

# Átomo de hidrógeno: discusión

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u(r) Y(\theta, \varphi)$$

*armónicos esféricos* (pointing to  $Y(\theta, \varphi)$ )  
 $R(r) = \frac{1}{r} u(r)$  (pointing to  $R(r)$ )

Adimensionalizando y motivados por el comportamiento asintótico

$$u(\rho) = e^{-\rho} \gamma(\rho) \quad \text{con} \quad \gamma(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{q=0}^k c_q \rho^q$$

*polinomio* (pointing to  $\gamma(\rho)$ )

$$c_q = (-1)^q \left( \frac{2}{k+l} \right)^q \frac{(k-1)!}{(k-q-1)!} \frac{(2l+1)!}{q!(q+2l+1)!} c_0$$

Para calcularlo en computadora puede ser más eficiente usar las expresiones

$$C_q = A_q C_{q-1}$$

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

La forma general de la función de onda hidrogenoide normalizada es

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \sqrt{\left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-Zr/na_0} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) Y_l^m(\theta, \varphi),$$

donde  $L_\alpha^\beta(x)$  son los polinomios generalizados de Laguerre.

Convención usual de normalización

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$$

todo el espacio

En términos de  $R(r)$  y  $Y(\theta, \varphi)$

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r = \iiint |R(r)|^2 |Y(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$$

$$= \underbrace{\int |R(r)|^2 r^2 dr}_1 \underbrace{\iint |Y(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi}_1$$

Tanto  $R(r)$  como  $Y(\theta, \varphi)$  son funciones de norma 1.

Definimos  $n = l + k$  y  $k \geq 1$   
 grado máximo del polinomio  $\swarrow$  número principal cuántico  $\searrow$

$$\Rightarrow n - l \geq 1$$

$$\Rightarrow$$

$$l + 1 \leq n$$

$$n = 1, 2, \dots$$

Dado un  $n$ , los valores posibles de  $l$  son

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

- Si  $l=0$ ,  $R_{n,0}(\rho) \neq 0$
- Si  $l>0$ ,  $R_{n,l}(0) = 0$

$$R_{1,0} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\rho}$$

$$R_{2,0} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} 2(1-\rho)e^{-\rho}$$

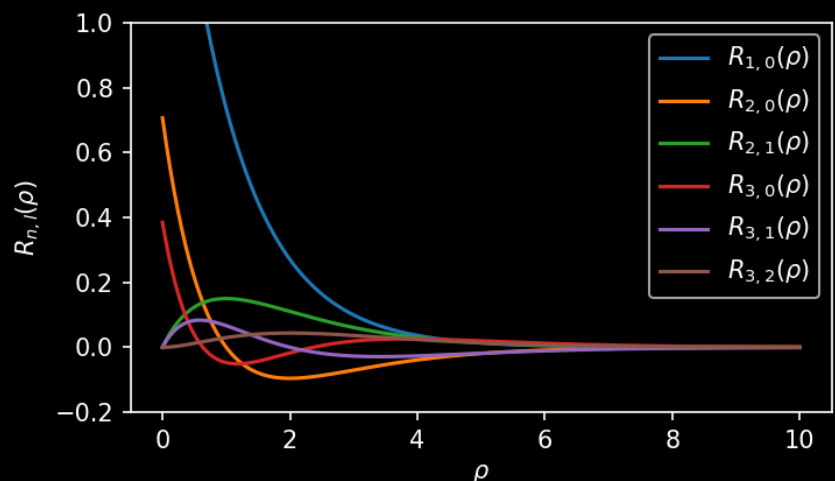
$$R_{2,1} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}}\rho e^{-\rho}$$

