

1. Construcción de la función de onda

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3 \frac{0!}{2 \cdot 1!}} e^{-r/a_0} L_0^{(1)}\left(\frac{2r}{a_0}\right) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

Tenemos

$$L_0^{(1)}(x) = e^x \frac{x^{-1}}{0!} \frac{d^0}{dx^0} (e^{-x} x^1) = 1$$

lo que implica

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3 \frac{1}{2}} e^{-r/a_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

Para el segundo caso, tenemos

$$\psi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{8a_0^3}} e^{-r/2a_0} L_1^{(1)}\left(\frac{r}{a_0}\right) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

con

$$L_1^{(1)}(x) = e^x x^{-1} \frac{d}{dx} (e^{-x} x^2) = 2 - x$$

y finalmente

$$\psi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

2. Configuración del estado fundamental

a/ Si no nos preocupamos de los ángulos, tendemos que integrar con respecto a los ángulos, es decir

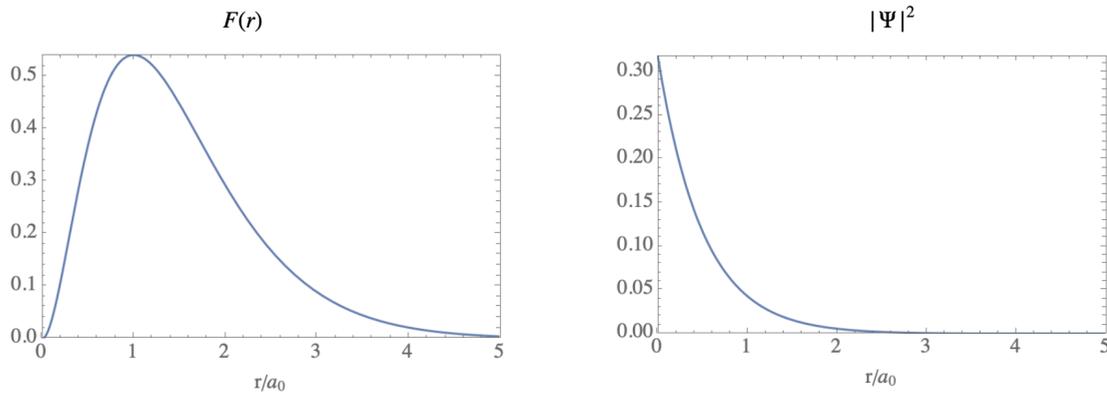
$$\begin{aligned} F(r) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} \end{aligned}$$

Para estudiar esta función y encontrar su máximo, debemos derivarla

$$F'(r) = \frac{4}{a_0^3} e^{-2ra_0} \left(2r - \frac{2}{a_0} r^2\right)$$

es cero cuando $r = 0$ y $r = a_0$. El máximo es cuando $r = a_0$, lo que corresponde a la predicción de Bohr.

b/ La probabilidad de encontrar la partícula en un punto es $|\Psi(r, \theta, \phi)|^2$



Aunque $|\Psi(r, \theta, \phi)|^2$ nos dice que la más gran probabilidad de encontrar el electrón está en $r = 0$, $F(r)$ nos dice que es en $r = a_0$. La razón es que aunque en $r = a_0$ y un cierto θ y ϕ la probabilidad de encontrar el electrón es baja, tenemos varias posibilidades considerando todas las posiciones en el mismo r pero con θ y ϕ diferentes. Eso es lo que nos indica $F(r)$ ya que hemos integrado sobre los ángulos, es decir que la partícula puede encontrarse en cualquier ángulo, por lo tanto sumando la probabilidad de encontrarse en cada uno de estos ángulos nos da finalmente una probabilidad mayor que en $r = 0$ donde es un solo punto.

c/

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \iiint r |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^\infty r F(r) dr = \frac{3}{2} a_0 \end{aligned}$$

