C.Física Moderna: Solución Taller 11

Átomo de Hidrógeno

1 Ecuación de Schrödinger vs modelo de Bohr

Una de las funciones posibles para el estado $2p$ ($n = 2$, $\ell = 1$) del átomo de hidrógeno es:

$$\psi_{210} = \frac{Are^{-\frac{r}{2a_0}}}{a_o}\cos\theta$$

Calcular para ese estado:

1. La constante de normalización A en términos de a_0.
2. El valor esperado $\langle r\rangle$ en términos de a_0.
3. La incertidumbre Δr en la posición del electrón en términos de a_0.

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2}$$

4. De acuerdo a la teoría de Bohr, el valor de los radios de las órbitas permitidas viene dada por $r_n = n^2 a_0$, siendo n el número cuántico y a_0 el radio del estado base. ¿El radio para $n = 2$ se encuentra dentro del intervalo establecido por el valor esperado y la incertidumbre (el intervalo $[\langle r\rangle - \Delta r, \langle r\rangle + \Delta r]$)?

Ayuda: $\int_0^\infty x^n e^{-ax}\,dx = n!/a^{n+1}$

Solución

Usamos la condición de normalización para calcular el valor de la constante A.

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\Psi^*\Psi r^2 dr\sin\theta d\theta d\phi = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\left(\frac{Are^{-\frac{r}{2a_0}}}{a_0}\cos\theta\right)^2 r^2 dr\sin\theta d\theta d\phi \\
1 &= \frac{A^2}{a_0^2}\left[\int_0^{2\pi} d\phi\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}\,dr\right] = \frac{2\pi A^2}{a_0^2}\left[\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}\,dr\right] \\
1 &= \frac{2\pi A^2}{a_0^2}\left[-\frac{\cos^3\theta}{3}\bigg|_0^{\pi}\int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}\,dr\right] = \frac{4\pi A^2}{3a_0^2}\int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}\,dr = \frac{4\pi A^2}{3a_0^2}\left(\frac{4!}{\left(\frac{1}{a_0}\right)^5}\right) \\
1 &= \frac{4\pi A^2}{3a_0^2}\left(24a_0^5\right) \quad\rightarrow\quad 1 = 32\pi A^2 a_0^3 \quad\rightarrow\quad A = \frac{1}{\sqrt{32\pi}a_0^{\frac{3}{2}}}
\end{aligned}$$

Por lo tanto la función de onda es:

$$\Psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}a_0^{\frac{5}{2}}} re^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta$$

Para calcular el valor esperado de la posición $\langle r\rangle$, usamos:

$$\begin{aligned}
\langle r\rangle &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}a_0^{\frac{5}{2}}} re^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta\right) r\left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}a_0^{\frac{5}{2}}} re^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta\right) r^2 dr\sin\theta d\theta d\phi \\
\langle r\rangle &= \frac{1}{32\pi a_0^5}\left[\int_0^{2\pi} d\phi\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\int_0^{\infty} r^5 e^{-\frac{r}{a_0}}\,dr\right] \\
\langle r\rangle &= \frac{1}{16a_0^5}\left[-\frac{\cos^3\theta}{3}\bigg|_0^{\pi}\left(\frac{5!}{\frac{1}{a_0^6}}\right)\right] = \frac{1}{16a_0^5}\left(\frac{2}{3}\right)\left(120a_0^6\right) = 5a_0
\end{aligned}$$

Para calcular la incertidumbre Δr, se necesita el valor esperado de $\langle r^2 \rangle$, veamos:

$$\begin{aligned}
\langle r^2 \rangle &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}a_0^{\frac{5}{2}}} re^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta\right) r^2 \left(\frac{1}{\sqrt{32\pi}a_0^{\frac{5}{2}}} re^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta\right) r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \\
\langle r^2 \rangle &= \frac{1}{32\pi a_0^5}\left[\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^6 e^{-\frac{r}{a_0}} dr\right] \\
\langle r^2 \rangle &= \frac{1}{16a_0^5}\left[-\frac{\cos^3\theta}{3}\bigg|_0^{\pi}\left(\frac{6!}{\frac{1}{a_0^7}}\right)\right] = \frac{1}{16a_0^5}\left(\frac{2}{3}\right)\left(720a_0^7\right) = 30a_0^2 \\
\Delta r &= \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \sqrt{30a_0^2 - (5a_0)^2} = \sqrt{5a_0^2} = \sqrt{5}a_0
\end{aligned}$$

