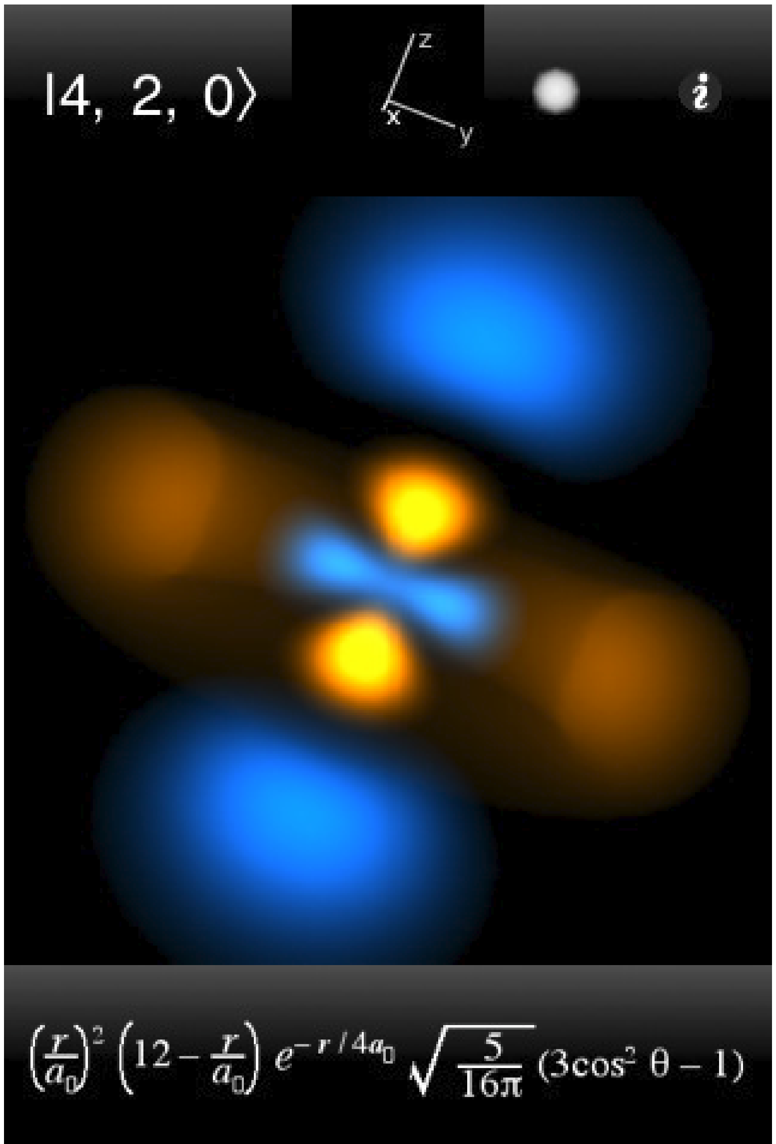
Universidad Nacional de Río Negro
Física Moderna A - 2017

- **Unidad** 05 – el átomo de hidrógeno
- **Clase** U05C02
- **Fecha** 05 Junio 2017
- **Cont** Átomo de Hidrógeno, números cuánticos
- **Cátedra** Asorey
- **Web**

https://github.com/asoreyh/unrn-moderna-a

“Los átomos se comportan como átomos, nada más”.
John Gribbin



- **Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno. Solución de la ecuación de Schrödinger. Números cuánticos.** Autovalores de energía. Orbitales atómicos.
- *Apéndice matemático: Ecuaciones diferenciales separables*.

