

1) (a) Obtenha a energia do estado excitado  $(1s^1 2s^1)^3S$  do átomo de Hélio, expressando sua resposta em termos de elementos de matriz no espaço orbital. Sua resolução deverá cumprir os seguintes passos: (i) Escreva a Hamiltoniana do átomo, explicitando sua notação. (ii) Escreva o estado atômico, explicitando sua notação, e indicando qual das componentes do estado tripleto será utilizada (a escolha é livre). (iii) Expresse sua resposta em termos de integrais (elementos de matriz) de 1 elétron, e das integrais de Coulomb e de Troca. (b) A energia do estado  $(1s^1 2s^1)^1S$  é mais alta que a do estado tripleto pelo fator  $2K$ , onde  $K$  denota a integral de troca. Interprete esse resultado a partir dos conceitos de Correlação de Spin e/ou Vacância de Fermi (*Fermi Hole*).

2) Utilizando o Princípio Variacional, estime a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio. Adote a função tentativa gaussiana dada por

$$\psi(r) = N \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha r^2\right),$$

onde  $N$  é a constante de normalização e  $\alpha$  o parâmetro variacional. Para simplificar os cálculos, utilize unidades atômicas:  $m = 1$  (massa do elétron),  $\hbar = 1$ ,  $e^2 = (q_{\text{elec}}^2/4\pi\epsilon_0) = 1$ . São dadas as expressões da componente radial do Laplaciano (coordenadas esféricas) e as integrais Gaussianas de interesse:

$$\frac{2!}{3} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}$$

$$\nabla_r^2 f(r) = \frac{2}{r} \frac{df}{dr} + \frac{d^2 f}{dr^2} = \alpha e^{-\frac{\alpha r^2}{2}} (\alpha^2 - 1)$$

$$\int_0^\infty dr r^{2n} e^{-\alpha r^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1} n!} \frac{\pi^{1/2}}{\alpha^{n+1/2}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\frac{2}{2 \cdot 2} \frac{1}{4\alpha}$$

$$\int_0^\infty dr r^{2n+1} e^{-\alpha r^2} = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\alpha \frac{2}{dr^2}$$

3) Assumindo a validade do acoplamento LS, determine os estados  $(2S+1)L_J$  do átomo de magnésio ( $Z = 12$ ) resultantes da configuração eletrônica:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p^1 \equiv [\text{Ne}]3s^1 3p^1$ . Explícite seu raciocínio.