

## Guía 1: Átomos hidrogénicos

En esta guía nos concentraremos en iones con un electrón (H, He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>, etc.). También podemos pensar en una primer aproximación para átomos con N electrones utilizando una carga efectiva que represente al núcleo apantallado por N-1 electrones y 1 electrón "activo". Describiremos los casos de electrones en estados ligados y también de electrones libres en el potencial nuclear (continuo). En el **Anexo 1** incluimos algunas integrales de utilidad. En el **Anexo 2** las expresiones de las funciones hidrogénicas, radiales y angulares (armónicos esféricos).

### A. Estados ligados hidrogénicos

**Recordemos:** El Hamiltoniano de 2 cuerpos en un potencial central puede analizarse desde el sistema centro de masa y separar así la dependencia radial y angular

$$H = -\frac{1}{2\mu} \nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

Donde  $\hat{L}$  es el operador momento angular y  $\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi)$ . Para un átomo hidrogénico el potencial es el de Coulomb entre el núcleo y el electrón. Las autofunciones de los estados ligados de un átomo hidrogénico pueden escribirse como  $\phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ , con

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_l^m(\theta, \varphi) \text{ armónicos esféricos (autofunciones de } L^2 \text{ y de } L_z) \\ R_{nl}(r) = \sum_{N=l+1}^n a_N S_N(\xi, r) \end{array} \right.$$

$$\xi = Z/n; \quad a_N = (-1)^{N-l-1} \sqrt{\frac{(n-l-1)!(n+l)!(2N)!}{2n}} \frac{1}{(N-l-1)!(n-N)!(N+l)!}$$

Y los orbitales de Slater son  $S_N(\xi, r) = \frac{(2\xi)^{N+1/2}}{\sqrt{(2N)!}} r^{N-1} e^{-\xi r}$ .

Otra alternativa es escribir las funciones radiales  $R_{nl}(r)$  utilizando la función hipergeométrica:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l {}_1F_1(-n+l+1; 2l+2; \rho)$$

donde  $\rho = 2Zr/n$ ;  $N_{nl} = \sqrt{\left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{(n+l)!}{[(2l+1)!]^2 2n(n-l-1)!}}$  y

$${}_1F_1(a; b; z) = 1 + \frac{a}{b} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{b(b+1)(b+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots$$

Note que la hipergeométrica es un polinomio y el grado dependerá de coeficiente  $a$ . Si es entero y negativo los  $a(a+1)(a+2)\dots$  se anulan a partir de cierto valor.

Se demuestra que para cualquier estado  $ns$  las funciones de onda verifican la condición de Kato, es decir

$$\partial \varphi_{ns} / \partial r \Big|_{r=0} = -Z \varphi_{ns}(r=0)$$

Esto va a resultar interesante como condición para exigir a las funciones de onda aproximadas (para el caso de multielectrónicos).

1. Escriba la función de onda  $\phi_{3s}(\vec{r})$  del átomo de hidrógeno en términos de la función hipergeométrica  ${}_1F_1(a,b,r)$ . Desarrolle la expresión polinómica de  $\phi_{3s}(\vec{r})$  y relacione con el número de nodos del estado 3s. Chequee el resultado con el Anexo 2. Verifique la condición de Kato.

1'. Halle las  $\phi_{nlm}$  con n=2. Use expansión en Slaters o hipergeométrica. Revise número de nodos, valor en r=0. Compare con el Anexo 2. Verifique la condición de Kato donde corresponda.

2. Muestre que los orbitales de Slater satisfacen

$$\int_0^\infty r^2 dr S_N(\xi, r) S_N(\xi, r) = 1, \text{ pero } \int_0^\infty r^2 dr S_N(\xi, r) S_{N'}(\xi, r) \neq \delta_{NN'}$$

3. A partir de las expresiones generales de las  $\varphi_{nlm}(\vec{r})$  (en Slaters o con la hipergeométrica), muestre que los únicos estados no nulos en r=0 son los ns, y que  $|\varphi_{ns}(r=0)|^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{z}{n}\right)^3$ .

