Tarea 1: Física Atómica y Materia Condensada

Tomás Ricardo Basile Álvarez
316617194

June 18, 2022

Problema 1

1. Usar la definición en mecánica clásica de momento angular $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$, para escribir las componentes rectangulares del operador cuántico de momento angular. Demostrar que estas componentes se pueden escribir en términos de las coordenadas angulares esféricas como:

$$
\begin{aligned}
l_x &= i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
l_y &= -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
l_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}
\end{aligned}
$$

Empezamos con la definición clásica del momento angular $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ y convertimos a operadores, usando que el operador de $\vec{r}$ es multiplicar por $\vec{r}$ y que el de $\vec{p}$ es $-i\hbar\nabla$. Entonces el operador de momento angular es:

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times (-i\hbar\nabla).$$

Escribimos esto en coordenadas cartesianas usando el gradiente $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{y} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{z}$ y el vector $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$

$$
\begin{aligned}
\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} &= (x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}) \times \left(-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{y} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{z} \right) \right) \\
&= -i\hbar (x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}) \times \left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{y} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{z} \right)
\end{aligned}
$$

Desarrollamos el producto cruz,

$$= -i\hbar \left(x\frac{\partial}{\partial x}\hat{x}\times\hat{x} + y\frac{\partial}{\partial x}\hat{y}\times\hat{x} + z\frac{\partial}{\partial x}\hat{z}\times\hat{x} + x\frac{\partial}{\partial y}\hat{x}\times\hat{y} + y\frac{\partial}{\partial y}\hat{y}\times\hat{y} + z\frac{\partial}{\partial y}\hat{z}\times\hat{y} + x\frac{\partial}{\partial z}\hat{x}\times\hat{z} + y\frac{\partial}{\partial z}\hat{y}\times\hat{z} + z\frac{\partial}{\partial z}\hat{z}\times\hat{z} \right)$$

Reemplazamos el resultado del producto cruz de cada par de vectores unitarios,

$$
\begin{aligned}
&= -i\hbar \left(-y\frac{\partial}{\partial x}\hat{z} + z\frac{\partial}{\partial x}\hat{y} + x\frac{\partial}{\partial y}\hat{z} + z\frac{\partial}{\partial y}(-\hat{x}) + x\frac{\partial}{\partial z}(-\hat{y}) + y\frac{\partial}{\partial z}\hat{x} \right) \\
&= -i\hbar \left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)\hat{x} + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right)\hat{y} + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)\hat{z} \right]
\end{aligned}
$$

Por lo tanto, las componentes en cada dirección son:

$$l_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$l_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
$$l_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

En Coordenadas Esféricas

Para encontrar los operadores en coordenadas esféricas, podríamos convertir las derivadas con respecto a las coordenadas rectangulares a coordenadas esféricas. Sin embargo, me parece que es más fácil deducir de nuevo la expresión desde cero pero en coordenadas esféricas. Por definición tenemos que

$$\vec{l} = \vec{r}\times\vec{p} = \vec{r}\times(-i\hbar\nabla)$$

El vector $\vec{r}$ en coordenadas esféricas es $\vec{r} = r\hat{r}$ y el gradiente es $\nabla = \frac{\partial}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{\phi}$, por lo que tenemos que:

$$\begin{aligned}
\vec{l} &= \vec{r}\times(-i\hbar\nabla)\\
&= -i\hbar\, r\hat{r}\times\left(\frac{\partial}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{\phi}\right)\\
&= -i\hbar r\left(\frac{\partial}{\partial r}\hat{r}\times\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{r}\times\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{r}\times\hat{\phi}\right)\\
&\text{Calculamos los productos cruz}\\
&= -i\hbar r\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\phi} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}(-\hat{\theta})\right)
\end{aligned}$$

Ahora usamos las expresiones de los vectores unitarios $\hat{\phi}$ y $\hat{\theta}$ en términos de vectores unitarios en cartesianas, que son $\hat{\theta} = \cos\theta(\cos\phi\hat{x} + \sin\phi\hat{y}) - \sin\theta\hat{z}$ y $\hat{\phi} = -\sin\phi\hat{x} + \cos\phi\hat{y}$. Por lo que tenemos,

$$\begin{aligned}
\vec{l} &= -i\hbar r\left(\frac{1}{r}[-\sin\phi\hat{x} + \cos\phi\hat{y}]\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{r\sin\theta}[\cos\theta(\cos\phi\hat{x} + \sin\phi\hat{y}) - \sin\theta\hat{z}]\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
&= -i\hbar\left[\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\hat{x} + \left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\hat{y} + \frac{\partial}{\partial\phi}\hat{z}\right]
\end{aligned}$$

Entonces vemos que las componentes del momento angular son:

$$l_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$
$$l_y = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$
$$l_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

Problema 2

Demostrar que las funciones radiales $R_{10}(r)$ y $R_{32}(r)$ de la tabla de las notas son solución de la ecuación radial del átomo de hidrógeno (utilizar $\mu = m_e$)

- R_{10}

Tenemos que $R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$ y la ecuación radial a la que llegamos en clase es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + v(r)\right)R = ER$$

Para probar que R_{10} es solución de la ecuación diferencial, la sustituimos del lado izquierdo y veremos que llegamos al lado derecho. Además, sustituimos $l = 0$ para este orbital y $v(r) = -(Ze^2)/(4\pi\epsilon_0 r)$. Por tanto, el lado izquierdo de la ecuación es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{10}}{dr}\right) + \left(\frac{\hbar^2(0)(0+1)}{2m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)R_{10} =$$

