Átomo hidrogenoide: discusión

$\lambda = \sqrt{\frac{-E}{E_0}}$

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

ρ es r adimensional $\rho = r/a_0$; $u(\rho) = f(\rho)e^{-\lambda\rho}$

Escribimos $f(\rho) = \rho^s \sum c_q \rho^q$

Encontramos

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

$$E_{k,l} = -\frac{Z^2 E_0}{(k+l)^2} \quad \text{válido para} \quad \begin{matrix} k \geq 1 \\ l \geq 0 \end{matrix}$$

$$R_{k=1,\,l=0}(r) = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \qquad (Z=1)$$

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

$\vdots$

La energía depende de la suma $k+l$.
Se define $n = k+l$

$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2} \quad ; \quad k \geq 1 \Rightarrow n - l \geq 1 \Rightarrow n \geq l+1$$

Los e-estados de hidrógeno se representan usualmente por $|n, l, m\rangle$

número principal cuántico

número cuántico de magnitud de momento angular orbital

número cuántico de proyección de momento angular orbital.

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

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

La forma general de la función de onda hidrogenoide normalizada es

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

donde $L^\beta_\alpha(x)$ son los polinomios generalizados de Laguerre.

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

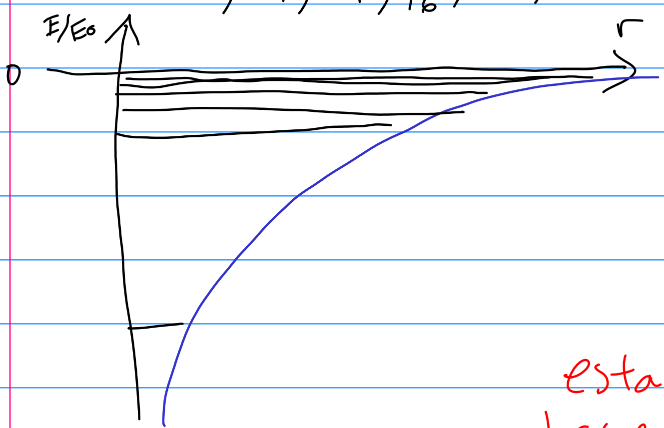
$$\int|\psi(\vec{r})|^2 dV = \iiint |R(r)|^2 |Y_l^m(\theta,\varphi)|^2 r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr\, d\theta\, d\varphi$$

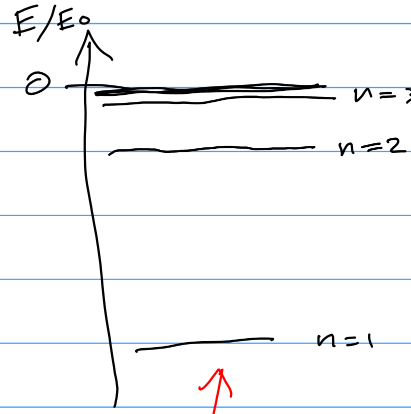
$$= \underbrace{\int |R(r)|^2 r^2 dr}_{1} \; \underbrace{\iint |Y_l^m(\theta,\varphi)|^2 \operatorname{sen}\theta \, d\theta\, d\varphi}_{1}$$

Números cuánticos

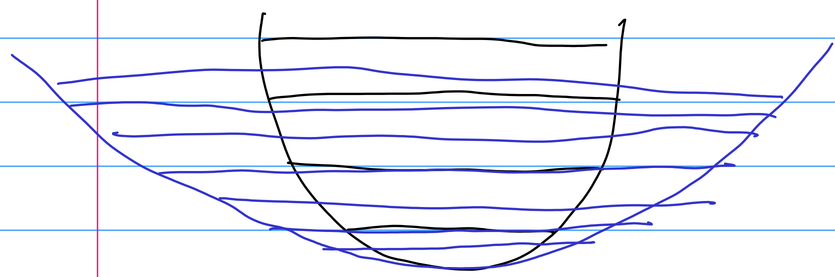
Dijimos $n \geq l+1$ ($l \geq 0$), $n \geq 1$, $E_n \sim -\frac{1}{n^2}$

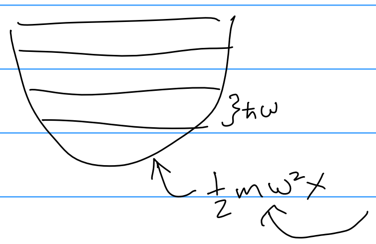
$\frac{1}{n^2} = 1, \frac{1}{4}, \frac{1}{9}, \frac{1}{16}, \frac{1}{25}, \ldots$





estado base $\psi_{n=1,\, l=0,\, m=0}(\vec{r})$





De la clase pasada

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$ radio de Bohr

$$E_0 = \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2}$$ energía de estado base

$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2} \; ; \; E_{n=1} = Z^2 E_0$$