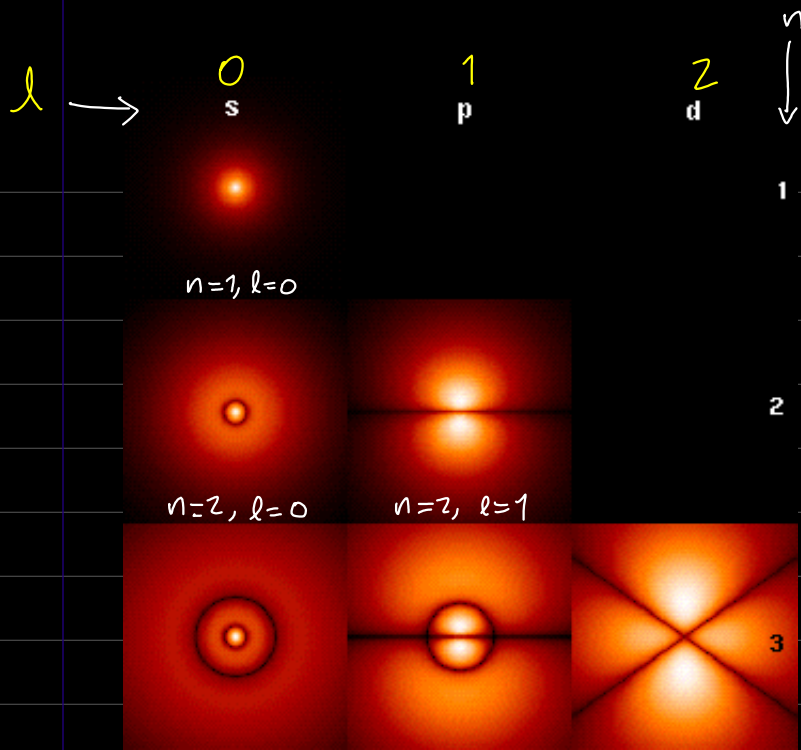
$$R_{3,0} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} 2\left(1-2\rho+\frac{2}{3}\rho^2\right)e^{-\rho}$$

$$R_{3,1} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3}\rho\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)e^{-\rho}$$

$$R_{3,2} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}\rho^2 e^{-\rho}$$

$$\rho = \frac{Zr}{na_0}$$





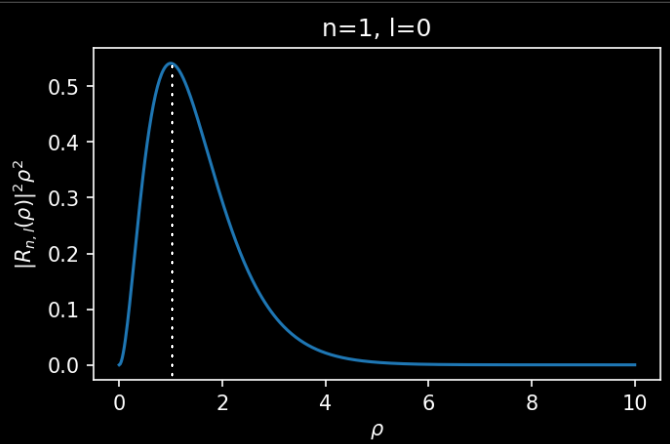
de Wikipedia

$$|\psi_{n,\ell,m}(\vec{r})|^2$$

$$|\psi_{n,\ell,m}(x,y,z=0)|^2$$

- $l=0 \rightarrow$  Sharp
  - $l=1 \rightarrow$  Principal
  - $l=2 \rightarrow$  Diffuse
  - $l=3$  Fundamental
  - $l=4$  G
- H } alfabético  
I }

La densidad de probabilidad radial de encontrar al electrón en  $\rho$  es  $|R_{n,\ell}(\rho)|^2 \rho^2$



