

GUÍA 9: POTENCIALES EN 2-D Y 3-D, MOMENTO ANGULAR, ÁTOMO DE HIDRÓGENO, ESPÍN

1. Considere el siguiente potencial (pozo infinito):

$$V(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a; |y| \leq b \text{ y } |z| \leq c \\ \infty & \text{sino} \end{cases}$$

Escribiendo el potencial en la forma:

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

y proponiendo para la función de onda la separación:

$$\varphi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z)$$

- (a) Hallar las autofunciones del Hamiltoniano de una partícula de masa  $m$  en ese potencial.
- (b) Hallar los autovalores correspondientes.

2. Considere el siguiente potencial en dos dimensiones:

$$V(x, y) = V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

Considere que la energía  $E < V_0$ . Calcule la función de onda y la corriente de probabilidad  $\vec{J}$ . ¿Cuál componente de  $\vec{J}$  espera que sea nula? ¿Y cuál no? Interprete. Estime el “tiempo” que la partícula pasa en la región clásicamente prohibida.

3. La energía potencial de un oscilador armónico tridimensional esférico puede escribirse como:

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \end{aligned}$$

Hallar las autofunciones y autovalores de  $\hat{H}$ . Analizar la degeneración de cada nivel de energía.

4. Sea un oscilador armónico tridimensional anisotrópico, con una frecuencia de oscilación diferente a lo largo de cada eje, de modo que:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

Escribir la expresión de los niveles de energía en términos de los  $\omega$ 's. Encontrar los cuatro niveles de energía más bajos para el caso  $\omega_x = \omega_y = 2\omega_z/3$ , y determinar su degeneración.

5. Sea una partícula de masa  $m$  sometida al siguiente potencial central:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & r < a \\ -V_0 & a < r < b \\ 0 & r > b \end{cases}$$

Calcular las autofunciones y autovalores del hamiltoniano correspondientes a estados con  $l = 0$ .

6. Evaluar los conmutadores  $[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x]$ ,  $[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x^2]$  y  $[\hat{L}_x, [\hat{L}_x, \hat{L}_y]]$ . Nota: recuerden las propiedades de los conmutadores que vimos antes.

7. Calcular  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  y  $\hat{L}_z$  en coordenadas esféricas. Ayuda: recuerde que:  $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$ . Utilizar los operadores en la representación coordenadas y la definición de las coordenadas esféricas para evaluar las derivadas. Calcule  $\hat{L}^2 \equiv \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$  en la misma representación. Mostrar que las autofunciones de  $\hat{L}_z$  y  $\hat{L}^2$ :

$$\begin{aligned}\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar \lambda_m Y_{lm}(\theta, \phi) \\ \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar^2 \lambda_l Y_{lm}(\theta, \phi)\end{aligned}$$

son los armónicos esféricos. Calcular los autovalores.

8. Un rotador rígido tiene momento de inercia  $I$  y velocidad angular  $\omega$ .
- Encuentre el hamiltoniano del rotador. ¿Qué constantes de movimiento tiene el sistema?
  - Encuentre los autoestados del rotador y los posibles valores de la energía de rotación.
  - La distancia de equilibrio entre los protones de una molécula de  $H_2$  es  $r_0 = 0.74 \text{ \AA}$ . Considerándola como un rotador rígido, encuentre la energía de rotación del primer nivel excitado ( $l = 1$ ).
  - ¿Cuál es la longitud de onda de la radiación emitida para la transición  $l = 1$  a  $l = 0$ ?
9. Sea un átomo de hidrógeno en su estado fundamental
- Calcular la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia mayor que  $a_0$  ( $a_0 \approx 0.529167 \text{ \AA}$  es el radio de Bohr) del núcleo.
  - Cuando este electrón está a una distancia  $2a_0$  del núcleo toda su energía es potencial. De acuerdo con la física clásica este electrón no puede exceder esa distancia. Cuánticamente ¿cuál es la probabilidad de hallar al electrón a  $r > 2a_0$ ?
  - El radio de un protón es del orden de  $10^{-13} \text{ cm}$ . Calcule la probabilidad de que, en el átomo de hidrógeno, el electrón esté dentro del protón.
10. Calcular  $\langle r \rangle$  y  $\langle r^{-1} \rangle$  para el estado fundamental de un átomo hidrogenoide de número atómico  $Z$ . Calcular  $\langle V(r) \rangle$  para ese estado.
11. Encontrar los valores más probables de  $r$  (en unidad de  $a_0$ ) para el electrón del átomo de hidrogeno en el estado  $2s$ .
12. Encuentre la corriente de probabilidad para el electrón en el átomo de hidrógeno en los niveles  $n = 1$  y  $n = 2$ . Interprete.
13. Sea la función de onda de un átomo de hidrógeno:

