

Prof. **Jesús Marquina.**

Fecha límite de entrega: **15/11/2013.**

Tarea 1

1. En los átomos hidrogenoides el valor medio de r esta dado por

$$\bar{r} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}.$$

Calcular \bar{r} para todos los estados con $n = 1, 2$ y 3 . Comparar estos valores con los radios de Bohr correspondientes. Utilizando \bar{r} como medida del tamaño de la orbita, disponer de los estados nl en orden creciente de distancia promedio al núcleo.

2. Expresar los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y en coordenadas esféricas. Empleando estas expresiones y la ecuación

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi},$$

obtener la siguiente expresión

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].$$

3. Las funciones de onda radiales del átomo de hidrógeno están dadas por

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

donde $\rho = 2Zr/na_0$, los L_t^s son los *polinomios asociados de Laguerre* definidos por

$$L_t^s(\rho) = \frac{d^s}{d\rho^s} [L_t(\rho)],$$

con

$$L_t(\rho) = e^\rho \frac{d^t}{d\rho^t} [\rho^t e^{-\rho}],$$

y N_{nl} es la constante de normalización dada por

$$N_{nl} = - \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^2 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{1/2}.$$

Escribir todas las funciones radiales para $n = 1, 2$ y 3 .

4. Podemos determinar las funciones de onda del momento angular $Y_{lm}(\theta, \phi)$ usando la expresión $Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$, donde

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$$

es la constante de normalización y $P_l^m(\xi)$ es la *función asociada de Legendre* definida por

$$P_l^{|m|}(\xi) = (-1)^{(m+|m|)/2} (1-\xi^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|} P_l(\xi)}{d\xi^{|m|}}$$

y

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l$$

son los *polinomios de Legendre*. Escribir las funciones angulares para $l = 0, 1$ y 2 .

5. El estado fundamental del litio tiene la configuración electrónica $1s^2 2s$. Escribir en forma de determinante la función de onda de ese estado (orbital-espín) cuando $M_s = m_{s_1} + m_{s_2} + m_{s_3} = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = +\frac{1}{2}$.