

Trabajo Computacional

Iones hidrogénicos – Estados Ligados

Parte A: Cálculos Generales

Elegir dos estados estacionarios de algún ión hidrogénico (uno de los términos debe ser con $l = 0$). Para cada uno de estos casos:

1. Dibujar la función de onda.
2. Comprobar que la función de onda es solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente.
3. Chequear si las funciones son ortonormales.
4. Analizar el comportamiento asintótico y en el origen.
5. Calcular los valores medios $\langle r^k \rangle$, para $k = -3, -2, -1, 0, 1$ y 2 .
6. Verificar si se cumple la condición de Kato y la regla de Oppenheimer.
7. Comprobar si se cumple el teorema del Virial.
8. Comprobar si la transformada de Fourier de la función radial es solución de la ecuación de Schrödinger en el espacio de los momentos.

Parte B: Para Avanzados

Comprobar las funciones de la parte anterior con las funciones que se obtienen mediante:

1. Expresión en términos de polinomios de Laguerre.
2. Expresión en términos de la hipergeométrica ${}_1F_1$.
3. Expresión en términos de orbitales de Slater.
4. Solución numérica de la ecuación diferencial correspondiente.
5. Solución por diagonalización directa del Hamiltoniano.

Parte C: Para más Avanzados

Utilizar una función distribución de Wigner con la misma estructura de la utilizada en el oscilador armónico:

$$P_{1s}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{\pi^3} e^{-\alpha r^2 - \frac{p^2}{\alpha}}$$

y minimizar la energía media variando el parámetro α .

1. Comparar la energía obtenida con el valor exacto.
2. Comparar los valores medios obtenidos en la primer parte con los que se obtienen utilizando esta distribución.