Ejemplo desarrollado 8.3: *Interpretación de la función de onda*

Veremos en el Capítulo 12 que la función de onda de un electrón en el estado de menor energía en un átomo de hidrógeno es proporcional a e^{-r/a_0}, donde a_0 es una constante y r es la distancia desde el núcleo. (Nótese que esta función de onda depende solamente de esta distancia y no de la posición angular relativa al núcleo.)

Calcule las probabilidades relativas de encontrar el electrón dentro de una región de volumen $1.0\ pm^3$, que es pequeña aún a escala atómica, localizada

(a) en el núcleo, (b) a una distancia a_0 del núcleo.

Solución: Para resolver este problema debemos considerar a la función de onda $\psi = e^{-ra_0}$ como una constante en el intervalo. La probabilidad se calcula tomando el módulo al cuadrado de la función de onda y multiplicándola por el elemento de volumen dado

$$P \propto |\psi|^2 dV = \left|e^{-r/a_0}\ \right|^2 dV = e^{-2r/a_0} dV$$

$$\text{a)} \qquad P_{r=0} \propto e^{-\frac{2r}{a_0}} dV \ = \ e^{-\frac{2(0)}{a_0}} (1.0\ pm^3) = 1.0 pm^3$$

$$\text{b)} \qquad P_{r=a_0} \propto e^{-\frac{2r}{a_0}} dV \ = \ e^{-\frac{2(a_0)}{a_0}} (1.0\ pm^3) = e^{-2}(1.0 pm^3)$$

Por lo tanto la probabilidad relativa es el cociente entre estas dos probabilidades:

$$P_{relativa} = \frac{P_{r=0}}{P_{r=a_0}} = \frac{1.0 pm^3}{e^{-2}(1.0 pm^3)} = e^2 \approx 7.4$$

Ejemplo desarrollado 8.4 ***Normalización de una función de onda***

Normalice la función de onda utilizada para el átomo de hidrógeno en el ejemplo desarrollado 8.3.

Solución: Para normalizar la función de onda ψ debemos encontrar $N = Q^{-\frac{1}{2}}$

$$Q =< \psi|\psi > = \int \psi^* \psi d\tau = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(e^{-\frac{r}{a_0}}\right)^2 \; r^2 sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

$$Q = \int_0^\infty r^2 \left(e^{-\frac{r}{a_0}}\right)^2 dr \int_0^\pi sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$Q = \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \int_0^\pi sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

Recordemos que:

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Así que:

$$Q = \left(\frac{2!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3}\right)(2)(2\pi) = \pi a_0^3$$

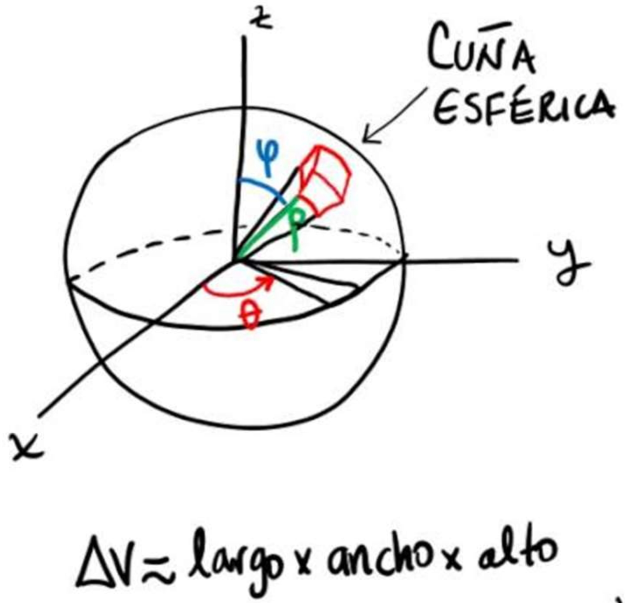
La función de onda normalizada será: $\psi' = Q^{-\frac{1}{2}} \psi = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-r a_0}$

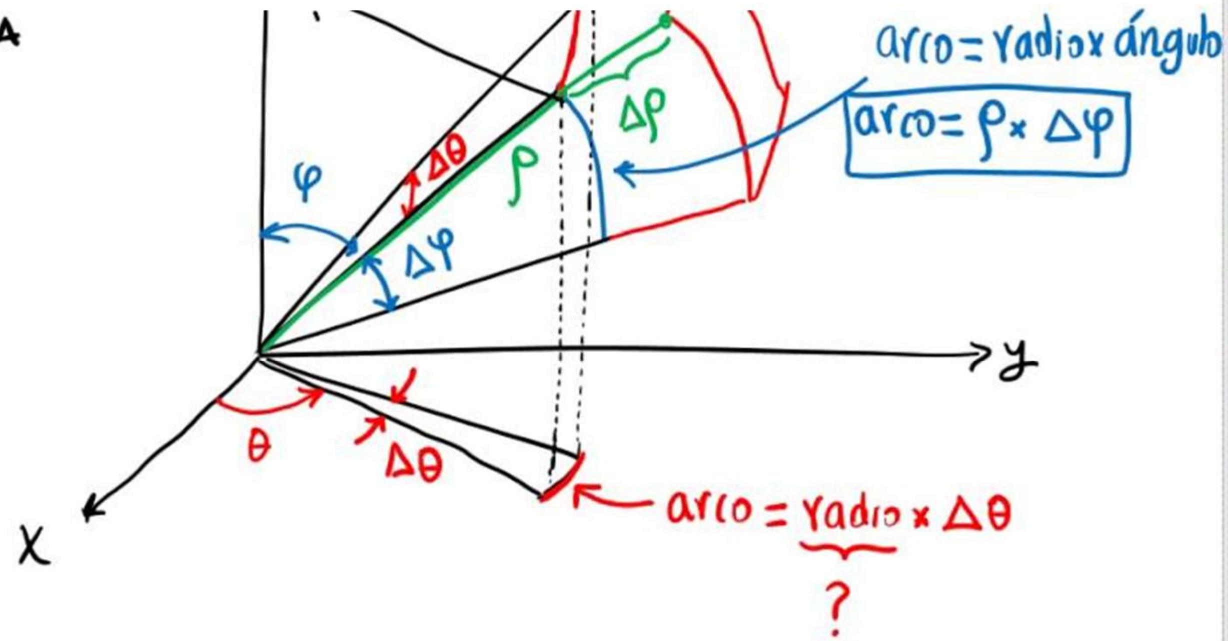
Ejemplo desarrollado 8.4 *Normalización de una función de onda*

