Átomo de Hidrogeno y más

Profesor: Benjamín Koch

Alumno: Matías Bejide

Solución de ecuación de Dirac con potencial de coulomb (átomo de hidrogeno).

- La ecuación tendrá la forma:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}=\left(c\alpha\left(p-\frac{e}{c}A\right)+\beta mc^2+e\Phi\right)\psi(\mathrm{x},\mathrm{t})$$

- Tomando $e\Phi=-\frac{Ze_0^2}{r}\equiv V(\mathrm{r})$ y $A=0$. Obteniéndose el ha miltoniano de Dirac $\left(c\alpha\cdot p+\beta mc^2+e\Phi\right)$.
- Aplicando la separación de variables se tiene:

$$E\psi(\mathrm{x})=\left(c\alpha\cdot p+\beta mc^2+V(\mathrm{r})\right)\psi(\mathrm{x})$$

- Antes de resolver la ecuacion se estudiaran los espinores: Debemos construir los espinores de Dirac a partir de los espinores de Pauli.
- Sabemos de la adición de momento angular (“l” y “s”):

$$\left|\mathrm{j}, m_j\right\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+m_j+\tfrac{1}{2}}\left|l, m_j-\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2},+\right\rangle + \sqrt{l-m_j+\tfrac{1}{2}}\left|l, m_j+\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2},-\right\rangle\right]; j = l+\tfrac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+m_j+\tfrac{1}{2}}\left|l, m_j+\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2},-\right\rangle - \sqrt{l-m_j+\tfrac{1}{2}}\left|l, m_j-\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2},+\right\rangle\right]; j = l-\tfrac{1}{2} \end{cases}$$

- Esto es simplemente la adición de momentos angulares vistos en cursos anteriores.

- Entonces se usaran los números cuánticos l y m_j, siendo (L=J-S y m=-j..j).
- Se obtienen los espinores:

$$\varphi^{\pm}_{jm_j} = \begin{Bmatrix} \left|l, m_j - \tfrac{1}{2}\right\rangle \left|\uparrow\right\rangle \\ \left|l, m_j + \tfrac{1}{2}\right\rangle \left|\downarrow\right\rangle \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} \sqrt{\dfrac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l,m_j - \frac{1}{2}} \\ \pm\sqrt{\dfrac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l,m_j + \frac{1}{2}} \end{Bmatrix} j = l \pm \tfrac{1}{2}$$

- Se utiliza el número “l” en ves de “j” porque “l” define la paridad de los armónicos esféricos.

- Entonces para cada valor de "j" hay 2 espinores (distintos "l").

$$\varphi^{l}_{jm_j} = \begin{Bmatrix} \varphi^{+}_{jm_j} ; l = j - \frac{1}{2} \\ \varphi^{-}_{jm_j} ; l = j + \frac{1}{2} \end{Bmatrix}$$

- Debe poder escribirse $\varphi^{+}_{jm_j}$ a partir de $\varphi^{-}_{jm_j}$. Se introduce el operador: $(\sigma \cdot \hat{x})$

- Este operador actúa: $\varphi^{\pm}_{jm_j} = (\sigma \cdot \hat{x}) \varphi^{\mathrm{m}}_{jm_j}$. Cambia paridad.

- necesario porque β cambia la paridad del segundo espinor y debe mantenerse.

- Podemos construir los espinores de Dirac: Ansatz

$$\Psi^{l}_{j,m_j}(\mathrm{x}) = \left\{ \begin{array}{c} \dfrac{iG_{lj}(\mathrm{r})}{r}\varphi^{l}_{jm_j} \\ \dfrac{F_{lj}(\mathrm{r})}{r}(\sigma \cdot \hat{\mathrm{x}})\varphi^{l}_{jm_j} \end{array} \right\}$$

- Ahora que tenemos ansatz volvemos a la ecuación de Dirac:

$$E\psi(\mathrm{x}) = \underbrace{\left(c\alpha\cdot p + \beta mc^2 + V(\mathrm{r})\right)}_{\begin{pmatrix} m - \frac{Z\alpha}{r} & \sigma\cdot p \\ \sigma\cdot p & -m - \frac{Z\alpha}{r} \end{pmatrix}}\psi(\mathrm{x})$$

- Se debe tratar con cuidado el termino: $\left(\sigma\cdot p\right)h(\mathrm{r})\varphi^{l}_{jm_j}$

