Guía 9: Potenciales en 2-D y 3-D, Momento angular, átomo de hidrógeno, Espín

Nota: Los problemas se explican en forma esquemática adrede para que se realice una lectura crítica y de elaboración personal. Sin embargo, si encuentra uno o varios errores por favor escríban a carlosv@df.uba.ar, gracias. Carlos Vigh

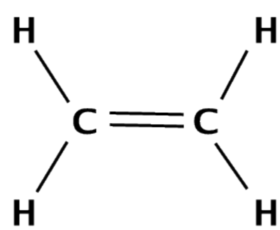
Problema 19: Considere los siguientes orbitales híbridos (orbitales híbridos sp^2):

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

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

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

1. Verifique que están normalizados.
2. ¿Son autofunciones del hamiltoniano del átomo de H? ¿Con qué energía? Probarlo.
3. * Verifique que estos orbitales están relacionados entre sí por rotaciones de $2\pi/3$ alrededor del eje **z**.
4. * A partir de (b), esquematice cómo se forman las uniones en la molécula de etileno:



Solución:
a) Es directo: $\Psi *_1 \Psi_1 = 1/3 + 2/3 = 1$

b) También es rápido:

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}\varphi_{2s}E_2 + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}\varphi_{2p_x}E_2 = E_2\Psi \tag{1}$$

Es una autofunción del hamiltoniano con energía E_2.

c) Primero veamos cómo se escribe una rotación:

$$R = e^{-i\alpha L_z/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-i\alpha\frac{\hat{L_z}}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \tag{2}$$

De esta manera aplicado a un orbital $\varphi_{n\ell m}$:

$$R\varphi_{n\ell m} = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-i\alpha\frac{\hat{L_z}}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\varphi_{n\ell m} = \sum_{n=0}^{\infty}(-i\alpha m)^n\frac{1}{n!}\varphi_{n\ell m} = e^{-i\alpha m}\varphi_{n\ell m} \tag{3}$$

Recordar que L_z aporta un $m\hbar$

Tomamos:

$$\varphi_{2p_x} = -\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{211} - \varphi_{21-1}] \tag{4}$$

$$\varphi_{2p_y} = \frac{i}{\sqrt{2}}[\varphi_{211} + \varphi_{21-1}] \tag{5}$$

Vemos como opera la rotación con estos orbitales:

$$e^{-i\alpha m}\varphi_{np_x} = -e^{-i\alpha m}\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n11} - \varphi_{n1-1}] = \tag{6}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}[(\cos\alpha - i\text{sen}\alpha)\varphi_{n11} - (\cos\alpha + i\text{sen}\alpha)\varphi_{n1-1}] = -\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n11} - \varphi_{n1-1}]\cos\alpha + \frac{i}{\sqrt{2}}[\varphi_{n11} + \varphi_{n1-1}]\text{sen}\alpha \tag{7}$$

$$\boxed{e^{-i\alpha m}\varphi_{np_x} = \cos\alpha\varphi_{np_x} + \text{sen}\alpha\varphi_{np_y}} \tag{8}$$

$$e^{-i\alpha m}\varphi_{np_y} = -e^{-i\alpha m}\frac{i}{\sqrt{2}}[\varphi_{n11} + \varphi_{n1-1}] = \tag{9}$$

$$= -\frac{i}{\sqrt{2}}[(\cos\alpha - i\text{sen}\alpha)\varphi_{n11} + (\cos\alpha + i\text{sen}\alpha)\varphi_{n1-1}] = -\frac{i}{\sqrt{2}}[\varphi_{n11} + \varphi_{n1-1}]\cos\alpha + \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n11} - \varphi_{n1-1}]\text{sen}\alpha \tag{10}$$

$$\boxed{e^{-i\alpha m}\varphi_{np_y} = -\text{sen}\alpha\varphi_{np_x} + \cos\alpha\varphi_{np_y}} \tag{11}$$

Como debe ser para rotaciones infinitesimales queda:

$$R(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \text{sen}\alpha \\ -\text{sen}\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{12}$$

Volviendo al ejercicio si:

$$R(2\pi/3)\Psi_1 = (1/3)^{1/2}R(2\pi/3)\varphi_{2s} + (2/3)^{1/2}R(2\pi/3)\varphi_{2p_x} = \Psi_2 \tag{13}$$

De igual forma se obtiene que:

$$R(-2\pi/3)\Psi_1 = (1/3)^{1/2}R(-2\pi/3)\varphi_{2s} + (2/3)^{1/2}R(-2\pi/3)\varphi_{2p_x} = \Psi_3 \tag{14}$$