

$$\therefore Y_l^m(\theta, \varphi) = N \sin^l(\theta) e^{im\varphi}$$

Aplicando L_- obtenemos las otras

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$
$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$Y_1^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$ $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$ $Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$ $Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$

La expresión general para cualquier valor de l y m está dada por

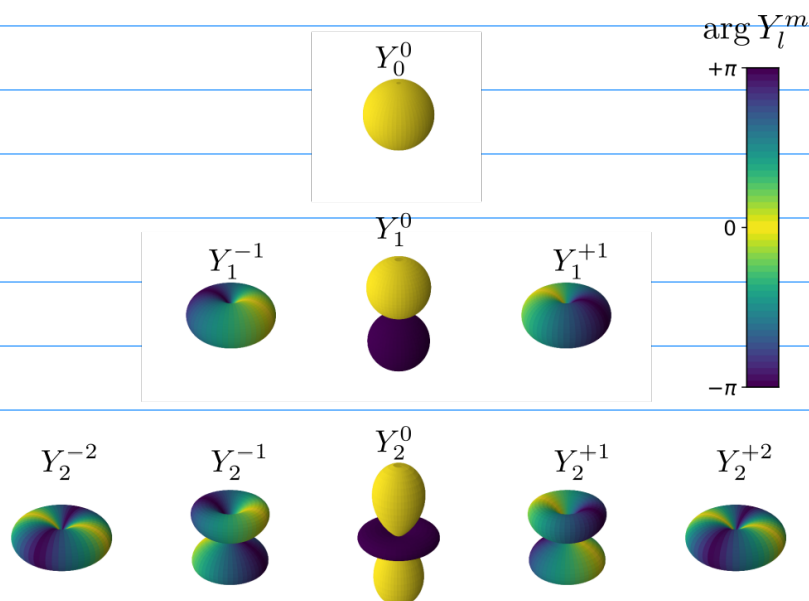
$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad m \geq 0;$$

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_l^m(\theta, \varphi)^*;$$

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x);$$

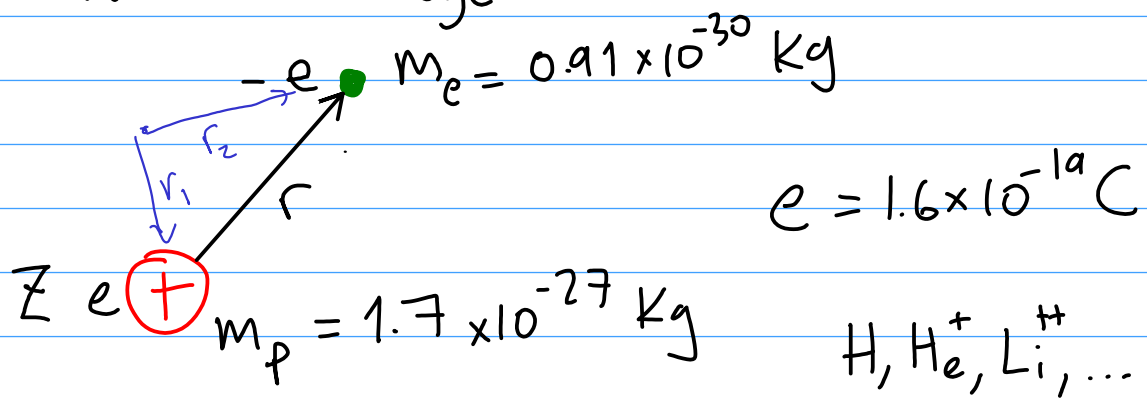
$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l.$$

Aquí, a $P_l^m(x)$ se le conoce como polinomio asociado de Legendre.



Los resultados de L_+ , L_- , L^2 , L_z
aplican para Y_l^m

Átomo hidrogenoide



$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$\vec{R}_{cm} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$



$$H = \frac{p_{cm}^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$$

$$M = m_1 + m_2$$

$$\dot{P}_{cm} = 0 \quad \text{mov rectilíneo unif}$$

$$\dot{P} = -\nabla V(\vec{r})$$

En el MR del CM $P_{cm} \equiv 0$

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$$

Potenciales centrales y el ^{VII. A} átomo de hidrógeno.

- $V(r)$ potencial central:
sólo depende de la distancia al origen
- $V(r)$ invariante ante rotaciones $\Rightarrow$
 H conmuta con L_x, L_y, L_z, L^2
- Para 2 partículas donde $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$
podemos reducirlo a 1 partícula y $V(r)$
- Para $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ podemos describir
átomos.

