



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

Escuela Superior de Física y Matemáticas

El Átomo de Hidrogeno.

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
LICENCIADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

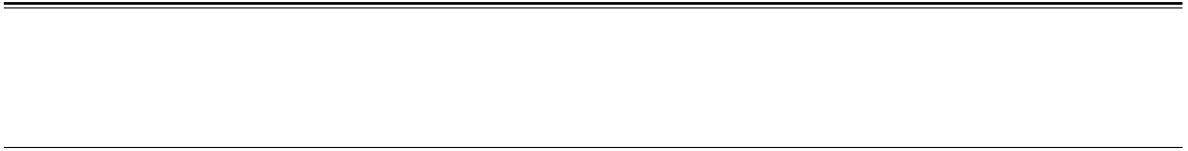
PRESENTA:

Eduardo Oropeza Solórzano.

ASESOR DE TESIS:

Dr. Humberto Garcilazo Soto.

México D. F., enero de 2007



A mi mamá, por ser tan fuerte y sabia
además de su infinito amor y apoyo.
A mi papá, por toda su ayuda.

Índice general

Agradecimientos	7
Prefacio	9
1. Sobre el Átomo Hidrogenoide en el Espacio de Momentos	11
1.1. La Ecuación de Schrödinger en el Espacio de Momentos	11
1.2. Simplificación a la Ecuación Integral Lineal de Schrödinger	13
1.3. La Transformada de Fourier de un Potencial Central	14
1.3.1. Transformada de un Potencial Coulombiano	15
1.4. Discretización de la Ecuación Integral Lineal	17
2. Espectro de Energía del Átomo de Hidrógeno	21
2.1. Aproximación a un Sistema Finito de Ecuaciones Lineales	21
2.2. Sobre los Programas en FORTRAN 77	22
2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno	24
2.3.1. Observación Empírica de los valores permitidos de l	30
3. Solución Analítica al Átomo Hidrogenoide en el Espacio de Momentos (Solución de V. Fock)	31
3.1. La ecuación Integral de Schrödinger	31
3.2. Proyección estereográfica de $\mathbb{R}^3$ a $\mathbb{S}^3$	32
3.3. La ecuación Integral de Schrödinger proyectada en $\mathbb{S}^3$	36
3.3.1. Modificación al kernel de la Ecuación Integral	37
3.4. Los Armónicos Esféricos 4-dimensionales	43
3.5. La ecuación integral de los Armónicos Esféricos 4-dimensionales	45
4. Energías de Ligadura de un átomo Hidrogenoide con un Potencial Extendido	49
4.1. Deducción del Potencial Extendido	49
4.1.1. El Campo Eléctrico debido al núcleo	50
4.1.2. El Potencial Eléctrico debido al núcleo	52
4.2. La Transformada de Fourier de un Potencial Extendido	54

4.3. Discretización de la Ecuación Integral Lineal	55
4.4. Energías de Ligadura de un átomo hidrogenoide formado con un núcleo de Uranio 235 y un muón	57
4.4.1. Sobre los datos numéricos obtenidos	62
Conclusiones	63
Apéndices	65
A. Analogías entre los Armónicos Esféricos 3 y 4 Dimensionales	67
B. Código del Programa Fortran 77	69
C. Constantes Físicas y Unidades	77
Referencias	79

Agradecimientos

Antes que nada agradezco a mis padres por darme la vida.
Por su incondicional amor, apoyo y ayuda que he recibido desde siempre.

A mis hermanas y hermanos por su ayuda y apoyo.
A mis amigos y amigas: Faby, Luis, Bauche, Rocio, Cristhian, Rufino, Yazmín y Blanca.

Al Doctor Humberto Garcilazo Soto, por dirigirme esta tesis con tanta paciencia. Por todo su apoyo y enorme confianza depositada a lo largo de la carrera.

A mis sinodales que revisan esta tesis:
Dr. Jesús García Ravelo. Por la crítica constructiva realizada que ayudó a mejorar este trabajo.
Dr. Jaime Avendaño López. Por su ayuda y orientación.
Dr. Víctor David Granados García. Por todo el material bibliográfico facilitado.
Dr. Roberto Daniel Mota Esteves. Por su apoyo.

A todos mis profesores de la licenciatura que motivaron y ayudaron en mi formación.

Prefacio

La forma usual de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para un átomo hidrogenoide, es plantear dicha ecuación en el espacio de configuración. Esta ecuación adquiere la forma de una ecuación diferencial parcial. Aplicando el método de separación de variables se obtienen dos ecuaciones diferenciales, una ecuación diferencial ordinaria que involucra únicamente la parte radial de la solución y otra ecuación diferencial parcial que involucra la parte angular, a esta última ecuación le aplicamos nuevamente el método de separación de variables, originandose otras dos ecuaciones diferenciales ordinarias. Las eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger será el producto de las soluciones individuales que se obtengan de cada una de las ecuaciones diferenciales ordinarias. Además los eigenvalores quedan determinados por medio la Fórmula de Bohr.

Nuestro trabajo se limitará al cálculo del espectro de energía de un átomo hidrogenoide planteando la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos. En el Capítulo 1 desarrollamos cierta metodología que nos permitirá, más adelante, determinar de manera numérica el espectro de energía de un átomo hidrogenoide bajo el supuesto de que el potencial de atracción entre el núcleo y la partícula circundante es un potencial de Coulomb. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en el espacio de momentos adquiere la representación de una ecuación integral lineal. Después de ciertas expansiones planteamos un sistema infinito de ecuaciones lineales. En el capítulo 2 trabajamos específicamente con el átomo de Hidrógeno y encontramos su espectro de energía. Nos auxiliamos de algoritmos numéricos programados en el lenguaje de alto nivel FORTRAN 77.

En el capítulo 3, se presenta parte del artículo titulado "On the Theory of the Hydrogen Atom" del físico Vladimir Fock en donde establece una solución analítica a la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos. Se proyecta estereográficamente la ecuación integral de Schrödinger en la esfera S^3 , donde la ecuación integral es idéntica a la ecuación integral que satisfacen los armónicos esféricos en 4 dimensiones. También se concluye la Fórmula de Bohr.

Justificando el porque se resolvió de manera numérica un problema ampliamente estudiado y que además admite una solución analítica, presentamos en el Capítulo 4 un ejemplo de aplicación de lo desarrollado en los Capítulos 1 y 2. La metodología empleada en estos capítulos puede ser generalizada y utilizada para atacar problemas que carecen de una solución analítica. Presentamos una forma de estimar los eigenvalores de un átomo hidrogenoide constituido por un núcleo pesado (es decir, con un gran número de nucleones) y sujeto a dicho núcleo partículas tales como un electrón o un muón. Bajo estas circunstancias es más preciso considerar que el radio del núcleo es distinto de cero y por tanto ya no suponemos un potencial coulombiano sino un potencial extendido. Específicamente es este capítulo, se aproximan las energías de ligadura para un átomo hidrogenoide formado por un núcleo de un átomo de Uranio 235, ^{235}U y un muón, μ^- , orbitando.

Capítulo 1

Sobre el Átomo Hidrogenoide en el Espacio de Momentos

Para plantear la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos es necesario la aplicación de la transformada de Fourier a la ecuación diferencial de Schrödinger en el espacio de configuración, originando una ecuación integral lineal, que llamamos Ecuación Integral de Schrödinger. La función incógnita de esta ecuación integral es la transformada de Fourier de la función de onda, que depende de tres variables. Mediante expansiones en armónicos esféricos de la función de onda y del potencial central planteamos una nueva ecuación integral, cuya función incógnita depende de una sola variable. Se procede a discretizar esta última ecuación integral. Usando como base los Polinomios de Legendre expandemos la función de onda radial planteandose así un sistema infinito de ecuaciones lineales.

1.1. La Ecuación de Schrödinger en el Espacio de Momentos

A continuación deducimos la Ecuación Integral de Schrödinger en el espacio de momentos. Partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en notación de operadores planteada para una partícula sin espín bajo un potencial escalar $V(\mathbf{r})$

$$\left(\frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(\mathbb{R}) \right) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (1.1)$$

Definimos el elemento de la base continua

$$v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}, \quad (1.2)$$

cuyo ket asociado es denotado por $|\mathbf{p}\rangle$. Formando el bracket en la ecuación (1.1) encontramos

$$\left\langle \mathbf{p} \left| \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(\mathbb{R}) \right| \Psi \right\rangle = \langle \mathbf{p} | E | \Psi \rangle. \quad (1.3)$$

1.1. La Ecuación de Schrödinger en el Espacio de Momentos

Sabemos que $\mathbb{P}|\Psi\rangle = p^2|\Psi\rangle$, donde p es una variable real que está entre $[0, \infty)$. Usando este hecho, la linealidad del operador hamiltoniano y las propiedades de los brackets tenemos

$$\langle \mathbf{p}|V(\mathbb{R})|\Psi\rangle = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \langle \mathbf{p}|\Psi\rangle. \quad (1.4)$$

Se sabe que $\langle \mathbf{p}|\Psi\rangle$ es la transformada de Fourier de la función Ψ en el espacio de momentos, que denotamos por Φ

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{p}) &=: \langle \mathbf{p}|\Psi\rangle \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \int d^3r e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.5)$$

En el bracket izquierdo de la Ecuación (1.4) insertamos el operador unidad entre el operador potencial, $V(\mathbb{R})$, y la función de onda, Ψ , y usando la relación de clausura

$$\mathbf{1} = \int |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|$$

tenemos

$$\langle \mathbf{p}|V(\mathbb{R})|\Psi\rangle = \int d^3p' \langle \mathbf{p}|V(\mathbb{R})|\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|\Psi\rangle. \quad (1.6)$$

En el kernel de esta última integral identificamos el elemento de matriz del operador potencial, $V(\mathbb{R})$, entre los elementos $|\mathbf{p}\rangle$ y $|\mathbf{p}'\rangle$ que denotamos por $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') =: \langle \mathbf{p}|V(\mathbb{R})|\mathbf{p}'\rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3r e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} V(\mathbf{r}) e^{i\frac{\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}. \quad (1.7)$$

Entonces, la Ecuación (1.6) la reescribimos así

$$\langle \mathbf{p}|V(\mathbb{R})|\Psi\rangle = \int d^3p' V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Phi(\mathbf{p}'). \quad (1.8)$$

Para terminar de plantear la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos sustituimos la Ecuación (1.8) y la definición de transformada de Fourier en la Ecuación (1.4), obtenemos la siguiente ecuación integral lineal para Φ

$$\boxed{\int d^3p' V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Phi(\mathbf{p}') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \Phi(\mathbf{p}).} \quad (1.9)$$

Entonces la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en el espacio de momentos adquiere una representación integral. Notemos que la función incógnita de esta ecuación integral es una función de tres variables, del vector de momento, $\mathbf{p}$.