- Usando la identidad: $\sigma\cdot a\sigma\cdot b = a\cdot b + i\sigma\cdot a\times b \rightarrow \sigma\cdot\hat{x}\sigma\cdot\hat{x} = 1$ se obtendrá:

$$\left(\sigma\cdot p\right)h(\mathrm{r})\varphi^{l}_{jm_j} \rightarrow 1\left(\sigma\cdot p\right)h(\mathrm{r})\varphi^{l}_{jm_j} \rightarrow \sigma\cdot\hat{x}\sigma\cdot\hat{x}\left(\sigma\cdot p\right)h(\mathrm{r})\varphi^{l}_{jm_j} \rightarrow$$

$$\frac{\sigma\cdot\hat{x}}{r}(\mathrm{x}\cdot\mathrm{p}+\mathrm{i}\,\sigma L)h(\mathrm{r})\varphi^{l}_{jm_j} \rightarrow -i\,\frac{\sigma\cdot\hat{x}}{r}\left\{r\,\frac{\partial h(\mathrm{r})}{\partial r} + \left(1\,\mathrm{m}\left(j+\tfrac{1}{2}\right)\right)h(\mathrm{r})\right\}\varphi^{l}_{jm_j}$$

Para $j = l \pm \tfrac{1}{2}$

- Con esto podemos obtener las ecuaciones para las funciones radiales:

$$\begin{cases} \left(E - m + \dfrac{Z\alpha}{r}\right) G_{lj}(\mathrm{r}) = -\dfrac{dF_{lj}(\mathrm{r})}{dr} \mp \left(j + \frac{1}{2}\right)\dfrac{F_{lj}(\mathrm{r})}{r} \\ \left(E + m + \dfrac{Z\alpha}{r}\right) F_{lj}(\mathrm{r}) = \dfrac{dG_{lj}(\mathrm{r})}{dr} \mp \left(j + \frac{1}{2}\right)\dfrac{G_{lj}(\mathrm{r})}{r} \end{cases}$$

- Ahora se hacen sustituciones con el fin de simplificar las ecuaciones:

$$\alpha_1 = m + E,\ \alpha_2 = m - E \quad ,\ \sigma = \sqrt{m^2 - E^2} = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2},$$

$$\rho = \mathrm{r}\,\sigma \quad ,k = \pm\left(j + \frac{1}{2}\right),\ \gamma = \mathrm{Z}\alpha$$

- Con todo esto obtenemos el sistema 1):

$$\begin{cases} \left(\dfrac{d}{d\rho}+\dfrac{k}{\rho}\right)F-\left(\dfrac{\alpha_2}{\sigma}-\dfrac{\gamma}{\rho}\right)G=0 \\ \left(\dfrac{d}{d\rho}-\dfrac{k}{\rho}\right)G-\left(\dfrac{\alpha_1}{\sigma}+\dfrac{\gamma}{\rho}\right)F=0 \end{cases}$$

- Para grandes “rho” el sistema se comporta como:

$F(\rho)=\mathrm{f}(\rho)\,\mathrm{e}^{-\rho};\ G(\rho)=\mathrm{g}(\rho)\,\mathrm{e}^{-\rho}$ y lleva al sistema 2):

$$\begin{cases} f'-f+\dfrac{kf}{\rho}-\left(\dfrac{\alpha_2}{\sigma}-\dfrac{\gamma}{\rho}\right)g=0 \\ g'-g-\dfrac{kg}{\rho}-\left(\dfrac{\alpha_1}{\sigma}+\dfrac{\gamma}{\rho}\right)f=0 \end{cases}$$

- El sistema 2) se resuelve mediante el método de Frobenius. Consiste en:

$$\begin{Bmatrix} f = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} b_0 \rho^{\nu} \\ g = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} a_0 \rho^{\nu} \end{Bmatrix}$$

- Sustituyendo en el sistema anterior y separando para los términos: a) $\nu = 0$ y b) $\nu \neq 0$. Obtendremos:

a) $\begin{Bmatrix} (\mathrm{s}+\mathrm{k})\,\mathrm{b}_0 + \lambda a_0 = 0 \\ (\mathrm{s}-\mathrm{k})\,\mathrm{a}_0 - \lambda b_0 = 0 \end{Bmatrix}$ b) $\begin{Bmatrix} (\mathrm{s}+\nu+\mathrm{k})\,\mathrm{b}_\nu - \mathrm{b}_{\nu-1} + \gamma a_\nu - \dfrac{\alpha_2}{\sigma} a_{\nu-1} = 0 \\ (\mathrm{s}+\nu-\mathrm{k})\,\mathrm{a}_\nu - a_{\nu-1} - \gamma b_\nu - \dfrac{\alpha_1}{\sigma} b_{\nu-1} = 0 \end{Bmatrix}$

- Dado que a_0 y $b_0 \neq 0$, de a) se obtiene: $s = \pm\sqrt{k^2 - \gamma^2}$ solo el valor positivo tiene sentido.

