Mecánica Cuántica

Problema 1

Las funciones $\varphi_1 = Ae^{ikx}$ y $\varphi_2 = Be^{-ikx}$ representan a una partícula moviéndose sin restricciones en el eje x.

a) Plantee el $\mathscr{H}$ del sistema

b) Verifique que cada una de ellas son autofunciones del $\mathscr{H}$ y calcule el autovalor de energía.

c) Calcule la densidad de probabilidad para cada función.

d) De acuerdo a los resultados obtenidos en c) ¿puede predecir si obtendrá un valor de la cantidad de movimiento perfectamente definido? Justifique.

e) Indique si dichas funciones son autofunciones del operador cantidad de movimiento.

f) Si la función es autofunción del operador cantidad de movimiento calcule el autovalor (observable).

Problema 2

Considere una partícula de masa m confinada en una caja unidimensional de ancho L y de paredes infinitas.

a) Plantee la expresión de potencial que indica dicha restricción.

b) Plantee el $\mathscr{H}$ para la partícula dentro de la caja.

c) Si proponemos como solución φ = C sen kx + D cos kx. Indique los valores de D y k para que cumpla las condiciones de contorno: $\varphi_{(0)} = 0$ y $\varphi_{(L)} = 0$.

e) Verifique que la función propuesta (con los valores de D y k calculados en el inciso anterior) es autofunción del $\mathscr{H}$ y calcule los autovalores de energía. ¿Por qué se dice que la energía está cuantizada?

f) Realice un gráfico en el que represente los 3 primeros niveles de energía. Verifique analíticamente para dos estados n y n+1 que no están equiespaciados.

Si se considera ahora una partícula confinada en una caja rectangular de lados L_1 y L_2.

g) Plantee el $\mathscr{H}$ para este caso.

h) ¿Cuál es la función de onda que se propone como solución de la ecuación de Schrödinger?

i) ¿Cuáles son los autovalores de energía?

Problema 3

a) Grafique los niveles de energía hasta n = 4 para una partícula de masa m confinada en una caja de unidimensional de ancho L. Indique como varía la separación entre los niveles al aumentar n.

b) Grafique las funciones que son solución de la ecuación de Schrödinger hasta n = 4.

c) Grafique la densidad de probabilidad de los niveles hasta n = 4.

d) Repita el gráfico realizado en a) para la partícula en una caja de ancho L' = 2L.

e) ¿Cómo varía la diferencia de energía entre dos estados consecutivos al aumentar L?

Problema 4

Si se considera ahora una partícula confinada en una caja rectangular de lados $L_x = 3\, L_y$

a) Plantee la expresión de los niveles de energía permitidos indicando que es cada término.

b) ¿Cuáles son las funciones que describen esos estados?

c) En el caso que $L_x = L_y$ proponga valores para los números cuánticos de tal forma que dos estados tengan la misma energía (degenerados)

Problema 5

Dada una partícula con un movimiento armónico

a) Plantee el $\mathscr{H}$ para este caso.

b) Plantee la expresión de los niveles de energía permitidos indicando que es cada término.

c) Realice un gráfico en el que represente los 3 primeros niveles de energía. ¿Están equiespaciados? Verifíquelo analíticamente para dos estados v y v+1.

Problema 6

Dada una partícula con un movimiento armónico

a) Esquematice las distribuciones de probabilidad para los 5 primeros estados indicando la energía de cada uno. ¿Cómo varía esta distribución al aumentar v?

b) ¿Cómo varía la separación entre los niveles de energía al aumentar la masa de la partícula? ¿Y si aumenta la constante k (constante de fuerza del oscilador)?

c) Para un oscilador armónico constituido por una masa $1.33\ 10^{-25}$kg la diferencia entre dos niveles de energía adyacentes es $4.82\ 10^{-31}$J. Calcular la constante de fuerza del oscilador

d) Calcular la energía del fotón necesaria para excitar la transición entre niveles de energía vecinos de un oscilador armónico de masa igual a la de un protón y constante de fuerza k = 544N/m.