1.2. Simplificación a la Ecuación Integral Lineal de Schrödinger

En esta sección simplificamos la ecuación integral de Schrödinger a una ecuación integral lineal cuya función incógnita depende de una sola variable, a saber, la magnitud del vector $\mathbf{p}$. Para este cometido y a partir de ahora suponemos que nuestro potencial es central, es decir que solo depende de la magnitud del vector de posición, $V(r)$. Además expandemos las funciones $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ y $\Phi(\mathbf{p}')$ de la Ecuación (1.9) como a continuación presentamos.

Puesto que los armónicos esféricos forman una base ortonormal podemos hacer la expansión siguiente

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l V_l(p, p') Y_l^m(\hat{p}) Y_l^{*m}(\hat{p}'). \quad (1.10)$$

Aquí hemos expresado al vector $\mathbf{p}$ en coordenadas esféricas: $\hat{p}$ determina la orientación espacial, es decir $\hat{p} = (\theta, \varphi)$ donde los ángulos θ y φ representan el ángulo polar y azimutal, respectivamente; cuyos dominios son $0 < \theta \leq \pi$ y $0 < \varphi \leq 2\pi$.

Y p denota su magnitud, $p = \|\mathbf{p}\|$.

Notemos que los coeficientes $V_l(p, p')$ no dependen del número cuántico m , esto es debido a que el potencial es invariante bajo rotaciones, pues estamos considerando que el potencial es central.

Al igual que propusimos un desarrollo en armónicos esféricos para el potencial, podemos hacerlo ahora para la transformada de Fourier de la función de onda Ψ

$$\Phi(\mathbf{p}') = \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \phi_{l'}(p') Y_{l'}^{m'}(\hat{p}'). \quad (1.11)$$

Donde hemos usado la misma notación que en la expansión del potencial. Al no haber dependencia de m en los coeficientes $V_l(p, p')$ tampoco dependerán de este número los coeficientes $\phi_{l'}$ en el desarrollo de Φ .

El problema de encontrar los eigenvalores a la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos, planteada para el átomo Hidrogenoide, estará íntimamente ligado a los coeficientes, $\phi_{l'}$, de la expansión dada en la Ecuación (1.11).

Encontramos en la Sección 1.1, que la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos adquiere la representación integral dada en la Ecuación (1.9).

Sustituyendo en el lado izquierdo de esta ecuación las expansiones tanto del potencial $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, como de la transformada de Fourier de la función de onda, $\Phi(\mathbf{p}')$, tenemos

$$\sum_{l,m} \sum_{l',m'} \int p'^2 dp' V_l(p, p') Y_l^m(\hat{p}) \phi_{l'}(p') \int d\hat{p}' Y_l^{*m}(\hat{p}) Y_{l'}^{m'}(\hat{p}') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \Phi(\mathbf{p}). \quad (1.12)$$

1.3. La Transformada de Fourier de un Potencial Central

Puesto que los armónicos esféricos son ortonormales¹

$$\int d\hat{p}' Y_l^{*m}(\hat{p}') Y_{l'}^{m'}(\hat{p}') = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_l^{*m}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (1.13)$$

la Ecuación (1.12) se reduce a

$$\sum_{l,m} \int p'^2 dp' V_l(p, p') Y_l^m(\hat{p}) \phi_l(p') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \Phi(\mathbf{p}). \quad (1.14)$$

El factor $Y_l^m(\hat{p})$ puede salir de la integral pues no depende de la variable de integración. Sustituyendo nuevamente la expansión para $\Phi(\mathbf{p})$ en el lado derecho de esta última ecuación tenemos que

$$\sum_{l,m} \left(\int p'^2 dp' V_l(p, p') \phi_l(p') \right) Y_l^m(\hat{p}) = \sum_{l,m} \left(\left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p) \right) Y_l^m(\hat{p}), \quad (1.15)$$

de donde concluimos

$$\boxed{\int_0^{\infty} p'^2 dp' V_l(p, p') \phi_l(p') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p).} \quad (1.16)$$

Así hemos planteado una ecuación integral lineal para la funciones ϕ_l , pues las funciones $V_l(p, p')$ son totalmente determinadas en la siguiente sección. La utilidad de esta ecuación integral radica en que la función incógnita solo depende de una variable, la magnitud p . Pasaremos a trabajar con esta ecuación integral en las subsecuentes secciones.

1.3. La Transformada de Fourier de un Potencial Central

Lo que haremos a continuación es determinar los coeficientes, $V_l(p, p')$, de la expansión propuesta dada en la Ecuación (1.10), tendremos así, una expresión explícita de la transformada de Fourier de un Potencial Central.

Consideramos la expansión en armónicos esféricos de la función de onda plana²

$$e^{i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l \left(\frac{pr}{\hbar} \right) \sum_{m=-l}^l Y_l^{*m}(\hat{p}) Y_l^m(\hat{r}), \quad (1.17)$$

¹Ver [1].

²Ver, por ejemplo, [13].

1.3. La Transformada de Fourier de un Potencial Central

donde j_l denota las funciones esféricas de Bessel de orden l , definidas como

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x),$$

y con J_n representamos las funciones de Bessel de primera especie de orden n .

Sustituimos la expansión de la onda plana y su conjugada en el elemento de matriz del operador potencial, $V(\mathbb{R})$, entre los elementos $|\mathbf{p}\rangle$ y $|\mathbf{p}'\rangle$, dada en la Ecuación (1.7)

$$\begin{aligned} V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = & \frac{(4\pi)^2}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \int r^2 dr (-1)^{l'} i^{(l+l')} j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) V(r) j_{l'}\left(\frac{p'r}{\hbar}\right) \\ & \cdot Y_{l',m'}^*(\hat{p}') Y_l^m(\hat{p}) \int d\hat{r} Y_l^{*m}(\hat{r}) Y_{l',m'}(\hat{r}). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Usando la ortonormalidad de los armónicos esféricos (Ecuación (1.13)) tenemos

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{l,m} \frac{2}{\pi\hbar^3} \int r^2 dr (-1)^l i^{2l} j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) V(r) j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right) Y_l^m(\hat{p}) Y_l^{*m}(\hat{p}'). \quad (1.19)$$

Igualando los coeficientes de esta expansión con la serie propuesta en la Ecuación (1.10) se concluye que

$$\boxed{V_l(p, p') = \frac{2}{\pi\hbar^3} \int_0^\infty r^2 dr j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) V(r) j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right)}. \quad (1.20)$$

1.3.1. Transformada de un Potencial Coulombiano

Consideramos un átomo hidrogenoide conformado por un núcleo con carga eléctrica $+Ze$ y una partícula sujeta a dicho núcleo con carga $-e$. Tanto el núcleo como la partícula circundante se considerarán puntuales y atraídas entre sí por un potencial de Coulomb, en la Figura 1.1 esquematizamos un átomo hidrogenoide con estas características.

Pasemos a encontrar la expresión explícita de $V_l(p, p')$ específicamente para el caso en que $V(r)$ es un potencial coulombiano. Para esto nos auxiliamos de un resultado conocido como la **Fórmula del Potencial de Yukawa**³ donde se consideran precisamente potenciales tipo Yukawa que son de la forma

$$V_\gamma(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} e^{-\gamma r}; \quad \gamma = cte \in \mathbb{R}^+, \quad (1.21)$$

³Ver [15].

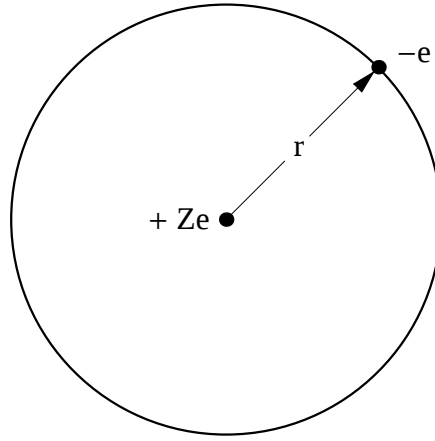


Figura 1.1: Representación clásica de un átomo hidrogenoide.

por e denotamos la carga elemental. Las unidades de γ son de longitud inversa. Este resultado afirma que es válida la siguiente igualdad

$$\int_0^{\infty} r^2 dr j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) V_{\gamma}(r) j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hbar^2}{2pp'} Q_l(z), \quad (1.22)$$

y la variable z es función de p y p'

$$z = \frac{p^2 + p'^2 + (\hbar\gamma)^2}{2pp'}. \quad (1.23)$$

Por Q_l denotamos las Funciones de Legendre de 2° especie de grado l , definidas por

$$Q_l(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{P_l(z)}{z-t} dt \quad \text{con } |z| > 1,$$

donde P_l es el Polinomio de Legendre de grado l .

Escribimos las primeras funciones de Legendre de 2° especie

$$\begin{aligned} Q_0(z) &= \frac{1}{2} \ln \left| \frac{z+1}{z-1} \right|, \\ Q_1(z) &= \frac{z}{2} \ln \left| \frac{z+1}{z-1} \right| - 1, \\ Q_2(z) &= \frac{1}{2} P_2(z) \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| - \frac{3z}{2}, \quad P_2(z) = \frac{3z^2 - 1}{2}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

1.4. Discretización de la Ecuación Integral Lineal

Finalmente, para encontrar $V_l(p, p')$ para el caso de un potencial coulombiano consideramos que $V_\gamma(r)$ es exactamente el potencial de Coulomb

$$V_c(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (1.25)$$

para lo cual simplemente tomamos $\gamma = 0$ en la Fórmula del Potencial de Yukawa. Entonces, sustituyendo la Ecuación (1.22) para este caso particular en la Ecuación (1.20) obtenemos

$$V_l(p, p') = -\frac{Z}{\pi\hbar} \frac{\hbar c}{pp'} \alpha Q_l(z), \quad (1.26)$$

donde α representa la constante de estructura fina, dada por

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c},$$

y z se reduce a

$$z = \frac{p^2 + p'^2}{2pp'}. \quad (1.27)$$

Notemos que nuestro potencial dado en la Ecuación (1.26) tiene una singularidad de tipo logarítmico cuando $p = p'$, pues en este caso se tiene que $z = 1$ y la función de Legendre de grado l , Q_l , tiene un factor de la forma

$$\ln \left| \frac{z+1}{z-1} \right|.$$

1.4. Discretización de la Ecuación Integral Lineal

Ahora que ya determinamos la transformada del potencial de Coulomb, procedemos a discretizar (por discretizar una ecuación, entendemos que se cambia la variable continua por una variable discreta) la ecuación integral lineal dada en la Ecuación (1.16). No ayudamos de expansiones en polinomios de Legendre para finalmente obtener un sistema infinito de ecuaciones lineales.