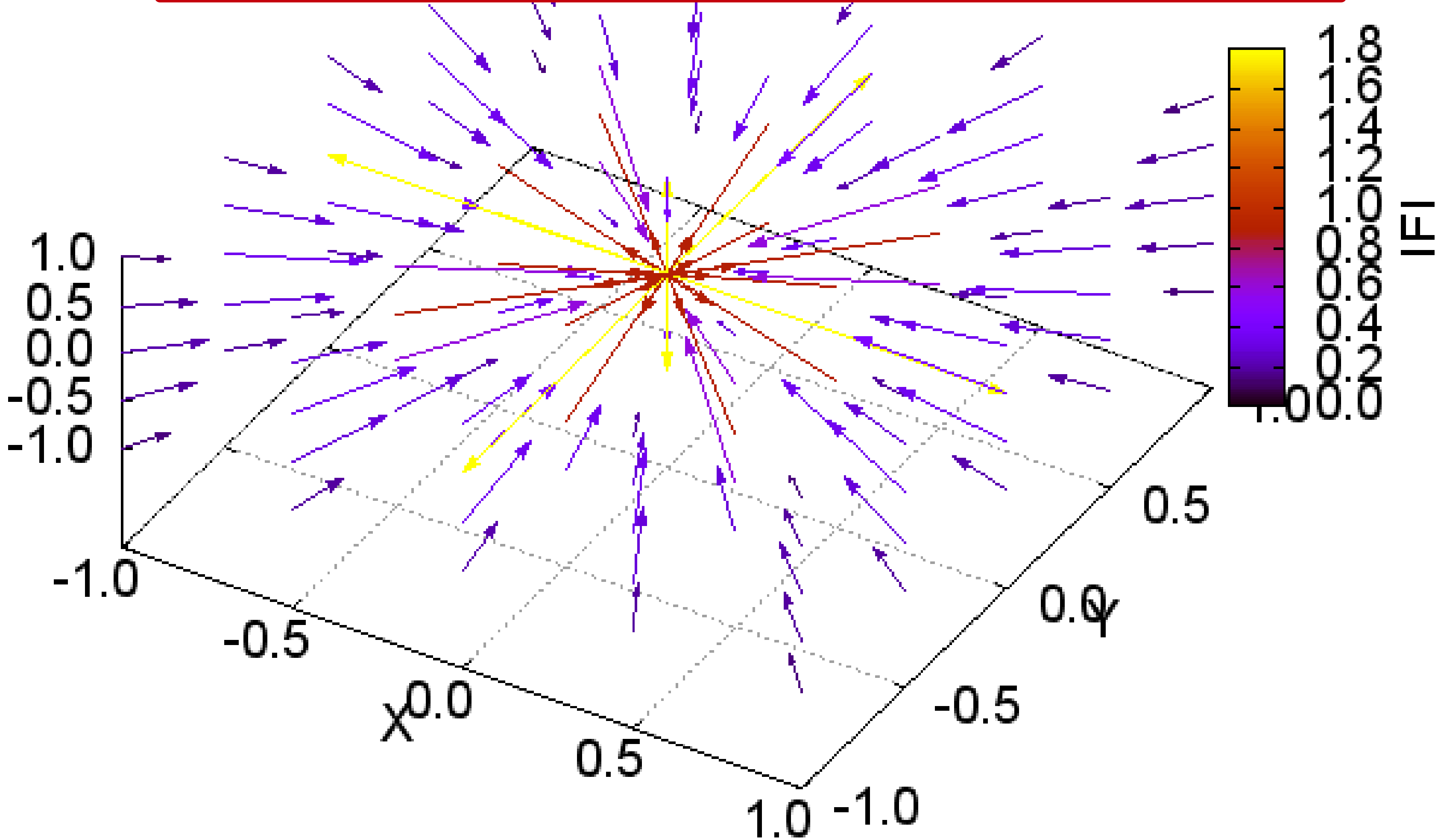
Hasta aquí

Para resolver un problema:

1. Encontrar los observables clásicos
2. Asignar los operadores cuánticos correspondientes
3. Escribir el Hamiltoniano del sistema, **H=K+U**
4. Plantear la ecuación de Schrödinger según corresponda
   1. Dependiente del tiempo; ó
   2. Independiente del tiempo
5. Hallar las soluciones para encontrar $\Psi\ (x,t)$
   - *Si es es 4.2.,* $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i\omega t}$

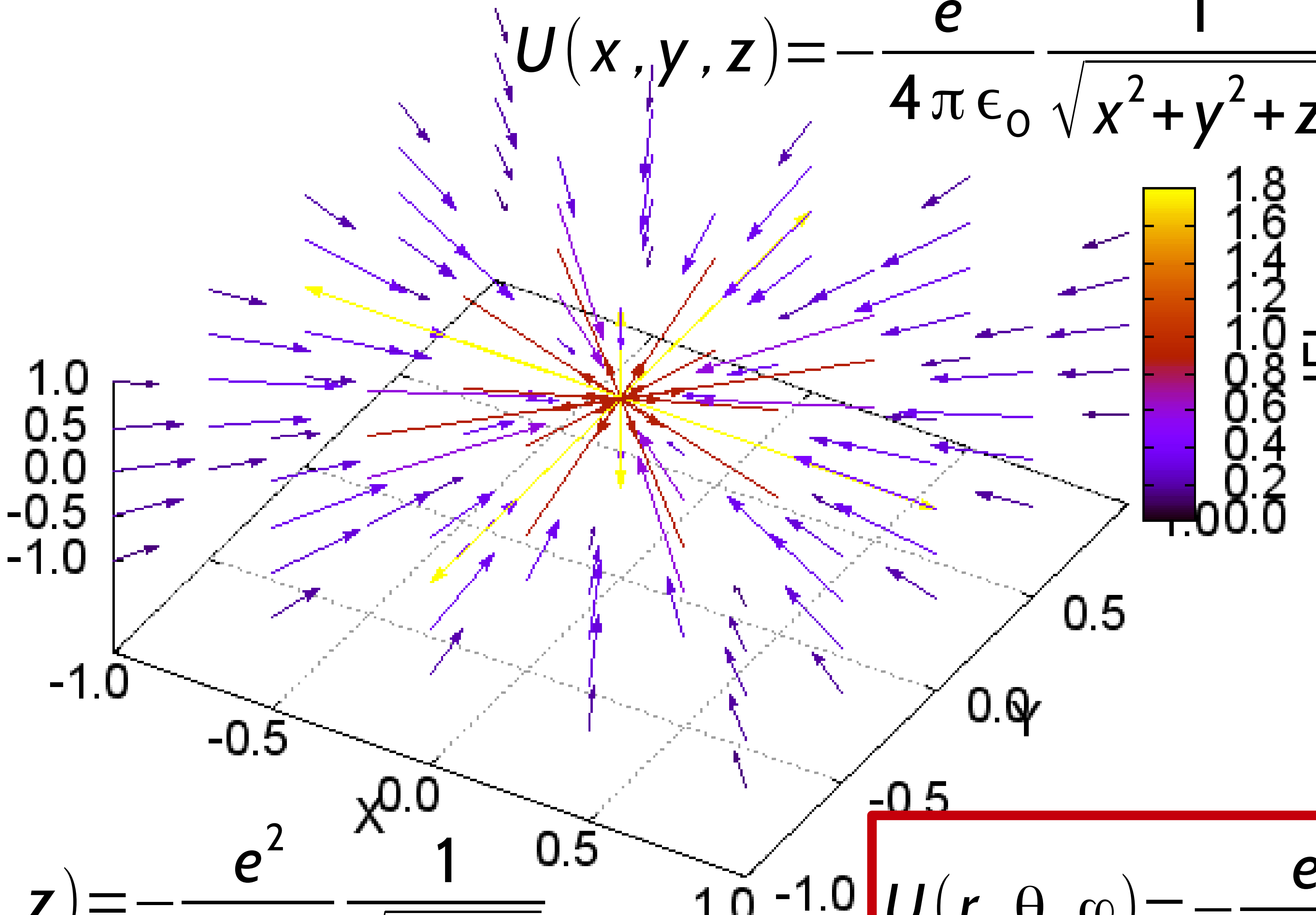
El campo eléctrico es radial y hacia el centro

