Serie de problemas para el curso

Química Cuantica I

Matemáticas

Resuelva todos los problemas del capítulo 1 de la referencia B6 y compare sus resultados con las soluciones que se incluyen al final de este documento.

Tema 1.

1) A partir de los postulados del modelo atómico de Bohr, obtenga expresiones para el radio de las órbitas y el momento lineal de un electrón en dichas órbitas. Demuestre que $V_n = 2E_n = -2T_n$, donde T_n, V_n y E_n son respectivamente la energía cinética, potencial y total del sistema en una órbita permitida.

2) En microscopía, el máximo detalle que se puede observar es del orden de magnitud de la longitud de onda utilizada. ¿Cuál será el límite de resolución de un microscopio electrónico que usa electrones con energía cinética de $150keV$? ¿Cuánta veces más grande es éste, comparado con un microscopio óptico? (La longitud de onda en la región visible está entre 400 y $700nm$.)

Tema 2.

1) Aplique cada uno de los siguientes operadores $x\frac{d}{dx}$ y $\frac{d}{dx}x$ a cada una de las siguientes funciones $x\cdot \sin x$, $x^2\cdot e^{-3x}$.

2) Demuestre que los operadores $x\frac{d}{dx}$ y $\frac{d}{dx}x$ son lineales.

3) Utilizando las propiedades de los conmutadores y $\left[\hat{x},\hat{p}\right] = i\hbar$, calcule: $\left[\hat{x},\hat{p}^2\right]$, $\left[\hat{x}^2,\hat{p}\right]$, $\left[\hat{x}^2,\hat{p}^2\right]$, y $\left[\alpha\hat{x}+\beta\hat{p},\gamma\hat{x}+\delta\hat{p}\right]$ ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$ son constantes).

4) Para cada una de las siguientes funciones: $e^x, x^2e^{-x}, x^2e^{x^2}, e^{-x^2}, xe^{-x^2}$, indique si es o no función propia del operador $\left(4x^2 - \frac{d^2}{dx^2}\right)$ y en caso afirmativo, obtenga el valor propio.

5) Obtenga las funciones propias de los siguientes operadores: a) $\frac{d^2}{dx^2}$, b) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, c) $\frac{d^2}{dx^2}+k^2$.

6) Indique bajo que condiciones el operador $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$ es hermitiano. (Considere cada componente del vector.)

7) Muestre que: a) $\left[\hat{x}_k, \hat{p}_l\right] = i\hbar\delta_{kl}$ y b) $\left[\hat{x}_k, \hat{p}_k^n\right] = i\hbar n\hat{p}_k^{n-1}$.

8) Indique si el operador $i\hat{x}$ es o no hermitiano. En caso negativo, ¿cuál es el adjunto?

9) Demuestre que los operadores $i\left(\hat{A}^\dagger - \hat{A}\right)$ y $\left(\hat{A}^\dagger + \hat{A}\right)$ son hermitianos, si $\hat{A}$ es un operador lineal.

Tema 3.

1) Considere a una partícula descrita por la función de onda $\psi(x,t) = A\exp\left(-\frac{|x|}{L} - iE\frac{t}{\hbar}\right)$. Determine el valor de A que normaliza a la función de onda. Calcule $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ y Δx. Obtenga la probabilidad de encontrar a la partícula entre 0 y L, y en el intervalo $(L,2L)$.

2) Utilizando la función de onda del problema anterior, obtenga $\phi(p,t) \equiv \langle\varphi_p|\psi\rangle$. Calcule $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$ y Δp. Obtenga la probabilidad de encontrar a la partícula con momento entre 0 y $\hbar/L$, y en el intervalo $(\hbar/L, 2\,\hbar/L)$.

3) Si $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$, calcule $\left[\hat{H}, \hat{x}\right]$. Use el resultado anterior en la expresión $\left\langle u_k\middle|\left[\hat{H},\hat{x}\right]\middle|u_l\right\rangle = \left\langle u_k\middle|\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}\middle|u_l\right\rangle$ para demostrar que $-\frac{\hbar^2}{m}\left\langle u_k\middle|\frac{du_l}{dx}\right\rangle = \left(E_k - E_l\right)\left\langle u_k\middle|xu_l\right\rangle$, donde las funciones u_j son funciones propias del operador hamiltoniano.

Tema 4.

1) Para una partícula encerrada, calcule $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$, $\Delta x\Delta p$ y $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$.

2) Si $\psi(x) = A\left(x^2 - a^2\right)$ es la función de onda de una partícula encerrada, calcule la constante de normalización y el valor esperado de la energía. Compare el último resultado con la energía del estado basal, ¿cuántas veces es más grande o más pequeño?

