En la imagen clásica, el átomo de hidrógeno por un protón y un electrón que gira alrededor. el protón es muchísimo más pesado que el electrón y por tanto se puede suponer inmóvil en el origen, igual que el Sol en el sistema solar. La imagen cuántica es que el electrón tiene cierta función de ondas normalizada Ψ y $\int_R |\Psi|^2$ es la probabilidad de encontrarlo en cierta región R. La fuerza entre el protón y el electrón es eléctrica. Lo único que tienes que recordar (o aprender) de los cursos básicos de física es que en electrostática la energía potencial correspondiente es Kq_1q_2/r, $r = \|\vec{x}\|$, donde q_1 y q_2 son las cargas del protón y del electrón y K es la *constante de Coulomb* $K = 8{,}9876 \cdot 10^9$ en el sistema internacional de unidades (SI). Con estas unidades se tiene $q_1 = \mathrm{e}$ y $q_2 = -\mathrm{e}$ donde $\mathrm{e} = 1{,}6022 \cdot 10^{-19}$. Entonces la ecuación de Schrödinger independientemente del tiempo resulta ser

$$(1) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\Psi - K\frac{\mathrm{e}^2}{r}\Psi = E\Psi$$

con $m_e = 9{,}1094 \cdot 10^{-31}$ la masa del electrón en el SI.

Vamos a generalizar un poco la situación porque no conlleva un esfuerzo adicional. Se llama *número atómico* al número de protones en el núcleo de un átomo. Para el hidrógeno $Z = 1$, para el helio $Z = 2$, para el litio $Z = 3$ y así sucesivamente siguiendo el orden de la tabla periódica. Normalmente los átomos tienen el mismo número de protones que de electrones pero se puede ionizar quitándoles electrones, lo que se indica en química poniendo mases, uno por cada electrón que desaparece. De esta forma He^{+} y Li^{++} indican iones con $Z = 2$ y $Z = 3$ pero con un solo electrón. Como la carga total del núcleo en general es $Z\mathrm{e}$, la ecuación (1) se generaliza a iones con un solo electrón como

$$(2) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\Psi - KZ\frac{\mathrm{e}^2}{r}\Psi = E\Psi.$$

Esta ecuación no es muy precisa cuando hay varios electrones porque interactúan entre ellos pero aun así sirve como primera aproximación y de aquí salen los orbitales que se estudian en los cursos de química.

En esta hoja lo que vamos a hacer es resolver (2). Esto, que se debe a Schrödinger, fue crucial en la historia de la física cuántica porque a partir de cálculos puramente matemáticos, se obtienen algunas cosas que se observaban en los experimentos y que nadie sabía explicar con la física clásica.

Una cuestión notacional es que la mayoría de los autores en este contexto no utilizan el SI sino otras unidades en las que $K = 1$ (unidades gaussianas), de modo que escriben Z en lugar de Z'. Incluso es habitual hacer algunas convenciones para que $\hbar$ sea uno (unidades de Planck). Todo eso es un poco lioso si uno no está acostumbrado, por tanto vamos a proceder de una manera puramente matemática para llegar a la notación del texto que te voy a pedir que leas en [FY09].

1) Comprueba que la ecuación (2) es equivalente a

$$-\frac{1}{2}\Delta\Phi - \frac{Z}{r}\Phi = E'\Phi \tag{3}$$

haciendo el cambio

$$\Phi(\vec{x}) = \lambda^{3/2}\Psi(\lambda\vec{x}) \quad \text{con} \quad \lambda = \frac{\hbar^2}{m_e K \mathrm{e}^2} \qquad \text{y} \qquad E' = \frac{\lambda}{K\mathrm{e}^2}E. \tag{4}$$

Comprueba además que si Ψ está normalizada, entonces Φ también y viceversa.

Entonces basta resolver (3) y después deshacer el cambio (4) para obtener la solución de (2).

2) Procedemos por separación de variables escribiendo en esféricas $\Phi(r,\theta,\varphi) = A(r)B(\theta,\varphi)$. Prueba que, con la notación de la hoja anterior, B es una autofunción de Δ^*.