Sustituimos la expresión de R_{10} y simplificamos

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\left[\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}\right]\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}(-2Z/a_0)e^{-Zr/a_0}\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2Z}{a_0}\frac{d}{dr}\left(r^2 e^{-Zr/a_0}\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2Z}{a_0}\left(2re^{-Zr/a_0} - \frac{Z}{a_0}r^2 e^{-Zr/a_0}\right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

Usamos que $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$, por lo que podemos sustituir $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0}$ en el último término de la expresión que teníamos y nos queda:

$$= \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2Z}{a_0}\left(2re^{-Zr/a_0} - \frac{Z}{a_0}r^2 e^{-Zr/a_0}\right) - \frac{Z}{r}\frac{\hbar^2}{m_e a_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z}{a_0}\left(\frac{2}{r}e^{-Zr/a_0} - \frac{Z}{a_0}e^{-Zr/a_0}\right) - \frac{2Z}{r}\frac{\hbar^2}{m_e a_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$= \frac{\hbar^2 Z}{m_e a_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{2}{r}e^{-Zr/a_0} - \frac{Z}{a_0}e^{-Zr/a_0} - \frac{2}{r}e^{-Zr/a_0}\right)$$

$$= \frac{\hbar^2 Z}{m_e a_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(-\frac{Z}{a_0}e^{-Zr/a_0}\right)$$

Vemos que R_{10} se encuentra en esta expresión, por lo que tenemos que

$$= -\frac{\hbar^2 Z}{2m_e a_0}\frac{Z}{a_0}R_{10} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2m_e a_0^2}R_{10}$$

Por lo que tenemos que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{10}}{dr}\right) + \left(\frac{\hbar^2(0)}{2m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)R_{10} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2m_e a_0^2}R_{10}$$

Lo cual es la ecuación radial para R_{10} con energía $E = -\dfrac{\hbar^2 Z^2}{2m_e a_0^2}$. Podemos ver que esto coincide con las energías que encontramos en clase $E_n = -\dfrac{\hbar^2}{2m_e}\left(\dfrac{m_e Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2 \dfrac{1}{n^2}$, pues si sustituimos $a_0 = \dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z}$, tenemos que la energía para $n = 1$ es $E_1 = -\dfrac{\hbar^2}{2m_e}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^2 = -\dfrac{\hbar^2 Z^2}{2m_e a_0^2}$, que es el resultado que obtuvimos.

- R_{32}

Tenemos que $R_{32}(r) = \left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \dfrac{4}{81\sqrt{30}} \left(\dfrac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$ y la ecuación radial a la que llegamos en clase es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} + v(r)\right)R = ER$$

Para probar que R_{32} es solución de la ecuación diferencial, la sustituimos del lado izquierdo y veremos que llegamos al lado derecho. Además, sustituimos $l = 2$ y $v(r) = -(Ze^2)/(4\pi\epsilon_0 r)$. El lado izquierdo de la ecuación es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{32}}{dr}\right) + \left(\frac{\hbar^2(2)(2+1)}{2m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)R_{32} =$$

Sustituimos la expresión de R_{32} y simplificamos

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\left[\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}\right]\right) + \left[\frac{3\hbar^2}{m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}\right)\right) + \left[\frac{3\hbar^2}{m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(2re^{-\frac{Zr}{3a_0}} - \frac{Zr^2}{3a_0}e^{-\frac{Zr}{3a_0}}\right)\right) + \left[\frac{3\hbar^2}{m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\frac{d}{dr}\left(\left[2r^3 - \frac{Zr^4}{3a_0}\right]e^{-\frac{Zr}{3a_0}}\right) + \left[\frac{3\hbar^2}{m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(\left[6r^2 - \frac{4Zr^3}{3a_0}\right]e^{-\frac{Zr}{3a_0}} - \frac{Z}{3a_0}\left[2r^3 - \frac{Zr^4}{3a_0}\right]e^{-\frac{Zr}{3a_0}}\right)$$
$$+ \left[\frac{3\hbar^2}{m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e r^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(6r^2 - \frac{2Zr^3}{a_0} + \frac{Z^2r^4}{9a_0^2}\right)e^{-\frac{Zr}{3a_0}} + \left[\frac{3\hbar^2}{m_e r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(6 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-\frac{Zr}{3a_0}} + \left[\frac{3\hbar^2}{m_e} - \frac{Ze^2 r}{4\pi\epsilon_0}\right]\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(6 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-\frac{Zr}{3a_0}} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left[6 - \frac{Zm_e e^2 r}{2\pi\epsilon_0\hbar^2}\right]e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

Usamos ahora que $a_0 = \dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$, por lo que podemos sustituir $\dfrac{m_e e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} = \dfrac{2}{a_0}$ en el último término:

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(6 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-\frac{Zr}{3a_0}} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left[6 - \frac{2Zr}{a_0}\right]e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

Se puede ver que varios de los términos se cancelan y nos queda solamente:

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4Z^2}{81\sqrt{30}a_0^2}\left(\frac{Z^2r^2}{9a_0^2}\right)e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$
$$= -\frac{\hbar^2 Z^2}{18m_e a_0^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

Vemos que aparece la expresión de R_{32}, por lo que tenemos:

$$= -\frac{\hbar^2 Z^2}{18m_e a_0^2}R_{32}(r)$$

Entonces concluimos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{32}}{dr}\right)+\left(\frac{\hbar^2(2)(2+1)}{2m_e r^2}-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)R_{32} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{18m_e a_0^2}R_{32}(r)$$

Que es la ecuación radial con $E = -\frac{\hbar^2 Z^2}{18m_e a_0^2}$. Podemos ver que esto coincide con la energía que vimos en clase para $n = 3$, que es $E_3 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2\frac{1}{9}$. Pues si sustituimos $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z}$, tenemos que $E_3 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\frac{1}{9} = -\frac{\hbar^2 Z^2}{18m_e a_0^2}$, que es lo que encontramos.