Potencial central: $U(r,\theta,\varphi) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r}\right)$



El campo eléctrico es radial y hacia el centro

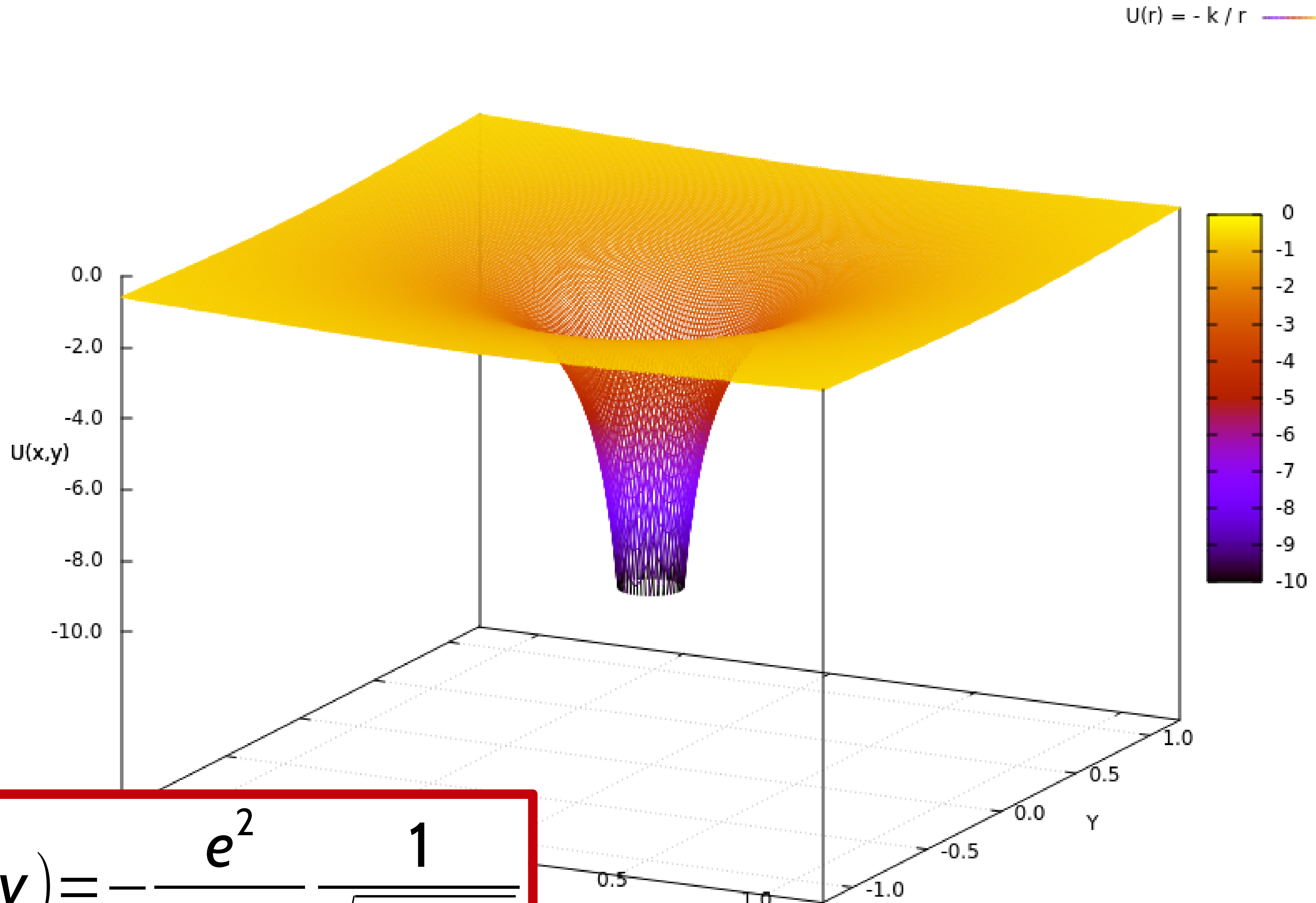
$$U(x,y,z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$



$$U(\rho,\varphi,z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{\rho^2+z^2}}$$

