

Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas esferoidales prolatas

H. Celemin¹ | E. J. Machado¹ | J.A. Cardona Bedoya²

Recibido:
Diciembre 19 de 2009

Aceptado:
Marzo 23 de 2010

Resumen

El sistema de coordenadas esferoidales prolatas (ξ, η, ϕ) es ortogonal y es el resultado de la rotación de una elipse alrededor de su eje mayor (eje en el cual los focos están situados). El átomo de hidrógeno como sistema atómico más sencillo es resuelto usando coordenadas esferoidales prolatas. Considerando que el núcleo del átomo de hidrogeno está ubicado en uno de los focos de la elipse, se encuentra que la ecuación de Schrödinger es separable en dichas coordenadas ($\Psi(\xi, \eta, \phi) = X(\xi)Y(\eta)\Phi(\phi)$). Con el fin de facilitar los cálculos se supone que la distancia entre el centro de la elipse y el foco es un número semi-entero del radio de Bohr (a_0), con esta suposición se encuentra una expresión para la función de onda $\Psi(\xi, \eta, \phi)$ del átomo de hidrogeno

Palabras clave: átomo de hidrógeno.

Abstract

The prolate spheroidal coordinates system (ξ, η, ϕ) is orthogonal and results from rotating of an ellipse the about the major axis of the ellipse, i.e., the axis on which the foci are located. The hydrogen atom as atomic simpler system is solved using prolate spheroidal coordinates. Considering that the nucleus of the hydrogen atom is located on one of the foci of the ellipse, the Schrödinger equations is separable in these coordinates ($\Psi(\xi, \eta, \phi) = X(\xi)Y(\eta)\Phi(\phi)$). In order to facilitate the calculations we assumed that the distance between the center of the ellipse and the focus is a semi-entire number of Bohr's radius (a_0), with this supposition we find an expression for the wave function $\Psi(\xi, \eta, \phi)$ of the hydrogen atom.

Key Words: hydrogen atom.

¹Departamento de Matemáticas y Estadística, Universidad del Tolima

²Departamento de Física, Universidad del Tolima

1. Introducción

La Física teórica posee dos herramientas importantes: el tratamiento matemático expresado con mucha frecuencia en forma de una ecuación diferencial, y como este tratamiento puede ser reflejado en función de las reglas que rigen un fenómeno físico. El problema netamente matemático del átomo de hidrógeno ha sido ampliamente estudiado y fue de gran interés para la teoría atómica. Este átomo es el más simple de los átomos, ya que contiene solamente un electrón orbitando alrededor de un núcleo muy masivo; la ecuación de Schrödinger de este sistema se ha solucionado en los sistemas de coordenadas esféricas y parabólicas [1-2].

Las coordenadas esferoidales prolatas han sido utilizadas ampliamente en una diversidad de trabajos en todas las áreas de la física, ya que permite modelar sistemas con simetría axial [3-5]. Lo anterior ha motivado la utilización de este sistema de coordenadas no convencional para solucionar la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno.

En la siguiente sección se presenta el modelo teórico utilizado para solucionar la ecuación de Schrödinger del átomo de Hidrogeno en coordenadas esferoidales prolatas, y se hace una descripción breve de estas coordenadas. En la sección tres se presentan los desarrollos matemáticos, y se obtienen las soluciones de las ecuaciones diferenciales que provienen de la separación de variables de la ecuación de Schrödinger. Finalmente se presentan las conclusiones.

2. Modelo teórico aplicado

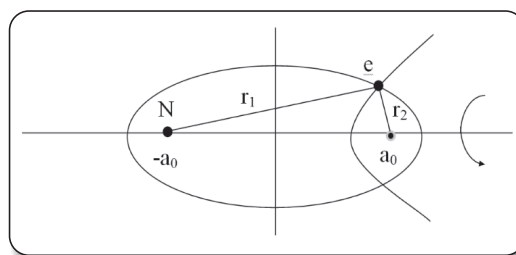
La mayor complejidad del átomo de hidrógeno para la aplicación de la ecuación de Schrödinger es la presencia de dos partículas el núcleo y el electrón. Por ello es preciso crear un sistema modelado donde se considera el núcleo de carga positiva fijo en uno de

los focos de la elipse con masa infinita y el electrón moviéndose a su alrededor con masa reducida m (figura 1). Se supone que la órbita del electrón es de tipo esferoidal prolata. Las coordenadas más adecuadas para describir este modelo son las coordenadas esferoidales prolatas (ξ, η, ϕ) definidas así:

$$\xi = \frac{(r_1 + r_2)}{2a}, \quad \eta = \frac{(r_1 - r_2)}{2a}, \quad \phi = \phi, \quad (1)$$

