MÉTODOS DE LA FÍSICA MATEMÁTICA

Jesús Manuel Gómez Romero
Mónica Capilla Alba
José Antonio Paredes Moreno

HOJA 2: EJERCICIO 14

La parte radial normalizada de la función de onda del átomo de hidrógeno viene dada por

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

donde α ***es una cte. Calcular la distancia media del electrón respecto al núcleo:***

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

Sustituimos la expresión dada para $R_{nl}(r)$ en $\langle r \rangle$:

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

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

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

Además, podemos separar en potencias $(\alpha r)^{2l+3}$ según nos convenga:

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

Llamamos $y = \alpha r$ y, por tanto, $\alpha \, dr = dy \quad \Rightarrow \quad dr = \frac{1}{\alpha} dy$. Entonces tenemos:

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

Como α es constante, podemos sacarla fuera de la integral:

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

Utilizamos la relación de recurrencia siguiente, que mantiene la misma α:

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

Particularizamos para nuestro caso:

$$y\; L_{n-l-1}^{2l+1}(y) \;=\; -(n-l)L_{n-l}^{2l+1}(y) \;+\; (2n)L_{n-l-1}^{2l+1}(y) \;-\; (n+l)L_{n-l-2}^{2l+1}(y)$$

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, sólo sobreviven los términos $L_n^\alpha \cdot L_n^\alpha \;\equiv\; \left[L_n^\alpha\right]^2$, luego:

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

Sustituimos esta combinación lineal en la integral:

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

Separamos ahora la integral en tres integrales:

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

Sabemos que:

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

Particularizando para este caso:

$$\int_0^\infty dy \;\; y^{2l+1} \;\; e^{-y} \;\; \left\{L_{n-l-1}^{2l+1}(y)\right\}^2 \;=\; \frac{((2l+1)+(n-l-1))!}{(n-l-1)!} \;=\; \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}$$

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

Obteniendo como resultado final:

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

*NOTA

Para realizar el ejercicio hemos utilizado la siguiente definición de los polinomios de Laguerre:

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

En cambio, los polinomios que hemos definido en clase son de la forma:

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

que difieren en un *n!* en el numerador.

Si se hacen las cuentas con esta última definición, la diferencia existente hará aparición cuando tomemos las propiedades del producto escalar, ya que en este caso tendríamos:

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

A efectos del resultado final, en este caso sería:

$$\boxed{\langle r\rangle = \frac{3n^2 - l\,(l+1)}{\alpha\; n}\left[(n-l-1)!\right]^2}$$