Escribamos nuevamente la Ecuación (1.16) que es de nuestro interés

$$\int_0^\infty p'^2 dp' V_l(p, p') \phi_l(p') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p).$$

Sustituyendo la expresión para $V_l(p, p')$ para el caso de un potencial coulombiano que encontramos en la Ecuación (1.26) tenemos

$$\int_0^\infty p' dp' \left[-\frac{Z}{\pi\hbar} \frac{\hbar c}{pp'} \alpha Q_l(z) \right] \phi_l(p') = p \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p). \quad (1.28)$$

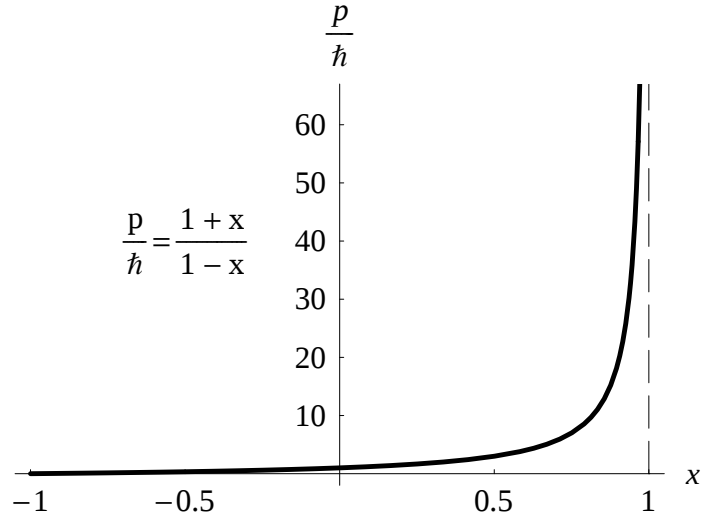


Figura 1.2: Gráfica del cambio de variable $p = p(x)$ para $b=1$.

Esta ecuación nos sugiere introducir una nueva función Λ_l ,

$$\Lambda_l : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R},$$

definida como

$$\Lambda_l(p) = p \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p), \quad (1.29)$$

con la cual la ecuación integral se transforma en

$$\int_0^\infty dp' \left[-\frac{Z \hbar c \alpha}{\pi \hbar} Q_l(z) \right] \frac{\Lambda_l(p')}{[E - \frac{p'^2}{2m}]} = \Lambda_l(p). \quad (1.30)$$

Ahora cambiemos el intervalo de integración $[0, \infty]$ al intervalo acotado $[-1, +1]$ por medio del siguiente cambio de variable

$$p : [-1, +1] \rightarrow [0, \infty]$$

dado por

$$p = p(x) = \hbar b \frac{1+x}{1-x}, \quad (1.31)$$

donde b es una constante⁴. Esta función es biyectiva, continua y con inversa continua, como se puede apreciar en la Figura 1.2.

Por el Teorema de Cambio de Variable, la Ecuación (1.30) se transforma en

⁴Consultar el apéndice C.

$$\int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[-\frac{Z \, \hbar c \, \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{\Lambda_l(p'(x'))}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2} = \Lambda_l(p(x)). \quad (1.32)$$

Con este cambio de variable hemos logrado que la función Λ_l compuesta con p

$$\Lambda_l \circ p : [-1, +1] \rightarrow \mathbb{R},$$

tenga como dominio el intervalo $[-1, +1]$ donde, como sabemos, los polinomios de Legendre forman un conjunto completo. Luego entonces, podemos expandir $\Lambda_l \circ p$ así

$$\Lambda_l \circ p(x) = \Lambda_l(p(x)) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l P_s(x). \quad (1.33)$$

Encontrando una forma de determinar los valores de los coeficientes a_n^l quedará determinada la función $\Lambda_l \circ p$, que a su vez determinará de manera unívoca a la función ϕ_l , a través de la Ecuación (1.29). Recordemos que con las funciones ϕ_l se puede construir la función de onda más general posible que satisface a la Ecuación Integral de Schrödinger (Ecuación (1.9)). Esta función de onda esta dada por el desarrollo de la Ecuación (1.11). Sin embargo, aclaramos que en esta tesis solo nos limitamos al cálculo de las energías de ligadura del átomo hidrogenoide.

Sustituyendo la expansión de $\Lambda \circ p$, (Ecuación (1.33)), en la Ecuación (1.32) tenemos

$$\sum_{s=0}^{\infty} a_s^l \int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[-\frac{Z \, \hbar c \, \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{P_s(x)}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2} = \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l P_s(x). \quad (1.34)$$

Multiplicando por el polinomio de Legendre de grado t , $P_t(x)$, ambos lados y luego integrando en el intervalo $[-1, +1]$ encontramos

$$\begin{aligned} \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[-\frac{Z \, \hbar c \, \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{P_s(x) P_t(x)}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2} \\ = \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l \int_{-1}^1 P_s(x) P_t(x) dx. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Usando ahora la propiedad de ortogonalidad de los polinomios de Legendre

$$\int_{-1}^1 P_s(x) P_t(x) dx = \frac{2}{2t+1} \delta_{st},$$

1.4. Discretización de la Ecuación Integral Lineal

llegamos a

$$\sum_{s=0}^{\infty} a_s^l \left(H_{st}^l - \frac{2}{2t+1} \delta_{st} \right) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad (1.36)$$

donde

$$H_{st}^l = \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 \frac{2b dx'}{(1-x')^2} \left[-\frac{Z \hbar c \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{P_s(x) P_t(x)}{E - \frac{(\hbar c b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2}. \quad (1.37)$$

Los índices s, t y l pueden tomar cualquier valor de $\mathbb{N} \cup \{0\}$. Así la Ecuación (1.36) representa un sistema infinito de ecuaciones lineales homogéneo que podemos expresarlo como

$$\begin{pmatrix} H_{0,0}^l - 2 & H_{0,1}^l & H_{0,2}^l & \cdots & H_{0,N}^l & \cdots \\ H_{1,0}^l & H_{1,1}^l - \frac{2}{3} & H_{1,2}^l & \cdots & H_{1,N}^l & \cdots \\ H_{2,0}^l & H_{2,1}^l & H_{2,2}^l - \frac{2}{5} & \cdots & H_{2,N}^l & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ H_{N-1,0}^l & H_{N-1,1}^l & H_{N-1,2}^l & \cdots & H_{N-1,N}^l & \cdots \\ H_{N,0}^l & H_{N,1}^l & H_{N,2}^l & \cdots & H_{N,N}^l - \frac{2}{2N+1} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^l \\ a_1^l \\ a_2^l \\ \vdots \\ a_{N-1}^l \\ a_N^l \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.38)$$

Analizando detenidamente el integrando de la Ecuación (1.37) observamos que cada integral H_{st}^l quedará cabalmente determinada cuando:

1. Se especifique algún átomo hidrogenoide y el estado cuántico que se busca, es decir, proporcionando el número de protones Z en el núcleo; la masa m de la partícula circundante y el valor de l .
2. Un par de números naturales para los índices s y t .
3. Algún valor para la energía E .

Si suponemos que la información del punto 1 está dada, entonces observemos que para cada valor de E le podemos asociar una matriz infinita al hacer variar los índices s y t en el conjunto de los naturales unión el cero. Es precisamente esta dependencia de E la que nos permitirá, en el siguiente capítulo y más adelante, encontrar los espectros de energía de algunos sistemas físicos.

Capítulo 2

Espectro de Energía del Átomo de Hidrógeno

Truncamos el sistema infinito de ecuaciones lineales presentado en la última sección del Capítulo 1. A partir de esto, encontramos de manera numérica el espectro de energía de un átomo de hidrógeno. Se explica el funcionamiento y las tareas que desempeña el programa FORTRAN 77 implementado. El objetivo de este capítulo será verificar y comprobar el correcto funcionamiento de este programa. Más adelante, nos serviremos de todo lo desarrollado en estos dos primeros capítulos para atacar un problema ligeramente más complicado.

2.1. Aproximación a un Sistema Finito de Ecuaciones Lineales

Puesto que aproximaremos nuestros resultados mediante la ayuda de algoritmos computacionales necesitamos que la expansión para Λ dada en la Ecuación (1.33) sea finita. Entonces la truncamos después de un número finito de sumandos, digamos N , -de la elección de este número dependerá, en parte, la precisión de los resultados que obtengamos- entonces

$$\Lambda_l(x) \approx \sum_{s=0}^N a_s^l P_s(x). \quad (2.1)$$

Por esta razón de truncamiento, la sumatoria de la Ecuación (1.36) también será finita, es decir, restringimos los valores del índice s entre 1 y N . Lo mismo pedimos para el índice t . Bajo estas consideraciones generamos un sistema lineal de ecuaciones homogéneo de tamaño $(N + 1) \times (N + 1)$, que en notación matricial adopta la forma

$$H A = 0, \quad (2.2)$$

o explícitamente

$$\begin{pmatrix} H_{0,0}^l - 2 & H_{0,1}^l & H_{0,2}^l & \cdots & H_{0,N}^l \\ H_{1,0}^l & H_{1,1}^l - \frac{2}{3} & H_{1,2}^l & \cdots & H_{1,N}^l \\ H_{2,0}^l & H_{2,1}^l & H_{2,2}^l - \frac{2}{5} & \cdots & H_{2,N}^l \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N-1,0}^l & H_{N-1,1}^l & H_{N-1,2}^l & \cdots & H_{N-1,N}^l \\ H_{N,0}^l & H_{N,1}^l & H_{N,2}^l & \cdots & H_{N,N}^l - \frac{2}{2N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0^l \\ a_1^l \\ a_2^l \\ \vdots \\ a_{N-1}^l \\ a_N^l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Con este sistema lineal de ecuaciones se trabajará en lo sucesivo para aproximar los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger en su representación integral. Como ya explicábamos, para cada valor de E le asociamos su respectiva matriz H , sin embargo será el determinante de esta matriz la que nos aportará información vital sobre el sistema físico.

El espectro de energía del átomo hidrogenoide serán los valores de E para los cuales el determinante se anula, ejemplificamos y explicamos esto con más detalle en la Sección 2.3.

Aclaremos que hasta aquí todos los resultados y ecuaciones deducidas son válidas para cualquier átomo hidrogenoide, considerando que el potencial atractivo entre el núcleo y la partícula circundante es de tipo coulombiano.

2.2. Sobre los Programas en Fortran 77

Nuestro siguiente paso en la búsqueda de los eigenvalores a la ecuación integral de Schrödinger, pensada para el átomo hidrogenoide, es construir la matriz H del sistema lineal dado en la Ecuación (2.3). Recordemos que la matriz H está formada por las dobles integrales H_{st}^l dadas en la Ecuación (1.37) cuyos integrandos son funciones bastante complicadas. Para tener una precisión numérica aceptable necesitamos matrices H de gran tamaño, es decir que N deberá ser suficientemente grande. También mencionamos que construiremos matrices H para distintos valores de E .