Problema 3

¿Qué valores de momento angular orbital son permitidos para el átomo de hidrógeno con $n = 2$? Hacer un diagrama de los niveles de energía incluyendo estructura fina (usar la ecuación 2.93 de las notas)

$$\Delta E(n, j) = \frac{Z^2\alpha^2|E_n|}{n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{j + 1/2}\right]$$

Empleando un valor de espín nuclear de $I = 1/2$ para el potrón ¿Qué valores puede tomar el momento angular F en cada uno de estos estados?

Valores de momento angular orbital permitidos

Para $n = 2$, los valores válidos del número cuántico l son $l = 0$ y $l = 1$ (porque se debe de cumplir que $0 \leq l < n$). Luego, considerando que la norma cuadrada del momento angular orbital es $\hbar^2 l(l + 1)$, tenemos que los posibles momentos angulares cuadrados son $\hbar^2(0)(0 + 1) = 0$ y $\hbar^2(1)(1 + 1) = 2\hbar^2$.

Además, para encontrar todos los estados con estructura fina, utilizaremos que el número cuántico de spin del electrón es $s = 1/2$. Y entonces el número cuántico de momento angular total j puede tomar los valores $l - 1/2$ y $l + 1/2$.

Como dijimos antes, tenemos que $n = 2$ y por lo tanto los valores válidos de l son $l = 0, l = 1$. Entonces los estados válidos son $2s$ y $2p$. Revisamos ahora estos dos estados y como se dividen según el valor de j:

- $2s$:
  Como tenemos que $l = 0$, los posibles valores para j son $j = 0 - 1/2 = -1/2$ y $j = 0 + 1/2 = 1/2$. Pero j tiene que se positiva, por lo que sólo hay una posibilidad para el valor de j, que es $j = 1/2$.

  Entonces, el único estado con estructura fina para $2s$ es el estado $2s_{1/2}$, que tiene $n = 2$ y $j = 1/2$.

  - $2s_{1/2}$: Según la ecuación 2.93 de las notas, la corrección en la energía para este estado es:

    $$\Delta E(2, 1/2) = \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{2^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{2}{1/2 + 1/2}\right] = \frac{-5Z^2\alpha^2|E_2|}{16}$$

    Entonces, considerando que la energía del estado $2s$ sin estructura fina es E_2, tenemos que la energía con esta corrección es de:

    $$\boxed{E_{2s_{1/2}} = E_2 + \Delta E(2, 1/2) = E_2 - \frac{5Z^2\alpha^2}{16}|E_2|}$$

    Se puede encontrar el valor numérico de esta energía usando que la energía E_2 es igual a $E_2 = -\frac{\mu}{m_e} hcR_\infty Z^2 \frac{1}{2^2}$ (ecuación 2.63 de las notas). Como el electrón es mucho menos pesado que el núcleo, $\mu \simeq m_e$ y la ecuación es sencillamente $E_2 = -hcR_\infty Z^2 \frac{1}{2^2}$.
    Para calcular esta energía numéricamente, usamos que $hcR_\infty \simeq 13.60569eV$. Además, $Z = 1$ para el átomo de Hidrógeno, por lo que la energía es $E_2 = -hcR_\infty Z^2 \frac{1}{2^2} = -(13.60569eV)\frac{1}{4} = -3.401422eV$.

    Luego, la energía con la corrección fina es igual a:

    $$\begin{aligned} E_{2s_{1/2}} &= E_2 - \frac{5Z^2\alpha^2}{16}|E_2| \\ &= -3.401422eV - \frac{5(1)^2(7.2973525693 \times 10^{-3})^2}{16}|-3.401422eV| \\ &= \boxed{-3.401478eV} \end{aligned}$$

- $2p$:

  Para el estado $2p$, tenemos que $l = 1$. Entonces las posibilidades para j son $j = 1 - 1/2 = 1/2$ y $j = 1 + 1/2 = 3/2$. Por lo tanto, se crean los dos estados siguientes:

  - $2p_{1/2}$: Según la ecuación 2.93 de las notas, la corrección en la energía es:

    $$\Delta E(2, 1/2) = \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{2^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{2}{1/2 + 1/2}\right] = \frac{-5Z^2\alpha^2|E_2|}{16}$$

    Entonces, considerando que la energía del estado $2p$ sin estructura fina es E_2, tenemos que la energía con esta corrección es de:

    $$\boxed{E_{2p_{1/2}} = E_2 + \Delta E(2, 1/2) = E_2 - \frac{5Z^2\alpha^2}{16}|E_2|}$$

    Este es el mismo resultado que se obtuvo para el estado $2s_{1/2}$ (debido a que la corrección sólo depende de n y j pero no de l). El valor numérico ya lo calculamos en el inciso anterior, y es $-3.401478eV$.

