

Valores esperados

Juan Barbosa, 201325901

Marzo 23, 2017

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Para el átomo de hidrógeno la ecuación anterior se escribe usando coordenadas esféricas, cuyo potencial depende de la parte radial:

$$V(r) = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

Haciendo un cambio de variable $r = \frac{a_0}{z}u$ se puede reescribir la ecuación para la parte radial como:

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{2}{u} \frac{dR}{du} + \left(\epsilon - \frac{2}{u} - \frac{l(l+1)}{u^2} \right) R = 0 \quad \text{donde } \epsilon = \frac{E}{E_0} \quad (2)$$

Para obtener el valor esperado de r se usa la probabilidad radial $P = 4\pi R^2 r^2 / \int P dr$.

$$\langle r \rangle = \langle a_0 u \rangle = a_0 \langle u \rangle = a_0 \int_0^{30} P u du \quad (3)$$

El valor esperado de $\langle \Delta E \rangle$ se calcula de la siguiente manera:

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \langle 1/r dV/dr \rangle [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] = \alpha \langle 1/r dV/dr \rangle \beta \quad (4)$$

donde α corresponde con una constante y β depende de j, l, s . Tomando la derivada de la ecuación 1 y dividiendo por r , se obtiene.

$$\langle \Delta E \rangle = \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle 1/r^3 \rangle \beta = \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^3} \langle 1/u^3 \rangle \beta \quad (5)$$

Teniendo en cuenta u y β son adimensionales las unidades están dadas por $\alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^3}$ cuyo valor es $3,62 \times 10^{-4}$ eV. Para finalmente obtener:

$$\langle \Delta E \rangle = 3,62\beta \times 10^{-4} \int_0^{30} P u^{-3} du \quad (6)$$

Para β , $j = l \pm s$ siempre que $l > 0$, de lo contrario $j = s$, donde $s = 1/2$.

```
import numpy as np
from scipy.constants import e, c, h
from scipy.interpolate import interp1d
import matplotlib.pyplot as plt

def solver(y, u, l, epsilon, du):
    L = l*(l+1)
    prime = np.zeros_like(u)
    x = np.ones_like(u)
    prime[0], x[0] = y
    for i in range(N-1):
        derivative = - 2*prime[i]/u[i] - (epsilon + 2/u[i] - L/u[i]**2)*x[i]
        prime[i+1] = prime[i] + derivative*du
        x[i+1] = x[i] + prime[i+1]*du
    return x

N = 1000
du = 100/N
U = np.linspace(du, N*du, N)
s = 0.5
epsilon = [[-0.999], [-0.243794, -0.252106], [-0.109864, -0.112379, -0.111361]]
thresh = [[30], [300, 300], [300, 300, 300]]

R_VALUES = np.zeros((3, 3))
plt.figure()
for n in range(1, len(epsilon)+1):
    epsilon = epsilon[n-1]
    for l in range(len(epsilon)):
        if l == 0:
            y = [-1, 1]
        else:
            y = [1, 0]
        e_ = epsilon[l]
        R = solver(y, U, l, e_, du)
        pos = thresh[n-1][l]
        r = R[:pos]
        u = U[:pos]
        P = 4*np.pi*(r*u)**2
        temp = (np.trapz(P, dx = du))
        P *= 1/(np.trapz(P, dx = du))
        r_E = np.trapz(P*u, dx = du)
        R_VALUES[n-1, l] = r_E
        const = 3.622608e-4
        j1 = l+s
        j2 = l-s
        if j2 < 0: j2 = 0
        beta1 = j1*(j1+1)-l*(l+1)-s*(s+1)
        beta2 = j2*(j2+1)-l*(l+1)-s*(s+1)
        e_E = const*np.trapz(P/u**3, dx=du)
        e_E1 = beta1*e_E
        e_E2 = beta2*e_E
        print(r"%d_&%d_&%.3f_&%.3e_&%.3e_\\"%(n, l, r_E, e_E1, e_E2))
        plt.plot(u, P, label="$n=%d$, l=%d"%(n, l))
plt.xlabel("$r/a_0$")
plt.ylabel("Probabilidad_Radial_($4\pi R^2r^2$)")
plt.legend()
plt.savefig("probability.pdf")
```

```
plt.figure()
ns = np.arange(1, 4)
for l in range(len(epsilon)):
    plt.plot(ns**2, R_VALUES[:, l], "-o", label="$l=%d$" % l)
plt.xlabel("$n^2$")
plt.ylabel("$\langle r \rangle / a_0$")
plt.legend()
plt.savefig("radius.pdf")
```

