

Problemas

Atomo de Hidrógeno y potenciales centrales §

1. Calcular el radio, la energía y la longitud de onda de la transición $n = 2 \rightarrow n = 1$ de los siguientes sistemas de 2 partículas:
(Calcular significa con unidades !!)
 - (a) H^2 (hidrógeno pesado = deuterón + electrón)
 - (b) He^+
 - (c) positronio
 - (d) mesonio ($m_\mu = 207 m_e$)
2. Sean $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ las soluciones del átomo de hidrógeno. Sean $R_{nl} = \frac{u_{nl}}{r}$ las funciones radiales reducidas.
 - (a) Mostrar que u_{10}^2 tiene un máximo en $r = a_0$ (el radio de Bohr).
 - (b) Calcular la posición para la cual la densidad de probabilidad es máxima, para el estado $n = 2, l = 1$.
 - (c) Calcular el valor medio $\langle r \rangle$ en dicho estado
 - (d) Si no coinciden, explicar por qué hay diferencias
3. Dibujar:
 - (a) Dibujar las funciones radiales R_{nl} , para $n = 1, 2, 3$
 - (b) Dibujar las funciones radiales reducidas P_{nl} , para $n = 1, 2, 3$
 - (c) Calcular $\langle r \rangle$ para el estado fundamental del Hidrógeno.
 - (d) Calcular $\langle 1/r \rangle$ para el estado fundamental del Hidrógeno. ¿Es igual a $1/\langle r \rangle$? ¿Por qué?
 - (e) Repetir con $\langle r^2 \rangle$
 - (f) Calcular $\langle r \rangle$ para los estados $1s, 2s, 3s, 3p, 3d$, y chequear los resultados con los gráficos.
4. Un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado $n = 2, l = 1, m_l = \pm 1$.
 - (a) ¿A qué distancia del núcleo la probabilidad de hallar el electrón es máxima?
 - (b) Calcular $\langle r \rangle$ y $\langle \frac{1}{r} \rangle$
 - (c) Calcular los valores medios de las energías (cinética, potencial y total) para ese estado.
5. Un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado

$$\Psi(r, t = 0) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{100}(r)e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_{211}(r)e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}$$
 - (a) ¿Qué valores de E, L^2 y L_z se pueden medir de este estado, y con qué probabilidad?
 - (b) Calcular $\langle E(t = 49 \text{ sec}) \rangle$
6. Encontrar la energía mas baja y el menor radio de inflexión (*classical turning point*) para el átomo de hidrógeno en estados con $l = 6$
7. Encontrar la densidad de probabilidad para un estado con $E = 3.40 \text{ eV}$.

§<http://www.df.uba.ar/users/dmitnik/teoricaII/hidrogeno>

8. Un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado

$$\Psi(r, 0) = \frac{\sqrt{\frac{4}{\pi}}}{(2a_0)^{3/2}} \left[e^{-r/a_0} + A \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} (-iY_1^1 + Y_1^{-1} + \sqrt{7}Y_1^0) \right]$$

- Calcular el valor de normalización A
 - Calcular la probabilidad de medir $\hbar^2 l(l+1)$ en una medición de L^2
 - Calcular la densidad de probabilidad $P_r(r)$ de encontrar el electrón en una capa dr alrededor del protón
 - Calcular el radio en el cual P_r es máximo
 - Calcular la energía media
 - Supongamos que se mide $L_z |\Psi(r, t=0)\rangle$ y resulta un valor $+\hbar$. ¿Cuánto vale $\Psi(r, t > 0)$?
 - ¿Y si el resultado anterior fue $L_z |\Psi(r, t=0)\rangle = 0$?
9. Usando la regla de recursión, demostrar que la solución radial del átomo de hidrógeno cumple con