  - $2p_{3/2}$: Según la ecuación 2.93 de las notas, la corrección en la energía es:

    $$\Delta E(2, 3/2) = \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{2^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{2}{3/2 + 1/2}\right] = \frac{-Z^2\alpha^2|E_2|}{16}$$

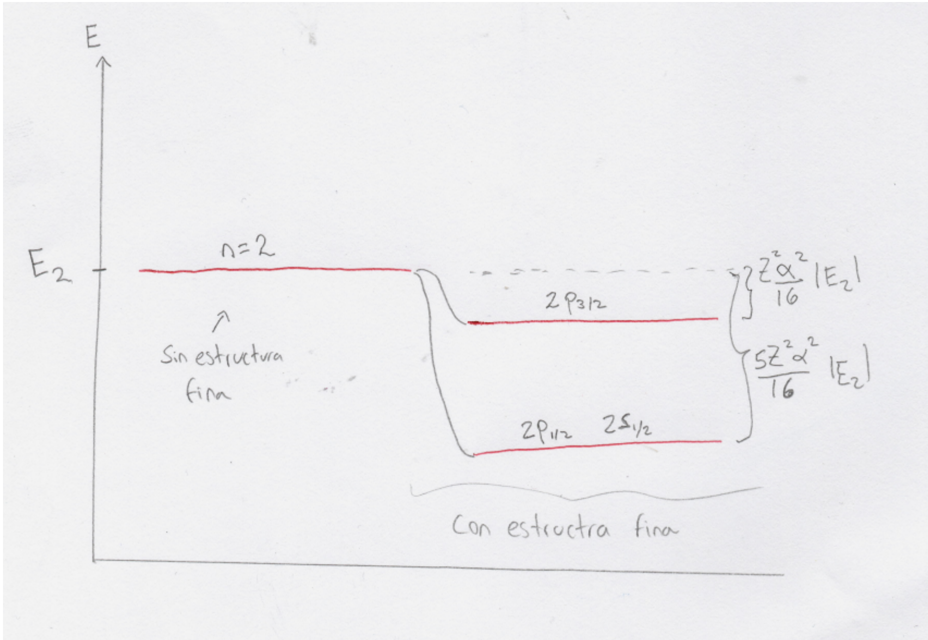
    Entonces, considerando que la energía del estado $2p$ sin estructura fina es E_2, tenemos que la energía con esta corrección es de:

    $$\boxed{E_{2p_{1/2}} = E_2 + \Delta E(2, 1/2) = E_2 - \frac{Z^2\alpha^2}{16}|E_2|}$$

    Y se puede calcular el valor numérico de este resultado:

    $$\begin{aligned} E_{2p_{3/2}} &= E_2 - \frac{Z^2\alpha^2}{16}|E_2| \\ &= -3.401422eVeV - \frac{(1)^2(7.2973525693 \times 10^{-3})^2}{16}|-3.401422eVeV| \\ &= \boxed{-3.401433eV} \end{aligned}$$

Podemos visualizar las energías de estos 3 estados $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$ en un diagrama de los niveles de energía:



¿Qué valores puede tomar el momento angular F en cada uno de estos estados?

- $2s_{1/2}, 2p_{1/2}$:

  En estos dos estados tenemos que $j = 1/2$ y además el spin del núcleo es $I = 1/2$. El momento angular total del electrón $j = 1/2$ tiene dos proyecciones $m_j = \pm 1/2$ y similarmente el momento angular del núcleo tiene dos proyecciones $m_I = \pm 1/2$. Por lo que en total se tienen $(2)(2) = 4$ estados en total.

  La suma de estos momentos $\vec{F} = \vec{I} + \vec{j}$ va a tener una proyección máxima m_F cuando m_I y m_j son máximas, que sucede cuando $m_I = 1/2, m_j = 1/2$, por lo que la proyección máxima es $m_F = 1/2 + 1/2 = 1$. Entonces debe de haber un valor de $F = 1$, el cual tiene tres proyecciones $m_F = 1, 0, -1$. Sin embargo, nos falta un estado para conseguir el total de 4 estados que sabemos que se deben de tener, dicho estado corresponde con $F = 0$, que tiene una sola proyección $m_F = 0$.

  Entonces, los valores posibles de F son $F = 0, F = 1$.

- $2p_{3/2}$:

  En este caso tenemos que $j = 3/2$ y el spin del núcleo es $I = 1/2$. El momento angular total del electrón $j = 3/2$ tiene 4 proyecciones $m_j = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$, mientras que el momento angular del núcleo tiene dos proyecciones $m_I = \pm 1/2$. Por lo que en total se tienen $(4)(2) = 8$ estados en total.

  La suma de estos momentos $\vec{F} = \vec{I} + \vec{j}$ va a tener una proyección máxima m_F cuando m_I y m_j son máximas, que sucede cuando $m_I = 1/2, m_j = 3/2$, por lo que la proyección máxima es $m_F = 1/2 + 3/2 = 2$. Entonces debe de haber un valor de $F = 2$, el cual tiene cinco proyecciones $m_F = -2, -1, 0, 1, 2$. Para conseguir el total de 8 estados nos faltan aún 3 estados, que corresponden con $F = 1$, pues tiene 3 proyecciones $m_F = -1, 0, 1$.