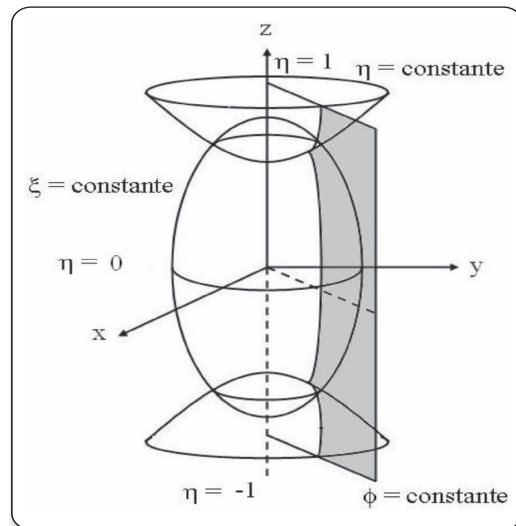
donde r_1 y r_2 son las distancias desde cualquier punto a los focos de la elipse, separados por la distancia $2a$.

Figura.1 Átomo de hidrógeno en el modelo propuesto



La figura 2 muestra las coordenadas esferoidales prolatas (Fuente: Mathematical Methods for Physicists, 2nd ed. Orlando, Academic Press, pp. 93, 1971). En estas coordenadas, η define una familia de hiperboloides de revolución alrededor de z , mientras que ξ define una familia de elipsoides de revolución alrededor de z , con una distancia interfocal $2a$ y la coordenada ϕ es el ángulo de azimutal [6].

Figura.2 Coordenadas esferoidales prolatas



Solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas esferoidales prolatas

$$\xi = \text{constante}, \quad -1 < \eta < 1, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi, \quad (2)$$

$$\eta = \text{constante}, \quad 1 < \xi < \infty, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi, \quad (3)$$

Para la descripción de nuestro modelo, la ecuación de Schrödinger viene dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\xi, \eta, \phi) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \Psi(\xi, \eta, \phi) = E \Psi(\xi, \eta, \phi), \quad (4)$$

donde m es la masa reducida del sistema, r_1 es la distancia entre el núcleo y el electrón. En coordenadas esferoidales, el Laplaciano tiene la forma de [7]:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{a^2(\xi^2 - \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 - 1 \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(1 - \eta^2 \right) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi \quad (5)$$

La distancia r_1 entre el núcleo y el electrón expresada en coordenadas esferoidales prolatas vienen dada por: $r_1 = a(\xi + \eta)$. Sustituyendo esta expresión en la ecuación 4, se obtiene:

$$-\nabla^2 \Psi(\xi, \eta, \phi) - \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{a(\xi + \eta)} \Psi(\xi, \eta, \phi) - \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(\xi, \eta, \phi) = 0 \quad (6)$$

Para la solución de la ecuación de Schrödinger, es conveniente usar el radio de Bohr: $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / e^2 m$ y considerar que $\epsilon^2 = 2mE / \hbar^2$, además se supone que la distancia entre el centro de la elipse y el foco es un número semi-entero del radio de Bohr ($a = a_0 / \ell$, ℓ entero). Considerando esto, la ecuación anterior se transforma en:

$$\nabla^2 \Psi(\xi, \eta, \phi) + \frac{2\ell}{a_0^2} \frac{1}{(\xi + \eta)} \Psi(\xi, \eta, \phi) + \epsilon^2 \Psi(\xi, \eta, \phi) = 0 \quad (7)$$

3. Función de onda

La ecuación anterior es separable. Escribiendo $\Psi(\xi, \eta, \phi) = X(\xi)Y(\eta)\Phi(\phi)$, y sustituyendo esta expresión en la ecuación (7), se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -m^2 \Phi(\phi), \quad (8)$$

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 - 1 \right) \frac{dX(\xi)}{d\xi} - \left(\frac{m^2}{\xi^2 - 1} - \frac{2\xi}{\ell} - \frac{a_0^2}{\ell^2} \epsilon^2 \xi^2 \right) X(\xi) = kX(\xi), \quad (9)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left(\eta^2 - 1 \right) \frac{dY(\eta)}{d\eta} - \left(\frac{m^2}{\eta^2 - 1} - \frac{2\eta}{\ell} - \frac{a_0^2}{\ell^2} \epsilon^2 \eta^2 \right) Y(\eta) = kY(\eta), \quad (10)$$

donde k es la constante de acoplamiento entre las dos últimas ecuaciones. La ecuación (8) tiene como solución