3) Considere un balín de 10.0*g* moviendose en un carril sin fricción de 1.00*m*. Utilizando el modelo de la partícula encerrada : a) Calcule la energía del estado basal. b) Si el balín se mueve a una velocidad de 1.00$m\ s^{-1}$, ¿cuánto vale n? c) Obtenga ΔE_n para el valor de n obtenido en el inciso anterior. d) ¿Cómo es $|\Psi(x)|^2$?

4) Para el problema del pozo finito: a) Encuentre C y D para que la función de onda esté normalizada. b) Si a=1$\AA$ y La=10, hay siete estados ligados: ka = 1.4276, 2.8523, 4.2711, 5.6792, 7.0689, 8.4232, 9.6789 . Calcule $P(a,\infty)=\int_a^\infty |u_E(x)|^2\,dx$ para los siete estados ligados y grafique P vs ka.

5) Obtenga las funciones propias y los valores propios de la energía para una partícula en el potencial: $V(x)=\begin{cases}\infty & , \quad x<0\\ 0 & , \quad 0<x<a\\ V_0 & , \quad x>a\end{cases}$, donde V_0>0. Considere sólo el caso de energias menores que V_0.

Tema 5.

1) A partir de la fórmula de Rodrigues, obtenga los seis primeros polinomios de Hermite (n = 0, 1, ..., 5) y calcule las raices de cada uno de ellos. Haga una gráfica cualitativa de $\exp\left(-\xi^2\right)H_n(\xi)^2$.

2) Para el oscilador armónico calcule $\langle k|x|l\rangle$ y $\left\langle k\left|\frac{d}{dx}\right|l\right\rangle$. Demuestre que $\langle n|\hat{T}|n\rangle=\frac{1}{2}E_n$ y $\langle n|\hat{V}|n\rangle=\frac{1}{2}E_n$.

3) Una partícula de masa de 100g está unida a un resorte con constante de fuerza igual a 1000Jm^{-2}. Calcule: a) la energía de estado basal, b) $\langle\hat{p}^2\rangle$, c) $\langle\hat{x}^2\rangle$, d) la separación entre los niveles de energía.

Tema 6.

1) Encuentre expresiones en coordenadas esféricas para los operadores: $\hat{L}_1$, $\hat{L}_2$, $\hat{L}_3$, $\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$, $\hat{L}^2$.

2) Calcule $\langle lm|\hat{L}_1^2|lm\rangle$, $\langle lm|\hat{L}_2^2|lm\rangle$ y $\langle lm|\hat{L}_3^2|lm\rangle$

3) Obtenga todos los armónicos esféricos, Y_{lm}, con l<3.

Tema 7.

1) Utilice la función generadora de los polinomios de Laguerre para demostrar:

a) $L_{k+1}(\rho)-[\rho-2k-1]L_k(\rho)+k^2L_{k-1}(\rho)=0$. (Derive la función generadora con respecto a x.)

b) $L_k{}'(\rho)-kL_{k-1}{}'(\rho)+kL_{k-1}(\rho)=0$. (Derive la función generadora con respecto a ρ.)

c) $\rho L_n''(\rho)+[1-\rho]L_n'(\rho)+nL_n(\rho)=0$. (Utilice (b) con $k = n+1$, derive (a) con $k = n$, reste las expresiones resultantes y use (b) para eliminar L_{k-1}', derive nuevamente elimine L_{k-1}', con la expresión previa.)

2) Para un electrón en el estado |321>, obtenga su energía, encuentre la menor energía que puede absorber (y la longitud de onda correspondiente), calcule la mayor energía que puede emitir (y la logitud de onda asociada).

3) Si un átomo conservara el orden de orbitales hidrogenoide y tiene llenas las capas n=1,2, ...,M. Calcule el número de estados ocupados.

Tema 8.

1) Considere un sistema tridimensional formado por tres partículas que no interactúan entre sí. Si éstas se mueven en un potencial $V(\mathbf{r})=k\mathbf{r}^2/2$. Obtenga la función de onda y la energía del estado basal, a) si son fermiones, b) si son bosones.

2) Se encuentran veinte fermiones, sin interacción mutua, encerrados en una caja cúbica de volumen $8L^3$. Calcule la energía del estado basal del sistema.