e) Repita el d) para el doble de la masa del protón

Datos: $m_p = 1.672622\ 10^{-25}$kg

$\hbar = 1.05457\ 10^{-34}$Js

Problema 7

Dada una partícula de masa m moviéndose sobre una circunferencia de radio r en el plano xy (rotor rígido en un plano).

a) Plantee el $\mathscr{H}$ del sistema

b) Verifique que $\varphi = 1/(2\pi)^{½}.e^{i\ ml\ \phi}$ es autofunción del $\mathscr{H}$ y calcule los autovalores de energía.

c) Indique que valores puede tomar m_l para cumplir con la condición de que la función sea univaluada.

d) Calcule la densidad de probabilidad para la función.

e) De acuerdo a los resultados obtenidos en d) ¿puede predecir si obtendrá un valor de la cantidad de movimiento perfectamente definido? Justifique.

e).La función propuesta en b) ¿es autofunción del operador cantidad de movimiento angular? Calcule el autovalor (observable). ¿De qué depende?

Nota: en este caso el vector momento angular tiene una única componente en la dirección del eje z

Problema 8

Dada una partícula de masa m moviéndose sobre una esfera de radio r en el espacio

a) Plantee el $\mathscr{H}$ para este caso. ¿Cómo se denominan las funciones que son solución de la ecuación de Schrödinger y cuáles son los números cuánticos de los que dependen? ¿Cuáles están degenerados?

b) Plantee la expresión de la energía indicando que es cada factor.

c) Realice un gráfico en el que represente los 3 primeros niveles de energía. ¿Están equiespaciados? Verifíquelo analíticamente para dos estados ℓ y ℓ +1.

Problema 9

Para un átomo de hidrógeno:

a) Plantee el $\mathscr{H}$ del movimiento interno del electrón con respecto al núcleo
b) Indique cuáles son las funciones que son solución de la ecuación de Schrödinger. ¿De qué variables dependen? ¿Cuáles son los números cuánticos que las definen y qué valores pueden tomar?
c) ¿Cuáles son las energías permitidas y de que número cuántico dependen? ¿Cuántas funciones tienen la misma energía?
d) Grafique las energías permitidas hasta n=3 ¿Cómo cambia la diferencia de energía entre dos niveles consecutivos al aumentar n?
d) ¿Qué números cuánticos definen una capa, subcapa y orbital? Haga un esquema de los orbitales de las capas K, L y M.
e) ¿Cuándo se dice que un electrón "ocupa" un orbital?
f) Grafique la densidad electrónica de los orbitales 1s, 2s y $2p_z$ Indique los números cuánticos que identifican a estos orbitales ¿Cuáles de ellos tienen densidad electrónica sobre el núcleo?
g) ¿Qué números cuánticos identifican completamente el estado de un electrón? ¿Con qué funciones construyo la función de onda total de un electrón?

<u>Problema 10</u>
a) Dentro de la aproximación orbital, plantee las funciones de onda más adecuadas para describir el estado orbital de dos electrones.
b) Plantee las posibles funciones de espín para dos electrones.
c) Aplicando el principio de exclusión de Pauli indique la configuración electrónica del átomo de Helio y su función de onda total.
d) Aplicando el principio de exclusión de Pauli indique la configuración electrónica del átomo de Helio excitado y escriba cuáles pueden ser las funciones de onda que lo caracterizan indicando cuáles forman el triplete y el singulete.
e) Exprese la configuración electrónica del Litio. Justifique por qué en la capa L comienza a llenarse primero el orbital s.

<u>Problema 11</u>
a) ¿Qué entiende por aproximación de Born Oppenheiner? ¿Cómo expresa el orbital molecular a través de la combinación lineal de orbitales atómicos (CLOA)?
b) ¿Qué orbitales moleculares conoce? ¿Cómo los diferencia? Grafíquelos.
c) ¿Cuál es la diferencia entre orbitales enlazantes y antienlazantes?
d) Plantee la configuración electrónica de O_2.