4. Sea  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \phi_{nlm} | \hat{A} | \phi_{nlm} \rangle$  el valor medio del operador  $\hat{A}$  en el estado ligado nlm.

a) Halle  $\langle r \rangle_{nlm}$  y  $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm}$  para iones hidrogénicos con carga nuclear Z en los estados con n=1 y 2

b) Dado un átomo de H en el estado 2p±1 verifique que se cumple el Teorema del Virial  $2\langle T \rangle = -\langle V \rangle$ .

c) El  $\langle r \rangle_{nlm}$  aumenta a medida que se incrementa el número cuántico principal, pero disminuye cuando se incrementa el número cuántico angular l. ¿Existe la posibilidad de que se "cruzen" los radios de distintos n? De un ejemplo.

5. Dados los elementos del grupo 2 de la Tabla Periódica: B, C, N, O, F y Ne (átomos neutros), los valores medios  $\langle r \rangle_{2p}$  obtenidos por el método Hartree-Fock<sup>1</sup> son los que se muestran en la siguiente tabla.

	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
$\langle r \rangle_{2p}$	2.204757	1.714495	1.409631	1.232198	1.084786	0.965273

a) Compárelos con  $\langle r \rangle_{2p}$  en el caso hidrogénico

b) Halle una carga efectiva  $Z_{ef}$  para cada átomo que corresponda con los valores de  $\langle r \rangle_{2p}$  de la tabla de manera de reproducir la expresión de  $\langle r \rangle_{2p}$  hidrogénico.

<sup>1</sup> Bunge et al, Atomic Data and Nuclear Data Tables 53, 113-162(1993)

6. Considere el átomo de Tritio  ${}^3\text{H}$ . Este se compone de un núcleo con un proton ( $Z=1$ ) y dos neutrones y un electrón. El núcleo de tritio es inestable y por emisión beta decae al de  ${}^3\text{He}$  (dos protones  $Z=2$  y un neutrón). El decaimiento es muy rápido comparado con los tiempos atómicos característicos. El resultado es que se duplica "instantáneamente" el potencial coulombiano entre el electrón ligado y el núcleo. Halle la probabilidad de que si el  ${}^3\text{H}$  estaba en  $1s$ , el  ${}^3\text{He}^+$  esté en:

- el estado  $1s$
- en cualquier estado distinto al  $1s$  (probabilidad de excitación o ionización)
- en el  $2s$
- en un estado con  $l \neq 0$
- ¿Qué pasa con la conservación de la energía?

7. Dada la transformada de Fourier  $\tilde{f}(\vec{k})$  de una función  $f(\vec{r})$  definida como

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{r}}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r})$$

- Demuestre que la transformada de Fourier de la onda plana  $\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}$  es la delta de Dirac
- Dado el potencial Coulombiano  $V(r) = -Z/r$  muestre que la transformada de Fourier es  $\tilde{V}(k) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Z}{k^2}$ . Ayuda (solución de Bethe): escriba  $V(r) = -\frac{Z}{r} \exp(-\varepsilon r)$ , calcule  $\tilde{V}(k)$  y luego haga el límite  $\varepsilon \rightarrow 0$ .
- Verifique que la ecuación de Schrödinger en el espacio de los momentos es

$$\left[ E_{nl} - \frac{k^2}{2} \right] \tilde{\psi}_{nlm}(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{u}}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{V}(\vec{k} - \vec{u}) \tilde{\psi}_{nlm}(\vec{u})$$

- Halle la autofunción del estado fundamental del hidrógeno en el espacio de los momentos  $\tilde{\psi}_{1s}(\vec{k})$ . Chequee la normalización y halle  $\langle p^2 \rangle$ . Relacionelo con la energía del  $1s$  y verifique el Teorema del Virial.
- Calcule las expresiones de la función del onda en el espacio de los momentos,  $\tilde{\psi}_{nlm}(\vec{k})$ , para los estados  $2p_0, 2p_{\pm 1}$ . Revise los resultados obtenidos con las expresiones dadas en la clase teórica.