3. Configuración del estado $n = 2$

a/ Para la probabilidad radial, tenemos

$$F(r) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

lo que nos da

$$\begin{aligned} F_{2,0,0}(r) &= \frac{1}{32\pi a_0^3} r^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{32\pi a_0^3} r^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} 4\pi \\ &= \frac{1}{8a_0^3} r^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} \end{aligned}$$

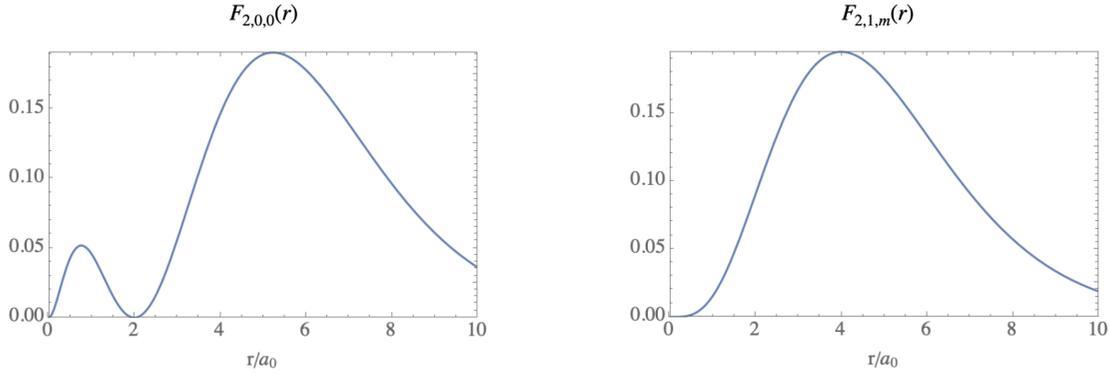
$$\begin{aligned} F_{2,1,-1}(r) &= \frac{1}{64\pi a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} r^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{64\pi a_0^3} r^4 e^{-r/a_0} \frac{4}{3} 2\pi \\ &= \frac{1}{24a_0^3} r^4 e^{-r/a_0} \end{aligned}$$

$$= F_{2,1,1}(r)$$

$$\begin{aligned} F_{2,1,0}(r) &= \frac{1}{32\pi a_0^3} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} r^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{32\pi a_0^5} r^4 e^{-r/a_0} \frac{2}{3} 2\pi \\ &= \frac{1}{24a_0^5} r^4 e^{-r/a_0} \\ &= F_{2,1,1}(r) = F_{2,1,-1}(r) \end{aligned}$$

La probabilidad radial depende solamente de n y ℓ , no depende de m .

El valor de ℓ más grande ($\ell = 1$) coincide con la predicción de Bohr.



b/ La probabilidad de encontrar la partícula en un punto es

$$\begin{aligned} |\psi_{2,0,0}|^2 &= \frac{1}{32\pi a_0^5} (2a_0 - r)^2 e^{-r/a_0} \\ |\psi_{2,1,-1}|^2 &= \frac{1}{64\pi a_0^5} r^2 e^{-r/a_0} \sin^2 \theta \\ |\psi_{2,1,0}|^2 &= \frac{1}{32\pi a_0^5} r^2 e^{-r/a_0} \cos^2 \theta \\ |\psi_{2,1,1}|^2 &= |\psi_{2,1,-1}|^2 \end{aligned}$$

c/ En promedio el electrón se encuentra en

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \iiint r |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^\infty r F(r) dr \end{aligned}$$

es decir

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{(2,0,0)} &= \int_0^\infty r F_{2,0,0}(r) dr = \frac{1}{8a_0^3} \int_0^\infty r^3 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} dr = 6a_0 \\ \langle r \rangle_{(2,1,-1)} &= \langle r \rangle_{(2,1,0)} = \langle r \rangle_{(2,1,1)} = \int_0^\infty r F_{2,1,-1}(r) dr = \frac{1}{24a_0^5} \int_0^\infty r^5 e^{-r/a_0} dr = 5a_0 \end{aligned}$$

En promedio un electrón en la órbita p está más cercano al centro que en la órbita s .