

Simulación: Visualización de orbitales en el átomo de hidrógeno.

Sergio Castrillón S.
Joseph Ruiz.
David Gutiérrez

Mayo 18 2023

1. Introducción

Desde el curso de Laboratorio Avanzado III se adelanta el proceso de construcción de simulaciones interactivas para la divulgación científica. Dentro del proyecto ya se cuenta con varias actividades en áreas de la física como mecánica, electromagnetismo y termodinámica. Sin embargo, la componente de mecánica cuántica apenas cuenta con una actividad. Por tal motivo, este trabajo presenta una visualización espacial de las soluciones de la ecuación de Schrödinger aplicada al átomo de hidrógeno.

2. Fundamentación Teórica.

2.1. Interpretación estándar de la mecánica cuántica.

Uno de los pilares de la física moderna es la mecánica cuántica. A pesar de mostrar increíbles resultados y aplicaciones en variados ámbitos, persisten dificultades. En particular en su interpretación. En su concepción y formulación, la mecánica cuántica se entiende como una teoría probabilística basada en los siguientes axiomas.

El estado de un sistema está dado por una combinación lineal de vectores en un espacio de Hilbert, estos vectores reciben el nombre de kets $|\psi\rangle$. Los observables físicos están asociados a operadores lineales de dicho espacio. Estos admiten una representación matricial y tienen la propiedad de que poseen autovalores reales. Son estos autovalores y sus correspondientes autovectores $|\phi_i\rangle$ se corresponden con medidas de ese observable. De manera que el hecho de medir “colapsa” el estado inicial $|\psi\rangle$ a uno de los autoestados del observable $|\phi_i\rangle$ con una probabilidad proporcional al cuadrado del autovalor asociado a $|\phi_i\rangle$. La evolución en el tiempo de estos sistemas se rige por la ecuación de Schrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi_i\rangle = \hat{H} |\phi_i\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) |\phi_i\rangle \quad (1)$$

En este sentido, la mecánica cuántica es una teoría determinista pero probabilística. Todo lo que se puede decir del sistema depende de la probabilidad de colapsar al realizar mediciones, y está dada por $\langle\psi|\psi\rangle = |\psi(x)|^2$. Donde la amplitud de probabilidad se interpreta como una onda de probabilidad en donde encontrar la partícula. Esta onda no tiene una realidad física.

2.2. El átomo de hidrógeno.

Para la aplicación al átomo de hidrógeno el potencial es $V = \frac{ke}{r}$. Aplicando el método de separación de variables a la ecuación resultante se obtienen las soluciones

$$\psi_{nlm} = N_{nlm} \exp\left\{-\frac{r}{a_0 n}\right\} \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left\{\frac{2r}{a_0 n}\right\} Y_l^m(\theta, \phi), \quad (2)$$

donde L_{n-l-1}^{2l+1} son los polinomios asociados de Laguerre y Y_l^m los armónicos esféricos. Usando la expresión para estos últimos en términos de los polinomios de Legendre, las soluciones se pueden reescribir como

$$\psi_{nlm} = N_{nlm} f(r) P_l^m\{\cos(\theta)\} \exp\{im\phi\} \quad (3)$$

Sin embargo, es más usual expresar las soluciones en otra base, conocida como orbitales y usados en el lenguaje de la química orgánica. Estos orbitales son obtenidos como combinaciones lineales de las funciones de onda $\psi_{nl|m|}$ y

$\psi_{nl-|m|}$. De la ecuación 3, tomando $m = |m|$ se tienen tres opciones para cada m :

$$\tilde{\psi}_{nl,+x} = \psi_{nlm} + \psi_{nl-m} = f(r) \left[\tilde{N}_{nlm} P_{lm} + \tilde{N}_{nl-m} P_{l-m} \right] \cos(m\phi) \quad (4)$$

$$\tilde{\psi}_{nl,0} = \tilde{N}_{nl0} f(r) P_{l0} \{ \cos(\theta) \} \quad (5)$$

$$\tilde{\psi}_{nl,-x} = \psi_{nlm} - \psi_{nl-m} = if(r) \left[\tilde{N}_{nlm} P_{lm} - \tilde{N}_{nl-m} P_{l-m} \right] \sin(m\phi), \quad (6)$$

haciendo un total de $2l + 1$ orbitales para cada valor de l . La distribución de probabilidad radial es $d\mathcal{P}/dr$ o

$$\mathcal{P}(r) \propto r^2 |\tilde{\psi}_{nl,y}(r, \theta, \phi)|^2 \quad y = \pm x, 0. \quad (7)$$

3. Esquema de la simulación.

El propósito de la simulación es implementar la visualización de las soluciones descritas anteriormente para el caso del electrón en el átomo de hidrógeno. El algoritmo de la simulación se describe en la siguiente secuencia.

- Definir un estado del átomo de hidrógeno eligiendo n, l .
- Fijar el orbital a mostrar mediante a elección de $y = \pm x, 0$.
- Instanciar N copias de un no-electrón (punto) con posición inicial (r_0, θ_0, ϕ_0) definida así:
 - Instanciar ϕ_0 muestreado de $[0, 2\pi)$ uniformemente.
 - Instanciar θ_0 muestreado de $[0, \pi]$ uniformemente o en valores discretos.
 - Instanciar r_0 muestreado de la distribución radial $\mathcal{P}(r|\theta_0, n, l) \propto r^2 |\tilde{\psi}_{nl,y}(r, \theta_0, \phi_0)|^2$ mediante el método Monte Carlo.
- Mostrar los N puntos dadas sus posiciones.

4. Referencias.

- [1] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Frank Laloe, “Quantum mechanics, volume 1,” Quantum Mechanics 1, 215–220 (1986) 2.
- [2] Colijn, C. (2003). The de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics and its Application to some Simple Systems.