Es precisamente aquí donde se presenta la necesidad de usar algoritmos computacionales para realizar estas tareas tan monótonas y tediosas. Incluso el cálculo de las integrales H_{st}^l podría ser imposible de realizar de manera analítica.

Para estos propósitos se implemento un programa codificado en el Lenguaje de alto nivel FORTRAN 77 el cual hemos llamado `atomohidrogeno.f`.

Precisamente para construir la matriz H del sistema de ecuaciones lineales, dado en la Ecuación (2.3), nos auxiliamos del programa `atomohidrogeno.f`; además este programa calcula el determinante de estas matrices, lo cuál será fundamental para encontrar las energías de ligadura como veremos en la siguiente sección. Como la matriz H está conformada por integrales dobles construimos una subrutina para encontrar el

valor de estas integrales, como algoritmo que la sustenta tenemos lo que se conoce como *Cuadratura de Gauss*¹.

Este programa es lo suficientemente general para encontrar los eigenvalores de cualquier átomo hidrogenoide con un potencial coulombiano pues solo basta especificar los parámetros como son la masa de la partícula sujeta al núcleo, m , el número de protones en el núcleo, Z y algún valor particular de l ; todo esto se puede cambiar fácilmente como se muestra en este extracto del programa ²

```
***** P A R A M E T R O S *****
*
* b = Sqrt[2*m*c**2*E1]/hbarra*c; E1= Energía del Estado Base *
* b = Parámetro en el cambio de variable del intervalo de [-1,+1]*
* Ra = Radio del núcleo=1.23*A**(1/3); A= Número de Nucleones *
* Z = Número de protones *
* pm = m*c**2 (Masa de la partícula en MeV's) *
*****

c Atomo de Hidrogeno
  Z =1.
  pm=0.51099

c Atomo Hidrogenoide c   Z =92. c   pm=105.

  E1= pm*(Z*alfa)**2/2.
  b = Sqrt(2*pm*E1)/hc
  NA=235
  Ra=1.23*NA**(1./3.)
```

También, el programa es flexible en cuanto a precisión se refiere, pues el tamaño $(N + 1) \times (N + 1)$ de las matrices H , el número de puntos en la cuadratura de Gauss, entre otras cosas se especifican desde el inicio del programa

```
***** P R E C I S I O N  EN EL  A L G O R I T M O *****
*
* NG= Numero de puntos en la cuadratura de Gauss. *
* NMAT= Tamano de la matriz H *
* NPP= Numero de puntos para hacer el Plot de E .vs. Det(E) *
```

¹Ver [7].

²Para el código completo consultar el Apéndice B.

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

* Numero de valores distintos que toma la energia. *

NG = 37

NPP = 35

NMAT= 35

Según la experiencia los valores óptimos para N oscilaron entre $N = 38$ y $N = 45$. Con este valor el programa FORTRAN 77 arrojaba datos numéricos tanto con una precisión y tiempo de ejecución aceptables. Una vez asignado el valor de N se mantuvo fijo a lo largo de los distintos calculos realizados.

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

En esta sección desarrollamos el procedimiento para encontrar las energías de ligadura del átomo de hidrógeno. Partimos del sistema lineal dado en la Ecuación (2.3).

Puesto que estamos tratando con el átomo de hidrógeno tenemos que $Z = 1$ y m es la masa del electrón³ además consideremos los casos que corresponden a los valores de l igual a 0, 1 y 2, estos datos nos ayudarán a calcular los valores de las integrales H_{st}^l (Ecuación (1.37)) y así construir la matriz H . En la Figura 2.1 presentamos un esquema clásico de un átomo de hidrógeno.

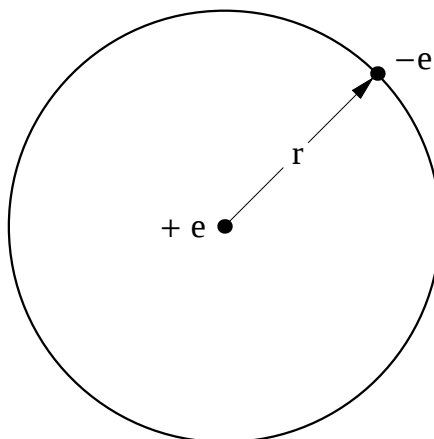


Figura 2.1: Representación clásica del átomo de hidrógeno.

Nuestro primer caso ha considerar es para $l = 0$. Como ya habíamos visto la función de Legendre de 2º especie para este valor de l viene dada por

³Ver apéndice C para los valores numéricos y unidades empleados.

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

$$Q_0(z) = \frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right|.$$

Puesto que z es función de p y p' , relación dada por la Ecuación (1.27), y que a su vez p es función de x conforme a la Ecuación (1.31), tenemos

$$\left| \frac{1+z}{1-z} \right| = \left(\frac{p+p'}{p-p'} \right)^2 = \left(\frac{1-xx'}{x-x'} \right)^2, \quad (2.4)$$

de donde

$$Q_0(x) = \ln \left| \frac{1-xx'}{x-x'} \right|.$$

Dado un valor particular de s y t queda determinado el integrando de las dobles integrales H_{st}^0 , dadas en la Ecuación (1.37), salvo el parámetro E .

Nuestro programa FORTRAN 77, `atomohidrogeno.f`, consta de dos subrutinas: la primera de ellas toma un valor específico de E y calcula cada una de las dobles integrales H_{st}^0 que conforman la matriz H del sistema matricial dado en la Ecuación 2.3. Los índices s y t varían entre 0 y el N dado previamente.

La segunda subrutina toma la matriz construida anteriormente y le calcula su determinante. Por $H(E)$ denotamos la matriz que surge al considerar este valor de E en cada una de las integrales H_{st}^l .

Es muy importante destacar que a la energía E se le considera como una variable independiente y al determinante de $H(E)$ como la variable dependiente. Los valores de E fueron dados de una manera un tanto arbitraria aunque sabemos que solo pueden ser negativos. La cantidad de valores de E oscilaron entre 30 y 40. Para cada uno de ellos el programa construyó su matriz y calculó su determinante. Graficando en el eje x los distintos valores de E , y en el eje y , el valor del determinante de la matriz encontrada, que carece de significado físico, se obtuvo la Figura 2.2. Haciendo un detalle de la parte reducida del gráfico anterior, encontramos la Figura 2.3.

Para tener soluciones no triviales en el sistema lineal (Ecuación (2.3)) necesitamos que el determinante de la matriz $H = (H_{mn}^l)$ sea igual a cero⁴, de donde resultará que solo con ciertos valores específicos de E , y no otros, se tienen soluciones no triviales a la ecuación integral de Schrödinger. Estos valores son precisamente las energías de enlace para el átomo de Hidrógeno.

Así pues las energías de ligadura son justamente los ceros de las Figuras 2.2 y 2.3 y aunque las figuras no son muy claras se puede intuir que hay una infinidad de ellos. Mediante el *método de la bisección* aproximamos en 4 dígitos significativos los primeros ceros de estos gráficos:

⁴Pues si el determinante fuera distinto de cero la matriz H sería invertible, luego existiría una única solución, a saber la solución trivial, ver [10].

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

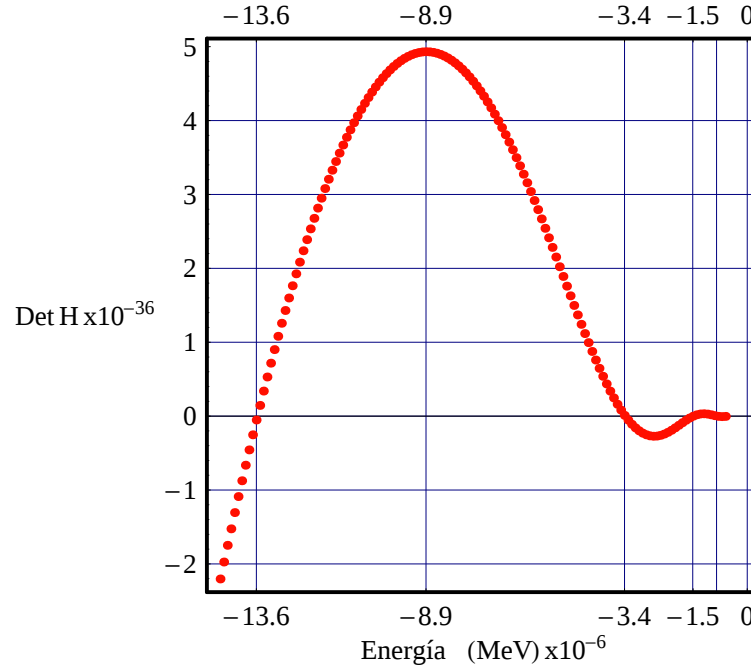


Figura 2.2: Determinante de la matriz H contra los valores de la energía.

- $E_1 = -13.605612$ eV,
- $E_2 = -3.401434$ eV,
- $E_3 = -1.511729$ eV,
- $E_4 = -0.850395$ eV,
- $E_5 = -0.544286$ eV,
- $E_6 = -0.377987$ eV.

los cuales coinciden muy aproximadamente con las energías dadas por la fórmula de Bohr

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5)$$

Cabe destacar que mientras más grande es el valor de N , y por tanto el tamaño de la matriz H , estos valores convergen en más dígitos significativos con los valores teóricos. Presentamos en la Tabla 2.1 un cuadro comparativo de los primeros eigenvalores encontrados de manera numérica y dados por la fórmula de Bohr, se puede apreciar una buena aproximación entre ambos resultados.

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

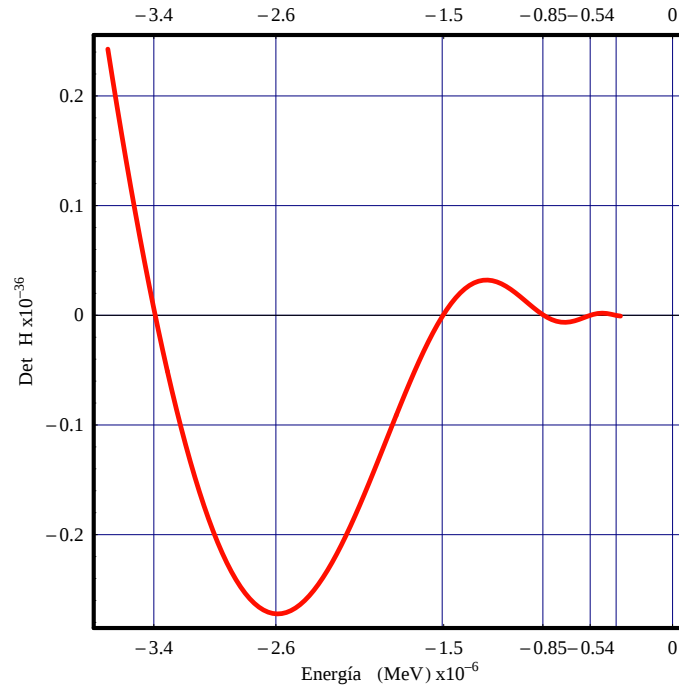


Figura 2.3: Detalle de la Figura 2.2.

