4 particles in the inside: A boson

---

(C4) The four reactions are permitted by all accounts, (e.g., baryon number, charge, there are no leptons so 0=0 regarding lepton numbers, strangeness is conserved, etc. All reactions are kinematically allowed, decays. A decay has to be that is, the mass of the particle that decays has to be larger (or equal) than the sum of masses of the products. a) and b) decays are not.

The electrons have to be in ↑↑↑, $l = 0,0,0$, : all quantum numbers coincide!!

(P1) nd^2 : equivalent electrons.

a) $l_1 = l_2 = 2$

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix} = 10$$ possibilities (possible states for each electron)

$$\binom{10}{2} = 45.$$

Degeneracy is 45

b) single electron states: with $M_S = 0$ and $M_L = 4, 3, 2, 1, 0$ are

ses	M_L	M_S
$2\alpha 2\beta$	4	0
$1\alpha 2\beta$, $2\alpha 1\beta$	3	0
$0\alpha 2\beta$, $1\alpha 1\beta$, $2\alpha 0\beta$	2	0
$\bar{1}\alpha 2\beta$, $0\alpha 1\beta$, $1\alpha 0\beta$, $2\alpha \bar{1}\beta$	1	0
$\bar{2}\alpha 2\beta$, $\bar{1}\alpha 1\beta$, $0\alpha 0\beta$, $1\alpha \bar{1}\beta$, $2\alpha 2\bar{\beta}$	0	0

There are 15 ses

c) LS coupling.

$l_1 = 2$, $l_2 = 2$, $L = \overset{s}{4}, \overset{a}{3}, \overset{s}{2}, \overset{a}{1}, \overset{s}{0}$

$s_1 = 1/2$ $s_2 = 1/2$, $S = \underset{s}{1}, \underset{a}{0}$

The only allowed by Pauli's antisymmetric combinations (wavefunction has to be antisymmetric) are

S P D F G
0 1 2 3 4

L	S	J	2J+1	sum of 2J+1
4	0	4	4	4
3	1	4, 3, 2	9, 7, 5	21
2	0	2	5	5
1	1	2, 1, 0	5, 3, 1	9
0	0	0	1	1
				45 as expected.

d) Ground state term (normal ordering) is $^3F_2$ (circled in the table)

e) other ordering (energetically speaking)

$$3F_2 < {}^3F_3 < {}^3F_4 < {}^3P_0 < {}^3P_1 < {}^3P_2$$

$$< {}^1G_4 < {}^1D_2 < {}^1S_0$$

f) There is only <u>one</u> state with $L=S=J=0$. It comes from $L=0$ (symmetric) and $S=0$ (antisymmetric)

$S=0$ antisymmetric is $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta-\beta\alpha)$

$L=0$ symmetric is (Clebsch-Gordan)

2×2

		0 0
2	-2	$1/\sqrt{5}$
1	-1	$-1/\sqrt{5}$
0	0	$1/\sqrt{5}$
-1	1	$-1/\sqrt{5}$
-2	2	$1/\sqrt{5}$

or

$$\overset{LM_L}{|00\rangle} = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[\underbrace{(2\bar{2})}_{}-(1\bar{1})+(00)-(\bar{1}1)+(\bar{2}2)\right]$$

this is

$$|l_1 l_2\, m_{l_1} m_{l_2}\rangle \equiv |\underbrace{2,2,}_{\text{supressed}}2,-2\rangle \equiv (2\bar{2})$$

now we multiply wave functions $(L=0)\times(S=0)$

$$|LSJM_J\rangle = |0000\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{5}}\left[(2\bar{2})+(\bar{2}2)\mp(1\bar{1})-(\bar{1}1)+(00)\right]\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta-\beta\alpha)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{10}}\Big[2\alpha\bar{2}\beta-2\beta\bar{2}\alpha+\bar{2}\alpha 2\beta-\bar{2}\beta 2\alpha$$
$$-1\alpha\bar{1}\beta+1\beta\bar{1}\alpha-\bar{1}\alpha 1\beta+\bar{1}\beta 1\alpha$$
$$+0\alpha 0\beta-0\beta 0\alpha\Big]$$

observe that it is antisymmetric to the interchange of electrons. $\overset{\text{electron}}{e_1}\overset{\text{electron}}{e_2} \to \overset{\text{electron}}{e_2}\overset{\text{electron}}{e_1}$.

