

Tema 2, segon part:

Rotor i hidrogen

Justifica la veracitat o falsedat de les següents afirmacions o tria la resposta correcta i justifica:

- L'energia de l'estat fonamental de la partícula en un anell 1D no pot tenir energia $E = 0$ perquè contravindria el principi de Heisenberg.
 - De manera semblant a la caixa quadrada 2D la funció d'ona del primer estat excitat de l'anell 1D (doblement degenerat) presenta un node.
 - No és possible trobar funcions d'ona reals com autovalors de l'Hamiltonià corresponent a la partícula en un anell 1D. Les funcions han de ser $\Psi = Ne^{im\phi}$.
 - Tots els estats de la partícula en un anell 1D presenten degeneració 2.
- En cap cas podem conèixer simultàniament L_x i L_y en un rotor 3D.
 - Podem conèixer simultàniament L^2 i L_z però no L^2 i L_x .
 - L_+ és hermític.
 - Les funcions del rotor 3D, Y_{11} , que té una representació gràfica que sembla un anell, i Y_{10} , que sembla un cacau (dos esferes tangents), tenen però la mateixa energia.
- \hat{L}_z commuta amb L_+L_- .
 - \widehat{L}^2 commuta amb \hat{L}_z però no amb L_+
 - \widehat{L}^2 , \hat{L}_z , L_+ i L_- commuten
 - \hat{L}_z commuta amb L_+ però no amb \hat{L}_x i \hat{L}_y
- L'operador L_+ no és hermític, com tampoc ho és L_- però $\hat{O} = L_-L_+$ sí que ho és.
 - Un camp magnètic uniform exerceix una força sobre un electró lliure perquè aquest presenta espín.
 - La relació entre el moment angular d'espín i el moment magnètic associat és la mateixa que la que hi ha entre el moment angular orbital i el seu moment magnètic associat.
 - Si un sistema està en un estat on coneixem \widehat{L}^2 , \hat{L}_z , \widehat{S}^2 , \hat{S}_z , també podem conèixer simultàniament \widehat{J}^2 i \hat{J}_z .
- La funció radial de l'orbital $2p_z$ presenta el mateix nombre de nodes que la de l'orbital $2s$ i aquest nombre és diferent de zero.
 - Presenta un node més.
 - Presenta un node menys.
 - L'orbital $2s$ no presenta nodes radials.

6. (a) L'orbital $2p_x$ és real.
 (b) L'orbital $2p_x$ és imaginari pur.
 (c) L'orbital $2p_z$ és complex.
 (d) L'orbital $2p_y$ és autofunció de \hat{L}_z .
7. (a) El punt més probable de trobar l'electró en un estat $1s$ és en la posició del nucli.
 (b) La funció radial de l'orbital $1s$ té el seu valor màxim en la posició del nucli.
 (c) La funció $2s$ presenta un màxim de probabilitat radial a un valor $r = a_0$, on a_0 és l'anomenat radi de Bohr.
 (d) La funció $2p_z$ no presenta nodes angulars.
8. (a) El model de Bohr per a l'hidrogen dóna lloc a energies no idèntiques però molt semblants a les que proporciona l'equació de Schrödinger.
 (b) Les energies de Bohr i Schrödinger per a l'hidrogen són idèntiques.
 (c) El radi a_0 de la primera òrbita de Bohr és l'únic valor de r on l'equació de Schrödinger prediu que podem trobar l'electró si el sistema està a l'estat fonamental.
 (d) L'equació de Schrödinger té l'avantatge sobre el model de Bohr que incorpora l'espín de manera natural.
9. Demuestra amb mètodes algebraics que $\hat{L}_x \Phi_{2p_x} = 0$.
 Dades $\Phi_{2p_x} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{R}_{2,1}(r) (Y_{1,1} - Y_{1,-1})$, $L_{\pm} |\ell, m\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle$.
10. Demuestra que l'energia d'acoblament espín-òrbita és zero en el cas de l'hidrogen a l'estat fonamental $1s$.