- Con la relación b) podemos ver si la serie converge o no: se obtiene: 3) $b_\nu\left[\sigma\left(s+\nu+k\right)+\alpha_2\gamma\right] = a_\nu\left[\alpha_2\left(s+\nu-k\right)-\sigma\gamma\right]$

- Ahora para grandes ν obtenemos: $b_\nu = \dfrac{\alpha_2}{\sigma} a_\nu$ que al ser reemplazado en b) lleva a: $b_\nu = \dfrac{2}{\nu} b_\nu, \ \mathrm{a}_\nu = \dfrac{2}{\nu} a_\nu \ \rightarrow \ \sum_\nu \dfrac{(2\rho)^\nu}{\nu!} = e^{2\rho}$

- Las series divergen para grandes ν que implica grandes ρ.

- Para evitar divergencia las series deben terminar.

- Supongamos $b_N = 0,\ a_N = 0$, de la relación b) se obtiene: $a_N = \frac{-\sigma}{\alpha_2} b_N$. "N" es el numero radial (N=0,1,2…)

- Reemplazando esta condición en 3) se llega a: $2\sigma(s+N) = \gamma(\alpha_1 - \alpha_2)$. Usando las definiciones para $\alpha_1,\ \alpha_2$

$$E = mc^2 \left[1 + \frac{\gamma^2}{(s+N)^2}\right]^{-1/2} ;c = 1$$

- Si usamos el valor encontrado para “s”, el numero principal (n=N+j+1/2) y el resto de las definiciones:

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (\mathrm{j} + 1/2) + \sqrt{(\mathrm{j} + 1/2)^2 - (\mathrm{Z}\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2}$$

Para obtener las funciones radiales

- Comenzando con ecuación 1): se reescribe como 4):

$$\frac{d}{d\rho}\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dfrac{-k}{\rho} & \left(\dfrac{\alpha_2}{\sigma}-\dfrac{\gamma}{\rho}\right)\\ \left(\dfrac{\alpha_1}{\sigma}+\dfrac{\gamma}{\rho}\right) & \dfrac{k}{\rho}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}\rightarrow\frac{d}{d\rho}\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}=M\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}$$

- Se deriva según “rho” y se obtiene 5):

$$\frac{d^2}{d\rho^2}\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}=\left(M^2+\frac{dM}{d\rho}\right)\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}$$

- En donde:

$$M^2 = \left[\frac{k^2}{\rho^2} + \left(\frac{\alpha_1}{\sigma} + \frac{\gamma}{\rho}\right)\left(\frac{\alpha_2}{\sigma} - \frac{\gamma}{\rho}\right)\right]\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{dM}{d\rho} = \frac{1}{\rho^2}\begin{pmatrix} k & \gamma \\ -\gamma & -k \end{pmatrix}$$

- Hay que diagonalizar $\frac{dM}{d\rho}$ para desacoplar las ecuaciones.
- Obteniéndose (“lambda es el valor propio”):

$$\frac{d^2}{d\rho^2}\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \left(1 + \frac{2\gamma E}{\sigma\rho} + \frac{\lambda(\lambda \pm 1)}{\rho^2}\right)\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

- Ahora se hace la sustitución $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho f \\ \rho g \end{pmatrix}$
- Y se utiliza la base de vectores que diagonalizan $\frac{dM}{d\rho}$:

$$A\begin{pmatrix} \rho f \\ \rho g \end{pmatrix} = \rho A\begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = \rho\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

- Obteniéndose finalmente:

$$\frac{d^2 u_{1,2}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{du_{1,2}}{d\rho} - \left(1 + \frac{2\gamma E}{\sigma\rho} + \frac{\lambda(\lambda \pm 1)}{\rho^2}\right) u_{1,2} = 0$$

- Se usa el ansatz: $u_{1,2} = \rho^{\gamma,\gamma-1} e^{-\rho/2} y_{1,2}(\rho)$ y obtenemos 6):

$$\left\{\begin{array}{c} \rho\dfrac{d^2 y_1}{d\rho^2} + \left[2(\lambda+1) - \rho\right]\dfrac{dy_1}{d\rho} - (1-\mathrm{n})\,\mathrm{y}_1 = 0 \\ \rho\dfrac{d^2 y_2}{d\rho^2} + \left[2\lambda - \rho\right]\dfrac{dy_2}{d\rho} + \mathrm{ny}_2 = 0 \end{array}\right\}; n = \frac{2\gamma E}{\sigma\sqrt{1-E^2}} - \lambda$$

- Este tipo de ecuaciones se llaman ecuaciones de Kummer: $\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + \left[b - \rho \right] \frac{dw}{d\rho} - aw = 0$

