FÍSICA 4

PRIMER CUATRIMESTRE DE 2015

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

1. Considere el siguiente potencial (pozo infinito):

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

   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:

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

   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:

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

   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:

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

   Escribir la expresión de los niveles de energía en términos de los ω'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 $\left[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x\right], \left[\hat{L}_y^2, \hat{L}_x^2\right]$ y $\left[\hat{L}_x, \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right]\right]$. 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 ω.

   (a) Encuentre el hamiltoniano del rotador. Qué constantes de movimiento tiene el sistema?

   (b) Encuentre los autoestados del rotador y los posibles valores de la energía de rotación.

   (c) La distancia de equilibrio entre los protones de una molécula de H_2 es $r_0 = 0.74$Å. Considerándola como un rotador rígido, encuentre la energía de rotación del primer nivel excitado (l = 1).

   (d) Cuál es la longitud de onda de la radiación emitida para la transición l = l a l=0?

9. Sea un átomo de hidrógeno en su estado fundamental

   (a) Calcular la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia mayor que a_0 ($a_0 \approx 0.529167$Å es el radio de Bohr) del núcleo.

   (b) Cuando este electrón está a una distancia $2a_0$ del nócleo 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 $r > 2a_0$?

   (c) 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.

10. Calcular $< r >$ y $\left\langle r^{-1}\right\rangle$ 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:

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

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

   (a) Normalizar ψ

   (b) Hacer una tabla con los valores que pueden medirse de E, L^2 y L_z, y sus probabilidades.

   (c) Calcular $\left\langle \hat{L}^2\right\rangle, \left\langle \hat{L}_z\right\rangle$ y $\left\langle \hat{H}\right\rangle$.

   (d) Hallar ψ 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 descripto por n, l, s, j y m_j vale que ($l > 0$):

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

(Nota: al término $\left\langle \hat{S}\cdot\hat{L}\right\rangle$ 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

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

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

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

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

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

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

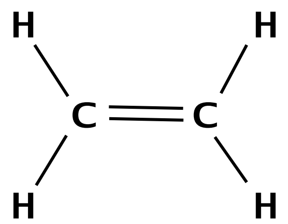
$$\Psi_3 = (1/3)^{1/2}\varphi_{2s} - (1/6)^{1/2}\varphi_{2p_x} - (1/2)^{1/2}\varphi_{2p_y}$$

(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 α alrededor del eje $\mathbf{z}$ sobre los siguientes orbitales del átomo de H (use el operador de rotación $\hat{R} = \exp\left[-i\alpha L_z/\hbar\right]$):
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):

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

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 αy β son las autofunciones del operador S_z y θ y φ 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 θ y φ(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 θ y φ 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).