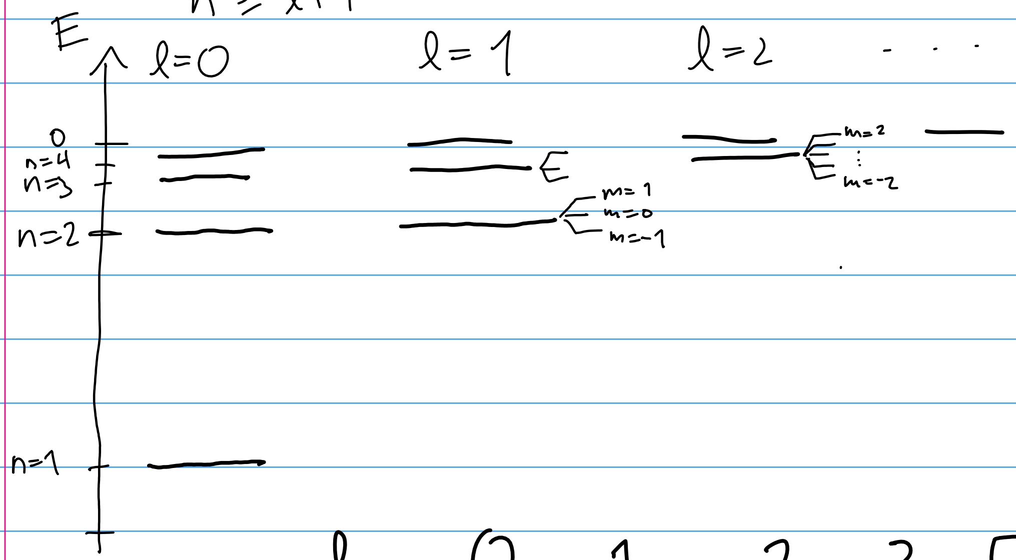
Otra forma de escribir la energía del estado base, usando la constante de estructura fina.

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \; ; \; E_0 = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$$

Como $E_0 \ll m_e c^2$, no usar ecuaciones relativistas es una aproximación decente.

Estructura de niveles

$n \geq l+1$



l	0	1	2	3	5	6 . . .
letra	S	P	D	F	G	H . . .
	sharp	principal	diffuse			

$3S \rightarrow n=3, \; l=0$

$n=1 \quad 2 \quad 3$
$l=0 \quad 0,1 \quad 0,1,2$

$l=0 \quad 1 \quad 2$
$m=0 \quad -1,0,1 \quad -2,-1,0,1,2$

Para cada valor de n, hay n posibles valores de l.

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

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

$$= \boxed{2\sum_{l=0}^{n-1} l} + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = \cancel{2}\frac{(n-1)n}{\cancel{2}} + n = n^2 \cancel{-n} + \cancel{n}$$

$$\sum_{p=1}^{n} p = \frac{n(n+1)}{2}$$

$$= n^2$$

Estado general

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

Los e-vectores en abstracto los escribimos como $|n,l,m\rangle$ y cumplen

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

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \langle \vec{r}|n,l,m\rangle$$

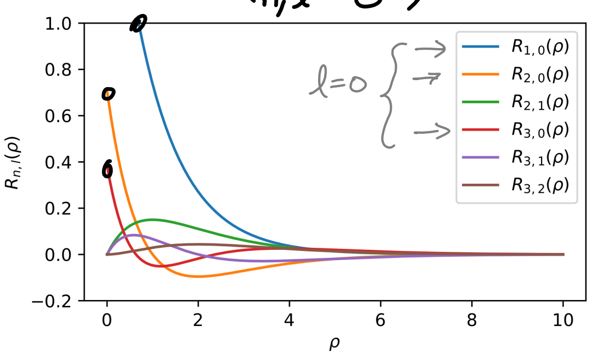
Habíamos usado $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{R}}$ pero también lo podemos escribir así:

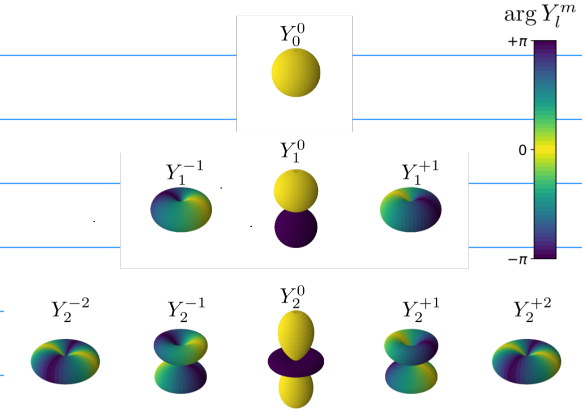
$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} E_n |n,l,m\rangle\langle n,l,m|$$

$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}$$

Eigenfunciones:

$R_{n,\ell}(\rho)$





Habíamos dicho que la ecuación radial es como una ecuación en 1D pero con potencial $V_{eff} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$\left[|R_{n,\ell}(r)|^2\right] = \frac{1}{L^3} \qquad \left[|R_{n,\ell}(r)|^2 r^2 dr\right] = \text{adimensional}$$

$$\langle \rho \rangle \approx 1 \qquad \langle r \rangle \approx a_0$$