

# Átomo de hidrógeno: resumen

$$\rightarrow V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{Potencial central}$$

$$\rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Pot central.  $\Rightarrow \Psi(\vec{r}) = R(r) \underbrace{Y_l^m(\theta, \varphi)}_{\text{armónicos esféricos}}$

$$\int |\Psi(\vec{r})|^2 dV = 1 \quad (\text{normalización})$$

$$\begin{aligned} \int |\Psi(\vec{r})|^2 dV &= \iiint |R(r)|^2 |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr \\ &= \underbrace{\int |R(r)|^2 r^2 dr}_1 \underbrace{\iint |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi}_1 \end{aligned}$$

Obtuvimos  $R(r)$  con ec radial.

- Tiene forma de ec. de Schrödinger 1D

para  $u(r) = R(r)r$

- Para que las soluciones fueran acotadas,  $E$  toma valores discretos

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} \quad \text{con} \quad E_0 = \frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{\hbar^2}{\mu a_0^2}$$

Radio de Bohr  $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0.5 \text{ \AA}$

$\uparrow$   
 $10^{-10} \text{ m}$

$$\langle r \rangle \sim a_0$$

En la derivación usamos  $l, k$

$n = l + k$  y se habla de  $n$  y  $l$ .

i.e.  $n$  y  $l$  determinan el estado del átomo.