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (11)$$

donde m es el número cuántico orbital. Como las ecuaciones (9) y (10) son las mismas, basta con resolver una de ellas. El punto $\xi = 1$ en la ecuación (9) es un punto regular singular, y es removible, de tal manera que la solución es de la forma [8]:

$$X(\xi) = (\xi^2 - 1)^{m/2} P(\xi), \quad (12)$$

donde la función $P(\xi)$ satisface la ecuación:

$$\left(\xi^2 - 1 \right) \frac{d^2 P(\xi)}{d\xi^2} + 2(m+1)\xi \frac{dP(\xi)}{d\xi} + \left(|m| + m^2 + \frac{2\xi}{\ell} + \frac{a_0^2}{\ell^2} \epsilon^2 \xi^2 + k \right) P(\xi) = 0 \quad (13)$$

Realizando un cambio conveniente de la variable independiente, $\xi = (\zeta + 1) / (\zeta - 1)$ [9] en la ecuación anterior y considerando que $P(\xi) = Q(\zeta)$ se obtiene:

$$\zeta(1-\zeta) \frac{d^2 Q(\zeta)}{d\zeta^2} + [(|m|-1)\zeta + (|m|+1)](1-\zeta) \frac{dQ(\zeta)}{d\zeta} + \left[(|m|+m^2+k)(1-\zeta)^2 + (2/\ell)(1-\zeta^2) + (a_0^2 \epsilon^2 / \ell^2)(1+\zeta)^2 + 2(1-\zeta^2) \right] Q(\zeta) = 0 \quad (14)$$

La solución en series de potencia $Q(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \zeta^n$, es sustituida en la ecuación (14), obteniendo la relación de recurrencia:

$$\alpha_n b_{n+1} + \beta_n b_n + \gamma_n b_{n-1} + \delta_n b_{n-2} + \epsilon_n b_{n-3} = 0, \quad (15)$$

donde,

$$\alpha_n = (n+1)(n+1+|m|), \quad (16)$$

$$\beta_n = -2n(2n+|m|) + m^2 + |m| + k + a_0^2 \epsilon^2 / \ell^2 + 2/\ell, \quad (17)$$

$$\gamma_n = 6(n-1)^2 - 2(m^2 + |m| + k + a_0^2 \epsilon^2 / \ell^2), \quad (18)$$

$$\delta_n = 2(n-2)(|m|-2n+4) + m^2 + |m| + k + a_0^2 \epsilon^2 / \ell^2 - 2/\ell, \quad (19)$$

$$\varepsilon_n = (n-3)(n-3-|m|) \quad , \quad (20)$$

y se toma $b_0=1$. Esto permite generar todos los coeficientes b_n de la serie de potencia, consecuentemente la solución de la ecuación (14) es obtenida.

Conociendo las soluciones de las ecuaciones diferenciales (8), (9) y (10) se encuentra que la función de onda en coordenadas esferoidales prolatas viene dada por:

$$\Psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\xi^2 - 1)^{m/2} \sum_{n_1=0}^{\infty} b_{n_1} \left(\frac{\xi-1}{\xi+1} \right)^{n_1} (\eta^2 - 1)^{m/2} \sum_{n_2=0}^{\infty} c_{n_2} \left(\frac{\eta-1}{\eta+1} \right)^{n_2} \exp(im\phi) \quad (21)$$

De tal forma que cada estado estacionario del espectro discreto se determina en coordenadas esferoidales prolatas por tres números enteros: m (número cuántico orbital) y n_1, n_2 (números cuánticos esferoidales prolatas).

4. Conclusiones

En este trabajo se ha encontrado la función de onda para el átomo de hidrógeno en coordenadas esferoidales prolatas, considerando que la distancia entre el centro del elipsoide y uno de sus focos es un número semientero del radio de Bohr

Referencias

- [1] L. I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Company, New York 1968
- [2] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Mecánica Cuántica No-Relativista, Reverte, Barcelona, 1967
- [3] F. Comasb, Nelson Studarta and G. E. Marques, Solid State Commun. 130, 447, (2004).
- [4] H. León, J.L. Marín and R. Riera, Physica E, 27, 385 (2005)
- [5] H. Quevedo, Phys. Rev. D 39, 2904 (1989)
- [6] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists. Academic Press, 1971.
- [7] P. M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics. McGraw-Hill, New York, 1953
- [8] A. N. Tijonov, y A. A. Samarsky, A.A. Ecuaciones de la Física Matemática. Mir, 1980.
- [9] G. Jaffe, Z. Physik 87, 535 (1934)