QUIMICA FISICA II. CURSO 2003-2004. SERIE 03.
El problema de dos partículas en Mecánica Cuántica

1. En Química Cuántica es habitual emplear el sistema de unidades atómicas, definidas como sigue:

Propiedad	unidad	equivalencia S.I.	nombre
Carga elemental	e	$1.602176462 \times 10^{-19}$ C	—
Masa	m_e	$9.10938188 \times 10^{-31}$ kg	—
Momento angular	$\hbar$	$1.054571596 \times 10^{-34}$ J·s	—
Constante eléctrica	$4\pi\epsilon_0$	$1.112650056 \times 10^{-10}$ F·m^{-1}	—
Longitud	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$	$0.5291772083 \times 10^{-10}$ m	bohr
Energía	$E_h = e^2/4\pi\epsilon_0 a_0$	$4.35974381 \times 10^{-18}$ J	hartree

Empleando la aproximación de masa nuclear infinita ($\mu \simeq m_e$), expresa en estas unidades: (a) el hamiltoniano del átomo hidrogenoide, (b) su energía, (c) la función de onda del estado $1s$.

2. Considera la absorción de luz de un átomo de hidrógeno para pasar del estado $1s$ al estado $2p$.

(a) Bajo la aproximación de masa nuclear infinita, calcula ΔE, ν, λ, y $\bar{\nu} = 1/\lambda$ (el llamado número de ondas, habitualmente expresado en cm^{-1}).

(b) Sabiendo que la masa del protón es $m(^1\text{H}) = 1.67262158 \times 10^{-27}$ kg (1.00727646 unidades de masa atómica, u; 1 u $= 10^{-3}/N_A = 1.66053873 \times 10^{-27}$ kg), calcula la longitud de onda de la absorción.

(c) Otro de los isótopos del hidrógeno es el deuterio, D ó ^{2}H, cuya masa es 2.01355321 u, y cuya abundancia es de 0.015 %. Calcula a qué longitud de onda absorbe un átomo de este isótopo que sufre la misma transición.

3. Las partes radiales normalizadas de los orbitales del átomo de hidrógeno (con $\mu \simeq m_e$) correspondientes a los tres primeros niveles de energía son $R_{1s}(r) = 2\,e^{-r}$, $R_{2s}(r) = \frac{1}{\sqrt{8}}(2-r)\,e^{-r/2}$, $R_{2p}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}}\,r\,e^{-r/2}$, $R_{3s}(r) = \frac{2}{81\sqrt{3}}(27-18r+2r^2)\,e^{-r/3}$, $R_{3p}(r) = \frac{4}{81\sqrt{6}}(6-r)\,r\,e^{-r/3}$, y $R_{3d}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30}}\,r^2 e^{-r/3}$. Representa estas funciones y comprueba que el número de nodos radiales es $n-l-1$, sin contar los nodos en $r=0$ y $r=\infty$. Comprueba, además, que las funciones ns son las únicas con valor no nulo en el origen.

4. Repite el ejercicio anterior para la densidad de probabilidad radial, $\mathcal{P}_{nl}(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$. Comprueba que todos los estados tienen densidad de probabilidad nula en el origen de coordenadas.

5. La función de onda del estado fundamental es $\psi_{1s}(r,\theta,\phi) = e^{-r}/\sqrt{\pi}$, y la de un estado excitado es $\psi_{2p_z}(r,\theta,\phi) = r\cos\theta\, e^{-r/2}/4\sqrt{2\pi}$. Calcula para estos estados el valor esperado de $\hat{\vec{r}}$, $\hat{\vec{p}}$, $\hat{r}$, $\hat{p}$, $\hat{T}$, $\hat{V}$ y $\hat{H}$. Comprueba que se cumple el teorema del virial, $\langle\hat{T}\rangle = \frac{n}{2}\langle\hat{V}\rangle$ si $V(\lambda\vec{r}) = \lambda^n V(\vec{r})$. Calcula también la probabilidad de encontrar el sistema en configuraciones con $\theta \in [0,\pi/4]$ y con $\theta \in [0,\pi/2]$.

6. Usa la densidad de probabilidad radial del orbital $1s$ para encontrar (a) la distancia electrón-núcleo más probable, (b) la distancia promedio, y (c) la distancia mediana, r_m, definida como la distancia para la que $\mathcal{P}[r < r_m] = 1/2$. (d) Calcula r_0 tal que $\mathcal{P}[r < r_0] = 99\,\%$.

7. En Mecánica Clásica, la expresión $0 \leq \mu\dot{r}^2/2 = E - (V(r) + l^2/2\mu r^2) = E - V_{\text{eff}}(r)$ define la región permitida para el movimiento. Los puntos de energía cinética nula, llamados puntos de parada, de retroceso, o puntos apsidales, dan las distancias mínima y máxima que alcanza la partícula de masa μ del sistema de dos cuerpos para valores dados de E y l. Aplica esta fórmula a un estado ψ_{nlm} del hidrógeno usando las expresiones cuánticas de su energía y momento angular y obtén los hipotéticos puntos de parada en función de n y l. Aplica esta solución al estado $1s$. Calcula, para este estado, la probabilidad de encontrar el sistema en la región clásicamente prohibida.

8. Calcula los valores esperados del operador $\hat{r}$ correspondientes a los estados de los tres primeros niveles de energía y comprueba que satisfacen la expresión general: $\langle\hat{r}\rangle_{nl} = (3n^2 - l(l+1))/2$.