ZTF-FCT
Zientzia eta Teknologia Fakultatea
Facultad de Ciencia y Tecnología

eman ta zabal zazu
Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea

FISIKA KUANTIKA

4 Gaia

Hidrogeno atomoaren autofuntzioak eta autobalioak

1. Kalkula bitez hidrogeno-atomoaren oinarrizko egoerako energia zinetikoaren eta energia potentzialaren itxarotako balioak.

2. Lor bedi hidrogeno-atomoaren $2s$ elektroia nukleoan zentraturiko $4a_0$ erradioko zirkunferentzia baten barnealdean aurkitzeko dagoen probabilitatea. Halaber, kalkula bedi espazioalde horretan $2p$ elektroia aurkitzeko dagoen probabilitatea.

3. Kalkula bedi hidrogeno-atomoaren oinarrizko egoerako elektroiaren eta nukleoaren arteko distantziaren itxarotako balioa. Halaber, kalkula bedi distantzia horren ziurgabetasuna eta konpara bedi ziurgabetasun hori itxarotako balioarekin. Azter bitez lorturiko emaitzen ondorioak.

4. Kalkula ezazu hidrogeno-atomoaren egoera geldikorren $< r^{-1} >$.

5. Hidrogeno-atomo baten elektroiaren uhin-funtzioa ondorengoa da:

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{2,1}(r)\left[\sqrt{\frac{1}{3}}Y_1^0(\theta,\phi) + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_1^1(\theta,\phi)\right]$$

Elektroiaren energia neurtzen badugu, zeintzuk dira lor genitzazkeen balioak eta hauen probabilitateak?, eta L_z neurtzean?

6. Hidrogeno-atomo baten elektroiaren E, L^2, eta L_z magnitudeen aldibereko neurketak egitean ondorengo balioak lortzen ditugu: $(E, L^2, L_z) = (E_2, 0, 0)$, $(E_3, 6\hbar^2, 2\hbar)$ eta $(E_3, 2\hbar^2, -\hbar)$; hirukote bakoitzaren probabilitateak 1/2, 1/4 eta 1/4 izanik, hurrenez hurren.

- Adieraz ezazu aurreko baldintzak betetzen dituen bi egoera (uhin-funtzio) independenteak.
- Zein izango da egoera hauen denboraren garapena?

7. H atomoaren hasierako egoera ondorengo uhin-funtzioaren bidez adierazten da:

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = A[\phi_{100}(\mathbf{r}) - \phi_{210}(\mathbf{r})].$$

Kalkula ezazu $< (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)^2 > (t)$. Zein da dentsitate-probabilitateak, $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, duen oszilazioen periodoa?

8. Hidrogeno atomoaren elektroia $n = 2$, $l = 1$ eta $m_l = 1$ egoeran dago.

- Nukleotik zein distantziatan da maximoa elektroia aurkitzeko probabilitatea? (Eman ezazu emaitza Å-etan)
- Kalkula ezazu egoera horri dagozkion energia potentzial eta zinetikoaren batezbestekoen zenbakizko balioak? (Eman itzazu emaitzak eV-tan)

Laguntza: $\psi_{211}(\mathbf{r}) = (1/[8\sqrt{\pi a_0^3}])\ (r/a_0)\ e^{-r/2a_0} \sin\theta\ e^{i\phi}$

9. H atomoko elektroia $4d$ egoeran egonik, bere uhin-funtzioaren alde erradiala ondorengoa da: $R_{4d}(r) \propto (6 - r/2a_0) r^2 \mathrm{e}^{-r/4a_0}$. ψ_{321} autofuntzioaren adierazpena ondorengoa dela jakinik: $\psi_{321} \propto r^2 \mathrm{e}^{-r/3a_0} \sin\theta \cos\theta\ \mathrm{e}^{i\phi}$, idatz ezazu (normalizazio-konstanterik gabe) ψ_{42-1} uhin-funtzioaren adierazpena.