  Por lo tanto los posibles valores de F son $F = 1$ y $F = 2$.

Problema 4

¿Cómo se modifican los niveles de energía para el muonio (formado por un protón y un muón)? Hacer un diagrama de los niveles de energía para $n = 2, 3$ incluyendo estructura fina (no es necesario incluir hiperfina). Con esta información, ¿de qué longitud de onda es la radiación que resulta de la transición $2p \to 1s$ que observaron en el experimento reciente en el que midieron el radio del protón?

Para encontrar los estados posibles con estructura fina, tomamos en cuenta los valores del número cuántico principal $n = 1, 2, 3$ y para cada uno de ellos los valores válidos de l (que tiene que ser entero y con $0 \leq l < n$). Y finalmente para cada uno de ellos, vemos los valores posibles del momento angular total j. En cada estado con n, j , calculamos la energía con corrección fina usando la ecuación 2.93 de las notas,

$$\Delta E(n,j) = \frac{Z^2\alpha^2|E_n|}{n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2}\right].$$

Donde la energía sin correcciones es (por la ecuación 2.63 de las notas)

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mu Z e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2\frac{1}{n^2} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

En el átomo de Hidrógeno normal se puede aproximar la masa reducida μ con la masa del electrón m_e debido a la gran diferencia entre la masa del electrón y la del protón. Sin embargo, para el muonio, se vuelve más importante usar la masa reducida por la menor diferencia entre la masa del muón y la del protón. Donde la masa reducida se define como $\mu = \dfrac{m_p m_\mu}{m_p + m_\mu}$ con $m_p = 1.672622 \times 10^{-27}kg$ la masa del protón y $m_\mu = 1.883531 \times 10^{-28}kg$ la del muón. Usando los valores numéricos, la masa reducida es $\mu = \dfrac{m_p m_\mu}{m_p + m_\mu} = 1.692895 \times 10^{-28}kg$. Vemos ahora todos los estados.

- $n = 1$

  Para este valor, la energía sin correcciones es $E_1 = -\dfrac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\dfrac{1}{1^2} = -\dfrac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$.
  Sustituyendo el valor de μ encontrado antes y $Z = 1$ llegamos a que esta energía es: $E_1 = -2528.493eV$.

  Ahora bien, para $n = 1$, el único valor posible de l es 0:

  - $l = 0$:
    Como el spin del muón es $s = 1/2$, el número cuántico del momento angular total es $j = 0+1/2 = 1/2$ o $j = 0 - 1/2 = -1/2$. Pero como j tiene que ser positiva, sólo hay un valor posible, que es $j = 1/2$. Por lo tanto, el único estado posible es:

    * $1s_{1/2}$:
      Como $n = 1, j = 1/2$, la corrección fina en la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(1,1/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_1|}{1^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{1}{1/2+1/2}\right]\\ &= -\frac{Z^2\alpha^2|E_1|}{4}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{1s_{1/2}} &= E_1 + \Delta E(1,1/2) = \boxed{E_1 - \frac{Z^2\alpha^2|E_1|}{4}}\\ &= -2528.526eV\end{aligned}$$

- $n = 2$

  Para este valor, la energía sin correcciones es $E_2 = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{2^2} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{128\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$.

  Sustituyendo el valor de μ encontrado antes y $Z = 1$ llegamos a que esta energía es: $E_2 = -632.123eV$.

  Para $n = 2$, hay dos valores posibles para l, que son $l = 0, l = 1$:

  - $l = 0$:

    En este caso, como el spin del muón es $s = 1/2$, el número cuántico del momento angular es $j = 1/2$ (como se calculó en el caso para $n = 1$). Por lo que el único estado posible es

    * $2s_{1/2}$:

      Como $n = 2, j = 1/2$, la corrección fina en la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(2,1/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{2^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{2}{1/2+1/2}\right]\\ &= -\frac{5Z^2\alpha^2|E_2|}{16}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{2s_{1/2}} &= E_2 + \Delta E(2,1/2) = \boxed{E_2 - \frac{5Z^2\alpha^2|E_2|}{16}}\\ &= -632.133eV\end{aligned}$$

  - $l = 1$:

    En esta caso, como el spin del muón es $s = 1/2$, el número cuántico del momento angular total j puede ser $1 + 1/2 = 3/2$ o $1 - 1/2 = 1/2$. Por lo que los dos estados posibles son:

    * $2p_{1/2}$:

      Como $n = 2$, $j = 1/2$, la corrección fina de la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(2,1/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{2^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{2}{1/2+1/2}\right]\\ &= -\frac{5Z^2\alpha^2|E_2|}{16}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{2p_{1/2}} &= E_2 + \Delta E(2,1/2) = \boxed{E_2 - \frac{5Z^2\alpha^2|E_2|}{16}}\\ &= -632.133eV\end{aligned}$$

    * $2p_{3/2}$:

      Como $n = 2$, $j = 3/2$, la corrección fina de la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(2,3/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{2^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{2}{3/2+1/2}\right]\\ &= \frac{-Z^2\alpha^2|E_2|}{16}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{2p_{3/2}} &= E_2 + \Delta E(2,3/2) = \boxed{E_2 - \frac{Z^2\alpha^2|E_2|}{16}}\\ &= -632.125eV\end{aligned}$$

- $n = 3$

  Para este valor, la energía sin correcciones es $E_3 = -\frac{\mu Z^2 e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{3^2} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{288\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$.
  Sustituyendo el valor de μ encontrado antes y $Z = 1$ llegamos a que esta energía es: $E_3 = -280.944eV$.