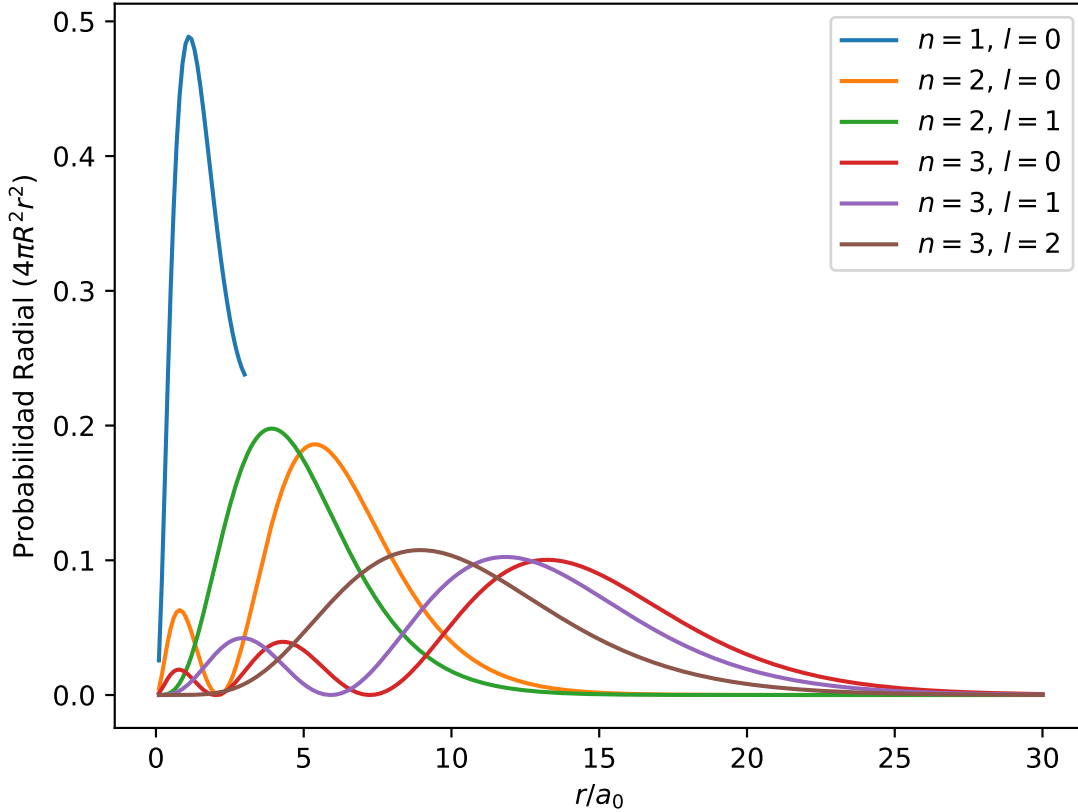


Figura 1: Función normalizada de probabilidad. Para distintos valores de n y l .

La Figura 1 muestra el comportamiento de la probabilidad radial en función del radio. En ella se puede observar que para un mismo valor de n , el máximo de las funciones se ubica a menor radio conforme l aumenta, Figura 2. Lo anterior también se evidencia en la Tabla 1 donde se expone el valor esperado para r , el cual disminuye conforme l aumenta en un mismo nivel de energía. Adicionalmente el valor esperado se encuentra a valores más altos de r que el máximo de la distribución.