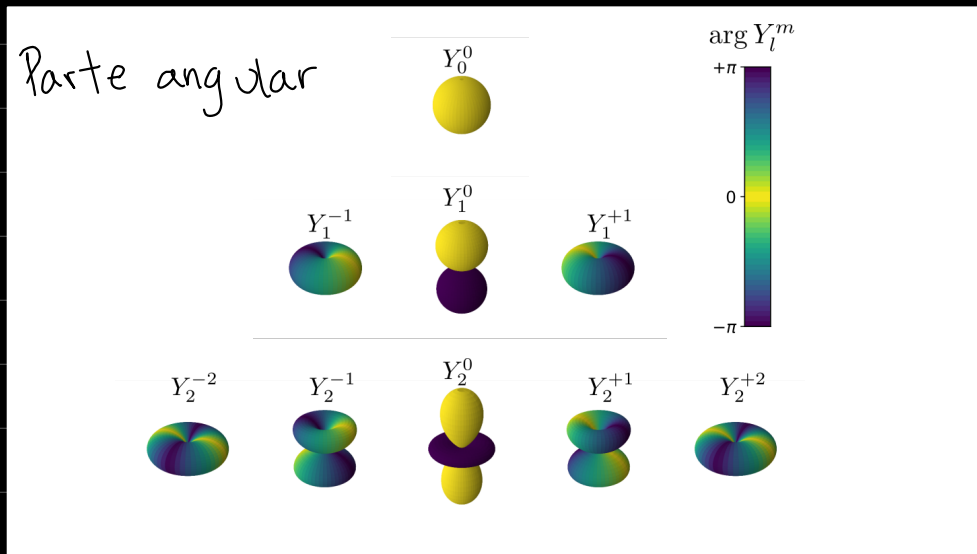
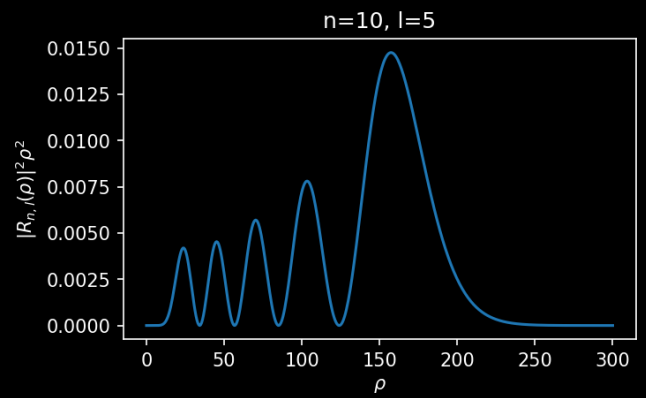
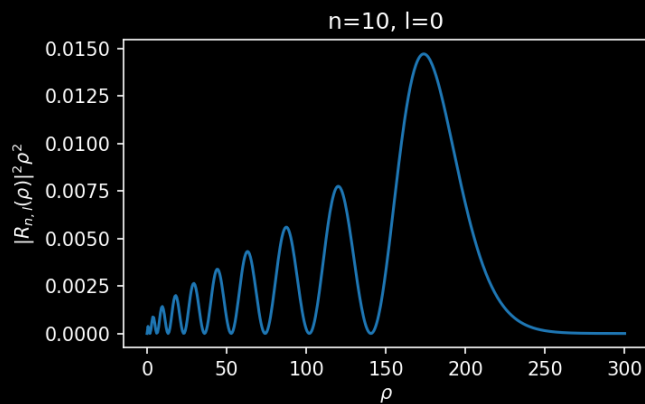
Máximo está en  $\rho \approx 1 \Rightarrow r = a_0$   
↑  
radio de Bohr

¿Cómo es  $\langle r \rangle$ ?

en un eigenestado  $\psi_{n,\ell,m}$

$$\langle r \rangle = \int \psi_{n,\ell,m}^* \overset{RY}{\downarrow} (r, \theta, \varphi) r \overset{RY}{\downarrow} \psi_{n,\ell,m} (r, \theta, \varphi) r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$$

$$= \left[ \int R_{n,\ell}(r) r R_{n,\ell}(r) r^2 dr \right] \left[ \int \int Y_{\ell}^{m*}(\theta, \varphi) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi \right]$$



## Eigenvalores

Para que las soluciones fueran acotadas encontramos que  $E$  debe tomar valores discretos.

$$C_k = 0 \quad \Rightarrow \quad E = - \frac{E_0 Z^2}{n^2} \quad \mu \approx m_e$$