  Para $n = 3$, hay tres valores posibles para l, que son $l = 0, 1, 2$:

  - $l = 0$:
    En este caso, como el spin del muón es $s = 1/2$, el número cuántico del momento angular total es (como se calculó en el caso para $n = 1$) $j = 1/2$. Por lo que el único estado posible es

    * $3s_{1/2}$:
      Como $n = 3, j = 1/2$, la corrección fina en la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(3, 1/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{3^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{3}{1/2 + 1/2}\right]\\ &= -\frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{4}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{3s_{1/2}} = E_3 + \Delta E(3, 1/2) &= \boxed{E_3 - \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{4}}\\ &= -280.947eV\end{aligned}$$

  - $l = 1$:
    En esta caso, como el spin del muón es $s = 1/2$, como vimos antes, los valores posibles para j son $1/2$ y $3/2$:

    * $3p_{1/2}$:
      Como $n = 3$, $j = 1/2$, la corrección fina de la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(3, 1/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{3^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{3}{1/2 + 1/2}\right]\\ &= -\frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{4}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{3p_{1/2}} = E_3 + \Delta E(3, 1/2) &= \boxed{E_3 - \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{4}}\\ &= -280.947eV\end{aligned}$$

    * $3p_{3/2}$:
      Como $n = 3$, $j = 3/2$, la corrección fina de la energía es de:

$$\begin{aligned}\Delta E(3, 3/2) &= \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{3^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{3}{3/2 + 1/2}\right]\\ &= \frac{-Z^2\alpha^2|E_3|}{12}\end{aligned}$$

      Por lo que la energía corregida es:

$$\begin{aligned}E_{3p_{3/2}} = E_3 + \Delta E(3, 3/2) &= \boxed{E_3 - \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{12}}\\ &= -280.945eV\end{aligned}$$

- $l = 2$:
  En este caso, como el spin del muón es $s = 1/2$, el momento angular total j puede tomar los valores $2 + 1/2 = 5/2$ y $2 - 1/2 = 3/2$. Entonces los estados son
  * $3d_{3/2}$: Como $n = 3$ y $j = 3/2$, la corrección fina de la energía es:

$$\Delta E(3, 3/2) = \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{3^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{3}{3/2 + 1/2}\right]$$
$$= \frac{-Z^2\alpha^2|E_3|}{12}$$

    Por lo que la energía corregida es:

$$E_{3d_{3/2}} = E_3 + \Delta E(3, 3/2) = \boxed{E_3 - \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{12}}$$
$$= -280.945eV$$

  * $3d_{5/2}$: Como $n = 3$ y $j = 5/2$, la corrección fina de la energía es:

$$\Delta E(3, 5/2) = \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{3^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{3}{5/2 + 1/2}\right]$$
$$= -\frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{36}$$

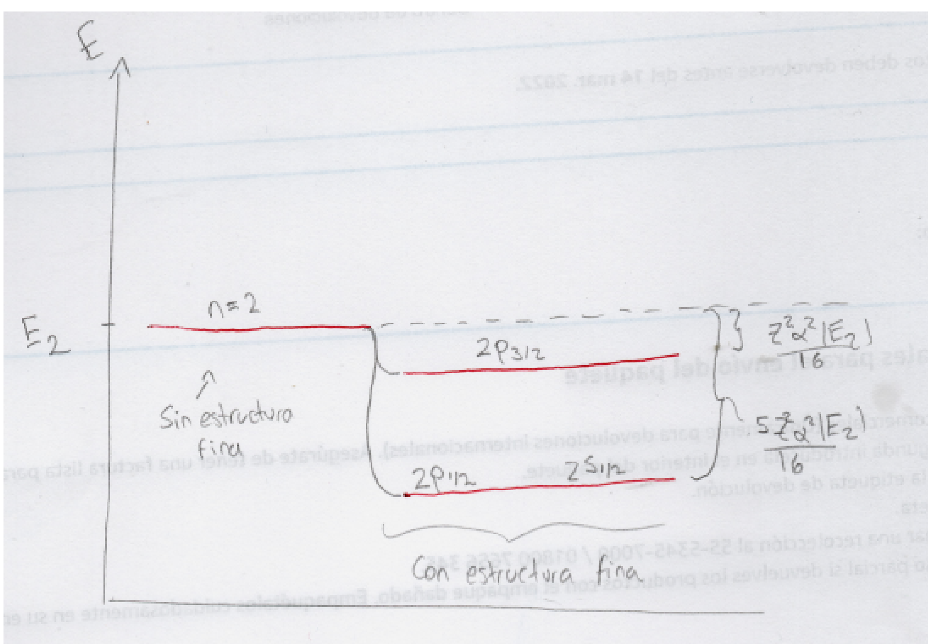
    Por lo que la energía corregida es:

$$E_{3d_{5/2}} = E_3 + \Delta E(3, 5/2) = \boxed{E_3 - \frac{Z^2\alpha^2|E_3|}{36}}$$
$$= -280.944eV$$

