

Mecánica Cuántica I

Auxiliar 2

Profesor: Hugo Arellano

Auxiliar: Sebastián Díaz

26/03/2008

Potencial Coulombiano y un poco de probabilidades. Para un átomo de hidrógeno, encuentre la probabilidad de que el electrón, en el estado fundamental, sea encontrado en el núcleo.

Solución. Lo primero que debemos saber es que el estado fundamental es esféricamente simétrico, i.e., $\psi = \psi(r)$. Ahora debemos calcularlo!! La manera de hacer esto es resolviendo la ecuación de funciones y valores propios:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

El potencial en este caso es el conocido:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

La ecuación que nos queda es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] \psi = E\psi$$

Considerando sólo la parte radial del Laplaciano y reordenando un poco:

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\psi) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \psi + Er\psi \right] = 0$$

Como yo sé la solución de esta ecuación les doy el siguiente ansatz:

$$\psi(r) = Ae^{-\alpha r}$$

donde A y α son constantes que se deben determinar. Calculando la segunda derivada que aparece en la ecuación y sustituyendo obtenemos:

$$Ae^{-\alpha r} \left[r \left(\alpha^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} - 2\alpha \right) \right] = 0$$

Esta ecuación es válida $\forall r \in [0, \infty)$. La constante A no puede ser nula (obtendríamos que $\psi(r) = 0$) y la función exponencial es siempre positiva, luego no queda otra que el polinomio de primer grado sea nulo:

$$r \left(\alpha^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} - 2\alpha \right) = 0$$

Una precisión: que un polinomio sea nulo significa que es la función nula y por lo tanto sus coeficientes son todos nulos. Obtenemos así las 2 ecuaciones:

$$\alpha^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad ; \quad \alpha = \frac{m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Aquí matamos dos pájaros de un mismo tiro, determinamos α y la energía correspondiente al estado fundamental:

$$\Rightarrow E = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2}$$

Nos falta calcular A , pero acordándonos que $\psi(r)$ es una amplitud de probabilidad, debemos imponer:

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

integrando la parte angular (obviamente usamos coordenadas esféricas) obtenemos la ecuación para A :

$$1 = 4\pi A^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r^2 dr$$

La integral que aparece se calcula fácilmente integrando por partes dos veces, su valor es $\frac{1}{4\alpha^3}$. De modo que:

$$A = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}$$

Finalmente:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \quad \left(\text{así es!! } \alpha = \frac{m}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \equiv \frac{1}{a_0} \right)$$

Vemos que se nos coló el famoso radio de Bohr $a_0 \approx 53000[fm]$.

Hasta ahora lo que hemos calculado es la amplitud de probabilidad $\psi(r)$ cuyo módulo al cuadrado nos entrega la densidad de probabilidad de encontrar al electrón a un cierto radio del centro del núcleo atómico.

Tenemos lo necesario para determinar la probabilidad de que el electrón se encuentre en el núcleo. Tomando el radio del núcleo como $2[fm]$, la probabilidad P buscada es:

$$\begin{aligned}
 P &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2[fm]} |\psi(r)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\
 &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2[fm]} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\
 &= \frac{4}{a_0^3} \int_0^{2[fm]} e^{-2r/a_0} r^2 dr
 \end{aligned}$$

Ya que el subintegrando tiene un valor extremadamente pequeño en el intervalo de integración ($r \in [0, 2[fm]$), podemos aproximar la integral por el producto entre el ancho del intervalo y el valor del subintegrando en $r = 2[fm]$. Con esta aproximación:

$$\begin{aligned}
 P &\approx \frac{4}{a_0^3} \left[e^{-\frac{2 \cdot 2[fm]}{a_0}} (2[fm])^2 \cdot 2[fm] \right] \\
 &\approx \frac{4}{5^3 \cdot 10^{12} [fm^3]} 2 \cdot 4[fm^3] e^{-\frac{4}{53000}} \\
 &\approx \frac{1}{\frac{125}{32} \cdot 10^{12}} \quad \left(e^{-\frac{4}{53000}} \approx 1 \right) \\
 &\approx \frac{1}{4 \cdot 10^{13}} \quad \left(\frac{125}{32} \approx 40 \right)
 \end{aligned}$$

Podemos hacer la siguiente lectura de la probabilidad obtenida: de un total de $4 \cdot 10^{12}$ átomos, en sólo 1 el electrón llega al núcleo. Pero si tenemos una muestra macroscópica de materia, i.e., $\sim 10^{23}$ átomos:

$$\frac{1}{4 \cdot 10^{13}} = \frac{x}{10^{23}} \Rightarrow x = \frac{10^{23}}{4 \cdot 10^{13}} = 25 \cdot 10^8$$

Es decir, para una muestra macroscópica de materia, habrán del orden de 2500 millones de electrones que llegarán a sus respectivos núcleos. Esto nos deja una importante conclusión: si bien las probabilidades de que ciertos procesos del “mundo atómico” ocurran son muy pequeñas, la inmensa cantidad de átomos que existen en la materia macroscópica hacen que la ocurrencia de dichos procesos sea algo “cotidiano”.