## B. Corrección Relativista

**Recordemos:** Dada la ecuación de Dirac (relativista), considerando a orden uno en  $(v/c)^2$ , el Hamiltoniano se escribe como  $H = H_0 + H_{\text{relat}}$ , donde  $H_0$  es el hamiltoniano no relativista y  $H_{\text{relat}}$  es

$$H_{\text{rel}} = \underbrace{-\frac{p^4}{8m^3c^2}}_{H_1 = H_{\text{cinet}}} + \underbrace{\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}}_{H_2 = H_{\text{S.O}}} + \underbrace{\frac{\pi \hbar^2}{2m^2c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \delta(r)}_{H_3 = H_{\text{Darwin}}}$$

A 1er orden perturbativo las autofunciones de  $H_0$  lo son también de  $H_1$  y  $H_3$ , pero no de  $H_{S,0}$  que no conmuta con  $L_z$  ni con  $S_z$ . Esto se resuelve introduciendo el momento angular total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  y escribiendo  $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$ . De esta manera puede tenerse una base de autofunciones  $|nljm_j\rangle$  comunes a  $J^2, L^2, S^2, H_0$  y  $J_z$  con autovalores  $j(j+1)\hbar^2, l(l+1)\hbar^2, s(s+1)\hbar^2, E_n$ , y  $m_j\hbar$ . A orden cero los  $|nljm_j\rangle$  pueden construirse como combinación lineal de las autofunciones de  $H_0$   $|nlm_j m_s\rangle$  utilizando los coeficientes de Clebsh-Gordan.

---

**10.** Dado el Hamiltoniano relativista

a) Muestre que las correcciones a la energía debido a  $H_1$  y  $H_3$  son:

$$\Delta E_1 = -\frac{1}{2c^2} \left[ E_n^2 + 2E_n Z \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} + Z^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} \right],$$

$$\Delta E_3 = \frac{2n}{c^2} E_n^2 \delta_{l,0}$$

Donde  $E = \frac{Z}{2n^2}$  es la energía no relativista. Esta es toda la corrección relativista a la energía para los estados ns ( $l=0$ ), pues  $H_{S,0}=0$ .

b) Escriba la expresión general de  $\Delta E_1$ , muestre que rompe la degeneración de la energía con el momento angular orbital  $l$ , y que  $\Delta E_1 < 0$  para todos los  $n, l$ . Haga un esquema de los corrimientos en energía.

c) Compare la energía no relativista y las correcciones relativistas cinética y de Darwin en los siguientes casos: 1s, 2s y 3s del H, del  $B^{+4}$  y del  $U^{+91}$ . A partir de qué ión diría que la corrección relativista es ineludible (use algún criterio, que supere al 1%, o al 0.1%?).

**11.** Demuestre que a orden unos en  $(v/c)^2$  la corrección spin-órbita a la energía es

$$\Delta E_{S,O} = \frac{1}{2} \langle \xi(r) \rangle \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right], \text{ con } \xi(r) = \frac{z}{2c^2 r^3}$$

a) Calcule esta corrección para los casos generales  $j = l \pm 1/2$ . Muestre que

$$\Delta E_{S,O} = \frac{nE_n^2}{c^2(l+1/2)} \begin{cases} (l+1)^{-1} & \text{si } j = l+1/2 \\ (-l)^{-1} & \text{si } j = l-1/2 \end{cases}$$

b) Halle las diferencias en las energías (split spin-orbita) del 2s<sub>1/2</sub>; 2p<sub>1/2</sub> y 2p<sub>3/2</sub> en función de  $(z/c)^2$ . A partir de que Z la corrección supera el 1% respecto a la no relativista?