- Y sus soluciones son funciones hipergeometricas confluentes: $F(\mathrm{a}, \mathrm{b}, \rho) = 1 + \frac{a}{b}\rho + \frac{a(\mathrm{a}+1)}{b(\mathrm{b}+1)} \frac{\rho^2}{2!} + \ldots$

- Y las soluciones son:

$$\left\{ \begin{matrix} y_1 = c_1 F_1(1-\mathrm{n}, 2(\lambda+1), \rho) \\ y_2 = c_2 F_2(-\mathrm{n}, 2\lambda, \rho) \end{matrix} \right\}$$

Finalmente se obtiene:

$$\left\{ \begin{array}{c} f = A^{-1}\rho^{\gamma} e^{-\rho/2} c_1 F_1(1-\mathrm{n}, 2(\lambda+1), \rho) \\ g = A^{-1}\rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} c_2 F_2(-\mathrm{n}, 2\lambda, \rho) \end{array} \right\}$$

Respecto a los niveles de energía

- La energía obtenida de la ecuación de Dirac:

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (\mathrm{j} + \frac{1}{2}) + \sqrt{(\mathrm{j} + \frac{1}{2})^2 - (\mathrm{Z}\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

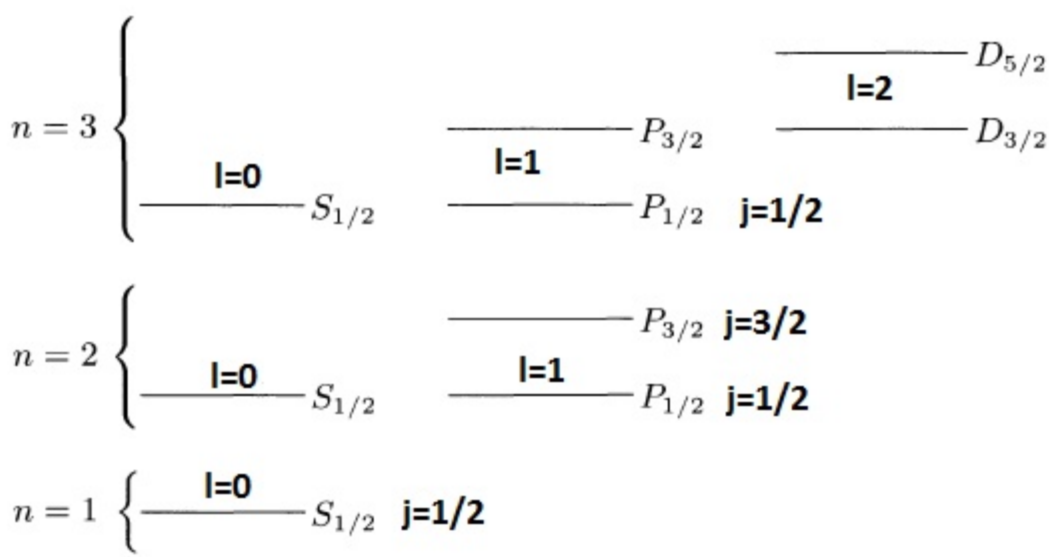
puede expandirse considerando $Z\alpha$ pequeño:

$$E = mc^2 \left\{ 1 - \frac{(\mathrm{Z}\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(\mathrm{Z}\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right\}$$

- Se puede observar que se recuperan los términos de la energía no relativista.

- De la expresión para la energía obtenida de de la ec. de Dirac se puede observar los siguientes niveles: (Usaremos los números n, l, j)

	n	ℓ	j	$E_{n,j}/mc^2$
$1\,S_{1/2}$	1	0	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$
$2\,S_{1/2}$	2	0	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{2}}$
$2\,P_{1/2}$	2	1	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{2}}$
$2\,P_{3/2}$	2	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{4-(Z\alpha)^2}$



- Esta separación de niveles se conoce como estructura fina del átomo de hidrogeno

- Es debido a la interacción spin-orbita del electrón

- Es efecto relativista.

Singularidad

- Existe una singularidad en la energía cuando:

$$(j + {}^{1}\!/_{2})^2 - (Z\alpha)^2 < 0$$

- Esta singularidad se elimina considerando núcleo finito.

- Esta es también la condición que evita orbitas espirales.

bibliografia

- Cohen-Tannoudji.Quantum mechanics, vol.1,2.
- Franz Schwabl Advanced Quantum Mechanics.
- Am. J. Phys., Vol. 65, No. 3.
- *A.D. Alhaidari / Physics Letters A 322 (2004) 72–77.*
- Journal of Mathematical Physics **11**, 125 (1970).
- Journal of Mathematical Physics **36**, 3332 (1995).