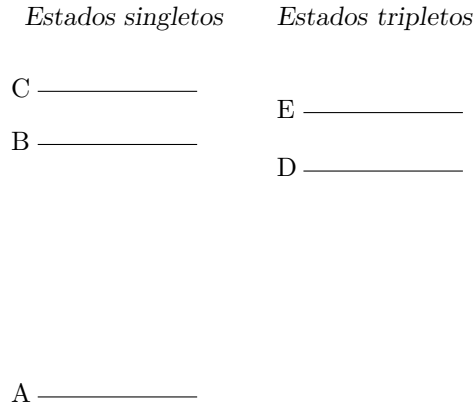


# Física Atômica e Molecular

## FOLHA 5: ÁTOMO DE HÉLIO

1. A figura seguinte mostra o estado fundamental e os primeiros quatro estados excitados do átomo de hélio.



- (a) Diga quais são as configurações electrónicas associadas a esses estados. Indique na figura a notação espectroscópica de cada estado.
- (b) Indique na figura as transições dipolares eléctricas possíveis entre esses estados.
- (c) Explique qualitativamente porque razão o nível B tem uma energia mais baixa do que o nível C.
- (d) Explique qualitativamente porque razão o nível D tem uma energia mais baixa do que o nível B.
2. Considere as três funções de onda do estado  $2^3S$  do Hélio:

$$\Psi(2^3S) = \phi_-(r_1, r_2) \times \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) & M_S = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] & M_S = 0 \\ \beta(1)\beta(2) & M_S = -1 \end{cases}$$

onde

$$\phi_-(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{1s}(r_1)\phi_{2s}(r_2) - \phi_{2s}(r_1)\phi_{1s}(r_2)]$$

Escreva as três funções  $\Psi(2^3S)$  na forma de determinantes de Slater (ou combinações lineares de determinantes de Slater) construídos com as funções

$$\begin{aligned} \phi_{1s\uparrow} &= \phi_{1s}(r)\alpha & \phi_{1s\downarrow} &= \phi_{1s}(r)\beta \\ \phi_{2s\uparrow} &= \phi_{2s}(r)\alpha & \phi_{2s\downarrow} &= \phi_{2s}(r)\beta \end{aligned}$$

3. No átomo de hélio os estados com interesse espectroscópico são os correspondentes a configurações electrónicas que incluem uma orbital 1s. A função de onda correspondente é

$$\Psi_{\pm}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{1s}(1)\Phi_{nlm}(2) \pm \Phi_{1s}(2)\Phi_{nlm}(1)] \times \text{função de onda de spin}$$

Os estados de parahélio correspondem ao sinal + enquanto os estados de ortohélio correspondem ao sinal - .

- (a) Considere o efeito da repulsão electrostática entre os dois electrões e conclua qual dos estados orto ou parahélio têm energia mais baixa.
- (b) Explique porque razão a diferença de energia entre estados orto e parahélio se torna pequena para valores elevados de  $n$ .
4. Determine um limite superior para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogénio usando o método variacional. Use uma função  $\phi = A \exp(-\beta r)$  onde  $\beta$  é um parâmetro.
5. Considere o hélio no estado fundamental. Use o método variacional para calcular a energia do estado fundamental. Considere a função de onda  $\Psi = \frac{\lambda^3}{\pi a_0^3} e^{-\lambda(r_1+r_2)/a_0}$ , onde  $\lambda$  é um parâmetro.
- Solução:*  $E = -77.5$  eV.
6. Considere um átomo de Hélio numa configuração excitada  $1s3p$ .
- (a) Determine os valores possíveis dos números quânticos  $L$  e  $S$  do átomo.
- (b) Escreva as formas possíveis da parte espacial da função de onda, usando orbitais de uma partícula  $\phi_{1s}(\vec{r})$  e  $\phi_{3p}(\vec{r})$ .
- (c) Diga, justificando, a qual das funções de onda obtida na alínea anterior está associada uma energia mais baixa. Escreva a expressão que representa a separação de energia correspondente.