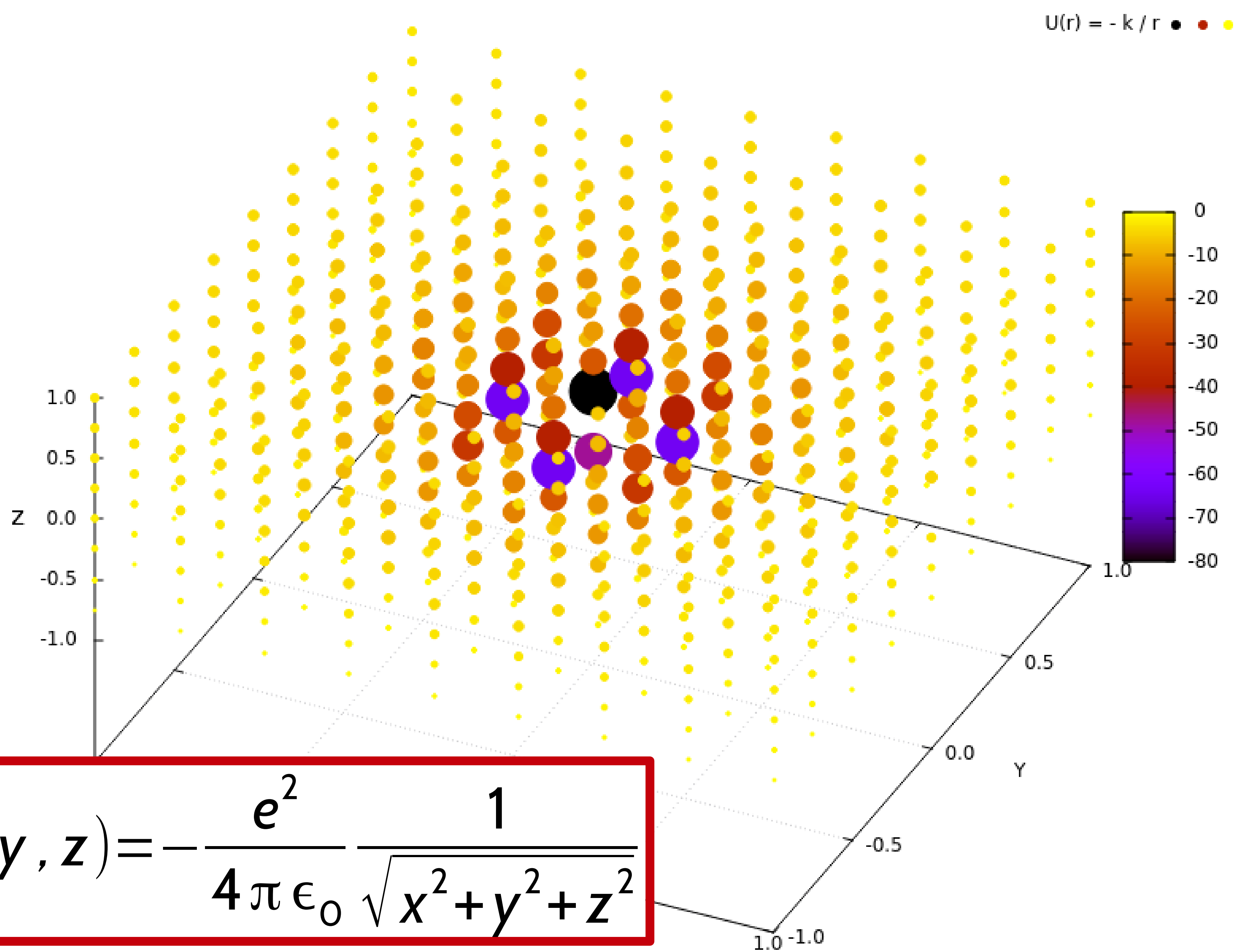
$$\boxed{U(r,\theta,\varphi) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}}$$

¿Y el potencial? Siempre muestran esto (¡es 2D!)



$$U(x,y) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}$$

Pero el verdadero potencial en 3D es así



$$U(x, y, z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

El problema....

- En cambio, el Laplaciano en esféricas queda:

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

una invitación a la diversión y emoción interminables...

$$\boxed{\begin{gathered}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) = \left(\frac{\kappa}{r} - \varepsilon\right)\psi(r,\theta,\varphi) \\ \kappa = -\frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}, \quad \varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}\end{gathered}}$$

No es demencia, es separación de variables

- Al parecer hemos complicado mucho la cosa, pero en esféricas, la solución es separable, es decir:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)T(\theta)F(\varphi)\rightarrow\psi=R\,T\,F$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial r}=\frac{\partial R}{\partial r}TF \qquad \frac{\partial\psi}{\partial\theta}=R\frac{\partial T}{\partial\theta}F \qquad \frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=R\,T\frac{\partial F}{\partial\varphi}$$

- **Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDDP) por Separación de Variables**:
  - Bajo ciertas condiciones, **la solución puede escribirse como un producto de 3 funciones, cada una dependiente de una única variable**
  - **1 EDDP → 3 EDO (ecuaciones diferenciales ordinarias)**