**12.** Demuestre que la energía incluyendo las tres correcciones relativistas a 1er orden perturbativo de los

problemas anteriores es 
$$E_{nj} = E_n \left[ 1 + \frac{(Z/c)^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right].$$

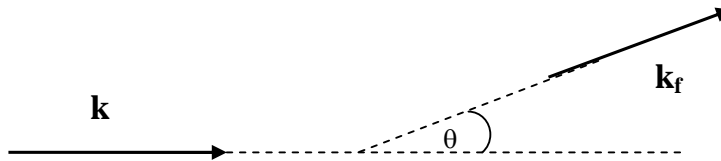
a) Halle los porcentajes de corrimiento en energía para los estados  $n=2$  (2s<sub>1/2</sub>, 2p<sub>1/2</sub> y 2p<sub>3/2</sub>) del He<sup>+</sup>.

b) A partir de qué átomo la corrección relativista a la energía es del 1%, y del 0.1%? ¿Una incerteza de este orden en las energías se relaciona con qué valores de  $\Delta t$ ? (Principio de Incertidumbre).

### C. Electrones en el continuo, scattering

**Recordemos:** En general las funciones del continuo en el límite asintótico  $r \rightarrow \infty$ , pueden escribirse como  $\Psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) \rightarrow \varphi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) + \frac{f(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(\pm ikr)}{r}$ , donde  $\varphi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$  es la onda plana,  $\frac{\exp(\pm ikr)}{r}$  es una onda esférica y  $f(\theta)$  es la amplitud de scattering. Puede demostrarse que  $f(\theta) = -(2\pi)^2 T$ , con  $T = \langle \varphi_{\vec{k}_f} | V | \Psi_{\vec{k}} \rangle$  la matriz de transición entre el momento inicial y final (desviado) del electrón, y la sección eficaz de scattering (diferencial en el ángulo de desviación) es  $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$ .

En la aproximación de Born  $T^{Born}(\theta) = \langle \varphi_{\vec{k}_f} | V | \varphi_{\vec{k}} \rangle$ .



La onda plana puede expresarse como  $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_{l,m} \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l j_l(kr) Y_l^m(\hat{r}) Y_l^{m*}(\hat{k})$

13. Demuestre que la amplitud de scattering puede desarrollarse como  $f(\theta) = \sum_l f_l (2l+1) P_l(\cos \theta)$ ,

donde  $f_l = f_l(k)$  es una función compleja,  $P_l(\cos \theta)$  es el polinomio de Legendre

$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_l^{m*}(\hat{r}_1) Y_l^m(\hat{r}_2)$  y  $\theta$  es el ángulo entre  $\vec{r}_1$  y  $\vec{r}_2$ .

Este desarrollo en serie se denomina *desarrollo en ondas parciales*. Las funciones  $f_l(k)$  son las amplitudes de las ondas parciales y se puede ver que

$f_l = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2ik}$  o su equivalente en

el diagrama de Argand. Chequee que satisface las tres fórmulas (del seno, de la cotangente y de la tangente) mostradas en la teoría

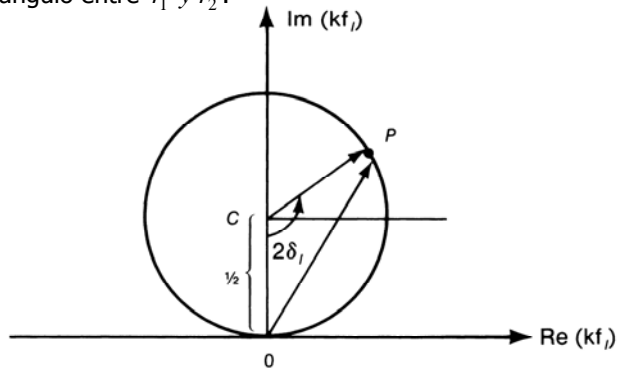


FIGURE 7.6. Argand diagram for  $kf_l$ .  $OP$  is the magnitude of  $kf_l$ , while  $CO$  and  $CP$  are each radii of length  $\frac{1}{2}$  on the unitary circle; angle  $OCP = 2\delta_l$ .