Repaso de resultados clásicos

- Consideramos 1 partícula masa μ sujeta
a potencial central $V(r)$

$$\vec{F} = -\nabla V(r) = -\frac{dV}{dr} \hat{r}$$

$\therefore \vec{F}$ siempre apunta hacia el origen

$$\rightarrow \vec{L} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$$

$$\rightarrow \text{Para } \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \frac{d\vec{L}}{dt} = 0$$

$\rightarrow \vec{L}$ es cte. de mov.

En mecánica cuántica:

En la representación $\{|\vec{r}\rangle\}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Como V sólo depende de r , usamos c. esféricas.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

(para $r \neq 0$)

Recordando que:

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

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

Hamiltoniano para potencial central.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} L^2 + V(r)$$

Separación de variables:

→ L_x, L_y, L_z sólo actúan en variables angulares θ, ϕ .

→ Conmutan con operadores que actúan en r .

→ L_x, L_y, L_z conmutan con H .
(son tes de mov).

$$[H, \vec{L}] = 0 \quad ; \quad [H, L^2] = 0$$

recordando que L_x, L_y, L_z no conmutan entre sí.

Podemos buscar eig funciones comunes a H, L_z, L^2 (s.p.g.)

$$\begin{aligned} H\psi(\vec{r}) &= E\psi(\vec{r}) \\ L^2\psi(\vec{r}) &= \hbar^2 l(l+1)\psi(\vec{r}) \\ L_z\psi(\vec{r}) &= \hbar m\psi(\vec{r}) \end{aligned} \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Ya conocemos} \\ \text{la solución} \end{array}$$

$$\therefore \psi(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Sin importar $R(r)$ $\nearrow$ es solución de eqs angulares.

Sólo nos falta determinar $R(r)$

Ecuación radial

Al usar $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ en $H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ obtenemos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

Ya sólo depende de 1 variable r
y el parámetro l . (ie. para cada l buscamos una función y un e.v.).

Podemos simplificarla haciendo $R(r) = \frac{1}{r} u(r)$ ($u(0)=0$)

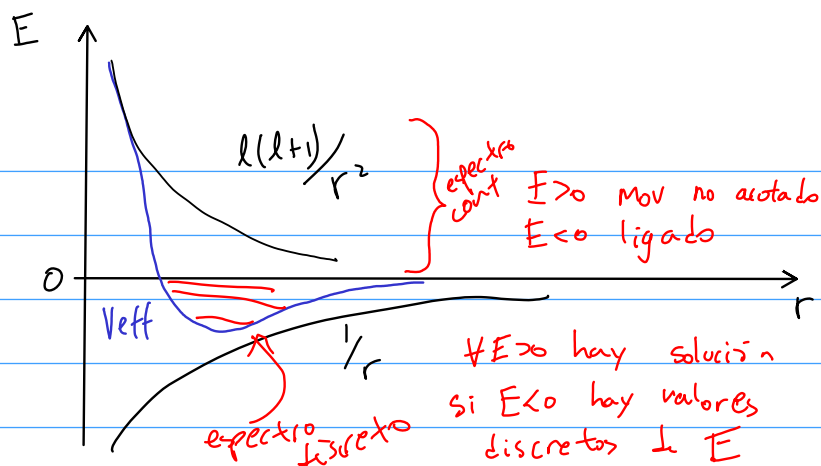
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Tiene forma de ec. en 1D para $r > 0$ con

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

Nota $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \geq 0$. apunta hacia afuera

se le llama potencial centrífugo.



Por lo tanto fijamos en $E < 0$

Adimensionalización

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0.5 \text{ \AA} \quad (\text{radio de Bohr})$$

$\uparrow$
 10^{-10} m

$$\rho = r/a_0$$

$$E_0 = \frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2 \hbar^2} = 13.6 \text{ eV}$$

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

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \lambda^2 \right] u(\rho) = 0$$

Esbozo de solución

a) Comportamiento asintótico

Cuando $\rho \rightarrow \infty$

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda^2 \right] u(\rho) = 0 \Rightarrow u(\rho) = e^{\pm \lambda \rho}$$

con + no
es físico

Hacemos $u(\rho) = e^{-\lambda \rho} y(\rho)$

b) Para $y(\rho)$ proponemos $y(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q$

Encontramos que para cumplir las condiciones de frontera $\psi(\rho)$ debe ser un polinomio finito

$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}, \quad n \geq l+1.$$

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

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.

e-estados de hidrogeno

$|n, l, m\rangle$

n : número principal cuántico

números cuánticos.

normalización

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

$$\begin{aligned} \int |\psi(\vec{r})|^2 dV &= \iiint |R(r)|^2 |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr \\ &= \underbrace{\int |R(r)|^2 r^2 dr}_1 \underbrace{\int \int |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi}_1 \end{aligned}$$