$n = 1, \dots$  ; Dado  $n$ ,  $l = 0, \dots, n-1$

$R_{n,l}(r)$  ;  $R_{1,0}(r)$  estado base

~~$R_{n,l}(r)$~~   $l$  debe ser  $< n$

Para  $n=2$  hay

$R_{2,0}(r)$  ;  $R_{2,1}(r)$

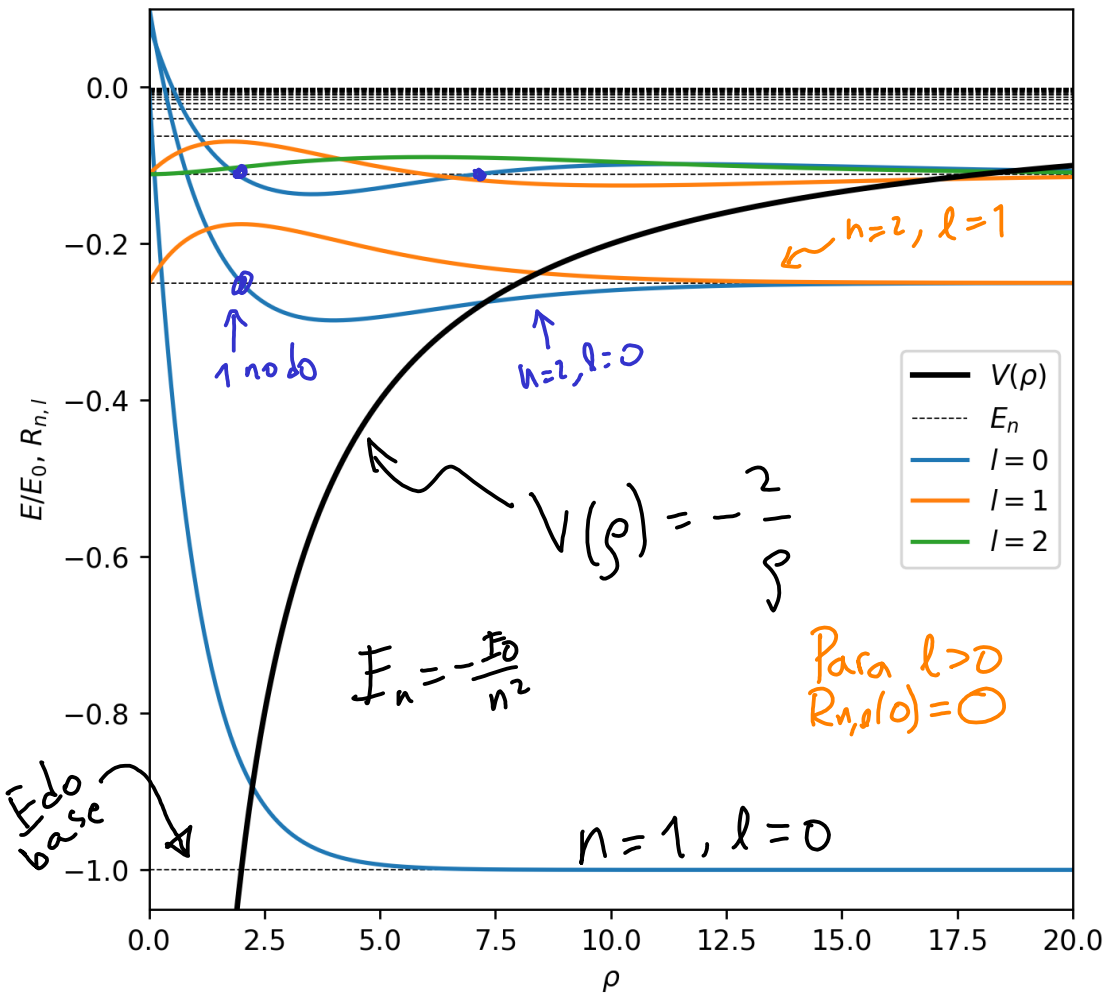
$\uparrow$   
 $n=0$

Polinomio generalizado de Laguerre

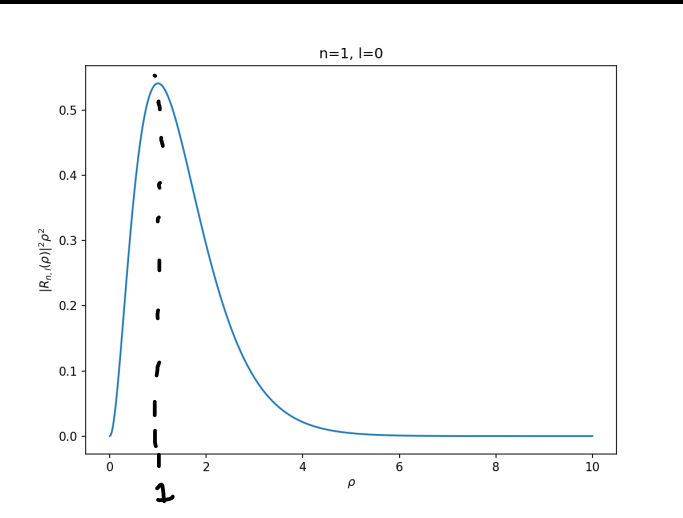
En general:  $\rho = \frac{r}{a_0}$

$$R_{n,l}(\rho) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2^n [(n+l)!]}} e^{-\rho/n} \left(\frac{2\rho}{n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right)$$

