SOLUCIÓN control n^o 4

Dado el siguiente orbital del átomo de hidrógeno:

$$\psi = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_o}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-\frac{r}{2a_o}}$$

1. Encontrar sus números cuánticos y decir de que orbital se trata.
2. Usando los resultados del apartado anterior, decir cuánto vale el módulo del momento angular del electrón cuando está en este estado.
3. Decir cuánto vale la proyección sobre el eje z del momento angular del electrón cuando está en este estado.
4. Calcular el valor más probable de la distancia entre el electrón y el núcleo.
5. Calcular el valor medio de r.

Datos:

$$\int_0^\infty r^n\, e^{-\alpha r}\, dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \qquad \text{con } n \text{ entero } \geq 0$$

Solución

1. Los números cuánticos son: n=2, ℓ=0, m_ℓ=0. El orbital es: $2s$.
2. El módulo del momento angular es: $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} = \sqrt{0}\hbar$ =0
3. La proyección del momento angular sobre el eje z es: $L_z = m_\ell \hbar = 0$.
4. El valor de la distancia más probable es:

$$P(r) = r^2 \int_0^\pi d\theta \,\mathrm{sen}\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |\Psi|^2 = 4\pi r^2 \frac{1}{4^2 2\pi} \frac{1}{a_o^3} \left(2 - \frac{r}{a_o}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_o}}$$

$$= \mathcal{C} \cdot e^{-\frac{r}{a_o}} \cdot r^2 \cdot \left(2 - \frac{r}{a_o}\right)^2$$

Donde $\mathcal{C}$ es una constante $(1/8a_o^3)$ que no influye en el resultado final. Derivamos la función $P(r)$ para calcular los valores máximos y mínimos:

$$P'(r) = \mathcal{C}\left[-\frac{1}{a_o} e^{-\frac{r}{a_o}} \left(r^2 (2 - \frac{r}{a_o})^2\right) + \left(2r(2 - \frac{r}{a_o})^2 + 2(\frac{-1}{a_o})(2 - \frac{r}{a_o}) r^2\right) e^{-\frac{r}{a_o}}\right]$$

$$P'(r) = \mathcal{C} \cdot e^{-\frac{r}{a_o}} \cdot r \cdot \left[-\frac{1}{a_o} r (2 - \frac{r}{a_o})^2 \; + \; \left(2(2 - \frac{r}{a_o})^2 + (\frac{-1}{a_o})(2 - \frac{r}{a_o}) r \right) \right] = 0$$

Que para que la derivada primera sea cero tendrán que anularse cada uno de los términos independientemente del resto, luego esto nos lleva al valor $r = 0$ y $r = \infty$ debido al término en r y a la exponencial y sólo queda entonces el término entre corchetes:

$$-\frac{1}{a_o} r (2 - \frac{r}{a_o})^2 \; + \; \left(2(2 - \frac{r}{a_o})^2 + (\frac{-1}{a_o})(2 - \frac{r}{a_o}) r \right) = 0$$

o:

$$(2 - \frac{r}{a_o}) \left(-\frac{1}{a_o} r (2 - \frac{r}{a_o}) + 2(2 - \frac{r}{a_o}) + 2(\frac{-1}{a_o}) r \right) = 0$$

Por tanto:

$$(2 - \frac{r}{a_o}) = 0 ==> r = 2a_o(1.06 \cdot 10^{-10} m)$$

y

$$-\frac{2r}{a_o} + \frac{r^2}{a_o^2} + 4 - \frac{2r}{a_o} - \frac{2r}{a_o} = 0$$

$$4 - \frac{6r}{a_o} + \frac{r^2}{a_o^2} = 0$$

ecuación de segundo grado con soluciones:

$$r = (3 + \sqrt{5}) a_o = 5.236 a_o (2,77 \cdot 10^{-10} m)$$

$$r = (3 - \sqrt{5}) a_o = 0.764 a_o (0,40 \cdot 10^{-10} m)$$

Con lo que hemos obtenido los cinco valores posibles de r, los dos asintóticos de $r = 0$ y $r = \infty$ (que son valores en los que se anula la función $P(r)$ y los dos máximos correspondientes a la función $2s$ y el mínimo entre ellos $(2a_o)$.

5. El valor medio de r es:

$$< r >= \int_0^{\pi} d\theta \, \mathrm{sen}\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dr \, r^2 \cdot r \cdot |\Psi|^2 = 4\pi \int_0^{\infty} dr r^3 \frac{1}{4^2 2\pi} \frac{1}{a_o^3} \left(2 - \frac{r}{a_o} \right)^2 e^{-\frac{r}{a_o}}$$

$$< r >= 4\pi \frac{1}{4^2 2\pi} \frac{1}{a_o^3} \int_0^\infty dr \left(4r^3 - \frac{2r^4}{a_o} + \frac{r^5}{a_o^2} \right) e^{-\frac{r}{a_o}}$$

Aplicando el dato de la integral aportado en el enunciado:

$$< r >= \frac{1}{8a_o^3} \left(4 \frac{3!}{\left(\frac{1}{a_o}\right)^4} - \frac{2}{a_o} \frac{4!}{\left(\frac{1}{a_o}\right)^5} + \frac{1}{a_o^2} \frac{5!}{\left(\frac{1}{a_o}\right)^6} \right)$$

$$< r >= \frac{1}{8a_o^3} \left(24a_o^4 - 48a_o^4 + 120a_o^4 \right) = 12a_o$$

Siendo el radio medio del orbital $2s$ $12a_o$ (o $6.35 \cdot 10^{-10} m$)