

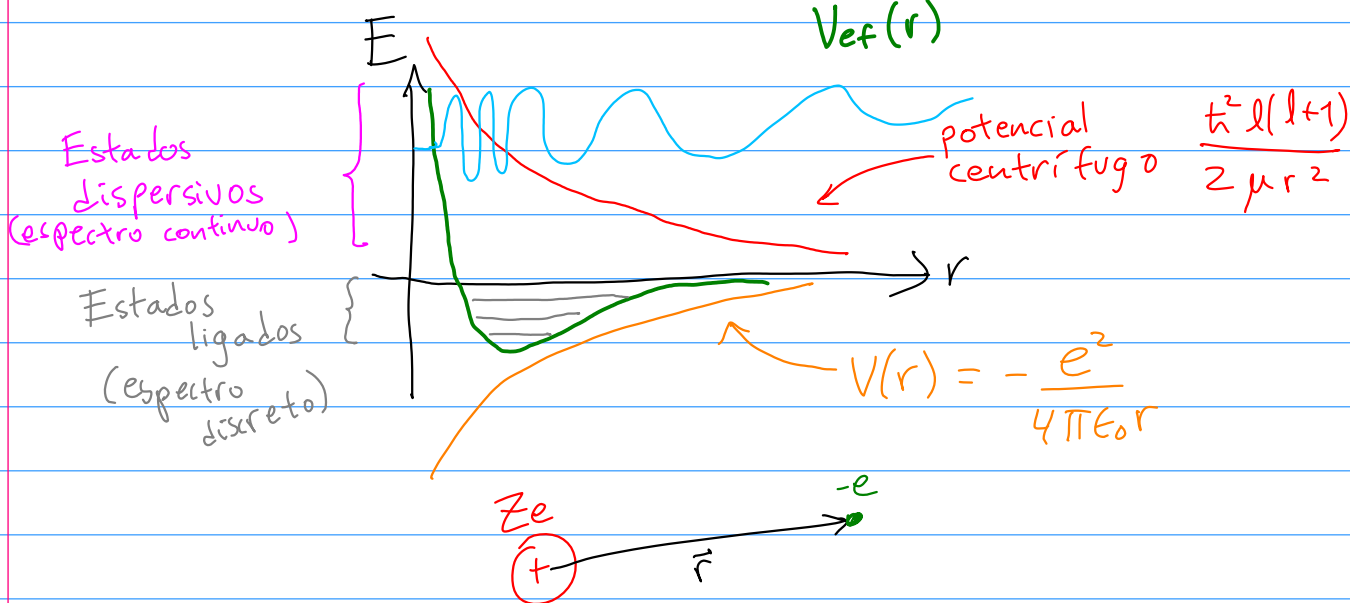
Átomo hidrogenoide II

Para problemas centrales ($V(\vec{r}) = V(r)$)

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Escribimos

$$R(r) = \frac{1}{r} u(r) \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}}_{V_{\text{ef}}(r)} + V(r) \right] u(r) = E u(r)$$



Nos fijamos en el caso $E < 0$ que es donde se forma un átomo.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.5 \times 10^{-10} \text{ m} \quad \text{Radio de Bohr}$$

$$E_0 = \mu e^4 / (4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{-E}{E_0}} ; \rho = r/a_0$$

$$u(\rho) = e^{-\lambda \rho} f(\rho) \quad \text{proponemos} \quad f(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q$$

↳ Debe ser polinomio



La solución completa es

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

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.

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

Oscilador armónico $E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$

Pozo cuadrado $E_n = (\text{const}) n^2$

Otra forma de escribir la energía usando la constante de estructura fina

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

$$E_0 = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2$$

$$a_0 = \frac{\hbar}{\mu c} \frac{1}{\alpha}$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 \alpha^2 \mu c^2}{n^2}$$



Como $E_0 \ll m_e c^2$ estamos en caso no relativista (el error es de orden α^2).