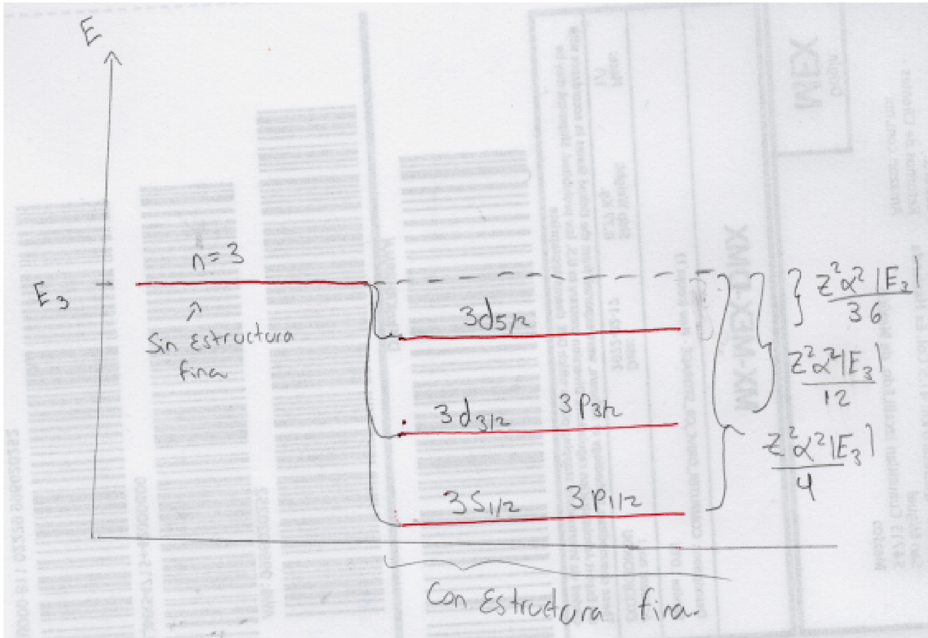
Diagramas de Estructura Fina:

Con los resultados encontrados antes, podemos hacer un diagrama de la estructura fina para $n = 2$ y para $n = 3$, que se muestran a continuación.

- $n = 2$:



- $n = 3$:



¿De qué longitud de onda es la radiación de la transición $2p \to 1s$?

Depende de en cuál de los estados $2p$ haya empezado el átomo, que puede ser $2p_{1/2}$ o $2p_{3/2}$, el estado final necesariamente será $1s_{1/2}$.

Si el átomo empieza en $2p_{1/2}$ y termina en $2s_{1/2}$, las energías son $E_{1s_{1/2}} = -2528.526eV$ y $E_{2p_{1/2}} = -632.133eV$. Por lo tanto, un salto entre estos dos niveles tiene una energía de $E = E_{2p_{1/2}} - E_{1s_{1/2}} = 1896.393eV$.

Pero la energía de radiación se relaciona con la longitud de onda como $E = \frac{hc}{\lambda}$, por lo que $\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{(4.135667 \times 10^{-15} eV \cdot s)(2.99792 \times 10^{8} m/s)}{1896.393eV} = 6.53785 \times 10^{-10} m$

Si el estado inicial era $2p_{3/2}$, ahora la energía inicial es $E_{2p_{1/2}} = -632.125eV$ y por tanto la energía del salto es $E = E_{2p_{1/2}} - E_{1s_{1/2}} = 1896.401eV$. La longitud de onda para esta energía es muy similar a la anterior, con un resultado de $6.53788 \times 10^{-10} m$.

Problema 5

Calcular el valor esperado del radio electrónico para un átomo de hidrógeno en el orbital $3d$. Calcular el valor esperado de $1/r^3$ en el orbital $2p$ del átomo de hidrógeno.

Valor esperado del radio electrónico en el orbital $3d$

La función de onda para la órbita $3d$ es $u_{3d} = Y_{3d}(\theta,\phi)R_{3d}(r)$. Luego, el valor esperado del radio r en este estado es:

$$
\begin{aligned}
\langle r\rangle_{3d} = \langle u_{3d}|ru_{3d}\rangle &= \int u_{3d}^* r u_{3d}\, dV \\
&= \int (Y_{3d}^* R_{3d}^*) r (Y_{3d} R_{3d}) dV \\
&\text{Reemplazamos } dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \text{ y escribimos explícitamente las integrales} \\
&= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} (Y_{3d}^* R_{3d}^*) r (Y_{3d} R_{3d})(r^2\sin\theta)\, dr d\theta d\phi \\
&= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_{3d}^* Y_{3d} \sin\theta d\theta d\phi \int_0^{\infty} R_{3d}^* r R_{3d} r^2 dr
\end{aligned}
$$

Pero como los esféricos armónicos están normalizados, la primera integral vale 1 y por tanto nos queda solamente que:

$$\langle r\rangle_{3d} = \int_0^{\infty} R_{3d}^* r R_{3d} r^2 dr = \int_0^{\infty} |R_{3d}|^2 r^3 dr$$

Por lo que en realidad sólo es necesario conocer la parte radial de la función de onda. Dicha parte radial se encuentra en la tabla 2.2 de las notas, y es igual a $R_{3d} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$ y entonces tenemos que:

$$
\begin{aligned}
\langle r\rangle_{3d} &= \int_0^{\infty} |R_{3d}|^2 r^3 dr \\
&= \int_0^{\infty} \left| \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \right|^2 r^3 dr \\
&= \int_0^{\infty} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3} \frac{16}{81^2\cdot 30} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^4 e^{-\frac{2Zr}{3a_0}} r^3 dr \\
&= \frac{16Z^7}{81^2\cdot 30a_0^7} \int_0^{\infty} r^7 e^{-\frac{2Zr}{3a_0}} dr
\end{aligned}
$$

