

**Práctica 5. Mecánica Cuántica: Átomo de hidrógeno, oscilador armónico.**

1. Teniendo en cuenta la definición de operador momento angular a partir de su definición clásica,  $\hat{l} = -i\hbar\hat{r} \times \hat{\nabla}$ ,
  - (a) Obtenga las componentes cartesianas del momento angular ( $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ ) y el cuadrado del operador momento angular ( $\hat{l}^2$ ) en términos de coordenadas esféricas ( $r, \theta, \phi$ ).
  - (b) Escriba la parte cinética del hamiltoniano ( $\hat{p}^2/2m$ ) haciendo uso de la expresión obtenida en el inciso anterior para  $\hat{l}^2$ . (Nota: recuerde la expresión del operador  $\nabla^2$  en coordenadas esféricas).
  
2. Suponga un electrón en un potencial central  $V(r)$ .
  - (a) Escriba la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo utilizando coordenadas esféricas.
  - (b) Proponga como solución  $(u(r)/r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  y derive la ecuación que debe satisfacer la función radial  $u(r)$  (recuerde que los armónicos esféricos,  $Y_{lm}$ , son autofunciones de los operadores  $\hat{l}^2$  y  $\hat{l}_z$ , con autovalores  $\hbar^2l(l+1)$  y  $m\hbar$ , respectivamente, donde  $l = 0, 1, 2, \dots$  y  $m = -l, -l+1, \dots, l$ ).
  - (c) Comparando con la ecuación de Schrödinger unidimensional, determine el potencial efectivo en el que se mueve el electrón.
  - (d) Si  $V(r)$  es el potencial coulombiano, grafique el potencial efectivo en función de  $r$ . Para ello, obtenga primero la posición en la que se localiza el mínimo y el valor del potencial efectivo allí. ¿Cómo cambia la forma del potencial al aumentar  $l$ ? ¿Cuál es el comportamiento del potencial efectivo para  $r$  pequeño? (esto último fuerza la condición de contorno  $u(r=0) = 0$  sobre la función radial).
  
3. Considere el átomo de hidrógeno y, continuando lo hecho en el ejercicio anterior, proponga como solución para la ecuación radial la función  $u(r) = e^{-\alpha r} r^\beta F(r)$  con  $F(r)$  un cierto polinomio en  $r$  que no puede crecer más rápido que  $e^{\alpha r}$  cuando  $r \rightarrow \infty$ .
  - (a) Reemplazando la forma propuesta para  $u(r)$  obtenga la ecuación diferencial que debe satisfacer  $F(r)$ .
  - (b) Compruebe que al considerar  $F(r) = \sum_{k=0}^{k_{max}} c_k r^k$  (polinomio de grado  $k_{max}$ ), la ecuación obtenida en (a) se reduce a una combinación lineal de potencias desde  $r^{-2}$  hasta  $r^{k_{max}}$  igualada a cero, es decir,
 
$$r^{-2}A_{-2} + r^{-1}A_{-1} + A_0 + \dots + r^{k_{max}}A_{k_{max}} = 0.$$

Dado que dicha ecuación vale para todo  $r$ , la solución para los coeficientes  $c_k$  (que determinan  $F(r)$ ) se obtiene igualando a cero los coeficientes  $A$ .

  - (c) Obtenga  $A_{k_{max}}$  e igualándolo a cero derive una expresión para la energía en términos del parámetro  $\alpha$ . A partir de  $A_{-2} = 0$  obtenga el parámetro  $\beta$  (tenga en cuenta que debe cumplirse  $u(r=0) = 0$ ).
  - (d) Planteando la anulación del coeficiente de una potencia arbitraria  $q$  y reemplazando las expresiones obtenidas en (c) para  $E$  y  $\beta$  se obtiene la siguiente relación de recurrencia que

determina los coeficientes  $c_k$  a partir de  $c_0$ :

$$c_{q+1} = c_q \frac{2\alpha}{(q+1)(2l+2+q)} \left( q+l+1 - \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\alpha} \right).$$

Aplique el hecho de que  $c_{k_{max}+1} = 0$  en la relación de recurrencia para derivar una expresión del parámetro  $\alpha$  en términos del entero  $n \equiv k_{max} + l + 1$ .