Observe that it is (see b)) a linear combination of states (SES)

$\bar{2}\alpha 2\beta$, $\bar{1}\alpha 1\beta$, $0\alpha 0\beta$, $1\alpha\bar{1}\beta$, $2\alpha\bar{2}\beta$ --- $M_L=0$ --- $M_S=0$

g) We need 5 Slater determinant to write this state. I write two of them

$$\phi_0 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \det |0\alpha, 0\beta|$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0(1)\,\alpha(1) & 0(1)\,\beta(1) \\ 0(2)\,\alpha(2) & 0(2)\,\beta(2) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [0\alpha 0\beta - 0\beta 0\alpha],$$

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \det |1\alpha, T\beta|$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1(1)\,\alpha(1) & T(1)\,\beta(1) \\ 1(2)\,\alpha(2) & T(2)\,\beta(2) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [1\alpha T\beta - T\beta 1\alpha].$$

h) jj coupling.

$j_1 = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$, $j_2 = \frac{5}{2}, 3/2$

j_1	j_2	J	$2J+1$	sum of $2J+1$
$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\overset{s}{\cancel{5}}, \overset{a}{4}, \overset{s}{\cancel{3}}, \overset{a}{2}, \overset{s}{\cancel{1}}, \overset{a}{0}$	9, 5, 1	15
$\frac{5}{2}$	$3/2$	4, 3, 2, 1	9, 7, 5, 3	24
$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\overset{s}{\cancel{3}}, \overset{a}{2}, \overset{s}{\cancel{1}}, 0$	5, 1	6
				45 states

- We do not gain nor loose states: 45
- Besides, the values of J : 4, 4, 3, 2, 2, 2, 1, 0, 0 are the same than in the LS coupling:

Note that it is very simple to write different states. For example, the state with

$$L=4, \quad S=0, \quad M_L=3, \quad M_S=0.$$

Take $L=4^s$: $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[(21)+(12)\right]$ from Clebsch-Gordan table

$S=0^a$: $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha\beta-\beta\alpha\right]$

and multiply

$$\overset{L\,S\,M_L\,M_S}{|4,0,3,0\rangle} = \frac{1}{2}\Big[2\alpha 1\beta - 2\beta 1\alpha + 1\alpha 2\beta - 1\beta 2\alpha\Big].$$

(P2) a) The solution of

$$\begin{cases} x^{1/2}\eta'' = \eta^{3/2} \\ \eta(\infty)=0 \end{cases}$$

is

$$\eta(x) = \frac{144}{x^3}.$$

Substitute $\eta(x) = c\,x^n$ in the equation, c and n to be found:

$$c\,n(n-1)\,x^{n-3/2} = c^{3/2}\,x^{3n/2}.$$

exp of x: $n-3/2 = \frac{3n}{2} \Rightarrow \boxed{n=-3}$

$c(-3/-4) = c^{3/2}$ or $\cancel{c=0}$

$12 = c^{1/2}$,, $\boxed{144=c}$

This is the solution found by Sommerfeld.

b) Exact formulae:

$$\rho = \left[\frac{1}{c_1}\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right]^{3/2}\eta^{3/2},$$

$\rho=\rho(r)$ is for Thomas-Fermi model. For neutral atoms $(Z=N)$, and this is a well-known result, ρ of Thomas Fermi model behaves <u>at infinity</u> $(r\to\infty$ or $x\to\infty)$ as $144/x^3$.

