

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 ($a_0 \approx 0.529167\text{Å}$ 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}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 φ_{nlm} son las autofunciones normalizadas de \hat{H} .

- Normalizar ψ
- 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 ψ 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, ℓ, 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:

