FÍSICA 4 B

Segundo Cuatrimestre de 2022

GUÍA 8: POTENCIALES EN 2-D Y 3-D, MOMENTO ANGULAR, ÁTOMO DE HIDRÓGENO, ESPÍN

1. Considere el siguiente potencial (pozo infinito):

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

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:

$$\phi(x,y,z) = f(x)g(y)h(z)$$

(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.

3. La energía potencial de un oscilador armónico tridimensional esférico puede escribirse como

$$V(r) = V(x,y,z) = {}^1\!/_2\, m\omega^2 r = {}^1\!/_2\, m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$$

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:

$$V(x,y,z) = {}^1\!/_2\, m\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2$$

Escribir la expresión de los niveles de energía en términos de los 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:

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{si r < a} \\ -V_0 & si\ \ a < r < b \\ 0 & si\, r > b \end{cases}$$

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 $\widehat{L_x}$, $\widehat{L_y}$ $y\,\widehat{L_z}$en coordenadas esféricas.
   Ayuda: recuerde que: $\widehat{L_x} = \hat{y}\widehat{p_z} - \hat{z}\widehat{p_y}$. Utilizar los operadores en la representación coordenadas y la definición de las coordenadas esféricas para evaluar las derivadas. Calcule $\widehat{L^2} = \widehat{L_x^2} + \widehat{L_y^2} + \widehat{L_z^2}$ en la misma representación. Mostrar que las autofunciones de$\widehat{L_z^2}$ y $\widehat{L^2}$:

$$\widehat{L_z}Y_{lm}(\Theta, \Phi) = \hbar\lambda_m Y_{lm}(\Theta, \Phi)$$
$$\widehat{L^2}Y_{lm}(\Theta, \Phi) = \hbar\lambda_l Y_{lm}(\Theta, \Phi)$$

   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 = 0.74Å. 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 de l =1 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 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 $r > 2a_0$?
   (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 2*s*.
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:

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

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 $\langle \hat{L}^2 \rangle, \langle \hat{L}_z \rangle$ y $\langle \hat{H} \rangle$

(d) Hallar ψ para un tiempo t cualquiera y repetir los cálculos de (c). Discutir el resultado.

(e) Si se mide $\widehat{L^2}$ y se obtiene el valor 0: indique cuál es la función de onda después de la medición. Si seguidamente se mide $\widehat{L_z}$, indique que valores pueden obtenerse.

(f) Ídem (e), si se mide $\widehat{L^2}$ y se obtiene el valor $2\hbar$.

14. Considere un electrón en un átomo de hidrógeno en el estado

$$\Psi = \frac{r}{2a_0\sqrt{6a_0^3}} e^{-r/2a_0} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} sen\, \Theta e^{-i\varphi}$$

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

(a) Calcular la densidad de carga en función de r. Determinar, en términos de a_0, su máximo.

(b) Calcular <r> y comparar con el resultado en (a).

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

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

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

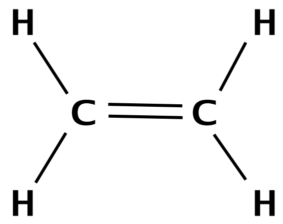
$$\Psi_3 = (1/3)^{1/2}\phi_{2s} - (1/6)^{1/2}\phi_{2p_x} - (1/2)^{1/2}\phi_{2p_y}$$

(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:



16. (a) Encuentre cuál es el efecto que tiene una rotación en un ángulo α alrededor del eje z sobre los siguientes orbitales del átomo de H (use el operador de rotación $\hat{R} = e^{-i\frac{\alpha\widehat{L_z}}{\hbar}}$):

   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.