Tres EDOs separadas: radial, cenital y acimutal

$$\boxed{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dT}{d\theta}\right)=\left[-l(l+1)+\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right]T}$$

$$\boxed{\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=\left[l(l+1)+\left(\kappa r-\varepsilon r^2\right)\right]R,\quad \varepsilon=\frac{2mE}{\hbar^2},\kappa=\frac{-2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}}$$

$$\boxed{\frac{d^2F}{d\varphi^2}=-m_l^2F}$$

$$\boxed{\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)T(\theta)F(\varphi)}$$

Las soluciones a estas tres EDOs generan los "famosos" tres números cuánticos de la tabla periódica: *n*, *l*, *m*

Veamos

- La solución acimutal ya la tenemos muy conocida

$$\boxed{\frac{d^2 F}{d\varphi^2} = -m_l^2 F \rightarrow F(\varphi) = A e^{i m_l \varphi}}$$

- La simetría acimutal del problema, necesaria para que Y no sea multivaluada, requiere

$$F(\varphi) = F(\varphi + 2\pi) \rightarrow A e^{i m_l \varphi} = A e^{i m_l (\varphi + 2\pi)}$$

$$\Rightarrow m_l \in \mathbb{Z}, m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

m_l es el número cuántico magnético

Ecuación cenital

Para la parte cenital, son buenas soluciones aquellas T que:

$l \geq |m_l| \Rightarrow \quad l = |m_l|,\ |m_l|+1,\ |m_l|+2, \ldots$

$\Rightarrow l$ acota arriba a m_l: $m_l \leq l \Rightarrow$

$$m = -l, -l+1, -l+2, \ldots 0, \ldots l-1, l$$

o bien

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dT}{d\theta}\right)=\left[-l(l+1)+\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}\right]T$$

y las funciones $T(\theta) \to T(\theta)_{m,l}$:

$$T_{lm} = \operatorname{sen}^{|m_l|}\theta \; A_{l|m_l|}(\cos\theta)$$

Los polinomios $A_{l,m}$ son polinomios.

Dado que ~~ambas~~ T depende de m y l, se puede escribir junto con F:

$$\boxed{Y_{lm}(\theta,\varphi) = T_{lm}(\theta)\; F_m(\varphi)}$$

Armónicos Esféricos.

UOS CO2-1

Armónicos esféricos Y_l^m

Algunos Detalles de los Armónicos Esféricos

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv Y_l^m = N_l^m \, T_l^m(\theta) \, F^m(\varphi)$$

Depende de los parámetros l y m y N_l^m es una normalización

En general se los escribe como.

$$Y_l^m = N_l^m \, P_l^m(\cos\theta) \, e^{im\varphi}$$

Donde $P_l^m(\cos\theta)$ son los polinomios Asociados de Legendre y

$$\boxed{N_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)\,(l-m)!}{4\pi \, (l+m)!}}}$$

Normalización

y están ortonormalizados: $\langle Y_{l'}^{m'} | Y_l^m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} = \iint Y_{l'}^{m'*} \, Y_l^m \, d(\cos\theta) \, d\varphi$

Armónicos Esféricos Y_l^m, l=0, l=1, l=2, l=3, l=4

https://es.wikipedia.org/wiki/Anexo:Tabla_de_arm%C3%B3nicos_esf%C3%A9ricos

Armónicos esféricos con $l = 0$ [editar]

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Armónicos esféricos con $l = 1$ [editar]

$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot e^{-i\varphi}\cdot\sin\theta \quad = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{(x-iy)}{r}$$

$$Y_1^{0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cdot\cos\theta \quad = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cdot\frac{z}{r}$$

$$Y_1^{1}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot e^{i\varphi}\cdot\sin\theta \quad = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{(x+iy)}{r}$$

Armónicos esféricos con $l = 2$ [editar]

$$Y_2^{-2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot e^{-2i\varphi}\cdot\sin^2\theta \quad = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot\frac{(x^2-2ixy-y^2)}{r^2}$$

$$Y_2^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot e^{-i\varphi}\cdot\sin\theta\cdot\cos\theta \quad = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot\frac{(xz-iyz)}{r^2}$$

$$Y_2^{0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\cdot(3\cos^2\theta-1) \quad = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\cdot\frac{(-x^2-y^2+2z^2)}{r^2}$$

$$Y_2^{1}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot e^{i\varphi}\cdot\sin\theta\cdot\cos\theta \quad = \frac{-1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot\frac{(xz+iyz)}{r^2}$$

$$Y_2^{2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot e^{2i\varphi}\cdot\sin^2\theta \quad = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cdot\frac{(x^2+2ixy-y^2)}{r^2}$$

Armónicos esféricos con $l = 3$ [editar]

$$Y_3^{-3}(\theta,\varphi) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\cdot e^{-3i\varphi}\cdot\sin^3\theta \quad = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\cdot\frac{(x^3-3ix^2y-3xy^2+iy^3)}{r^3}$$

$$Y_3^{-2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\cdot e^{-2i\varphi}\cdot\sin^2\theta\cdot\cos\theta \quad = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\cdot\frac{(x^2z-2ixyz-y^2z)}{r^3}$$

$$Y_3^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\cdot e^{-i\varphi}\cdot\sin\theta\cdot(5\cos^2\theta-1) \quad = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\cdot\frac{(-x^3+ix^2y-xy^2+4xz^2+iy^3-4iyz^2)}{r^3}$$

