BKC 0103-15 – Física Quântica – Informações complementares

Integrais para função de onda radial do hidrogênio

Em geral, em problemas que envolvem a parte radial da função de onda para átomos de hidrogênio.

$$I(n) = \int_0^{+\infty} x^n e^{-\frac{x}{\alpha}} dx\,, \quad \text{com n = 1,2,3...}$$

Esta integral pode ser resolvida por parte, mas podemos obter a solução para o caso geral por meio da indução. Comecemos buscando a solução da integral:

$$I(1) = \int_0^{+\infty} x^1 e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = -\,\alpha x e^{-\frac{x}{\alpha}}\Big|_{x=0}^{x=+\infty} + \alpha \int_0^{+\infty} e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = \alpha^2 e^{-\frac{x}{\alpha}}\Big|_{x=0}^{x=+\infty} = \alpha^2$$

Usamos acima que: $u = x \;\; du = dx$ e $dv = e^{-\frac{x}{\alpha}} dx \;\; v = \alpha e^{-\frac{x}{\alpha}}$ e a definição da integração por partes: $\int u dv = uv - \int v du$. Se considerarmos o caso n=2:

$$I(2) = \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = -\,\alpha x^2 e^{-\frac{x}{\alpha}}\Big|_{x=0}^{x=+\infty} + 2\alpha \int_0^{+\infty} x e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = 2\alpha\, I(1) = 2\alpha^3$$

Do mesmo modo, para n=3:

$$I(3) = \int_0^{+\infty} x^3 e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = -\,\alpha x^3 e^{-\frac{x}{\alpha}}\Big|_{x=0}^{x=+\infty} + 3\alpha \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = 3\alpha\, I(2) = 6\alpha^4$$

Assim, por indução, podemos ver que a integral para um dado n será:

$$\boxed{\boldsymbol{I(n) = \int_0^{+\infty} x^n e^{-\frac{x}{\alpha}} dx = n!\;\alpha^{n+1}} \quad , \quad \textbf{com n = 1,2,3...}}$$

Observação: É importante notar que esta integral foi calculada entre os valores zero e infinito, no qual temos que o primeiro termo da integração por partes é sempre nulo. Em um caso mais geral, entre dois pontos quaisquer, teríamos outros termos não nulos para contabilizar e o resultado final seria mais elaborado.