domina para  $\rho \gg 1$

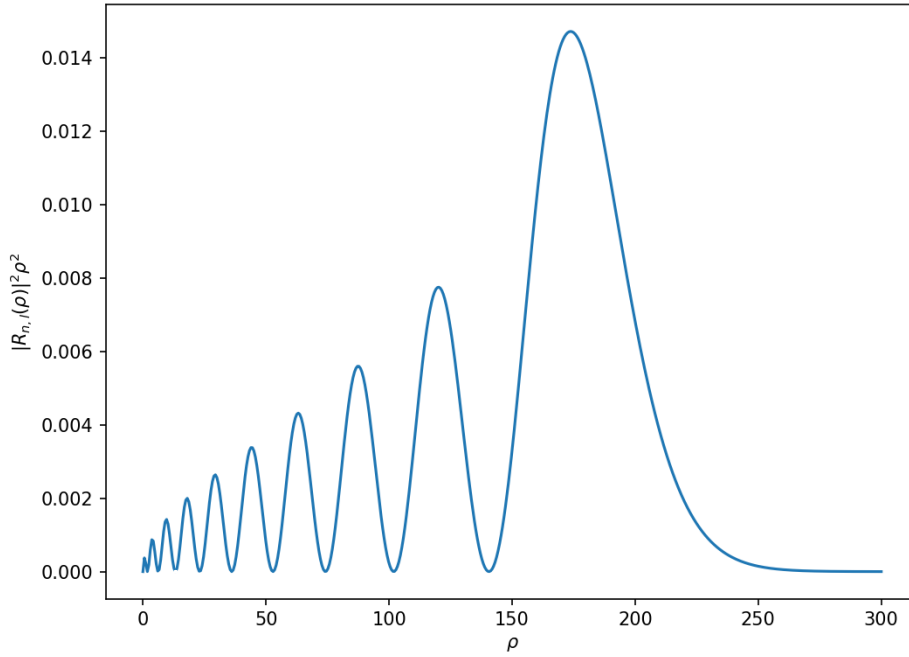


Si nos fijamos en las probabilidades  $|R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr$  de encontrar al electron entre  $r$  y  $r+dr$

