Leticia Jaén Tapia
Víctor Babiano Suárez

Queremos hallar la distancia media del electrón respecto al núcleo:

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty drr^3\left[R_{nl}(\alpha r)\right]^2$$

sabiendo que:

$$R_{nl}(r) = \left[\alpha^2\frac{(n-l-1)!}{2n(n+1)!}\right]^{1/2} e^{-\alpha r/2}(\alpha r)L_{n-l-1}^{2l+1}(\alpha r)$$

Para ello usamos la siguiente definición de los polinomios de Laguerre:

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(n+\alpha)!}{(n-k)!(n+\alpha)!k!}x^k$$

Sustituimos R_{nl} en $\langle r\rangle$:

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty dr\ r^3\left[\alpha^3\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]e^{-\alpha r}(\alpha r)\left\{L_{n-l-1}^{2l+1}(\alpha r)\right\}^2$$

Sacamos de la integral los términos factoriales que no dependen de "r":

$$\langle r\rangle = \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\int_0^\infty dr\ (\alpha r)^{2l+3}e^{-\alpha r}\left\{L_{n-l-1}^{2l+1}(\alpha r)\right\}^2$$

Agrupamos $(\alpha r)^{2l+3}$ como más nos convenga para que se parezca a la relación de recurrencia:

$$xL_n^\alpha(x) = -(n+1)L_{n+1}^\alpha(x)+(2n+\alpha+1)L_n^\alpha(x)-(n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(x)$$

Así nos queda

$$\langle r\rangle = \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\int_0^\infty dr\ (\alpha r)^2(\alpha r)^{2l+1}e^{-\alpha r}\left\{L_{n-l-1}^{2l+1}(\alpha r)\right\}^2$$

Llamamos $x=\alpha r$, por tanto, $\alpha dr = dx \Rightarrow dr = \frac{1}{\alpha}dx$, teniendo:

$$\langle r\rangle = \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\int_0^\infty \frac{1}{\alpha}dx\ \mathrm{x}^{2l+1}e^{-x}\left\{\mathrm{x}\,L_{n-l-1}^{2l+1}(x)\right\}^2$$

Sacamos α por ser constante:

$$\langle r\rangle = \frac{(n-l-1)!}{\alpha 2n(n+l)!}\int_0^\infty dx\ \mathrm{x}^{2l+1}e^{-x}\left\{\mathrm{x}\,L_{n-l-1}^{2l+1}(x)\right\}^2$$

Particularizando para nuestro caso la anterior relación de recurrencia:

$$xL_{n-l-1}^{2l+1}(x) = -(n-l)L_{n-l}^{2l+1}(x) + (2n)L_{n-l-1}^{2l-1}(x) - (n+l)L_{n-l-2}^{2l+1}(x)$$

Elevamos esta expresión al cuadrado, teniendo en cuenta la propiedad del producto escalar:

$$\int_0^\infty dy\ y^\alpha e^{-y}L_n^\alpha L_m^\alpha = \delta_{nm}\frac{(\alpha+n)!}{n}$$

es decir, quedando los términos $L_n^\alpha \cdot L_m^\alpha = \left[L_n^\alpha\right]^2$, luego:

$$\left\{xL_{n-l-1}^{2l+1}(x)\right\}^2 = (n-l)^2\left[L_{n-1}^{2l+1}(x)\right]^2 + (2n)^2\left[L_{n-l-1}^{2l-1}(x)\right]^2 - (n+l)^2\left[L_{n-l-2}^{2l+1}(x)\right]^2$$

Sustituimos en la expresión de $\langle r\rangle$:

$$\langle r\rangle = \frac{(n-l-1)!}{\alpha 2n(n+l)!}\int_0^\infty dx\ \mathrm{x}^{2l+1}e^{-x}\left\{(n-l)^2\left[L_{n-1}^{2l+1}(x)\right]^2 + (2n)^2\left[L_{n-l-1}^{2l-1}(x)\right]^2 - (n+l)^2\left[L_{n-l-2}^{2l+1}(x)\right]^2\right\}$$