Usando la teoría de Bohr, el radio de la órbita permitida para $n = 2$ es:

$$r_2 = 2^2 a_0 = 4a_0$$

Los valores de los radios de Bohr corresponden a los valores mas probables, y deben estar dentro del rango establecido alrededor del valor esperado $\langle r \rangle \pm \Delta r$, veamos:

$$\begin{aligned}
\langle r \rangle \pm \Delta r = 5a_0 \pm \sqrt{5}a_0 \quad \therefore \quad \langle r \rangle \pm \Delta r &= (5 \pm \sqrt{5})a_0 \\
\left[(5-\sqrt{5})a_0, (5+\sqrt{5})a_0\right] &= [2.764a_0, 7.236a_0] \\
2.764a_0 < 4a_0 &< 7.236a_0
\end{aligned}$$

Luego el valor que predice Bohr se encuentra dentro del rango establecido del valor esperado para éste número cuántico.

---

2 Cuantización del momento angular

Para un estado excitado del átomo de hidrógeno.

1. Demuestre que el ángulo mínimo que puede formar el vector momento angular $\vec{L}$ con el eje z es:

$$(\theta_L)_{min} = \arccos\left(\frac{n-1}{\sqrt{n(n-1)}}\right)$$

2. ¿Cuál es la ecuación correspondiente para $(\theta_L)_{max}$, el mayor ángulo posible entre $\vec{L}$ y el eje z?

Solución

El ángulo θ_L es el que se forma entre el vector $\vec{L}$ y el eje z. Luego:

$$\cos\theta_L = \frac{L_z}{L} \quad \rightarrow \quad \theta_L = \arccos\left(\frac{L_z}{L}\right)$$

El ángulo más pequeño $(\theta_L)_{min}$ se logra cuando L_z tiende al valor de L, esto se obtiene con las siguientes condiciones:

$$
\begin{aligned}
\ell = n-1 \qquad &; \qquad m_\ell = \ell = n-1 \\
L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = \sqrt{(n-1)n}\hbar \qquad &; \qquad L_z = m_\ell \hbar = (n-1)\hbar \\
(\theta_L)_{min} = \arccos\left(\frac{(n-1)\hbar}{\sqrt{(n-1)n}\hbar}\right) \qquad &\therefore \qquad (\theta_L)_{min} = \arccos\left(\frac{(n-1)}{\sqrt{(n-1)n}}\right) \\
(\theta_L)_{min} = \arccos\left(\sqrt{\frac{n-1}{n}}\right) \qquad &\therefore \qquad (\theta_L)_{min} = \arccos\left(\sqrt{1-\frac{1}{n}}\right)
\end{aligned}
$$

Obsérvese que $(\theta_L)_{min}$ se aproxima a $0°$ cuando $n \to \infty$.
Para calcular el ángulo más grande $(\theta_L)_{max}$, se logra con las siguientes condiciones:

$$
\begin{aligned}
\ell = n-1 \qquad &; \qquad m_\ell = -\ell = -(n-1) \\
L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar = \sqrt{(n-1)n}\hbar \qquad &; \qquad L_z = m_\ell \hbar = -(n-1)\hbar \\
(\theta_L)_{max} = \arccos\left(\frac{-(n-1)\hbar}{\sqrt{(n-1)n}\hbar}\right) \qquad &\therefore \qquad (\theta_L)_{max} = \arccos\left(\frac{-(n-1)}{\sqrt{(n-1)n}}\right) \\
(\theta_L)_{max} = \arccos\left(-\sqrt{\frac{n-1}{n}}\right) \qquad &\therefore \quad (\theta_L)_{max} = \arccos\left(-\sqrt{1-\frac{1}{n}}\right)
\end{aligned}
$$

Obsérvese que $(\theta_L)_{max}$ se aproxima a $180°$ cuando $n \to \infty$.

FORMULAS ÚTILES

: Condición de Normalización: $\displaystyle\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \psi^* \psi r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi = 1$

: Valores esperados: $\displaystyle\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \psi^* \hat{\mathcal{O}} \psi \; \underbrace{r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi}_{dV}$

: Energias Permitidas: $E_n = -\dfrac{13.6}{n^2}\; eV$

: Momento Angular: $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar \quad L_z = m_\ell \hbar \quad \cos\theta = \dfrac{L_z}{L}$

Número Cuántico	Símbolo	Posibles Valores
Principal	n	1,2,3,...
Orbital	ℓ	0,1,2,...., n-1
Magnético	m_ℓ	$0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm \ell$