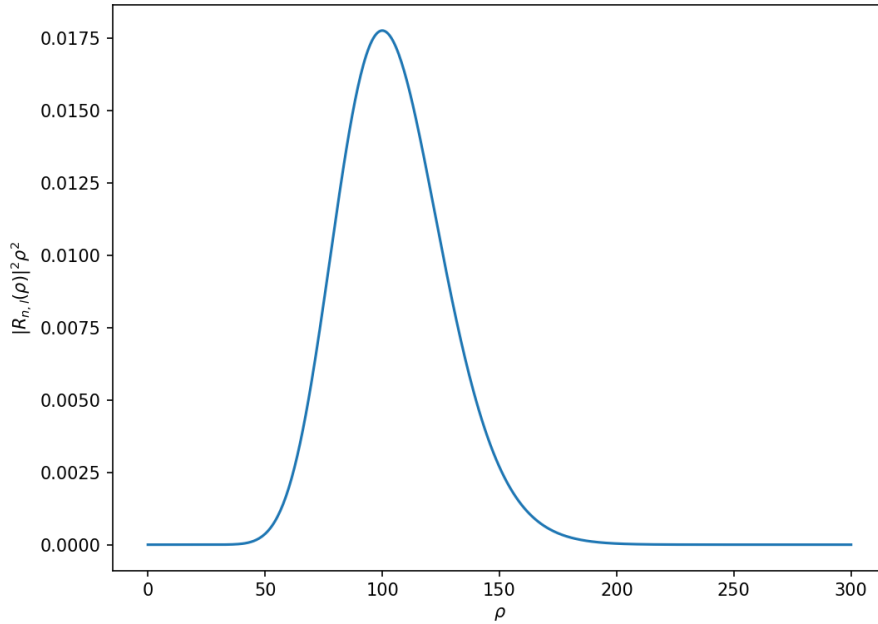


Máximo  $\rho \approx 1$   
 $r = a_0$

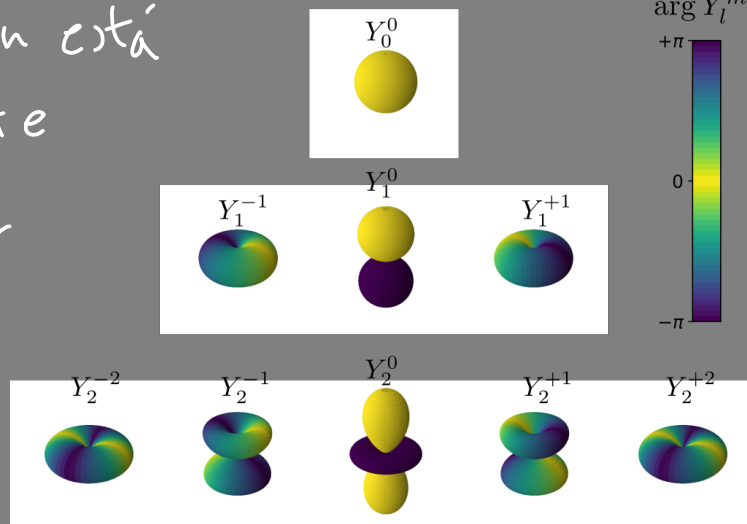
$n=10, l=0$



$n=10, l=9$



También está  
la parte  
angular



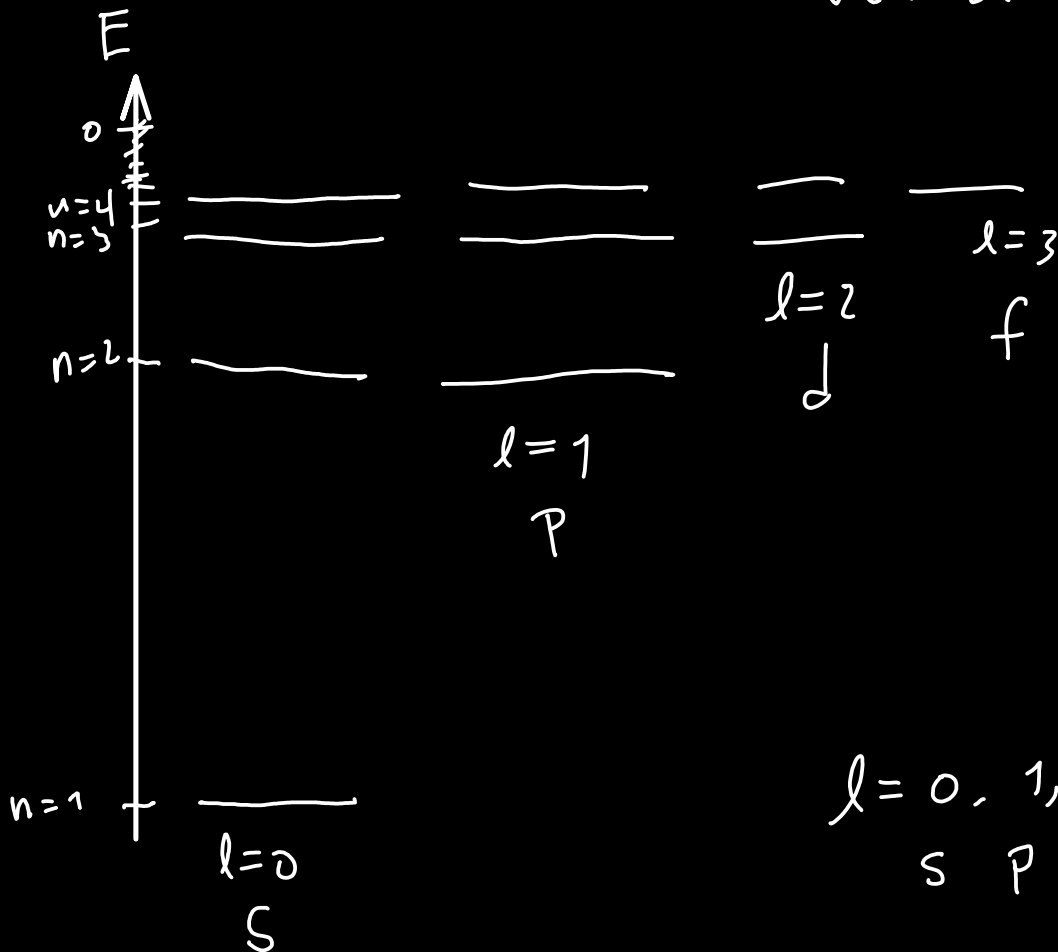
# Constante de estructura fina

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 = \frac{1}{2(137)^2} \mu c^2 \approx 10^{-5} \underbrace{m_e c^2}_{E \text{ en reposo de electron}}$$

(Esto justifica el enfoque no relativista)

## Estructura de niveles:



Para cada  $n$  hay  $n$  posibles valores de  $l$

Para cada  $l$  hay  $2l+1$  posibles valores de  $m$

# de estados con e.v.  $E_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2$

- Por simetría ante rotaciones hay degeneración en  $m$ . (Se rompe con  $\vec{E}, \vec{B}$ )

- La degeneración en  $l$  resulta de potencial  $1/r$ .

Para alcalinos (Li)



Cerca del núcleo:  $\frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Lejos:  $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

∴ Potencial efectivo para electron de valencia no es  $1/r$  y se rompe la degeneración en  $l$ .