Energía en eV	Método Numérico	Fórmula de Bohr
E_1	-13.605612	-13.605698
E_2	-3.401434	-3.401424
E_3	-1.511729	-1.511744
E_4	-0.850395	-0.850356
E_5	-0.544286	-0.544227
E_6	-0.377987	-0.377936

Cuadro 2.1: Tabla comparativa de las primeras energías de enlace.

Resumiendo nuestro primer caso, tenemos que si $l = 0$ los valores permitidos de la energía E están discretizados y además hay una infinidad de ellos: $E_1, E_2, E_3, E_4, \dots$

Nuestro siguiente caso es cuando $l = 1$. Con este valor de l calculemos el espectro de energía del átomo de hidrógeno. La función de Legendre $Q_1(z)$ esta dada por

$$Q_1(z) = \frac{z}{2} \ln \left| \frac{z+1}{z-1} \right| - 1.$$

Como función de la variable x tenemos que

$$Q_1(x) = \frac{(1 - xx')^2 + (x - x')^2}{(1 - x^2)(1 - x'^2)} \ln \left| \frac{1 - xx'}{x - x'} \right| - 1.$$

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

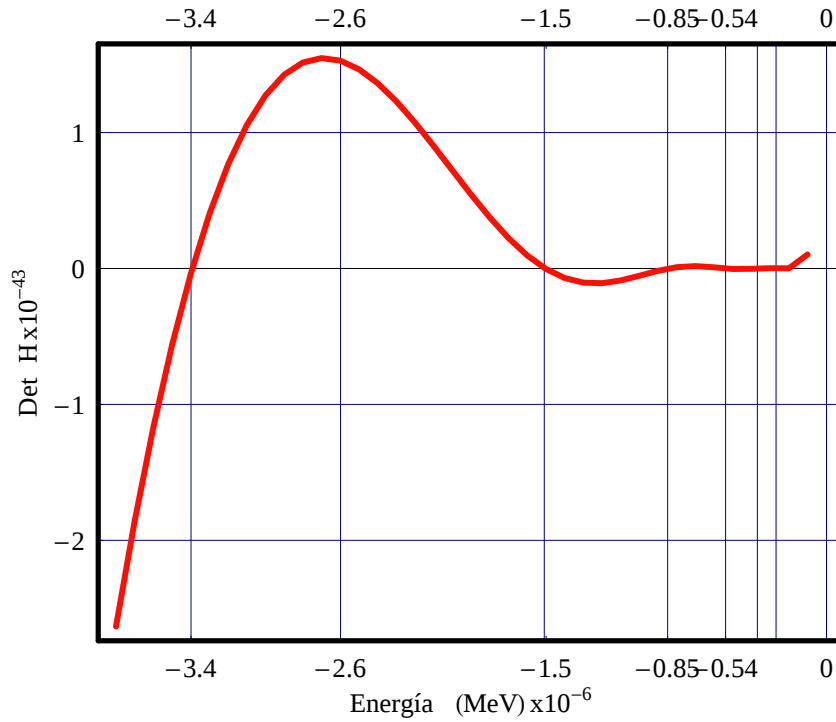


Figura 2.4: Gráfica para el caso $l = 1$.

Procediendo exactamente de la misma manera que para el caso $l = 0$ se obtuvo la Figura 2.4. Aparentemente tiene los mismos los ceros de la Figura 2.2 pero hay una notable diferencia: el primer cero de este nuevo gráfico está ubicado en lo que hemos denotado por E_2 y luego tenemos los mismos subsiguientes ceros:

- $E_2 = -3.401434$ eV,
- $E_3 = -1.511729$ eV,
- $E_4 = -0.850395$ eV,
- $E_5 = -0.544286$ eV,
- $E_6 = -0.377987$ eV.

Luego, si $l = 1$, los ceros están dados por $E_2, E_3, E_4, \dots$ y así sucesivamente.

Por último veamos que sucede si $l = 2$; nuestra función de Legendre de 2° especie $Q_2(z)$ está dado por

$$Q_2(z) = \frac{1}{2} P_2(z) \ln \left| \frac{1+z}{1-z} \right| - \frac{3z}{2}, \quad P_2(z) = \frac{3z^2 - 1}{2},$$

2.3. Energías de Ligadura del Átomo de Hidrógeno

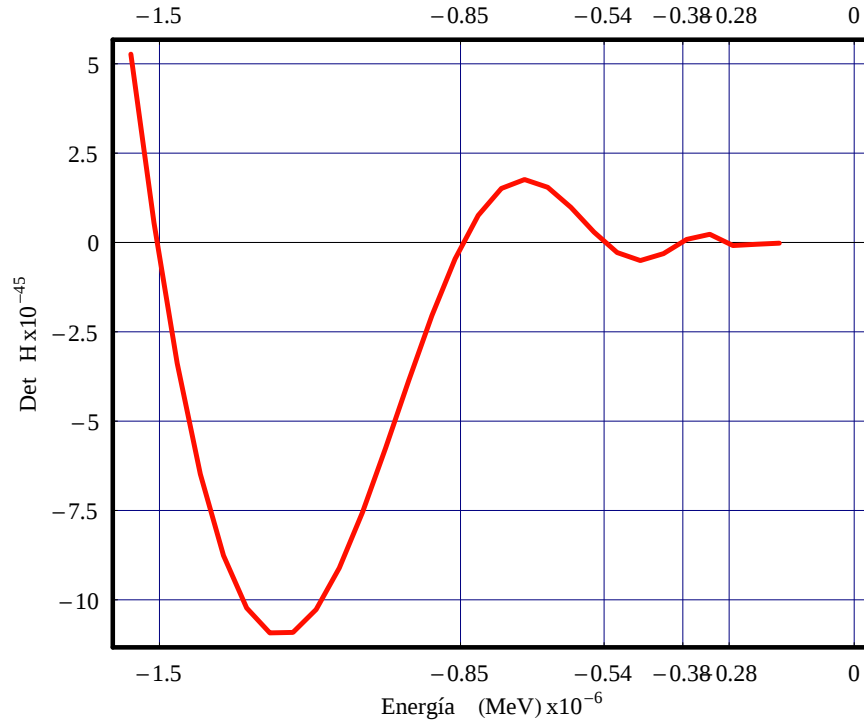


Figura 2.5: Gráfica para el caso $l = 2$.

y en términos de la variable x :

$$Q_2(x) = \left\{ \frac{3}{2} \left[\frac{(1 - xx')^2 + (x - x')^2}{2(1 - x^2)(1 - x'^2)} \right]^2 - \frac{1}{2} \right\} \ln \left| \frac{1 - xx'}{x - x'} \right| - \frac{3(1 - xx')^2 + (x - x')^2}{2(1 - x^2)(1 - x'^2)}.$$

De una manera totalmente análoga se procedió a dar diferentes valores a E , construir su respectiva matriz, calcularle su determinante y encontramos la Figura 2.5.

En dicha figura vemos que nuevamente se recorrió el cero, es decir, si $l = 2$ entonces el primer cero se encuentra en E_3 , y a partir de ahí los siguientes ceros coinciden

- $E_3 = -1.511729 \text{ eV}$,
- $E_4 = -0.850395 \text{ eV}$,
- $E_5 = -0.544286 \text{ eV}$,
- $E_6 = -0.377987 \text{ eV}$.

2.3.1. Observación Empírica de los valores permitidos de l .

Resumiendo los tres casos anteriores, tenemos que si $l = 0$, entonces, los ceros están dados por $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5, \dots$. Luego, si $l = 1$, los valores permitidos de E son $E_2, E_3, E_4, E_5, \dots$. Y si $l = 2$ tenemos que las soluciones no triviales están en $E_3, E_4, E_5, \dots$. Se observa que hay corrimiento de los ceros a medida que l aumenta. Podemos conjeturar que dado un valor de l , el primer cero de su respectivo gráfico de E contra el determinante de H se encuentra en el lugar $l + 1$, es decir en E_{l+1} . Resumimos esto en la Tabla 2.2.

Valor de l	Energías									
0	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	$\dots$	E_n	E_{n+1}	$\dots$
1		E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	$\dots$	E_n	E_{n+1}	$\dots$
2			E_3	E_4	E_5	E_6	$\dots$	E_n	E_{n+1}	$\dots$
3				E_4	E_5	E_6	$\dots$	E_n	E_{n+1}	$\dots$
$\vdots$					$\ddots$	$\ddots$	$\dots$	$\ddots$	$\vdots$	$\dots$
l									E_{n+1}	$\dots$

Cuadro 2.2: Corrimientos de las energías E_n para distintos valores de l .

Ahora pensando un poco diferente las cosas, dado un cierto valor de energía E_n nos preguntamos para que valores de l nos encontramos con esta energía. En la siguiente tabla se dan distintas energías y a la izquierda los valores de l para los cuales aparece esta energía.

Energía	Valores permitidos de l
E_1	0.
E_2	0,1.
E_3	0,1,2.
E_4	0,1,2,3.
$\vdots$	$\vdots$
E_n	0,1,2,3, $\dots$, $n-1$.

Cuadro 2.3: Valores posibles de l dada una energía E_n .

Dicho de otra manera estamos verificando de manera empírica que dado un valor específico de energía de ligadura E_n con $n = 1, 2, 3, \dots$ el índice l puede tomar únicamente los valores de $0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Capítulo 3

Solución Analítica al Átomo Hidrogenoide en el Espacio de Momentos (Solución de V. Fock)

En este capítulo desarrollamos una parte del artículo llamado “On the Theory of the Hydrogen Atom”, presentado por V. Fock en 1935^a. Aquí se resuelve la ecuación de Schrödinger planteada para el átomo tipo hidrogenoide en el espacio de momentos de manera analítica. Para ello se procede a demostrar que dicha ecuación es idéntica a la ecuación integral lineal de los armónicos esféricos de la teoría del potencial en cuatro dimensiones.

^aVer [8].