Hacemos ahora la sustitución $x = \frac{2Zr}{3a_0}$ por lo que $r = \frac{3a_0x}{2Z}$ y entonces $dr = \frac{3a_0}{2Z}dx$.

$$
\begin{aligned}
\langle r\rangle_{3d} &= \frac{16Z^7}{81^2\cdot 30a_0^7} \int_0^{\infty} \left(\frac{3a_0x}{2Z}\right)^7 e^{-x} \left(\frac{3a_0}{2Z}\right) dx \\
&= \frac{16\cdot 3^8 Z^7 a_0^8}{81^2\cdot 30\cdot 2^8 a_0^7 Z^8} \int_0^{\infty} x^7 e^{-x} dx \\
&= \frac{a_0}{480Z} \int_0^{\infty} x^7 e^{-x} dx
\end{aligned}
$$

Esta integral es la función Gamma evaluada en 8, que es igual a $\Gamma(8) = (8-1)! = 7!$, por lo que concluimos que

$$\begin{aligned}\langle r\rangle_{3d} &= \frac{a_0}{480Z}\int_0^\infty x^7 e^{-x}dx = \frac{a_0}{480Z}(7!) \\ &= \boxed{\frac{21}{2}\frac{a_0}{Z}}\end{aligned}$$

Entonces, el valor esperado del radio electrónico en el orbital $3d$ es $\langle r\rangle = \dfrac{21a_0}{2Z}$. En particular, para el átomo de hidrógeno, $Z = 1$ y por lo tanto $\langle r\rangle = \dfrac{21a_0}{2}$.

Valor esperado para $1/r^3$ en el orbital $2p$

Similarmente al caso anterior, empezamos escribiendo la función de onda para la órbita $2p$, la cual es $u_{2p} = Y_{2p}(\theta,\phi)R_{2p}(r)$. Luego, el valor esperado de $1/r^3$ en este estado es:

$$\begin{aligned}\langle \frac{1}{r^3}\rangle_{2p} &= \langle u_{2p}|1/r^3 u_{2p}\rangle = \int u_{2p}^* 1/r^3 u_{2p}\, dV \\ &= \int (Y_{2p}^* R_{2p}^*) 1/r^3 (Y_{2p}R_{2p}) dV \\ &\text{Reemplazamos } dV = r^2\sin\theta dr d\theta d\phi \text{ y escribimos explícitamente las integrales} \\ &= \int_0^{2\pi}\int_0^\pi\int_0^\infty (Y_{2p}^* R_{2p}^*) 1/r^3 (Y_{2p}R_{2p})(r^2\sin\theta)\, dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y_{2p}^* Y_{2p}\sin\theta d\theta d\phi \int_0^\infty R_{2p}^* 1/r^3 R_{2p} r^2 dr\end{aligned}$$

Pero como los esféricos armónicos están normalizados, la primera integral vale 1 y por tanto nos queda solamente que:

$$\langle 1/r^3\rangle_{2p} = \int_0^\infty R_{2p}^* 1/r^3 R_{2p} r^2 dr = \int_0^\infty |R_{2p}|^2 1/r\, dr$$

Por lo que en realidad sólo es necesario conocer la parte radial de la función de onda. Dicha parte radial se encuentra en la tabla 2.2 de las notas, y es igual a $R_{2p} = \left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\dfrac{1}{2\sqrt{6}}\left(\dfrac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$ y entonces tenemos que:

$$\begin{aligned}\langle 1/r^3\rangle_{2p} &= \int_0^\infty \left|\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}}\right|^2 \frac{1}{r}dr \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{24}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}}\frac{1}{r}dr \\ &= \frac{Z^5}{24a_0^5}\int_0^\infty r e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr\end{aligned}$$

Hacemos ahora la sustitución $x = \dfrac{Zr}{a_0}$ por lo que $r = \dfrac{a_0 x}{Z}$ y entonces $dr = \dfrac{a_0}{Z}dx$.

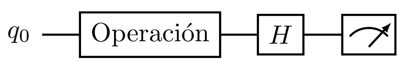
$$\begin{aligned}\langle 1/r^3\rangle_{2p} &= \frac{Z^5}{24a_0^5}\int_0^\infty \left(\frac{a_0 x}{Z}\right)e^{-x}\left(\frac{a_0}{Z}\right)dx \\ &= \frac{Z^5 a_0^2}{24a_0^5 Z^2}\int_0^\infty x e^{-x}dx \\ &= \frac{Z^3}{24a_0^3}\int_0^\infty x e^{-x}dx\end{aligned}$$

Esta integral es la función Gamma evaluada en 2, que es $\Gamma(2) = 1! = 1$. Por lo que nos queda que

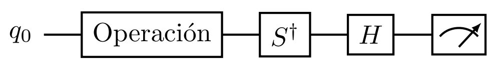
$$\langle 1/r^3 \rangle_{2p} = \boxed{\frac{Z^3}{24a_0^3}}$$

Para el átomo de hidrógeno se tiene que $Z = 1$ y por lo tanto $\langle 1/r^3 \rangle_{2p} = \dfrac{1}{24a_0^3}$

Circuito 1



Circuito 2



Circuito 3