Normalización

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

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 dV = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |R(r)|^2 |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$$

$$= \underbrace{\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr}_1 \underbrace{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi}_1$$

Valores posibles de n :

$$n=1, \dots;$$

Dado n , valores posibles

$$\text{de } l=0, \dots, n-1.$$

Estado base $\left\{ E_n = -Z^2 E_0 \right.$

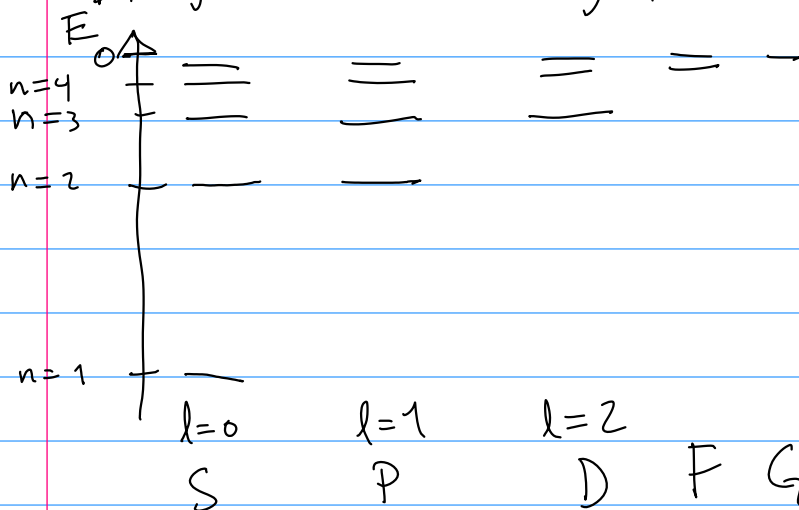
$$\left. R_{1,0}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0} \right\}$$

$$\begin{aligned} n=1 & \quad R_{1,0} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-\rho} \\ n=2 & \quad \left\{ \begin{aligned} R_{2,0} &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} 2(1-\rho)e^{-\rho} \\ R_{2,1} &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \rho e^{-\rho} \end{aligned} \right. \\ n=3 & \quad \left\{ \begin{aligned} R_{3,0} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} 2\left(1-2\rho+\frac{2}{3}\rho^2\right)e^{-\rho} \\ R_{3,1} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \rho\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)e^{-\rho} \\ R_{3,2} &= \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}} \rho^2 e^{-\rho} \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

Normalisation: $\int_0^\infty R_{n,l}^2 r^2 dr = 1$

n se llama
número principal
cuántico.

Diagramas de energía



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

$$0 \leq l \leq n-1$$

notación de
espectroscopia

Los eigenestados de hidrogeno son $|n, l, m\rangle$

Dado un n , cuántos posibles l hay? $\rightarrow n$

Dado un l , cuántos posibles m hay? $\rightarrow 2l+1$

Para hacer la tabla periódica falta el
grado de libertad del espín $|n, l, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle$

para el electrón $s = \frac{1}{2}$ y $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$|n, l, m, s, m_s\rangle$

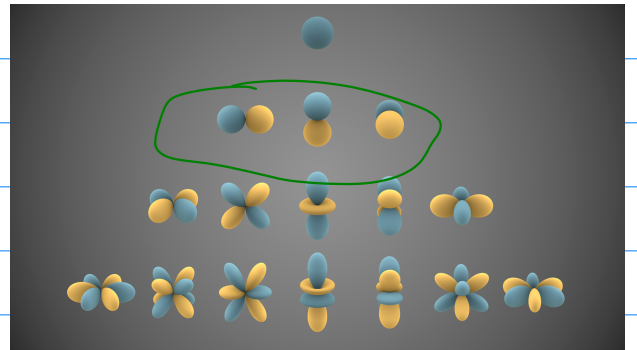
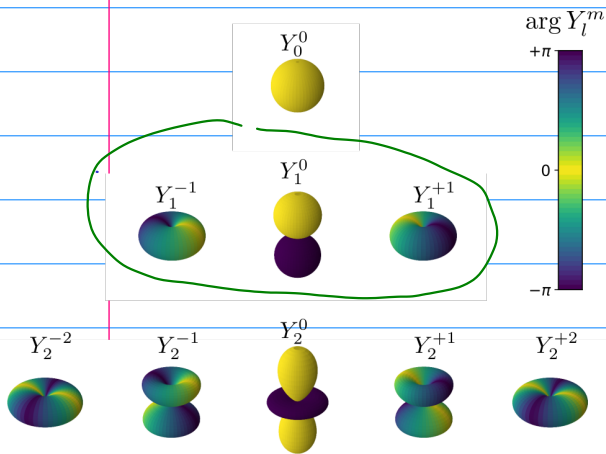
Regresando a $|n, l, m\rangle$