Normalice la función de onda utilizada para el átomo de hidrógeno en el ejemplo desarrollado 8.3.

INTEGRALES TRIPLES EN COORDENADAS ESFÉRICAS

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(e^{-\frac{r}{a_0}}\right)^2 \; r^2 sin(\theta) dr d\theta d\phi$$





Ejemplo 8.2 Verificación de la ortogonalidad

Las funciones de onda sin (x) y sin $(2x)$ son autofunciones del operador hermitico d^2/dx^2, con autovalores -1 y -4, respectivamente. Verificar que ambas funciones son ortogonales.

Solución: Para verificar que ambas funciones de onda son ortogonales entre sí, integramos el producto (sin (x))(sin$(2x)$) sobre todo el espacio.

$$\Psi' = Q^{-1/2}\,\Psi \qquad\qquad \langle \Psi' | \Psi' \rangle = 1$$

Aprovechamos la periodicidad de ambas funciones y calculamos la integral en el intervalo entre x=0 y x=2π.

$$\int sin(ax)\sin(\mathrm{bx})\,dx = \frac{\sin(a-b)\,x}{2(a-b)} - \frac{\sin(a+b)\,x}{2(a+b)} + C$$

Así que

$$\int_0^{2\pi} (\sin\ (x))(\sin(2x)) = 0$$

Por lo tanto las funciones son mutuamente ortogonales

Ejemplo desarrollado 8.5: *Identificaci6n de una autofunción*

Muestre que e^{ax} es una autofunción propia del operador d/dx y encuentre el autovalor correspondiente. Compruebe que e^{ax^2} no es una autofunción de $\frac{d}{dx}$.

Solución: Para que una función sea autofunción de un operador $\widehat{\Omega}$ se debe cumplir que $\widehat{\Omega} f = \omega f$ con $\omega \in \mathbb{C}$.

Para la función $f = e^{ax^2}$

$$\frac{d}{dx}(e^{ax}) = ae^{ax}$$

Por lo tanto el autovalor es a.

Para la función $f = e^{ax^2}$

$$\frac{d}{dx}\left(e^{ax^2}\right) = 2ax\ e^{ax^2}$$

Por lo tanto f no es autofunción del operador.

Ejemplo desarrollado 8.6 *Determinación del valor de un observable*

¿Cuál es el momento lineal de una partícula descrita por la función de onda $\psi = Ae^{ikx} + Be^{(-ikx)}$, (a) B = 0, (b) A= 0?

Solución: Para conocer el momento lineal debemos de aplicar el operador $p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ a la función de onda.

Para el primer caso con B=0 tenemos: $\psi = Ae^{ikx}$

$$p_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(Ae^{ikx}) = \frac{\hbar}{i}A\frac{d}{dx}(e^{ikx}) = \frac{\hbar}{i}A(ik)e^{ikx} = \hbar Ake^{ikx} = \hbar k(Ae^{ikx}) = k\hbar\psi$$

Para el segundo caso con A=0 tenemos:

$$p_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(Be^{-ikx}) = \frac{\hbar}{i}B\frac{d}{dx}(e^{-ikx}) = \frac{\hbar}{i}B(-ik)e^{-ikx} = -\hbar Bke^{-ikx} = -\hbar k(Be^{-ikx}) = -k\hbar\psi$$

Así que la magnitud del momento lineal es el mismo en cada caso con signo opuesto.

Ejemplo desarrollado 8.7 *Cálculo de un valor esperado.*

Calcule el valor medio de la distancia de un electrón al núcleo en el átomo de hidrógeno en su estado de menor energía.

Solución: El valor medio de una variable dinámica para un sistema descrito por la función de onda se obtiene como: $< r > = < \psi|r|\psi >$

¿Quién es ψ? Es la función de onda normalizada que obtuvimos en el ejercicio

$$\psi = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

El braket se resuelve empleando coordenadas esféricas:

$$< r > = < \psi|r|\psi > = \int \psi^* r \psi \, d\tau = \int \left((\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \right)^* r \, (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-r a_0} \, d\tau$$

$$= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left((\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \right)^2 r * \; r^2 sin(\theta) d\theta d\phi dr$$

Recordemos que:

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$< r > = \int_0^\infty (\pi a_0^3)^{-1} e^{-\frac{2r}{a_0}} \; r^3 \int_0^\pi sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$< r > = (\pi a_0^3)^{-1} \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^{3+1}} (2)(2\pi) = \frac{3! * 4\pi}{\pi a_0^3 * \left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{3}{2} a_0$$

¿Cuánto vale numéricamente?

$$< r > = \frac{3}{2} \; (52.9 \; pm) = 79.4 \; pm$$