**Introducción a la Física Cuántica**
**Tarea 6**

A entregar: Miércoles 14 de noviembre de 2018

## El átomo de Hidrógeno

En clase discutimos la solución al átomo de Hidrógeno, cuyo Hamiltoniano es,

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2\mu r^2}\hat{L}^2 - \frac{e^2}{r} \qquad (1)
\end{aligned}$$

donde $\mu \approx m_e$ es la masa reducida, aproximadamente igual a la masa del electrón, $-e$ la carga del electrón y $\hat{L}^2$ el cuadrado del momento angular,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi}\right) \qquad (2)$$

La proyección $z$ del momento angular, $\hat{L}_z$, está dada por,

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (3)$$

En clase mostramos, y usted verificará abajo, que $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$, conmutan todos entre sí. Por lo tanto, podemos hallar sus eigenfunciones comunes y sus eigenvalores correspondientes,

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) &= E_n\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) \\
\hat{L}^2\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) &= \hbar^2 l(l+1)\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) \\
\hat{L}_z\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) &= \hbar m\,\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) \qquad (4)
\end{aligned}$$

donde $E_n$ es la energía, dada por

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \qquad (5)$$

y los números cuánticos toman los valores

$$\begin{aligned} n &= 1,2,3,\ldots,\infty \\ l &= 0,1,2,\ldots,n-1 \\ m &= -l,-l+1,\ldots,-1,0,1,\ldots,l-1,l. \end{aligned} \tag{6}$$

Las funciones de onda $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)$ están explícitamente dadas por,

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho_n/2} \rho_n^l \, L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho_n) \, Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{7}$$

donde

$$\rho_n = \frac{2r}{na_0} \tag{8}$$

$L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ son los polinomios asociados de Laguerre y $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ son los armónicos esféricos. Para obtener su forma explícita, vea cualquier libro de funciones especiales (por ejemplo, *Mathematical Methods for Physicists*, G. Arfken) o busque en el internet. Este aspecto lo estudiará en detalle en su curso de Matemáticas Avanzadas de la Física.

El conjunto de todos los estados $\psi_{nlm}$ es una base completa y ortonormal del espacio de Hilbert de todas las funciones cuadrado-integrables en el espacio de tres dimensiones $(x,y,z) = (r,\theta,\varphi)$:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^2 dr \, \psi^*_{n'l'm'}(r,\theta,\varphi)\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{9}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\psi^*_{nlm}(r',\theta',\varphi') = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z'). \tag{10}$$

**Prob. 22 Degeneración de los estados de la energía**

Muestre que para cada valor $E_n$ de la energía, existen $n^2$ estados $\psi_{nlm}$ diferentes.

**Prob. 23. Distribuciones de probabilidad radiales**

Supongamos que sólo quisiéramos saber propiedades radiales, es decir, que quisiéramos saber, por ejemplo, el valor de expectación de una cantidad física que sólo dependiera de la magnitud del vector de posición $f(\vec{r}) = f(r)$ donde $r = |\vec{r}|$. Por ejemplo, podríamos preguntarnos por el valor promedio o de expectación de $f(r)$, cuando el estado es $\psi_{nlm}$,

$$\begin{aligned}\langle \hat{f}(r) \rangle &= \int d^3r \, \psi^*_{nlm}(r,\theta,\varphi) f(r) \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^2 dr \, \psi^*_{nlm}(r,\theta,\varphi) f(r) \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) \end{aligned} \tag{11}$$

Usando el hecho que los esféricos armónicos están normalizados, es decir,

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \, Y^*_{lm}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi) = 1 \tag{12}$$

muestre que el valor de expectación de $f(r)$ puede escribirse como,

$$\langle \hat{f}(r) \rangle = \int_0^{\infty} dr \, P_{nl}(r) \, f(r). \tag{13}$$

Identifique $P_{nl}(r)$. Note que esta cantidad puede interpretarse como la probabilidad de que, estando en el estado $\psi_{nlm}$ , hallemos al electrón entre $r$ y $r + dr$, es decir, es la probabilidad de la posición radial del electrón.

**Probs. 24 y 25. Gráficas de las distribuciones de probabilidad radiales**

Grafique $P_{10}(r)$, $P_{20}(r)$, $P_{21}(r)$, $P_{30}(r)$, $P_{31}(r)$ y $P_{32}(r)$ ... usted puede buscar en tablas o en el internet las funciones apropiadas de los polinomios asociados de Laguerre y luego graficarlas ... o, quizás mejor, puede usar el programa *Mathematica* y usar directamente la función **LaguerreL[p,q,x]** que es el polinomio asociado de Laguerre $L^q_p(x)$. Para sus gráficas use una escala en la que el radio de Bohr es la unidad, es decir, ponga $a_0 = 1$ en todas las fórmulas y grafique directamente.

**Prob. 26 y 27. Máximos de las distribuciones radiales**

Continuando con el problema anterior, halle los valores de $r$ en donde $P_{nl}(r)$ toma sus valores máximos. Muestre que para $l = n - 1$ el máximo siempre está en $r_{\rm max} = n^2 a_0$, que es el radio de las órbitas circulares de Bohr. Vea donde están los máximos para $l < n - 1$.

**Probs. 28 y 29. Propiedades del momento angular**

Muestre primero que si se tienen los operadores $\hat{A}$, $\hat{B}$ y $\hat{C}$, entonces,

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \tag{14}$$

Recordando que el momento angular es,

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \tag{15}$$

y usando las reglas de conmutación,

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \tag{16}$$

y que cualquier otro conmutador es igual a cero, muestre que,

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \tag{17}$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \tag{18}$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \tag{19}$$

y

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \tag{20}$$

**Probs. 30. Expresiones del momento angular**

Usando el hecho que el operador de momento angular, en la representación de la posición está dado por

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}} &= \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \\ &= -i\hbar\, \vec{r} \times \nabla \end{aligned} \tag{21}$$

muestre explícitamente que, en coordenadas esféricas, dicho operador puede escribirse de las siguientes maneras:

$$\hat{\vec{L}} = i\hbar \left( \frac{\hat{\theta}}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} - \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \tag{22}$$

donde $\hat{\theta}$ y $\hat{\phi}$ son los vectores unitarios de los correspondientes ángulos en coordenadas esféricas.

$$\hat{L}_x = i\hbar \left( \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \tag{23}$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left( -\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \tag{24}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \tag{25}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi} \right) \tag{26}$$

**Sugerencia:** Se puede proceder de varias maneras, la siguiente es sólo una sugerencia. Use el gradiente en coordenadas esféricas:

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\hat{\phi}}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \tag{27}$$

y use las expresiones explícitas de los vectores unitarios también en esféricas.