Separamos en tres integrales:

$$\langle r\rangle = \frac{(n-l-1)!}{\alpha 2n(n+l)!}\left\{\begin{array}{l}(n-l)^2\int_0^\infty dx\ \mathrm{x}^{2l+1}e^{-x}\left[L_{n-1}^{2l+1}(x)\right]^2 + (2n)^2\int_0^\infty dx\ \mathrm{x}^{2l+1}e^{-x}\left[L_{n-l-1}^{2l-1}(x)\right]^2 + \\ +(n+l)^2\int_0^\infty dx\ \mathrm{x}^{2l+1}e^{-x}\left[L_{n-l-2}^{2l+1}(x)\right]^2\end{array}\right\}$$

Sabiendo que:

$$\int_0^\infty dx\ x^a e^{-x}\left\{L_n^\alpha(x)\right\}^2 = \frac{(\alpha+n)!}{n!}$$

Particularizando para nuestro caso:

$$\int_0^\infty dx\, x^a e^{-x} \left\{ L_n^\alpha(x) \right\}^2 = \frac{\left((2l+1)+(n-l-1)\right)!}{(n-l-1)!} = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}$$

Aplicándolo en la expresión que tenemos para <r>:

$$\langle r \rangle = \frac{(n-l-1)!}{\alpha 2n (n+l)!} \left\{ (n-l)^2 \frac{(n+l+1)!}{(n-l)!} + (2n)^2 \frac{(n+l)}{(n-l-1)!} + (n+l)^2 \frac{(n+l-1)!}{(n-l-2)!} \right\}$$

Operamos:

$$\langle r \rangle = \frac{(n-l-1)!}{\alpha 2n (n+l)!} \left\{ (n-l)^2 \frac{(n+l+1)(n+l)(n+l-1)!}{(n-l)(n-l-1)(n-l-2)!} + (2n)^2 \frac{(n+l)(n-l-1)!}{(n-l-1)(n-l-2)!} + (n+l)^2 \frac{(n+l-1)!}{(n-l-2)!} \right\}$$

$$\langle r \rangle = \frac{(n-l-1)!(n+l)(n+l-1)!}{\alpha 2n (n+l)!(n-l-2)!} \left\{ (n-l) \frac{(n+l+1)}{(n-l-1)} + (2n)^2 \frac{1}{(n-l-1)} + (n+l) \right\}$$

$$\langle r \rangle = \frac{(n-l-1)(n-l-2)!(n+l)!}{\alpha 2n (n+l)!(n-l-2)!} \left\{ (n-l) \frac{(n+l+1)}{(n-l-1)} + (2n)^2 \frac{1}{(n-l-1)} + (n+l) \right\}$$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{\alpha 2n} \left\{ (n-l)(n+l+1) + (2n)^2 + (n+l)(n+l+1) \right\}$$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{\alpha 2n} \left\{ n^2 + nl + n - nl - l^2 + 4n^2 + n^2 - nl - n + nl - l^2 - l \right\}$$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{\alpha 2n} \left\{ 6n^2 - 2l^2 - 2l \right\}$$

$$\langle r \rangle = \frac{1}{\alpha n} \left\{ 3n^2 - l^2 - l \right\}$$

Finalmente obtenemos:

$$\langle r \rangle = \frac{3n^2 - l(l+1)}{\alpha n}$$

Para resolver el ejercicio hemos utilizado el significado de los polinomios de Laguerre como ya hemos indicado al principio. Sin embargo, en los polinomios definidos en clase hay una pequeña variación:

$$L_n^{\alpha}(x)=\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \frac{n!(n+\alpha)!}{(n-k)!(\alpha+k)!k!}x^k$$

Teniendo esto en cuenta y la variación que se daría en la propiedad del producto escalar:

$$\int_0^{\infty} dy\, y^{\alpha}\, e^{-y}\, L_n^{\alpha}\, L_m^{\alpha}=\delta_{nm}(\alpha+n)!\,n!$$

Lo que nos lleva al siguiente resultado:

$$<r>=\frac{3n^2-l(l+1)}{\alpha n}\left[(n-l-1)!\right]^2$$