3.1. La ecuación Integral de Schrödinger

En el Capítulo 1 concluimos que la ecuación de Schrödinger en su representación integral esta dada por

$$\int d^3p' V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Phi(\mathbf{p}') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \Phi(\mathbf{p}), \quad (3.1)$$

recordando que $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ esta definido como

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3r e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} V(r) e^{i\frac{\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}. \quad (3.2)$$

Primero mostramos que si $V(r)$ es el potencial de Coulomb, entonces el elemento de matriz $V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ cumple con la relación

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = - \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{Z\hbar^2 e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|^2}. \quad (3.3)$$

Para demostrar esta última relación suponemos, por un momento, que el potencial $V(r)$ es un potencial del tipo Yukawa, es decir que

$$V_\gamma(r) = -\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\gamma r}}{r},$$

quedando claro que el potencial de Coulomb es un caso límite de este

$$V_c(r) = \lim_{\gamma \rightarrow 0} V_\gamma(r). \quad (3.4)$$

Entonces,

$$\int d^3r e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} V_c(r) e^{i\frac{\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} = -\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^{-\gamma r}}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.5)$$

y realizando la integración con respecto a las dos variables angulares tenemos

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} V_c(r) e^{i\frac{\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} &= \frac{Z e^2 \hbar}{2i\epsilon_0} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^\infty r dr \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| r} \left[e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| r \cos\theta} \right]_{\cos\theta=-1}^1 e^{-\gamma r} \\ &= \frac{Z e^2 \hbar}{2i\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \left\{ \frac{e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| - \gamma} r}{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| - \gamma} + \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| + \gamma} r}{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| + \gamma} \right\}_{r=0}^\infty \\ &= \frac{Z e^2 \hbar}{2i\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|} \lim_{\gamma \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| - \gamma} + \frac{1}{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| + \gamma} \right\}. \end{aligned}$$

Por último tomando el límite concluimos

$$\int d^3r e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} V_c(r) e^{i\frac{\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} = -\frac{Z \hbar^2 e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|^2}. \quad (3.6)$$

Comparando este último resultado con la Ecuación (3.3) concluimos lo deseado.

Así pues, de lo anterior concluimos que la ecuación integral de Schrödinger (Ecuación (3.1)) en el espacio de momentos puede ser escrita de la forma

$$\boxed{-\frac{Z e^2}{8\pi^3 \hbar \epsilon_0} \int d^3p' \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|^2} \Phi(\mathbf{p}') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \Phi(\mathbf{p})}. \quad (3.7)$$

3.2. Proyección estereográfica de $\mathbb{R}^3$ a $\mathbb{S}^3$

Primero explicamos de manera escueta qué es la proyección estereográfica del plano euclídeo a la 2-esfera, con objeto de darnos una idea en la forma que se generalizará más adelante y de la interpretación geométrica.

Recordemos que la 2-esfera es un objeto geométrico de dos dimensiones inmersa en $\mathbb{R}^3$, definida como

$$\mathbb{S}^2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x^2 + y^2 + z^2 = 1\}.$$

3.2. Proyección estereográfica de $\mathbb{R}^3$ a $\mathbb{S}^3$

Intuitivamente la proyección estereográfica es hacer una correspondencia vía una función, que denotamos por Ξ , del plano euclídeo $\mathbb{R}^2$ con la esfera común -excepto el polo sur-, es decir $\mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, -1)\}$. Resultando que estos dos espacios con sus respectivas topologías son homeomorfos¹ entre sí vía la función Ξ .

La identificación la podemos visualizar gráficamente ya que tiene una interpretación geométrica sencilla. Tomemos la 2-esfera, $\mathbb{S}^2$, y por el ecuador hagamos pasar un plano perpendicular al eje de la esfera tal y como se muestra en la Figura 3.1.

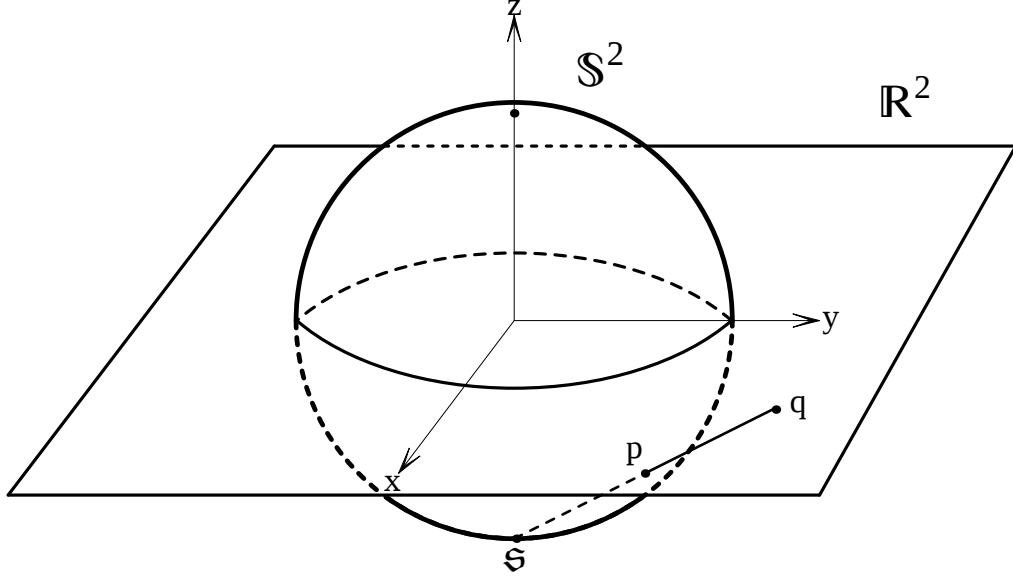


Figura 3.1: Proyección Estereográfica de $\mathbb{S}^2$ a $\mathbb{R}^2$

Luego, para construir la regla de asociación entre los puntos del plano con la esfera procedemos así: tomemos cualquier punto $\mathbf{p}$ de la esfera, exceptuando el polo sur, y tracemos la única línea recta que pasa por este punto $\mathbf{p}$ y por el polo sur que hemos denotado por $\mathcal{S}$; esta recta se intersectará en un único punto del plano, que le llamaremos $\mathbf{q}$. Así a cada punto de $\mathbb{S}^2$ -excepto uno, el polo sur- le corresponde uno y solo un punto del plano euclídeo $\mathbb{R}^2$. Esta asignación biunívoca falla para el polo sur pues no habría forma de definirle una única recta que pase por él.

La función explícita esta dada por

$$\begin{aligned} \Xi : \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, -1)\} \\ \mathbf{q} = (x, y) &\mapsto \mathbf{p} = (\xi, \eta, \zeta), \end{aligned}$$

donde

¹Un homeomorfismo es una función biyectiva, continua y cuya inversa también resulta ser continua.

$$\begin{aligned}\xi &= \frac{2x}{1 + |\mathbf{q}|^2} = \sin\theta \cos\varphi, \\ \eta &= \frac{2y}{1 + |\mathbf{q}|^2} = \sin\theta \sin\varphi, \\ \zeta &= \frac{1 - |\mathbf{q}|^2}{1 + |\mathbf{q}|^2} = \cos\theta.\end{aligned}$$

Notemos que además de las coordenadas cartesianas, hemos escrito las respectivas coordenadas esféricas del punto $\mathbf{p} = \Xi(\mathbf{q})$ pues este es un punto de $\mathbb{S}^2$. Al igual que el Capítulo 1 denotamos por θ al ángulo polar y por φ al ángulo azimutal.

La inversa, que no es difícil de calcular, está dada por

$$\begin{aligned}\Xi^{-1} : \mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, -1)\} &\rightarrow \mathbb{R}^2 \\ \mathbf{p} = (x, y, z) &\mapsto \left(\frac{x}{1+z}, \frac{y}{1+z} \right),\end{aligned}$$

la cual claramente es continua.

Para los propósitos que V. Fock tenía en mente necesitamos una pequeña generalización de la proyección estereográfica: en vez de proyectar el plano euclídeo sobre la esfera común construimos algo totalmente análogo subiendo una dimensión a cada objeto, es decir, proyectar el espacio euclídeo de 3 dimensiones, $\mathbb{R}^3$, sobre la 3-esfera, $\mathbb{S}^3$, que es la esfera unitaria que está inmersa en un espacio de 4 dimensiones $\mathbb{S}^3 \subset \mathbb{R}^4$ definida como

$$\mathbb{S}^3 = \{(x, y, z, w) \in \mathbb{R}^4 \mid x^2 + y^2 + z^2 + w^2 = 1\}.$$

La generalización de la función proyección², que seguimos denotando por Ξ , es totalmente análoga al caso que hemos presentado anteriormente, pero hacemos una ligera modificación: interpretamos las componentes del vector momento $\mathbf{p}$ dividido entre p_0 como las coordenadas del espacio euclídeo $\mathbb{R}^3$, es decir pensamos cada vector de la forma

$$\frac{\mathbf{p}}{p_0} = \left(\frac{p_x}{p_0}, \frac{p_y}{p_0}, \frac{p_z}{p_0} \right),$$

donde p_0 está definido por

$$p_0 = \sqrt{-2mE}. \quad (3.8)$$

Notemos que p_0 es un número real pues $E < 0$, puesto que sólo estamos considerando el caso en que el espectro es discreto.

Entonces la función generalizada está dada explícitamente por

²Ver [12] para la generalización en n-dimensiones.

$$\begin{aligned} \Xi : \mathbb{R}^3 &\rightarrow \mathbb{S}^3 \setminus \{(0, 0, 0, -1)\} \\ \frac{\mathbf{p}}{p_0} = \frac{1}{p_0}(p_x, p_y, p_z) &\mapsto (\xi, \eta, \zeta, \chi), \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde

$$\xi = \frac{2p_0 p_x}{p_0^2 + p^2} = \sin\alpha \sin\theta \cos\varphi, \quad (3.10)$$

$$\eta = \frac{2p_0 p_y}{p_0^2 + p^2} = \sin\alpha \sin\theta \sin\varphi, \quad (3.11)$$

$$\zeta = \frac{2p_0 p_z}{p_0^2 + p^2} = \sin\alpha \cos\theta, \quad (3.12)$$

$$\chi = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2} = \cos\alpha. \quad (3.13)$$

Además de escribir las coordenadas cartesianas también damos las coordenadas esféricas sobre la 3-esfera, las cuales serán de utilidad, las hemos denotado con los ángulos α, θ, φ , estos dos últimos ángulos, θ y φ , tienen el significado usual, ángulo polar y azimutal respectivamente, de las coordenadas esféricas en un espacio 3-dimensional. Los dominios de los ángulos son $0 < \alpha \leq \pi$, $0 < \theta \leq \pi$ y $0 < \varphi \leq 2\pi$.

El elemento de área sobre la esfera unitaria 3-dimensional, $\mathbb{S}^3$, esta dada por

$$d\Omega = \sin^2\alpha d\alpha \sin\theta d\theta d\varphi, \quad (3.14)$$

y se relaciona con el elemento de volumen en el espacio de momentos por la siguiente relación

$$d^3p = dp_x dp_y dp_z = p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{1}{8p_0^3} (p_0^2 + p^2)^3 d\Omega, \quad (3.15)$$

la cual pasamos a deducir.