Estado general de H.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l C_{n,l,m} R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Los e.v. del Hamiltoniano de hidrógeno

$$H |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle$$

$$\langle \vec{r} | n, l, m \rangle = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l E_n |n, l, m\rangle \langle n, l, m|$$

$$\langle n, l, m | n', l', m' \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

$$H |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle$$

# Producto tensorial.

(producto de Kronecker)



- Si tenemos dos sistemas aislados  $S_1$  y  $S_2$ . ¿Cómo describir al sistema completo?

- ¿Cómo relacionar los espacios de estados en problemas de 1D y 3D?

- Definición:

Si  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  son espacios de Hilbert de dim  $N_1$  y  $N_2$  (finita o infinita).

El producto tensorial de los espacios:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

si:  $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}_1$  y  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_2$

El producto tensorial de dos vectores

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

Con las siguientes propiedades:



i) Es lineal respecto a multiplicación por escalares

$$(\lambda |\varphi\rangle) \otimes |\psi\rangle = \lambda (|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle)$$

$$|\varphi\rangle \otimes (\mu |\psi\rangle) = \mu (|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle)$$

ii) Distribuye sumas de vectores

$$|\varphi\rangle \otimes (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = |\varphi\rangle \otimes |\psi_1\rangle + |\varphi\rangle \otimes |\psi_2\rangle$$

$$(|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) \otimes |\psi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\psi\rangle + |\varphi_2\rangle \otimes |\psi\rangle$$

iii) Si  $\{|\mu_i\rangle\}$  es base de  $\mathcal{E}_1$  ( $\dim N_1$ )

$\{|\nu_j\rangle\}$  es base de  $\mathcal{E}_2$  ( $\dim N_2$ )

$\{|\mu_i\rangle \otimes |\nu_j\rangle\}$  es base de  $\mathcal{E}$

$$\dim \mathcal{E} = N_1 N_2$$

Con  $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}_1$  y  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_2$  arbitrarios

$$|\varphi\rangle = \sum_i a_i |\mu_i\rangle \quad ; \quad |\psi\rangle = \sum_j b_j |\nu_j\rangle$$

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \sum_{ij} a_i b_j |\mu_i\rangle \otimes |\nu_j\rangle$$

Las componentes del producto tensorial de dos vectores es el producto de las componentes

Nota importante:

$\exists$  vectores en  $E$  que no se pueden escribir como producto tensorial de vectores en  $E_1$  y  $E_2$ .

Ejemplo: Base de  $E_1$ :  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$   
Base de  $E_2$ :  $\{|a\rangle, |b\rangle\}$

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \quad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle + |b\rangle)$$

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{2}(|1\rangle \otimes |a\rangle + |2\rangle \otimes |a\rangle + |1\rangle \otimes |b\rangle + |2\rangle \otimes |b\rangle)$$

$$= \frac{1}{2}(|1a\rangle + |2a\rangle + |1b\rangle + |2b\rangle)$$

Notación  $= \frac{1}{2}(|1\rangle + |2\rangle) \otimes (|a\rangle + |b\rangle)$

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = |\varphi\rangle |\psi\rangle = |\varphi\psi\rangle$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|1a\rangle + |2b\rangle)$  no se puede escribir como  $|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle$

Base de  $E$ :  $\{|1a\rangle, |1b\rangle, |2a\rangle, |2b\rangle\}$

En mecánica clásica los grados de libertad crecen como  $6P$

$P =$  número de partículas

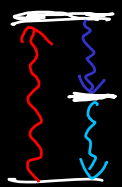
En mecánica cuántica:

(para el caso más sencillo de espines la dim del espacio de una partícula es 2

$$2^P$$

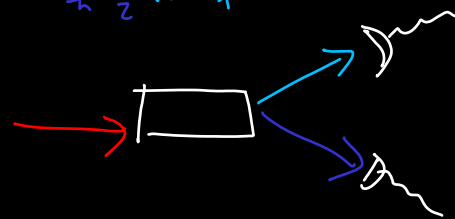
Enredamiento

La complejidad de la descripción de un sistema cuántico crece exponencialmente con el número de partículas.



$$W = W_2 + W_1$$

$$\hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}_2 + \hbar \vec{k}_1$$



$$|1\rangle = \alpha |p_1\rangle + \beta |0\rangle$$



$$|p_1 p_2\rangle + |00\rangle$$