14. Calcule la sección eficaz total y muestre que es  $\sigma = \sum_l \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l$ . Sugerencia:

Utilice el diagrama de Argand, es decir que  $f_l = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2ik}$ . Analice los límites de las contribuciones de las  $\sigma_l$  cuando  $\delta_l \rightarrow 0$  y cuando  $\delta_l \rightarrow \pi/2$

15. Las funciones del continuo, en el límite asintótico  $r \rightarrow \infty$ , pueden escribirse como

$$\Psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) \rightarrow \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{f(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(\pm ikr)}{r},$$

donde  $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$  es la onda plana y  $f(\theta)$  es la amplitud de

scattering. La sección eficaz diferencial es  $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$ . La amplitud de scattering puede desarrollarse

como  $f(\theta) = \sum_l f_l (2l+1) P_l(\cos \theta)$ , con  $f_l = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2ik}$ . A partir de esto demuestre que

$$\text{Im}[f(\theta = 0)] = \frac{k}{4\pi} \sigma \quad (\text{teorema óptico})$$

16. En general las funciones del continuo en el límite asintótico  $r \rightarrow \infty$ , pueden escribirse como

$$\Psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) \rightarrow \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{f(\theta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(\pm ikr)}{r},$$

donde  $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$  es la onda plana y  $f(\theta)$  es la amplitud de

scattering,  $f(\theta) = \sum_l f_l (2l+1) P_l(\cos \theta)$ , con  $f_l = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2ik}$ . Demuestre que a bajas energías (límite

$k \rightarrow 0$ ) la sección eficaz total de scattering  $\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \rightarrow 4\pi a^2$ .

Nota:  $\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_l = -\frac{\delta_{l,0}}{a}$ .

17. Se define la matriz diagonal S tal que sus elementos diagonales son  $S_l = 1 + 2ik f_l$ , con las amplitudes parciales  $f_l$  definidas en el problema 13. Demuestre que  $S^* S = S S^* = 1$  y que

$$f_l - f_l^* = 2ik f_l f_l^*$$

18. Una posibilidad para describir la interacción de un electrón con un átomo neutro de carga nuclear Z es el potencial de Moliere  $V(r) = -\frac{Z}{r} \phi^M(r)$ , con

$$\phi^M(r) = 0.35 \exp(-0.3r) + 0.55 \exp(-1.2r) + 0.1 \exp(-6.0r).$$

Encuentre la sección eficaz total en la aproximación de Born, discuta su valor en términos de la carga nuclear.

## Anexo 1

### Integrales útiles:

$$\int_0^{\infty} r^k e^{-zr} dr = \frac{k!}{z^{k+1}}$$

$$\int d\vec{r} \frac{1}{r} e^{-zr} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{4\pi}{z^2 + k^2}$$

$$\int d\vec{r} e^{-zr} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{8\pi z}{(z^2 + k^2)^2}$$

$$\int d\vec{r} r e^{-zr} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{8\pi(3z^2 - k^2)}{(z^2 + k^2)^3}$$

$$\int d\vec{r} r^n e^{-zr} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = -\frac{\partial^n}{\partial z^n} \left( \frac{8\pi z}{(z^2 + k^2)^2} \right)$$

$$\int d\vec{r} r (\hat{r}\cdot\hat{e}_j) e^{-zr} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = -\frac{32\pi i z}{(z^2 + k^2)^3} \vec{k}\cdot\hat{e}_j$$

