Carlos Rodríguez Fernández
Ismael Granero Maraña
Isabel María Alfonso Naranjo

15. La parte radial normalizada de la función de onda del átomo de Hidrógeno viene dada por:

$$R_{nl}(\alpha r) = \left[\alpha^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\right]^{1/2} e^{-\alpha r/2} (\alpha r)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\alpha r)\,,$$

Donde α es una constante. Calcular la distancia media del electrón respecto del núcleo:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr \cdot r^3 \cdot [R_{nl}(\alpha r)]^2.$$

Lo que tenemos que hacer es evaluar la integral dada, así que vamos a introducir $R_{nl}(r)$ en $\langle r \rangle$:

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

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

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

La razón de escribirlo así es porque conocemos una regla de recurrencia para los polinomios de Laguerre que verifica:

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

En nuestro problema:

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

Luego, la regla de recurrencia quedaría como:

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

Haciendo en la integral $\langle r \rangle$ el cambio de variable:

$$\alpha r \to x$$
$$\alpha dr = dx\,;\, dr = \frac{dx}{\alpha}$$

se obtiene que:

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

Y ya estaríamos en disposición de aplicar la regla de recurrencia. Puede parecer un tanto engorroso desarrollar el término cuadrático de $x \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$, pero no lo es tanto si aprovechamos la propiedad de ortogonalidad de estos polinomios:

Usando la definición de polinomios de Laguerre:

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

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

, siendo:

$$\|L_n^\alpha(x)\|^2 = \frac{(\alpha+n)!}{n!}$$

la norma.

En nuestro ejercicio,

$$\alpha \equiv 2l+1$$
$$n \equiv n-l-1$$

, luego:

$$\int_0^\infty dx \cdot x^{2l+1} \cdot e^{-x} \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \cdot L_{m-l-1}^{2l+1}(x) \ = \delta_{nm} \frac{(l+n)!}{(n-l-1)!}$$

, siendo:

$$\left\| L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \right\|^2 = \frac{(l+n)!}{(n-l-1)!}$$

$$\left\| L_{n-l}^{2l+1}(x) \right\|^2 = \frac{(l+n+1)!}{(n-l)!}$$

$$\left\| L_{n-l-2}^{2l+1}(x) \right\|^2 = \frac{(l+n-1)!}{(n-l-2)!}$$

las normas.

Por tanto, en el término cuadrático $\left[x \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}(x)\right]^2$ no van a sobrevivir los productos cruzados, y su desarrollo quedará como sigue:

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

Introduciendo en la integral:

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

es decir, resulta la suma de tres integrales, que no son otra cosa que la norma de cada polinomio de Laguerre por un factor multiplicativo:

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

El problema en este punto está básicamente resuelto, tan sólo es necesario simplificar la expresión. Lo que vamos a hacer es el MCM en el corchete y sumar dentro, para simplificar con el factor común:

$$\langle r \rangle = \frac{(n-l-1)!}{2\alpha n(n+l)!}\left[\begin{array}{c} (n-l)^2 \cdot \frac{(n+l+1)(n+l)(n+l-1)!}{(n-l)(n-l-1)(n-l-2)!} + \\ +(2n)^2 \cdot \frac{(n+l)(n+l-1)!}{(n-l-1)(n-l-2)!} + \\ +(n+l)^2 \frac{(n+l-1)!}{(n-l-2)!} \end{array} \right] =$$

$$= \frac{(n-l-1)!\,(n+l)(n+l-1)!}{2\alpha n(n+l)!\,(n-l-2)!}\left[(n-l)^2 \cdot \frac{(n+l+1)}{(n-l)(n-l-1)} + \frac{(2n)^2}{(n-l-1)} + (n+l)\right] =$$

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

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

$$= \frac{6n^2 - 2l^2 - 2l}{2\alpha n} = \frac{3n^2 - l(l+1)}{\alpha n}$$

En conclusión, la distancia media del electrón respecto del núcleo en el átomo de Hidrógeno es:

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