3) Muestre que el operador del cuadrado del momento angular de dos partículas, $\hat{L}^2=\left(\hat{L}_1+\hat{L}_2\right)^2$, puede escribirse como:

$$\hat{L}^2=\hat{L}_1^{\,2}+\hat{L}_2^{\,2}+2\hat{L}_{13}\hat{L}_{23}+\hat{L}_{1+}\hat{L}_{2-}+\hat{L}_{1-}\hat{L}_{2+}.$$

4) Si $|\alpha\rangle=\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle$ y $|\beta\rangle=\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$ son las funciones propias de los operadores del momento angular de espín, $\hat{S}^2$ y $\hat{S}_3$, demuestre que se cumplen las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned}
&\hat{S}^2|\alpha\rangle=\tfrac{3}{4}\hbar^2|\alpha\rangle && \hat{S}^2|\beta\rangle=\tfrac{3}{4}\hbar^2|\beta\rangle\\
&\hat{S}_3|\alpha\rangle=\tfrac{1}{2}\hbar|\alpha\rangle && \hat{S}_3|\beta\rangle=-\tfrac{1}{2}\hbar|\beta\rangle\\
&\hat{S}_+|\alpha\rangle=0 && \hat{S}_+|\beta\rangle=\hbar|\alpha\rangle\\
&\hat{S}_-|\alpha\rangle=\hbar|\beta\rangle && \hat{S}_-|\beta\rangle=0
\end{aligned}$$

Tema 9.

1) Considere una partícula en una dimensión, en el intervalo [-a,a]. Utilice el método variacional para encontrar la menor energía y la función de onda aproximada con polinomios impares de grado tres. Compare su resultado con la solución exacta.

2) Se tiene un sistema unidimensional bajo la influencia del potencial:

$$V(x)=\begin{cases}\infty & ,|x|<a\\ \dfrac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\cos\left(\dfrac{\pi x}{2a}\right) & ,|x|>a\end{cases}.$$

Aproximando la función de onda por $\Psi(x)=c_1u_1(x)+c_3u_3(x)$, donde u_1 y u_3 son la primera y tercera soluciones de la partícula encerrada, encuentre variacionalmente los coeficientes c_1 y c_3. Obtenga la mejor aproximación a la energía del estado basal.

Tema 10.

1) Para un oscilador armónico unidimensional en un campo de fuerza constante, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{k\hat{x}^2}{2} - F\hat{x}$, use la teoría de perturbaciones para obtener: a) $\psi^{(0)} + \psi^{(1)}$, b) $\omega^{(0)} + \omega^{(1)} + \omega^{(2)}$, c) $\left\langle \psi^{(0)} + \psi^{(1)} \middle| \hat{H} \middle| \psi^{(0)} + \psi^{(1)} \right\rangle$, d) $\left\langle \psi^{(0)} + \psi^{(1)} \middle| x \middle| \psi^{(0)} + \psi^{(1)} \right\rangle$.

2) Para el hamiltoniano $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{k\hat{x}^2}{2} - c$, donde c es una constante, utilice la teoría de perturbaciones para calcular las correcciones a primero y segundo orden en la energía y en la función de onda. Tome como sistema de referencia al oscilador armónico.

3) Se tiene una partícula en una dimensión, con el potencial
$$V(x) = \begin{cases} \infty & ,|x| > a \\ A\left(1 - \left|\frac{x}{a}\right|\right) & ,|x| < a \end{cases}.$$
Utilice como aproximación inicial a la partícula encerrada y calcule la corrección a primer orden en la energía. Evalue su resultado para $A = \pm\frac{E_1}{10}$.

Soluciones y ayuda para algunos problemas

Matemáticas

2) -160. 3) 20, 384. 5) $5\mathbf{i}-2\mathbf{j}+2\mathbf{k}$, $3\mathbf{i}+4\mathbf{j}+4\mathbf{k}$, **−2,** $8\mathbf{i}+7\mathbf{j}-13\mathbf{k}$.

6) $L_1=r_2p_3-r_3p_2$, $L_2=r_3p_1-r_1p_3$, $L_3=r_1p_2-r_2p_1$.

7) $r_A^2=x^2+y^2+(z-R/2)^2$, $r_B^2=x^2+y^2+(z+R/2)^2$.

8) elipse: $(x/a)^2+(y/b)^2=1$, hipérbola: $(x/a)^2-(y/b)^2=1$,

9) $-2+2i$, $xu-yv+(yu+xv)i$, i, $xu-yv-(yu+xv)i$, $(x^2+y^2)(u^2+v^2)$.

10) 2, 2, 0. 11) $3x^2+4x+1$, $2x^2+2x$, x^2+2x+1, 1. 12) $\hat{P}^2 + \left[\hat{Q},\hat{P}\right] - \hat{Q}^2$

13) a^2. 14) $-(a^2+b^2+c^2)$. 15) $a=½\sqrt{k}$, $-2a$. 16) impar, par, impar, par, par, impar.

17) impar, par, impar.