10. Hidrogeno atomoaren autofuntzio bati dagokion energia -0.85 eV da. Egoera honen uhin-funtzioa bakoitia izanik eta $< \hat{L}^2 >=6\hbar^2$, $\hat{L}^2$ neurtzerakoan, zein da $2\hbar^2$ lortzeko probilitatea?

11. H atomoaren hasierako egoera ondorengo uhin-funtzioaren bidez adierazten da:

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = A[\psi_{100}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r})].$$

Kalkula ezazu $< \hat{L}^4 > (t)$ eta $< z > (t)$.

12. Atomo bakarreko (Z=1) momentu dipolarra ondorengo adierazpenaren bidez definitzen da:

$$\mathbf{d} = -e\mathbf{r},$$

non $\mathbf{r}$ elektroiak nukleoarekiko duen posizio-bektorea den.

- Froga ezazu atomoaren egoera egonkorren $\mathbf{d}$-ren batezbestekoa nulua dela.
- Atomoa ezin daiteke egon egoera egonkor batean aldakorra den eremu elektromagnetikoa (adibidez, argia) bere gainean aplikatzen denean. Izatez, egoera ez-egonkor horretan egonik argia xurgatu edo igorri egiten du. Demagun t aldiunean atomoaren egoera ondorengoa dela:

  $$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}} \left[\Psi_{1s}(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \gamma \Psi_{2p0}(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \right],$$

  non γ konstante erreala den. Normalizaturik al dago aurreko uhin-funtzioa? Zeintzuk dira $\hat{H}, \hat{L}^2$ eta $\hat{L}_z$ eragileen batezbesteko balioak? Kalkula ezazu ere $\hat{\mathbf{d}}$ eragilearen batezbesteko balioa eta froga ezazu elektroia egoera horretan egonik batezbestean oszilakorra den dipolo elektrikoaren jokaera duela. Klasikoki sistema honek erradiazio elektromagnetikoa igorriko luke, zein maiztasunarekin?
- Kalkula ezazu $< \mathbf{d} >$ goiko uhin-funtzioan Ψ_{2p0} uhin-funtzioa Ψ_{2s} uhin-funtzioarekin ordezkatu ezkero. Zer gertatzen da Ψ_{2p0} uhin-funtzioa Ψ_{3d0}-rekin ordezkatzen denean?

13. Partikula baten haiserako egoera ondorengoa da:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2}R_{3,2}(r)Y_2^1(\theta,\phi) - i\frac{\sqrt{3}}{2}R_{4,2}(r)Y_2^{-1}(\theta,\phi)\right].$$

Hidrogeno atomoaren autofuntzioa al da? $\hat{L}_z^2$-ren autofuntzioa al da? Zenbat balio du $< \hat{L}_z >$?

14. Hidrogeno atomoko elektroiaren egoeraren zenbaki kuantikoak ondorengoak dira: $n = 5, l = 4, m_l = -4$. Egin ezazu egoera honi dagokion dentsitate-probabilitate erradialaren irudia, eta kalkula ezazu r-ren **zenbakizko balioa** non dentsitate-probabilitate erradiala maximoa den?

15. Hidrogeno atomoan dagoen elektroi baten hasierako egoera ondorengoa da:

$$\Psi(\mathbf{r}, t=0) = \frac{1}{\sqrt{3}}\phi_{2,0,0}(\mathbf{r}) + \frac{2}{\sqrt{3}}\phi_{3,2,0}(\mathbf{r}).$$

Kalkula ezazu zenbat balio duten $< \mathbf{r} > (t)$ eta $< L_x > (t)$ edozein t aldiune batean.

16. H atomoko elektroiaren hasierako egoera ondorengoa da:

$$\Psi(\mathbf{r}, t=0) = \frac{1}{2}\psi_{321}(\mathbf{r}) - i\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_{42-1}(\mathbf{r}).$$

Iraunkorra al da? Kalkula ezazu $< \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 > (t)$.