$$R_{n(n-1)} = N_n r^{n-1} e^{-r/(na_0)} \quad (1)$$

10. Mostrar que un estado estacionario nl del átomo de hidrógeno cuyo momento angular es máximo
- $\langle r \rangle = a_0 n(n + \frac{1}{2})$
 - $\langle r^2 \rangle = a_0^2 n^2(n+1)(n + \frac{1}{2})$
 - Usar los resultados anteriores para mostrar que si n y l son muy grandes el electrón está localizado cerca de la superficie de una esfera de radio $a_0 n^2$ y su energía es igual a la de un electrón clásico
 - Calcular el valor más probable del radio para $l = n - 1$
11. La función de onda de un átomo de hidrógeno es:

$$\Psi = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} Z^{3/2} (6 - Zr) Zr e^{-\frac{Zr}{3}} \cos \theta$$

- Determinar los valores de los números cuánticos n , l y m_l de Ψ por inspección.
- Generar otra función con los mismos valores de n y l , pero con $m_l + 1$.
- Determinar el valor más probable de r en el estado especificado por Ψ , para $Z = 1$.

12. Oscilador Armónico isotrópico en 3-d

- Hallar el espectro y la degeneración de los estados de un oscilador armónico isotrópico en 3 dimensiones, en coordenadas cartesianas, para los primeros estados con $N = n_x + n_y + n_z \leq 4$
- Dibujar el espectro en un gráfico N vs. l para un oscilador armónico tridimensional.
- Comparar la degeneración de los estados en coordenadas esféricas, con los obtenidos en coordenadas cartesianas.
- Señalar la paridad de los estados en coordenadas esféricas.

13. Funciones esféricas de Bessel

- Mostrar por derivación directa, que $j_2(kr)$ es solución del problema de partícula libre.
- Mostrar para el caso de $l = 2$, que se cumplen los siguientes límites:

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} j_l(\rho) = \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right); \quad \lim_{\rho \rightarrow \infty} n_l(\rho) = -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right),$$

para argumentos pequeños, los límites son,

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} j_l(\rho) = \rho^l / (2l + 1)!!; \quad \lim_{\rho \rightarrow 0} n_l(\rho) = -(2l - 1)!! / \rho^{l+1}.$$

- ** Calcular el estado básico de hidrógeno en la representación de momento. Ayuda: Usar coordenadas esféricas con el eje en la dirección de p . Hacer la integral de θ primero.

$$\Phi(p) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{a_0 p}{\hbar}\right)^2\right]^2}$$

- Graficar la función
- Chequear la normalización
- Calcular $\langle p^2 \rangle$
- Calcular $\langle T \rangle$ (chequear teorema virial)

15. En las figuras siguientes están dibujadas las soluciones radiales $\Psi_{nl}(r)$ y las funciones radiales reducidas $P_{nl}(r) = r\Psi_{nl}(r)$, para los orbitales $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $3d$, $4s$, $4p$ y $4d$ del átomo de Hidrógeno. Identificar cada figura.

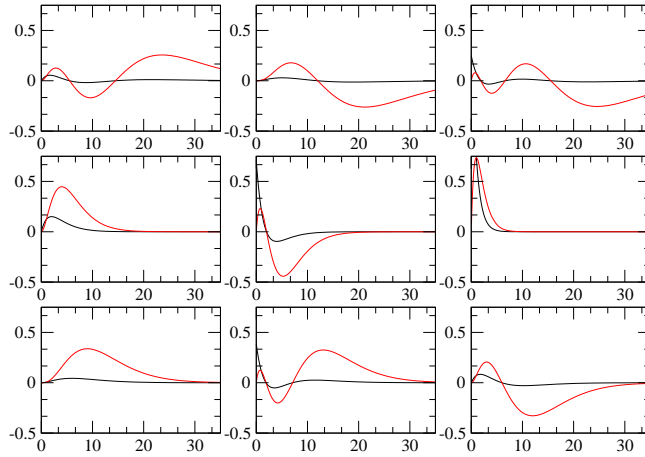


Figure 1: Soluciones radiales del átomo de Hidrógeno.