$$Y_3^{0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\cdot(5\cos^3\theta-3\cos\theta) \quad = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\cdot\frac{(-3x^2z-3y^2z+2z^3)}{r^3}$$

$$Y_3^{1}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\cdot e^{i\varphi}\cdot\sin\theta\cdot(5\cos^2\theta-1) \quad = \frac{-1}{8}\sqrt{\frac{21}{\pi}}\cdot\frac{(-x^3-ix^2y-xy^2+4xz^2-iy^3+4iyz^2)}{r^3}$$

$$Y_3^{2}(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\cdot e^{2i\varphi}\cdot\sin^2\theta\cdot\cos\theta \quad = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\cdot\frac{(x^2z+2ixyz-y^2z)}{r^3}$$

$$Y_3^{3}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\cdot e^{3i\varphi}\cdot\sin^3\theta \quad = \frac{-1}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\cdot\frac{(x^3+3ix^2y-3xy^2-iy^3)}{r^3}$$

Armónicos esféricos con $l = 4$ [editar]

$$Y_4^{-4}(\theta,\varphi) = \frac{3}{16}\sqrt{\frac{35}{2\pi}}\cdot e^{-4i\varphi}\cdot\sin^4\theta$$

$$Y_4^{-3}(\theta,\varphi) = \frac{3}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\cdot e^{-3i\varphi}\cdot\sin^3\theta\cdot\cos\theta$$

$$Y_4^{-2}(\theta,\varphi) = \frac{3}{8}\sqrt{\frac{5}{2\pi}}\cdot e^{-2i\varphi}\cdot\sin^2\theta\cdot(7\cos^2\theta-1)$$

$$Y_4^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{3}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\cdot e^{-i\varphi}\cdot\sin\theta\cdot(7\cos^3\theta-3\cos\theta)$$

$$Y_4^{0}(\theta,\varphi) = \frac{3}{16}\sqrt{\frac{1}{\pi}}\cdot(35\cos^4\theta-30\cos^2\theta+3)$$

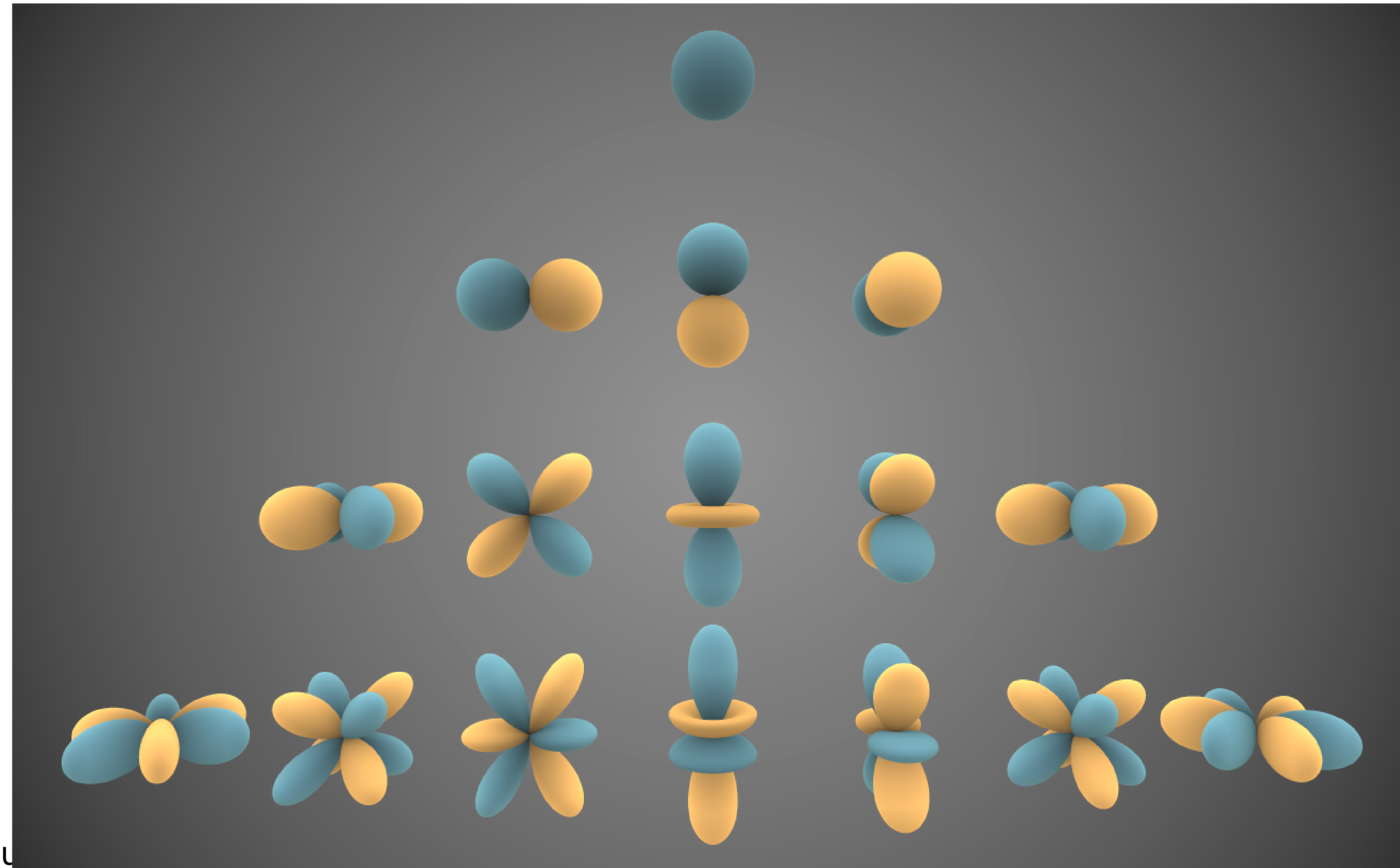
$$Y_4^{1}(\theta,\varphi) = \frac{-3}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\cdot e^{i\varphi}\cdot\sin\theta\cdot(7\cos^3\theta-3\cos\theta)$$