Despejando p de la Ecuación (3.13) tenemos que

$$p^2 = p_0^2 \frac{1 - \chi}{1 + \chi}. \quad (3.16)$$

Derivando con respecto a χ encontramos

$$p dp = -\frac{p_0^2}{(1 + \chi)^2} d\chi. \quad (3.17)$$

Por otro lado calculemos $1 + \chi$:

$$1 + \chi = 1 + \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2} = \frac{2p_0^2}{p_0^2 + p^2}, \quad (3.18)$$

3.3. La ecuación Integral de Schrödinger proyectada en $\mathbb{S}^3$

de donde

$$\frac{(p_0^2 + p^2)^2}{4p_0^2} = \frac{p_0^2}{(1 + \chi)^2}. \quad (3.19)$$

Sustituyendo esto último en la Ecuación (3.17) obtenemos

$$pdp = -\frac{(p_0^2 + p^2)^2}{4p_0^2}d\chi, \quad (3.20)$$

también de la Ecuación (3.13) tenemos

$$d\chi = d(\cos\alpha) = -\sin\alpha d\alpha. \quad (3.21)$$

Sustituyendo la diferencial anterior en la ecuación (3.20) tenemos

$$pdp = \frac{p_0^2 + p^2}{4p_0^2} \sin\alpha d\alpha, \quad (3.22)$$

Por último calculemos $\sin\alpha$ en términos de la variable p

$$\sin\alpha = \sqrt{1 - \cos^2\alpha} = \sqrt{1 - \left(\frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2}\right)^2} = \frac{2p_0p}{p_0^2 + p^2}, \quad (3.23)$$

de donde

$$p = \frac{p_0^2 + p^2}{2p_0} \sin\alpha. \quad (3.24)$$

Multiplicando miembro a miembro las Ecuaciones (3.22) y (3.24) tenemos

$$p^2 dp = \frac{(p_0^2 + p^2)^3}{8p_0^3} \sin^2\alpha d\alpha. \quad (3.25)$$

Multiplicando ambos lados por $\sin\theta d\theta d\varphi$

$$p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{(p_0^2 + p^2)^3}{8p_0^3} \sin^2\alpha d\alpha \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (3.26)$$

tenemos exactamente la ecuación (3.15).

3.3. La ecuación Integral de Schrödinger proyectada en $\mathbb{S}^3$

Definimos

$$\lambda = \frac{mZe^2}{4\pi\epsilon_0\hbar p_0}, \quad (3.27)$$

e introducimos la nueva función

3.3. La ecuación Integral de Schrödinger proyectada en $\mathbb{S}^3$

$$\Theta(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{\pi}{\sqrt{8}} p_0^{-5/2} (p_0^2 + p^2)^2 \Phi(\mathbf{p}), \quad (3.28)$$

para transformar la ecuación integral de Schrödinger, Ecuación (3.7), en la siguiente manera

$$\Theta(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{\lambda}{2\pi^2} \int \frac{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)}{4p_0^2 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \Theta(\alpha', \theta', \varphi') d\Omega'. \quad (3.29)$$

Demostremos que se cumple la relación anterior. Partimos de la Ecuación (3.7) en la cual sustituimos la diferencial de volumen que encontramos en la Ecuación (3.15) y además introducimos la nueva función dada en la Ecuación (3.28) para obtener

$$-\frac{Ze^2}{8\pi^3 \hbar \varepsilon_0} \int \frac{d\Omega' (p_0^2 + p'^2)}{8p_0^3 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \Theta(\alpha', \theta', \varphi') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \frac{\Theta(\alpha, \theta, \varphi)}{(p_0^2 + p^2)}. \quad (3.30)$$

De la definición de p_0 dado en la Ecuación (3.8) tenemos

$$-\frac{Ze^2}{8\pi^3 \hbar \varepsilon_0} \int \frac{d\Omega' (p_0^2 + p'^2)}{8p_0^3 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \Theta(\alpha', \theta', \varphi') = -\frac{1}{2m} [p_0^2 + p^2] \frac{\Theta(\alpha, \theta, \varphi)}{(p_0^2 + p^2)^2}, \quad (3.31)$$

de donde

$$\frac{mZe^2}{8\pi^3 \hbar \varepsilon_0 p_0} \int d\Omega' \frac{(p_0^2 + p'^2)(p_0^2 + p^2)}{4p_0^2 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \Theta(\alpha', \theta', \varphi') = \Theta(\alpha, \theta, \varphi). \quad (3.32)$$

Considerando la definición de λ dada en la Ecuación(3.27)) encontramos la ecuación deseada.

3.3.1. Modificación al kernel de la Ecuación Integral

A continuación seguimos con más cambios al kernel de la ecuación integral que hemos encontrado, sin olvidar que nuestro objetivo final es llevar la ecuación integral de Schrödinger a la ecuación integral de los armónicos esféricos 4-dimensionales.

Demostremos que el inverso del kernel de la ecuación integral (3.29) satisface la siguiente relación importante

$$4 \sin^2 \frac{\omega}{2} = \frac{4p_0^2 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)}, \quad (3.33)$$

donde el ángulo ω es el arco de longitud del círculo máximo que conecta los puntos $(\alpha, \theta, \varphi)$ y $(\alpha', \theta', \varphi')$ sobre la esfera $\mathbb{S}^3$. Tenemos además que

$$\cos \omega = \cos \alpha \cos \alpha' + \sin \alpha \sin \alpha' \cos \gamma, \quad (3.34)$$

donde γ cumple con

3.3. La ecuación Integral de Schrödinger proyectada en $\mathbb{S}^3$

$$\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi - \varphi'). \quad (3.35)$$

Para demostrar la relación (3.33) veremos de manera independiente que la distancia al cuadrado es idéntica a cada uno de los miembros de esta ecuación.

Sea

$$d : \mathbb{R}^4 \times \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$$

la métrica usual de $\mathbb{R}^4$, es decir si $(\xi, \eta, \zeta, \chi), (\xi', \eta', \zeta', \chi') \in \mathbb{R}^4$, entonces

$$d^2 = (\xi - \xi')^2 + (\eta - \eta')^2 + (\zeta - \zeta')^2 + (\chi - \chi')^2.$$

Mostremos primero que la distancia al cuadrado cumple con la siguiente relación

$$d^2 = \frac{4p_0^2 |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)}, \quad (3.36)$$

para lo cual partimos de las coordenadas dadas por la proyección estereográfica definidas en las Ecuaciones (3.10) - (3.13). Consideramos que las coordenadas cartesianas de los vectores del espacio de momentos están dados por $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ y $\mathbf{p}' = (p_{x'}, p_{y'}, p_{z'})$. Entonces, tenemos

$$(\xi - \xi')^2 = 4p_0^2 \left(\frac{p_x}{p_0^2 + p^2} - \frac{p_{x'}}{p_0^2 + p'^2} \right)^2, \quad (3.37)$$

$$(\eta - \eta')^2 = 4p_0^2 \left(\frac{p_y}{p_0^2 + p^2} - \frac{p_{y'}}{p_0^2 + p'^2} \right)^2, \quad (3.38)$$

$$(\zeta - \zeta')^2 = 4p_0^2 \left(\frac{p_z}{p_0^2 + p^2} - \frac{p_{z'}}{p_0^2 + p'^2} \right)^2. \quad (3.39)$$

y

$$(\chi - \chi')^2 = \left(\frac{(p_0^2 - p^2)(p_0^2 + p'^2) - (p_0^2 - p'^2)(p_0^2 + p^2)}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right)^2, \quad (3.40)$$

de donde

$$(\chi - \chi')^2 = 4p_0^2 \left(\frac{p'^2 - p^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right)^2. \quad (3.41)$$

La métrica euclidiana d en $\mathbb{R}^4$ entre los puntos $\Xi(\mathbf{p}) = (\xi, \eta, \zeta, \chi)$ y $\Xi(\mathbf{p}') = (\xi', \eta', \zeta', \chi')$ que están sobre la esfera $\mathbb{S}^3$ viene dada por la suma de las 4 cantidades anteriores. Desarrollamos los cuadrados de los tres primeros sumandos

$$\begin{aligned}
 d^2 &= (\xi - \xi')^2 + (\eta - \eta')^2 + (\zeta - \zeta')^2 + (\chi - \chi')^2 \\
 &= 4p_0^2 \left[\frac{p_x^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p_{x'}^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} - 2 \frac{p_x p_{x'}}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right] \\
 &\quad + 4p_0^2 \left[\frac{p_y^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p_{y'}^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} - 2 \frac{p_y p_{y'}}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right] \\
 &\quad + 4p_0^2 \left[\frac{p_z^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p_{z'}^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} - 2 \frac{p_z p_{z'}}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right] \\
 &\quad + 4p_0^2 \frac{p_0^2(p'^2 - p^2)^2}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2}.
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Puesto que

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

y que el producto interno está dado por

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = p_x p_{x'} + p_y p_{y'} + p_z p_{z'}$$

la Ecuación (3.42) la simplificamos después de agrupar correctamente a

$$\begin{aligned}
 d^2 &= 4p_0^2 \left[\frac{p^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p'^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} + \frac{p_0^2(p'^2 - p^2)^2}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right].
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

Manipulamos los tres primeros sumandos que están entre corchetes

$$\begin{aligned}
 \frac{p^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p'^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} + \frac{p_0^2(p'^2 - p^2)^2}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2} = \\
 \frac{p^2(p_0^2 + p'^2)^2 + p'^2(p_0^2 + p^2)^2 + p_0^2(p'^2 - p^2)^2}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2}.
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

Consideremos los siguientes trucos algebraicos en cada uno de los tres sumandos que conforman el numerador del lado derecho de la igualdad anterior

$$\begin{aligned}
 p^2(p_0^2 + p'^2)^2 &= (p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)^2 - p_0^2(p_0^2 + p'^2)^2 \\
 p'^2(p_0^2 + p^2)^2 &= (p_0^2 + p'^2)(p_0^2 + p^2)^2 - p_0^2(p_0^2 + p^2)^2 \\
 p_0^2(p'^2 - p^2)^2 &= p_0^2[(p_0^2 + p'^2) - (p_0^2 + p^2)]^2 \\
 &= p_0^2(p_0^2 + p'^2)^2 - 2p_0^2(p_0^2 + p'^2)(p_0^2 + p^2) + p_0^2(p_0^2 + p^2)^2.
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

Sustituyendo estas expresiones en la Ecuación (3.44) y simplificando tenemos

$$\begin{aligned}
 & \frac{p^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p'^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} + \frac{p_0^2(p'^2 - p^2)^2}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2} \\
 &= \frac{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)^2 + (p_0^2 + p'^2)(p_0^2 + p^2)^2 - 2p_0^2(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2} \\
 &= \frac{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)[(p_0^2 + p'^2) + (p_0^2 + p^2) - 2p_0^2]}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2} \\
 &= \frac{p^2 + p'^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)},
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

de donde

$$\frac{p^2}{(p_0^2 + p^2)^2} + \frac{p'^2}{(p_0^2 + p'^2)^2} + \frac{p_0^2(p'^2 - p^2)^2}{(p_0^2 + p^2)^2(p_0^2 + p'^2)^2} = \frac{p^2 + p'^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)}. \tag{3.47}$$

Sustituyendo la Ecuación (3.47) en la Ecuación (3.43) tenemos que

$$\begin{aligned}
 d^2 &= 4p_0^2 \left[\frac{p^2 + p'^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} - \frac{2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right] \\
 &= 4p_0^2 \left[\frac{p^2 - 2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' + p'^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right] \\
 &= 4p_0^2 \left[\frac{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}{(p_0^2 + p^2)(p_0^2 + p'^2)} \right],
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

que es exactamente lo que queríamos demostrar (Ecuación (3.36)).