Respecto a los valores esperados para ΔE se observa que dependiendo del valor de j la energía aumenta o disminuye, sin embargo no lo hacen en la misma proporción. Para todos los casos la disminución es mayor al aumento por lo cual el acoplamiento espín-órbita contribuye a la estabilidad del átomo.

Finalmente y a pesar que existen pocos puntos, es posible determinar que el valor esperado de r varía con n^2 , con pendiente constante con valor a_0 , resultado obtenido por Bohr.

$$r = a_0 n^2 \quad (7)$$

Cuadro 1: Valores esperados para r y ΔE . E_1 corresponde con $j = l + s$ y E_2 con $j = l - s$.

n	l	$\langle r \rangle / a_0$	ΔE_1 (eV)	ΔE_2 eV
1	0	1.539	0.000e+00	-1.141e-03
2	0	6.070	0.000e+00	-1.932e-04
2	1	4.911	1.631e-05	-3.261e-05
3	0	13.543	0.000e+00	-5.971e-05
3	1	12.272	5.021e-06	-1.004e-05
3	2	10.439	1.820e-06	-2.730e-06

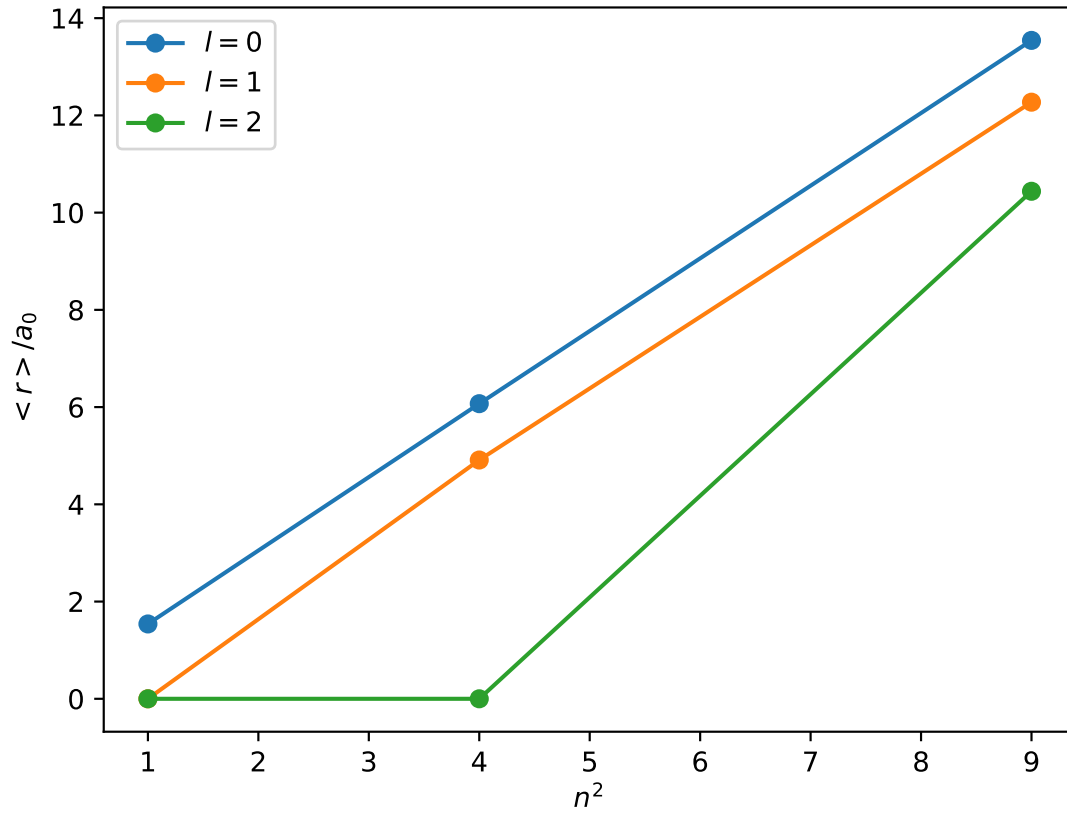


Figura 2: Valor esperado de r en función de n para distintos valores de l .