(e) Sabiendo que  $k_{max} \geq 0$  y que  $n = 1, 2, \dots$ , determine el rango de valores que puede tomar  $l$ . Utilice la expresión de  $\alpha$  en términos de  $n$  del inciso anterior y obtenga la expresión para las energías  $E_n$  a partir de la expresión calculada previamente en el inciso (c). Compare con el modelo atómico de Bohr.

(f) Con todo lo hecho en los incisos previos y en el ejercicio anterior escriba la solución completa de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno (las autofunciones no normalizadas y los autovalores).

(g) Calcule las constantes de normalización correspondientes a las funciones de onda con números cuánticos  $n = 1, l = 0$  y  $n = 2, l = 0$ .

4. El número de estados con una misma energía definen la degeneración de los orbitales con  $n$  fijo. Calcule la degeneración en términos de  $n$  teniendo en cuenta los números cuánticos permitidos para  $l$  y  $m$ .
5. Sean  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  las soluciones del átomo de Hidrógeno y  $P_{nl}(r) = R_{nl}^*(r)R_{nl}(r)r^2$  la densidad de probabilidad radial.
  - (a) Mostrar que  $P_{10}$  tiene un máximo en  $r = a_0$  (el radio de Bohr).
  - (b) Calcular el valor esperado  $\langle r \rangle$  para dicho estado.
  - (c) Si los valores no coinciden explique por qué se da esta diferencia.
6. 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 al electrón es máxima?
  - (b) Calcule  $\langle r \rangle$  y  $\langle 1/r \rangle$ . (Nota: El potencial Coulombiano tiene la forma  $V(r) = cte.1/r$ , de forma que  $\langle 1/r \rangle$  es proporcional al valor de expectación para  $V(r)$ .)
7. A partir de lo hecho en los ejercicios 5 y 6, ¿en qué estado el electrón tiene mayor probabilidad de encontrarse cerca del núcleo? Justifique conceptualmente a partir de la forma del potencial efectivo para  $l = 0$  y  $l \neq 0$  y las correspondientes regiones permitidas clásicamente para  $E < 0$ .
8. La función de onda del oscilador armónico cuántico está determinada por los polinomios de Hermite  $H_n(u)$ , y puede escribirse como:

$$\psi_n(x) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

donde  $u = x\sqrt{m\omega/\hbar}$  y  $A_n$  es una constante de normalización. Sabiendo que para los primeros

valores de  $n$ , los polinomios de Hermite valen:

$$\begin{aligned}
 H_0(u) &= 1 \\
 H_1(u) &= 2u \\
 H_2(u) &= 4u^2 - 2 \\
 H_n(u) &= 2uH_{n-1}(u) - 2(n-1)H_{n-2}(u) \\
 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\rho^2} H_n(\rho) H_m(\rho) d\rho &= \delta_{nm} 2^n n! \sqrt{\pi}
 \end{aligned}$$

(a) Escriba las funciones de onda para el oscilador en los estados correspondientes a  $n = 0, 1, 2$  y la densidad de probabilidad para dichos estados.

(b) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar a la partícula en  $x = 0$  en cada uno de los casos ( $n = 0, 1, 2$ )?

9. Utilice como guía lo hecho en el ejercicio 2 para explorar el oscilador armónico en tres dimensiones. Considere el potencial  $V(r) = m\omega^2 r^2/2$  y derive la ecuación radial para  $u(r)$ . A partir de la misma escriba el potencial efectivo y analice sus propiedades: determine el mínimo en función de  $l$ , estudie el comportamiento para  $r \rightarrow 0$  y  $r \rightarrow \infty$ , gráfiquelo en términos de  $r$  y estudie como cambia la forma del mismo al cambiar  $l$ .

10. Los valores permitidos para la energía del oscilador armónico tridimensional vienen dados por:

$$E_n = \left( n + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega$$

y los valores permitidos de  $l$  son  $0, 2, 4, \dots, n$ , si  $n$  es par, y  $1, 3, 5, \dots, n$ , si  $n$  es impar. Finalmente,  $m_l = -l, \dots, l$ . Calcule la degeneración de los niveles de energía tanto para  $n$  par como para  $n$  impar. ¿En qué difieren las expresiones para los niveles de energía correspondientes al oscilador armónico unidimensional y tridimensional? En base a esto, ¿puede usted detectar el error en la deducción de Planck de la distribución de Planck de la radiación de cuerpo negro?