Thus,

$$\rho \sim \frac{1}{r^{3/2}}\cdot\left(\frac{144}{x^3}\right)^{3/2}$$

$$= \underset{\uparrow}{\text{const}} \cdot \frac{1}{r^{3/2}}\frac{1}{r^{9/2}}$$

$c_1, Z, e, 4\pi\varepsilon_0,$
$144^{3/2}, b^{3/2}$

$$= \text{const}\ \frac{1}{r^6}$$

$$\boxed{m=6}$$

when $r\to\infty$.

c) We have to calculate $\langle r\rangle$, and $\langle r^2\rangle$ and also $\langle r^3\rangle,\ldots$ so we better calculate $\langle r^n\rangle$ and after take $n=1,2,3,\ldots$. Remember that $\rho(r)$ is normalized such that

$$Z = 4\pi\int_0^\infty dr\, r^2 \rho(r).$$

The expectation value

$$\langle r^n\rangle = \frac{4\pi}{Z}\int_0^\infty dr\, r^{2+n}\,\rho(r),$$

which it is correctly written because when $n=0$,

$$\langle 1\rangle = \frac{4\pi}{Z}\int_0^\infty dr\, r^2\rho(r) \text{ and } \langle 1\rangle = 1$$

as expected. With due changes,

$$\langle r^n\rangle = \frac{4\pi}{Z}\left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 c_1}\right)^{3/2}\int_0^\infty dr\, r^{2+n}\left(\frac{\chi}{r}\right)^{3/2}$$

$$\int_0^\infty dr\, r^{n+1/2}\,\chi^{3/2} = b^{n+\frac{3}{2}}\int_0^\infty \frac{dr}{b}\left(\frac{r}{b}\right)^{\frac{1}{2}+n}\chi^{3/2}$$

$$= b^{n+3/2}\int_0^\infty dx\, x^{n+\frac{1}{2}}\,\chi^{3/2}$$

or $$\langle r^n \rangle = \frac{4\pi}{Z}\left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 C_1}\right)^{3/2} b^{n+3/2} \underbrace{\int_0^\infty dx\, x^{n+1/2} \Big)^{3/2}}_{\overset{\shortparallel}{B_n}} .$$

B_n (if finite) is a number <u>independent of Z</u>.

Peculiar,

$$\langle 1 \rangle = 4\pi\left(\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 C_1}\right)^{3/2}\left(0.885\, a_0\right)^{3/2} B_0 \;,,$$

$$\overset{\shortparallel}{1}$$

$$\frac{1}{Z} Z^{3/2}\left(Z^{-1/3}\right)^{3/2} = Z^0 = 1.$$

B_0 is this strange number. <u>no Z's at all</u>.

Keeping only Z's:

$$\langle r \rangle = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{const } a_0}}{\cdots} \frac{1}{Z} Z^{3/2}\left(Z^{-1/3}\right)^{5/2} B_1$$

$$= \cdots Z^{-1/3} B_1 .$$

$$-1 + \frac{3}{2} - \frac{5}{6} = -\frac{1}{3}$$

Also

$$\langle r^2 \rangle = \overset{\text{const} \times a_0^2}{\cdots} Z^{-2/3} B_2 ,$$

$$\langle r^3 \rangle = \cdots Z^{-1} B_3 ,$$

$$\langle r^4 \rangle = \cdots Z^{-4/3} B_4 , \ldots$$

and so on.

d) However, whereas B_1, B_2 integrals are finite, $B_3, B_4, B_5, \ldots$ diverge at infinity !!! ($\frac{\Lambda}{r^6}$ does not go to 0 faster enough to prevent this fact!)

Take B_3, for example,

$$B_3 = \int_0^\infty dx\, x^{7/2}\, \eta^{3/2},$$

at $x = \infty$,

$$\int^\infty dx\, \frac{x^{7/2}}{x^{9/2}} = \int^\infty dx\, \frac{1}{x} = \log x \Big]^\infty = \infty.$$

This is not the case for B_2, for example,

$$B_2 = \int_0^\infty dx\, \frac{x^{5/2}}{x^{9/2}} = \int^\infty dx\, \frac{1}{x^2} = \frac{1}{x}\Big]^\infty \Rightarrow 0$$

At $x=0$ none of them $(B_1, B_2, B_3 \ldots)$ diverge.