$$Y_4^{2}(\theta,\varphi) = \frac{3}{8}\sqrt{\frac{5}{2\pi}}\cdot e^{2i\varphi}\cdot\sin^2\theta\cdot(7\cos^2\theta-1)$$

$$Y_4^{3}(\theta,\varphi) = \frac{-3}{8}\sqrt{\frac{35}{\pi}}\cdot e^{3i\varphi}\cdot\sin^3\theta\cdot\cos\theta$$

$$Y_4^{4}(\theta,\varphi) = \frac{3}{16}\sqrt{\frac{35}{2\pi}}\cdot e^{4i\varphi}\cdot\sin^4\theta$$

Armónicos Esféricos Y_l^m, l=0, l=1, l=2, l=3, l=4



Notación para *l* (notación espectroscópica)

- Por razones históricas los valores de l reciben nombres:

l =	Nombre
0	**s** (*sharp*)
1	**p** (*principal*)
2	**d** (*diffuse*)
3	**f** (*fundamental*)
4	**g**
5, 6, 7, ...	**h, i, j, ...**

Para la radial:

Solo tiene solución la ecuación radial si
$\epsilon > 0$ ó

$$\epsilon_n = -\left(\frac{\kappa}{2n}\right)^2 \Rightarrow \frac{2\cancel{\mu} E_n}{\cancel{\hbar^2}} = -\frac{1}{n^2}\frac{\cancel{4}\mu^{\cancel{2}} e^4}{\cancel{4}\,4^2\pi^2\epsilon_0^2\hbar^{\cancel{4}\,2}}$$

$$\Rightarrow E_n = -\underbrace{\left(\frac{\mu e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\right)}_{13.6\,eV}\left(\frac{1}{n^2}\right) = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) = \left[l(l+1) + \left(\kappa r - \varepsilon r^2\right)\right]R$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{13.6\,eV}{n^2}}$$

Energía del Átomo de Hidrógeno

n es el número cuántico principal → Energía.

Solución radial

Las soluciones para la parte radial. Las soluciones dependen de n y l:

$$R(r) \equiv R_n^l = \left(\frac{r}{a_0}\right)^l G_n(r/a_0)\, e^{-r/na_0}$$

Donde r es la coordenada y a_0 es el radio de Bohr:

Radio de Bohr.

$$\boxed{a_0 = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{\mu_e e^2} = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}} \quad y \ \alpha = 1/137$$

y G_n son los polinomios de Laguerre.

$$\boxed{G_n = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{n!}{(n-k)!\,(k!)^2} r^k}$$

Polinomios de Laguerre.

$G_0 = 1$; $G_1(r) = -r+1$; $G_2 = \frac{1}{2}(r^2-4r+2)$; $G_3(r) = \frac{1}{6}(-r^3+9r^2-18r+6)$

J

U05C02-4

Los valores de *l*

- Los posibles valores de l están limitados, $l<n$: $l=0, \ldots, n-1$

n | l	l=0	l=1	l=2	l=3	l=4
1	1s	–	–	–	–
2	2s	2p	–	–	–
3	3s	3p	3d	–	–
4	4s	4p	4d	4f	–
5	5s	5p	5d	5f	5g

Soluciones (Beiser)

Table 6.1 Normalized Wave Functions of the Hydrogen Atom for $n = 1, 2,$ and 3*

n	l	m_l	$\Phi(\phi)$	$\Theta(\theta)$	$R(r)$	$\psi(r, \theta, \phi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}\, a_0^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}\, a_0^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}\, a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}\, a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta$
2	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}\, a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{81\sqrt{3}\, a_0^{3/2}}\left(27-18\frac{r}{a_0}+2\frac{r^2}{a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}\, a_0^{3/2}}\left(27-18\frac{r}{a_0}+2\frac{r^2}{a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}$
3	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6}\, a_0^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\cos\theta$
3	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{6}\, a_0^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}\left(6-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-r/3a_0}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{10}}{4}(3\cos^2\theta-1)$	$\frac{4}{81\sqrt{30}\, a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}\, a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}(3\cos^2\theta-1)$
3	2	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30}\, a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$
3	2	±2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm 2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$	$\frac{4}{81\sqrt{30}\, a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}}\frac{r^2}{a_0^2}e^{-r/3a_0}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$

*The quantity $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 = 5.292 \times 10^{-11}$ m is equal to the radius of the innermost Bohr orbit.