### Valores medios:

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{n^2}{Z} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right) \right\}$$

$$\langle 1/r \rangle_{nlm} = \frac{Z}{n^2}$$

$$\langle 1/r^2 \rangle_{nlm} = \frac{Z^2}{n^3} \frac{1}{(l+1/2)}$$

$$\langle 1/r^3 \rangle_{nlm} = \frac{Z^3}{n^3} \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)}, \quad l \neq 0$$

## Anexo 2

Tabla 1. Funciones de onda hidrogénicas

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$$

$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 27 - 18 \frac{Zr}{a_0} + 2 \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} \right) e^{-Zr/3a_0}$$

$$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$$

$$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 6 - \frac{Zr}{a_0} \right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

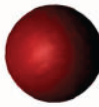
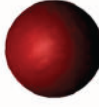
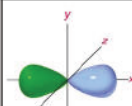
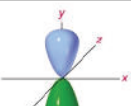
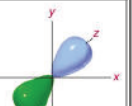
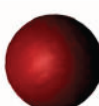
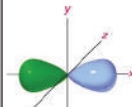
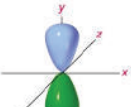
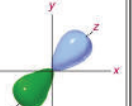
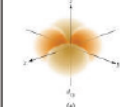

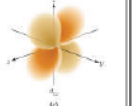
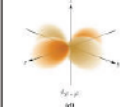



n	ℓ	m	orbital shapes
1	0	0	 1s
2	0	0	 2s
2	1	0	
			
			
2	1	±1	2p <sub>x</sub> orbital    2p <sub>y</sub> orbital    2p <sub>z</sub> orbital
3	0	0	 3s
3	1	0	
			
			
3	1	±1	3p <sub>x</sub> orbital    3p <sub>y</sub> orbital    3p <sub>z</sub> orbital
3	2	0	
			
			
3	2	±1	
			
3	2	±2	
			



Tabla 2: Funciones de onda radiales  $R_{nl}$  de átomos hidrogenoides.

Designación	$n$	$l$	$R_{nl}(r)^2$
1s	1	0	$(Z/a_0)^{3/2} 2 \exp(-\rho/2)$
2s	2	0	$(Z/a_0)^{3/2} 8^{-1/2} (2 - \rho) \exp(-\rho/2)$
2p	2	1	$(Z/a_0)^{3/2} 24^{-1/2} \rho \exp(-\rho/2)$
3s	3	0	$(Z/a_0)^{3/2} 243^{-1/2} (6 - 6\rho + \rho^2) \exp(-\rho/2)$
3p	3	1	$(Z/a_0)^{3/2} 486^{-1/2} (4 - \rho) \rho \exp(-\rho/2)$
3d	3	2	$(Z/a_0)^{3/2} 2430^{-1/2} \rho^2 \exp(-\rho/2)$
4s	4	0	$(Z/a_0)^{3/2} 96^{-1} (24 - 36\rho + 12\rho^2 - \rho^3) \exp(-\rho/2)$
4p	4	1	$(Z/a_0)^{3/2} 15360^{-1/2} (20 - 10\rho + \rho^2) \rho \exp(-\rho/2)$
4d	4	2	$(Z/a_0)^{3/2} 46080^{-1/2} (6 - \rho) \rho^2 \exp(-\rho/2)$
4f	4	3	$(Z/a_0)^{3/2} 322560^{-1/2} \rho^3 \exp(-\rho/2)$

$$\rho = 2Zr/(na_0).$$

### The Spherical Harmonics

$$Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\theta, \phi)$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos \theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^0 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \cdot (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$Y_3^{\pm 1} = \mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \cdot \sin \theta \cdot (5 \cos^2 \theta - 1) \cdot e^{\pm i\phi}$$

$$Y_3^{\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos \theta \cdot e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^{\pm 3} = \mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \cdot \sin^3 \theta \cdot e^{\pm 3i\phi}$$

### Armóninos esféricos

<http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qcg/harmonics/charmonics.html>

