

## FÍSICA 4

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

1. Considere el siguiente potencial (pozo infinito):

$$V(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a; |y| \leq b \text{ y } |z| \leq c \\ \infty & \text{si no} \end{cases}$$

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  $[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x]$ ,  $[\hat{L}_y, \hat{L}_x^2]$  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  $\hat{L}^2$ :

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

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:

$$\psi = A (\varphi_{210} - 2\varphi_{21-1} + 3\varphi_{100})$$

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.
  - Si se mide  $\hat{L}^2$  y se obtiene el valor 0: indique cuál es la función de onda después de la medición. Si seguidamente se mide  $\hat{L}_z$ , indique que valores pueden obtenerse.
  - Ídem (e), si se mide  $\hat{L}^2$  y se obtiene el valor  $2\hbar$ .
14. Considere un electrón en un átomo de hidrógeno en el estado

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

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

- Calcular la densidad de carga en función de  $r$ . Determinar, en términos de  $a_0$ , su máximo.
  - 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.
- Calcular los valores posibles de los números cuánticos  $l$  del impulso orbital total y  $s$  del spin total.
  - Hallar los posibles valores del número cuántico  $j$  que corresponden a  $\hat{J}^2$ , siendo  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ .
  - 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.
  - 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.

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

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

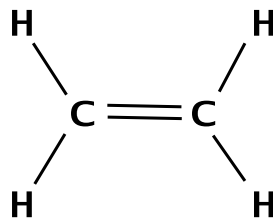
19. Considere los siguientes orbitales híbridos (orbitales híbridos  $sp^2$ ):

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

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

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

- Verifique que están normalizados.
- Son autofunciones del hamiltoniano del átomo de  $H$ ? Con qué energía? Probarlo.
- \* Verifique que estos orbitales están relacionados entre sí por rotaciones de  $2\pi/3$  alrededor del eje  $z$ .
- \* 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<sub>x</sub> iii) 2p<sub>y</sub> y iv) 2p<sub>z</sub>.* 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).