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

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hat{r}} \Rightarrow \hat{H} = \sum_{n,l,m} E_n |n, l, m\rangle \langle n, l, m|$$

¿Cómo se ve todo esto?

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ [convención de mecánica cuántica]



Convención real que no usamos!!

Probabilidad de encontrar al electrón entre r_1 y r_2

$$\mathcal{P}(r_1, r_2) = \int_{r_1}^{r_2} |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr = \int_{r_1}^{r_2} |u_{n,l}(r)|^2 dr$$

$R = \frac{1}{r} u$

recuerda el jacobiano

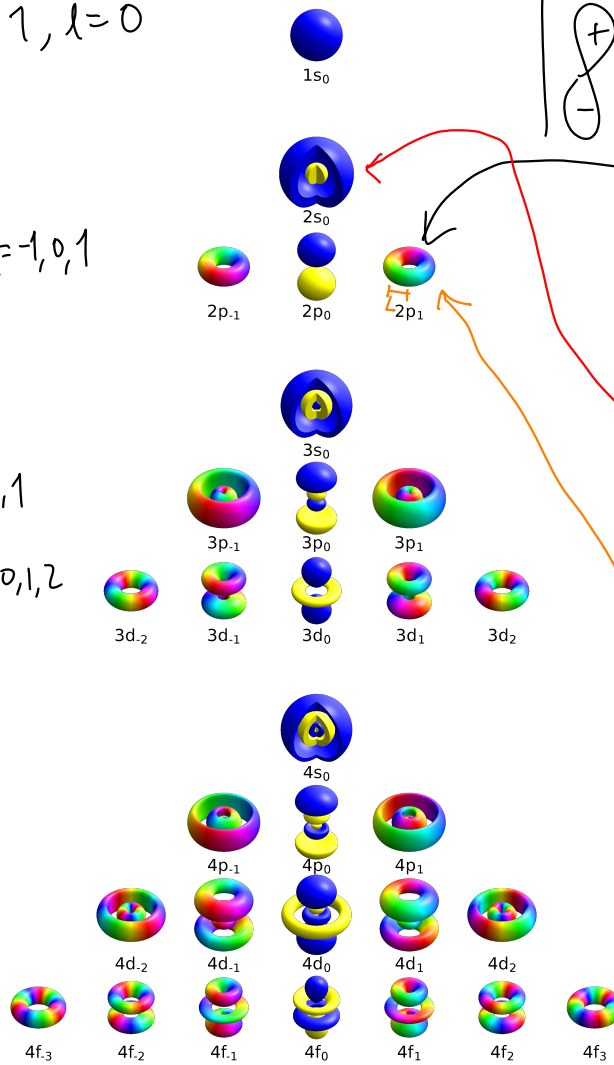
Distancia entre niveles vecinos

$$\Delta E = -E_0 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right)$$

$$n=1, l=0$$

$$n=2 \begin{cases} l=0 \\ l=1, m_l=-1, 0, 1 \end{cases}$$

$$n=3 \begin{cases} l=0 \\ l=1, m_l=-1, 0, 1 \\ l=2, m_l=-2, -1, 0, 1, 2 \end{cases}$$



$$\left| \frac{+}{-} \right|^2 = \frac{+}{+}$$

$$Y_l^m = N \sin^l \theta e^{im\phi}$$