$$\psi = A (\varphi_{210} - \varphi_{21-1} + \varphi_{100})$$

donde las  $\varphi_{nlm}$  son las autofunciones normalizadas de  $\hat{H}$ .

- Normalizar  $\psi$
  - Hacer una tabla con los valores que pueden medirse de  $E$ ,  $L^2$  y  $L_z$ , y sus probabilidades.
  - Calcular  $\langle \hat{L}^2 \rangle$ ,  $\langle \hat{L}_z \rangle$  y  $\langle \hat{H} \rangle$ .
  - Hallar  $\psi$  para un tiempo  $t$  cualquiera y repetir los cálculos de (c). Discutir el resultado.
14. Considere un electrón en un átomo de hidrógeno en el estado

$$\Psi = \frac{r}{2a_0 \sqrt{6a_0^3}} \exp\left(\frac{-r}{2a_0}\right) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$$

$$n = 2, l = 1.$$

- (a) Calcular la densidad de carga en función de  $r$ . Determinar, en términos de  $a_0$ , su máximo.
- (b) Calcular  $\langle r \rangle$  y comparar con el resultado en (a).
15. Suponiendo que los dos electrones del átomo de helio están en estados con  $\{l = 1, s = 1/2\}$  y  $\{l = 2, s = 1/2\}$  respectivamente.
- (a) Calcular los valores posibles de los números cuánticos  $l$  del impulso orbital total y  $s$  del spin total.
- (b) Hallar los posibles valores del número cuántico  $j$  que corresponden a  $\hat{J}^2$ , siendo  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ .
- (c) Considerando ahora cada electrón por separado, hallar los valores posibles de los números cuánticos  $j_1$  y  $j_2$  del momento angular total de cada electrón.
- (d) A partir de lo hallado en (c) calcular los valores posibles del número cuántico  $j$  del impulso angular total. Comparar con lo hallado en (b).
16. Demostrar que para un átomo en un autoestado descrito por  $n, l, s, j$  y  $m_j$  vale que ( $l > 0$ ):

$$\langle \hat{S} \cdot \hat{L} \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} l \hbar^2 & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} (l + 1) \hbar^2 & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

(Nota: al término  $\langle \hat{S} \cdot \hat{L} \rangle$  se lo conoce como acoplamiento spin-órbita). ¿Qué pasa si  $l = 0$ ?

17. Efecto Zeeman: Estudiar el efecto de la aplicación de un campo magnético constante y uniforme  $\vec{B}$  sobre un átomo de hidrógeno. Escribir el nuevo  $\hat{H}$  resultante y encontrar sus autofunciones y autovalores. Hallar la degeneración de cada estado y comparar en un gráfico los valores de energía antes y después de aplicar el campo magnético.
18. Considere el hamiltoniano siguiente

$$\hat{H} = -\mu B (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}) - \lambda \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

donde  $\vec{S}_1$  y  $\vec{S}_2$  describen el vector spin de dos partículas distinguibles de spin  $1/2$ .

