

## SERIE 15: ÁTOMO DE HIDRÓGENO, PARTÍCULAS IDÉNTICAS Y ÁTOMOS CON MUCHOS ELECTRONES

- 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.
- 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.
- Encontrar los valores más probables de  $r$  (en unidad de  $a_0$ ) para el electrón del átomo de hidrogeno en el estado  $2s$ .
- Encuentre la corriente de probabilidad para el electrón en el átomo de hidrógeno en los niveles  $n=1$  y  $n=2$ . Interprete.
- 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.
- Repetir el ejercicio para los siguientes estados:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{3}} \left( \varphi_{200} - \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_{211} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_{21-1} \right)$$

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{3}} \left( \varphi_{100} - \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_{211} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_{21-1} \right)$$

- 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).
7. 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).
8. Demostrar que para un átomo en un autoestado descrito por  $n, \ell, s, j$  y  $m_j$  vale que ( $\ell > 0$ ):

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

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

9. 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.
10. Considere el siguiente hamiltoniano:

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

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 está dada por

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

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