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\,T(\theta)\,F(\varphi)\rightarrow\psi(r,\theta,\varphi)=R_n^l(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$$

Números cuánticos

- Número cuántico principal, $n \leftarrow$ Energía

$$\boxed{n = 1, 2, 3, \ldots}$$

- Número cuántico orbital, $l \leftarrow$ Momento Angular

$$\boxed{l = 0, 1, 2, \ldots, n-1}$$

- Número cuántico magnético, $m_l \leftarrow$ Orientación Angular

$$\boxed{m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l}$$

Radio clásico y energía del nivel fundamental

Interpretación de a_0. La ecuación radial era:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) = +\left[l(l+1) + (\kappa r - \epsilon r^2)\right] R$$

Consideremos el nivel fundamental, $n=1$, $l=0$, $m=0$

$$\Rightarrow \Psi_{10}^{0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad y \quad R = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}.$$

$$\Rightarrow \frac{dR}{dr} = \frac{d}{dr}\left(\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}\right) = -\frac{2}{a_0^{5/2}} e^{-r/a_0}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(r^2 \left(\frac{-2}{a_0^{5/2}}\right) e^{-r/a_0}\right) =$$

$$= 2r\left(\frac{-2}{a_0^{5/2}}\right) e^{-r/a_0} + r^2 \left(\frac{-2}{a_0^{5/2}}\right)\left(-\frac{1}{a_0}\right) e^{-r/a_0}$$

$$= \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}\left[\frac{-2r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0^2}\right] = \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right)$$

Radio clásico y energía del nivel fundamental

$$\Rightarrow \cancel{R}\left[\frac{r^2}{a_0^2} - \frac{2r}{a_0}\right] = \left[\ell(\ell+1) + (\kappa r - \epsilon r^2)\right]\cancel{R}$$

$\ell = 0 \Rightarrow$

$$\left[\frac{r^2}{a_0^2} - \frac{2r}{a_0}\right] = \kappa r - \epsilon r^2$$

Agrupando:

$$r^2\left(\frac{1}{a_0^2} + \epsilon\right) - r\left(\frac{2}{a_0} + \kappa\right) = 0.$$

Como esto vale para todo r $\Rightarrow$ Ambos paréntesis deben ser 0.

$$\Rightarrow \frac{1}{a_0^2} = -\epsilon \quad \text{y} \quad \frac{2}{a_0} + \kappa = 0.$$

$$\Rightarrow \frac{2}{a_0} = -\kappa \Rightarrow a_0 = -2/\kappa \Rightarrow a_0 = (+\cancel{2})\left(+\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\cancel{2}me^2}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{a_0 = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{me^2}}$$ Radio de Bohr

Radio clásico y energía del nivel fundamental

y para el otro término:

$$\frac{1}{a_0^2} = -\epsilon \Rightarrow \frac{1}{a_0^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{\hbar^2}{2 m a_0^2} \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2}{\frac{2m(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^4}{m^2 e^4}} \Rightarrow \boxed{E = -\frac{m e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2 \hbar^2}}$$

$$\Rightarrow n=1,\ l=0 \Rightarrow \boxed{E_1 = -13.6\,\mathrm{eV}}$$

Energía del Nivel Fundamental

Hacia el momento angular

- La energía del sistema sólo aparece en la ec. radial:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=\left[l(l+1)+\left(\kappa r-\varepsilon r^2\right)\right]R$$

$$\varepsilon=\frac{2mE}{\hbar^2},\kappa=\frac{-2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$$

- Cinética tenemos dos contribuciones: radial y orbital, pero ahí dice *E* (por las reglas de cuantización!):

$$E=K_r+K_o+U\rightarrow E=K_r+K_o-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- Y debería ser K_r solamente, ¿no? Veamos que pasa:

Número cuántico orbital

Trabajemos con el 2º término:

$$\left[l(l+1) + (\kappa r - \epsilon r^2)\right] = l(l+1) + \left(-\frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\cdot r - \frac{2mE}{\hbar^2} r^2\right) =$$

$$= l(l+1) - \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} r - \frac{2m}{\hbar^2}\left(K_r + K_o - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) r^2$$

$$= l(l+1) - \cancel{\frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}} r - \frac{2mK_r}{\hbar^2} r^2 - \frac{2m}{\hbar^2} K_o r^2 + \cancel{\frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}} r^{\cancel{2}}$$

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

Ec. radial.

Para que desaparezca la parte orbital, debemos requerir:

$$l(l+1) - \frac{2mK_o}{\hbar^2} r^2 = 0.$$

Número cuántico orbital

Con lo cual:

$$\frac{2m}{\hbar^2} K_o r^2 = l(l+1)$$

$$\Rightarrow \boxed{K_o = \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1)}$$

Energía cinética orbital.

y dado que $L = m v_\theta r$ y $K_o = \frac{1}{2} m v_\theta^2$

$$\Rightarrow K_o = \frac{1}{2} m v_\theta^2 \frac{mr^2}{mr^2} \Rightarrow K_o = \frac{1}{2} \frac{\overbrace{m^2 v_\theta^2 r^2}^{L^2}}{m r^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{K_o = \frac{L^2}{2mr^2}}$$

y entonces:

$$\frac{L^2}{\cancel{2m r^2}} = \frac{\hbar^2}{\cancel{2m r^2}} l(l+1) \Rightarrow L^2 = l(l+1)\hbar^2 \Rightarrow \boxed{L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{L = \sqrt{l(l+1)}\;\hbar}$$

Momento Angular Cuantizado

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