Con lo que hemos visto en la pasada hoja, el autovalor de Δ^* es $-l(l+1)$ para algún $l \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ y B es combinación lineal de armónicos esféricos $\{Y_{lm}\}_{m=-l}^{l}$. Suponemos por tanto $B = Y_{lm}$ y escribimos $f_l(r)$ en lugar de $A(r)$ para indicar que depende de l. Ahora vamos a seguir §32 de [FY09]. Está en la biblioteca de matemáticas (se pide por formulario desde la de Ciencias). Si no lo consigues, dímelo y te mando las pocas páginas necesarias escaneadas.

3) En esta situación, prueba que $f_l(r) = rA(r)$ satisface la ecuación §32.(1).

4) Lee el resto de §32 hasta la p. 144 incluida, saltándote solo el párrafo de la 141 que comienza "We direct attention". En toda esta discusión, para nosotros μ es simplemente m_e, la masa del electrón. La "masa reducida" de la que habla el texto es una pequeña corrección de m_e para que el modelo sea más preciso. Te puedes olvidar de ella si no sabes qué es.

5) Escribe con tus palabras, la deducción de §32.(6) y §32.(7). Deshaciendo el cambio (4) prueba que los posibles valores de E en (2), esto es, los niveles de energía, son

$$E_n = -\frac{Z^2K^2m_e\mathrm{e}^4}{2\hbar^2n^2}, \tag{5}$$

que es la segunda fórmula de (1.15) [Cha15], salvo lo que ya te dije de que me olvidé de dividir por K^2. Comprueba sustituyendo los valores que el nivel de mínima energía para el hidrógeno es $E_1 = -2{,}1799 \cdot 10^{-18}$. Si sabes qué es un eV, estos son los $-13{,}6$ eV que aparecen en la p. 140 de [FY09]. Esta cantidad es medible y concuerda bastante bien con el experimento.

6) Lee (o relee) §1.5 de [Cha15] y demuestra las fórmulas (1.16). La primera está hecha en la p. 143 de [FY09] sin deshacer el cambio (4).

Finalmente lo que tienes que escribir para tu trabajo:

7) En primer lugar motiva (2) como modelo de un único electrón en un ion. Basta con que redactes con tus palabras lo que he escrito y quizá lo completes con lo que leas en internet o en algunos de los libros básicos como [GP78] o [Ynd03]. Después enuncia y prueba una proposición o teorema que diga que las soluciones normalizables de (2) tienen $E = E_n$ dado por (5) y que las Ψ correspondientes son de la forma $r^l e^{-a_n r} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ con $0 \le l < n$, $-l \le m \le l$ o combinaciones lineales suyas cuando l y m varían. Aquí R_{nl} es un polinomio de grado $n - l - 1$, que no hace falta que especifiques, a_n es una constante y Y_{lm} son los armónicos esféricos. Para esto debes llegar hasta §32 y deshacer el cambio (4). Escribe la expresión para a_n. Ilustra la situación explicando las soluciones de (2) dadas por las fórmulas (1.16) de [Cha15]. Finalmente, habla algo de la interpretación física mencionando algo acerca de los orbitales. En total intenta no superar las siete páginas.

Si te sientes con fuerzas (no te sientas obligada), puedes mencionar algo acerca de que el modelo no es del todo preciso por no considerar el espín que se manifiesta en el efecto Zeeman anómalo o en la llamada estructura hiperfina. De lo primero puse un poco en [Cha15] y de ambas cosas puedes encontrar mucha información en internet.

Referencias

[Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2015.

[FY09] L. D. Faddeev and O. A. Yakubovskiĭ. *Lectures on quantum mechanics for mathematics students*, volume 47 of *Student Mathematical Library*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2009. Translated from the 1980 Russian original by Harold McFaden, With an appendix by Leon Takhtajan.

[GP78] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica*. Alhambra, Madrid, 1978.

[Ynd03] F. J. Ynduráin. *Mecánica cuántica*. Grupo Planeta, 2003.