- (a) En  $t = 0$  el estado inicial es  $\alpha_1 \otimes \beta_2$ . Reescriba el hamiltoniano en función del momento angular total  $\hat{J} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ .
- (b) ¿Cuáles son los valores posibles de la energía?
- (c) \* Escriba el estado inicial en función de autoestados caracterizados por  $\hat{J}_z$  y  $\hat{J}^2$ .
- (d) \* Muestre que la probabilidad de medir  $S_{1z} = +1/2$  como función del tiempo esta dada por

$$P(S_{1z} = 1/2) = \frac{1}{2} (1 + \cos(\lambda \hbar t))$$

19. Considere los siguientes orbitales híbridos (orbitales híbridos  $sp^2$ ):

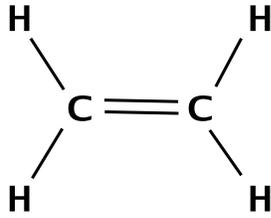
$$\Psi_1 = (1/3)^{1/2} \varphi_{2s} + (2/3)^{1/2} \varphi_{2p_x}$$

$$\Psi_2 = (1/3)^{1/2} \varphi_{2s} - (1/6)^{1/2} \varphi_{2p_x} + (1/2)^{1/2} \varphi_{2p_y}$$

$$\Psi_3 = (1/3)^{1/2} \varphi_{2s} - (1/6)^{1/2} \varphi_{2p_x} - (1/2)^{1/2} \varphi_{2p_y}$$

- (a) Verifique que están normalizados.
- (b) ¿Son autofunciones del hamiltoniano del átomo de H? ¿Con qué energía? Probarlo.
- (c) \* Verifique que estos orbitales están relacionados entre sí por rotaciones de  $2\pi/3$  alrededor del eje  $\mathbf{z}$ .

(d) \* A partir de (b), esquematice cómo se forman las uniones en la molécula de etileno:



20. \*

- (a) Encuentre cuál es el efecto que tiene una rotación en un ángulo  $\alpha$  alrededor del eje  $\mathbf{z}$  sobre los siguientes orbitales del átomo de  $H$  (use el operador de rotación  $\hat{R} = \exp[-i\alpha L_z/\hbar]$ ):  
 i)  $2s$  ii)  $2p_x$  iii)  $2p_y$  y iv)  $2p_z$ . En particular, considere el caso  $\alpha = \pi/2$ .
- (b) Encuentre la densidad de probabilidad en todo el espacio para el electrón en el nivel  $n = 2$  y verifique que es isótropa.

21. \* Verificar por medio del cálculo matricial que las siguientes matrices (matrices de Pauli):

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

satisfacen las relaciones de conmutación del momento angular si escribimos  $\sigma_i = \frac{1}{2}\hbar\sigma_i$ ,  $i \in \{x, y, z\}$ , y entonces provee una representación matricial para el momento angular. Mostrar que esta representación particular corresponde al caso  $s = 1/2$ . Ayuda: formar la matriz para  $s^2$  y hallar sus autovalores.

22. \* Determinar clásicamente el momento magnético de un electrón en una órbita circular de radio  $r$  alrededor de un protón. Escribirlo en función de un operador conocido y cuantificarlo.
23. \* Considere una partícula de spin  $1/2$  en presencia de un campo magnético uniforme  $\vec{B} = B_0\mathbf{z}$ . Suponga que, a  $t = 0$ , la función de onda de spin de la partícula es:

$$\sigma = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \alpha + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \beta$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son las autofunciones del operador  $S_z$  y  $\theta$  y  $\varphi$  representan los ángulos polares. Esta función de onda es autofunción del operador  $S_u = \vec{S} \cdot \mathbf{u}$ , donde  $\mathbf{u}$  es la dirección del espacio definida por los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  (es decir, la componente del spin en la dirección  $\mathbf{u}$ ).

- (a) Escriba el hamiltoniano de interacción de la partícula con el campo magnético.
- (b) Encuentre las constantes de movimiento del sistema.
- (c) Calcule la función de onda  $\sigma(t)$  para cualquier instante arbitrario  $t > 0$ . ¿Qué pasa con los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  al tiempo  $t$ ? Interprete este resultado.
- (d) Calcule el valor medio de  $S_z$ . ¿Cuál es su dependencia con el tiempo? Interprete.
- (e) ¿Cuál será la nueva función de onda de la partícula si interactúa con un campo uniforme en la dirección  $\mathbf{x}$ , es decir,  $\vec{B} = B_0\mathbf{x}$ , en el instante  $t = 0$ ? (Hint: use la matriz de Pauli correspondiente).