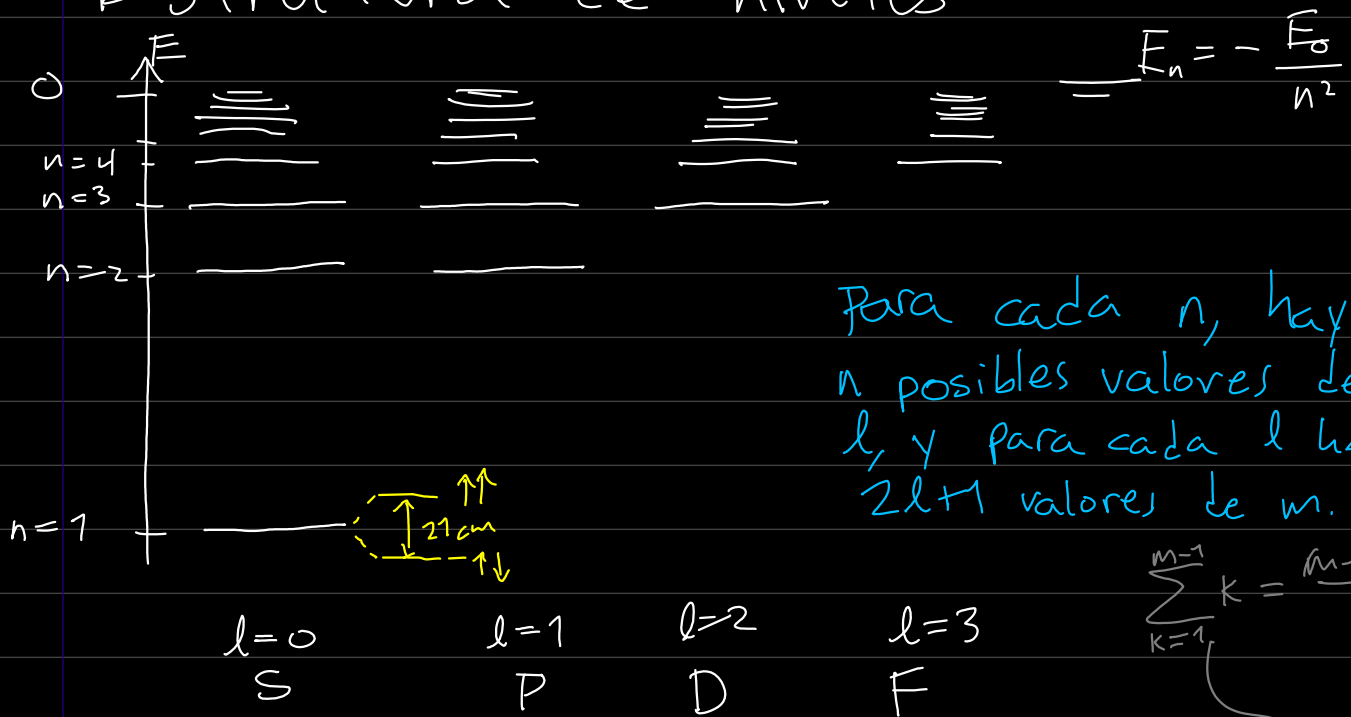
$$E_0 = \frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{1}{2} \alpha^2 m c^2$$

← energía relativista en reposo  
 con  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$

$$E_0 \ll m_e c^2$$

↑ constante de estructura fina

# Estructura de niveles



¿Cuántos estados tienen energía  $E_n$ ?

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

$$= n^2 - n + n$$

$$= n^2$$

- Para romper degeneración en  $m$  hay que romper la simetría rotacional con un  $\vec{E}$  o  $\vec{B}$ .

- Un estado general de hidrógeno

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

Si no proyectamos a la base  $\{|\vec{r}\rangle\}$

Los e-vectores son  $|n, l, m\rangle$

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

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

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

forma alternativa de escribir  $H$  usando la base de sus e-vectores.

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

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