Solución del átomo de Hidrógeno

Luis Daniel Díaz Durango

8 de agosto de 2024

Partamos de la ecuación diferencial que describe el átomo de Hidrógeno.

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V(r)\right\}\psi = E\psi \tag{1}$$

Sabemos que el proton y el electrón tienen cargas opuestas, por lo tanto, el potencial $V(r)$, que es el potencial de Coulomb, queda de la forma $V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1q_2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} = -\frac{\alpha}{r}$, con $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$. De modo que la ecuación queda de la forma:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\alpha}{r}\right\}\psi = E\psi \tag{2}$$

Una forma lógica de proceder, es escogiendo un sistema coordenado que simplifique las soluciones. En este caso, por ser un problema central, como observamos desde la forma del potencial $V(r)$, es conveniente usar coordenadas esféricas. El laplaciano en coordenadas esféricas es:

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

Por tanto, la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas es:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right\} - \frac{\alpha}{r}\psi$$

Así, podemos hacer separación de variables, esto es, $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)T(\theta)P(\phi)$, Así, multiplicando por r^2/ψ, y organizando los términos por variables:

$$\begin{aligned} Er^2 = &-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{r^2}{R}\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2r}{R}\frac{dR}{dr}\right\} - \alpha r \\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{T\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dT}{d\theta}\right)\right\} \\ &-\frac{1}{P\sin^2\theta}\frac{d^2P}{d\phi^2}\end{aligned}$$

Por la periodicidad en la variable ϕ, está claro que la solución de $P(\phi)$ tiene que ser senos y cosenos, y para θ, la solución son los polinomios asociados de Legendre, por lo que el producto de estas corresponde a los armónicos esféricos. Por otra parte, la solución a la parte radial corresponde a los polinomios de Laguerre. Así, la solución general es:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{3}$$

A continuación se muestran gráficas de los primeros armónicos esféricos con m=0.

Con este link, se puede acceder al código fuente de este documento, al pdf generado, y el código fuente de las gráficas.

Figura 1: l=0, m=0

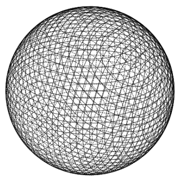

Figura 3: l=2, m=0

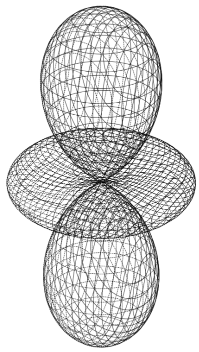

Figura 2: l=1, m=0

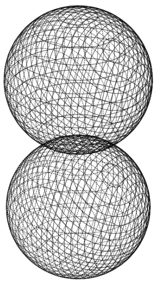

Figura 4: l=3, m=0