Ahora mostremos que la métrica euclidiana d en $\mathbb{R}^4$ también cumple con

$$d^2 = 4 \sin^2 \frac{\omega}{2}. \tag{3.49}$$

Es claro que en una esfera 3-dimensional podemos tomar dos puntos cualesquiera y unirlos por medio de un círculo de longitud máxima; es decir por el círculo que pasa por los puntos escogidos y el centro de la esfera, tal como se representa en la Figura 3.2.

Y al igual que en una esfera común, $\mathbb{S}^2$, este círculo de longitud máxima puede ser encajado en un espacio de dos dimensiones, es decir que es homeomorfo a un círculo común, $\mathbb{S}^1$.

Así pues conectemos con un círculo máximo los puntos $\Xi(\mathbf{p}) = (\xi, \eta, \zeta, \chi)$ y $\Xi(\mathbf{p}') = (\xi', \eta', \zeta', \chi')$ y por lo dicho anteriormente lo representamos como en la Figura 3.3. No olvidemos que por definición la 3-esfera es unitaria así que la hipotenusa del triángulo rectángulo que se aprecia en esta figura es igual a uno.

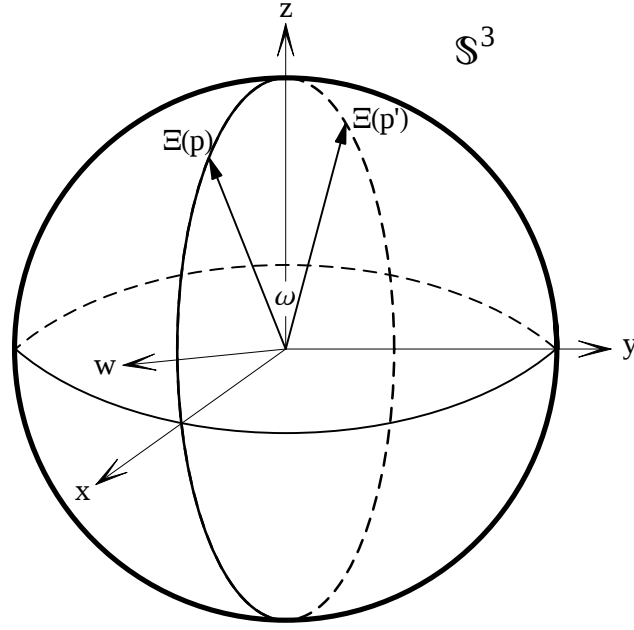


Figura 3.2: Unión de dos puntos en la 3-esfera por un círculo máximo.

Por trigonometría elemental encontramos de la Figura 3.3 que

$$\sin \frac{\omega}{2} = \frac{d}{2}, \quad (3.50)$$

donde d denota, como ya lo hemos indicado, la distancia euclídea entre los dos puntos $\Xi(\mathbf{p})$ y $\Xi(\mathbf{p}')$. De donde evidentemente concluimos la Ecuación (3.49).

Finalmente, igualando las relaciones (3.36) y (3.49) demostramos la Ecuación (3.33).

Pasamos a demostrar las relaciones dadas en (3.34) y (3.35). Calculamos el cuadrado de la métrica usando las coordenadas esféricas de la proyección estereográfica de la misma manera que lo hicimos con las coordenadas cartesianas en las Ecuaciones (3.42). Las coordenadas esféricas también están dadas en las Ecuaciones (3.10) - (3.13). Es decir

$$\begin{aligned} d^2 &= (\xi - \xi')^2 + (\eta - \eta')^2 + (\zeta - \zeta')^2 + (\chi - \chi')^2 \\ &= (\sin \alpha \sin \theta \cos \varphi - \sin \alpha' \sin \theta' \cos \varphi')^2 \\ &\quad + (\sin \alpha \sin \theta \cos \varphi - \sin \alpha' \sin \theta' \cos \varphi')^2 \\ &\quad + (\sin \alpha \cos \theta - \sin \alpha' \cos \theta')^2 \\ &\quad + (\cos \alpha - \cos \alpha')^2. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Desarrollando los cuadrados encontramos

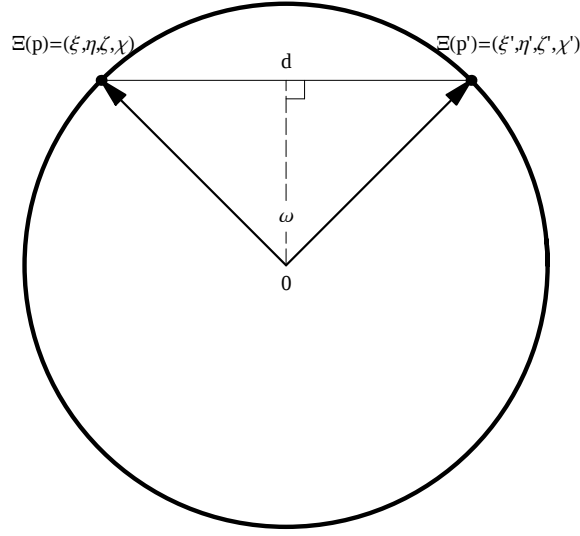


Figura 3.3: Un círculo máximo de $\mathbb{S}^3$ inmerso en un espacio de dos dimensiones.

$$\begin{aligned}
 d^2 = & \sin^2 \alpha \sin^2 \theta + \sin^2 \alpha' \sin^2 \theta' - 2 \sin \alpha \sin \theta \sin^2 \alpha' \sin^2 \theta' [\cos \varphi \cos \varphi' + \sin \varphi \sin \varphi'] \\
 & + \sin^2 \alpha \cos^2 \theta + \sin^2 \alpha' \cos^2 \theta' - 2 \sin \alpha \cos \theta \sin \alpha' \cos \theta' \\
 & + \cos^2 \alpha - 2 \cos \alpha \cos \alpha' + \cos^2 \alpha'.
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

Si introducimos la identidad trigonométrica

$$\cos(\varphi - \varphi') = \cos \varphi \cos \varphi' - \sin \varphi \sin \varphi',$$

encontramos que

$$\begin{aligned}
 d^2 = & \sin^2 \alpha + \sin^2 \alpha' - 2 \sin \alpha \sin \theta \sin \alpha' \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi') \\
 & - 2 \sin \alpha \cos \theta \sin \alpha' \cos \theta' + \cos^2 \alpha - 2 \cos \alpha \cos \alpha' + \cos^2 \alpha' \\
 = & 2 - 2 [\cos \alpha \cos \alpha' + \sin \alpha \sin \alpha' \cos \gamma],
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

donde γ denota precisamente lo que queremos

$$\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi'). \tag{3.54}$$

Igualando la Ecuación (3.49) y la siguiente identidad trigonométrica

$$2 \sin^2 \frac{\omega}{2} = 1 - \cos \omega$$

tenemos que de la Ecuación (3.53) se deduce

3.4. Los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

$$\cos\omega = 1 - 2\sin^2\frac{\omega}{2} = \cos\alpha\cos\alpha' + \sin\alpha\sin\alpha'\cos\gamma, \quad (3.55)$$

relación que queríamos mostrar, Ecuación (3.34).

Pasamos a darle la forma final a la Ecuación Integral (3.29). Sustituyendo la Ecuación (3.33) en dicha ecuación tenemos que

$$\Theta(\alpha, \theta, \varphi) = \frac{\lambda}{2\pi^2} \int \frac{\Theta(\alpha', \theta', \varphi') d\Omega'}{4\sin^2\frac{\omega}{2}}. \quad (3.56)$$

El factor en la Ecuación (3.28) ha sido escogido de tal manera que la condición de normalización tenga la siguiente forma

$$\frac{1}{2\pi^2} \int |\Theta(\alpha, \theta, \varphi)|^2 d\Omega = \int \frac{p_0^2 + p^2}{2p_0^2} |\Phi(\mathbf{p})|^2 d^3p = \int |\Phi(\mathbf{p})|^2 d^3p = 1. \quad (3.57)$$

Puesto que el área de una esfera 4-dimensional³ esta dada por $2\pi^2$, la condición de normalización es en particular cumplida para la función $\Theta = 1$.

Mostraremos en las siguientes secciones que la Ecuación (3.56) no es más que la ecuación integral que satisfacen los armónicos esféricos de 4-dimensiones.

3.4. Los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

En esta sección bosquejamos algo de la teoría y de las propiedades que poseen los armónicos esféricos 4-dimensionales. Esto será requerido para el desarrollo de la siguiente sección.

Los armónicos esféricos 4-dimensionales son funciones que generalizan de una manera natural a los armónicos esféricos comunes de la Teoría del Momento Angular. Por esta razón comparten propiedades muy similares.

Los armónicos esféricos 4-dimensionales son funciones complejo evaluadas cuyo dominio es $\mathbb{S}^3$

$$\begin{aligned} \Theta_{nlm} : \mathbb{S}^3 &\rightarrow \mathbb{C} \\ (\alpha, \theta, \varphi) &\mapsto \Theta_{nlm}(\alpha, \theta, \varphi), \end{aligned} \quad (3.58)$$

donde $(\alpha, \theta, \varphi)$ es un punto de $\mathbb{S}^3$ en coordenadas esféricas generalizadas.

³El área de una esfera unitaria n-dimensional esta dada por $\frac{2\sqrt{\pi^n}}{\Gamma(\frac{n}{2})}$ para $n \geq 2$, donde Γ denota la función factorial gama, para ver una demostración consultar [16].

3.4. Los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

Adoptamos la siguiente representación explícita

$$\Theta_{nlm}(\alpha, \theta, \varphi) = \Pi_{nl}(\alpha)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.59)$$

Notemos que los armónicos esféricos 4-dimensionales dependen de tres números cuánticos n, l y m , donde l y m tienen el significado usual de los números cuántico azimutal y magnético respectivamente. Ya hemos denotado por $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ a los armónicos esféricos tradicionales con su condición de normalización

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = 1, \quad (3.60)$$

Las funciones $\Pi_{nl}(\alpha)$ están normalizadas por

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \Pi_{nl}^2(\alpha) \sin^2\alpha d\alpha = 1, \quad (3.61)$$

De donde los armónicos esféricos de cuatro dimensiones Θ_{nlm} satisfacen la condición de normalización

$$\frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\Theta_{nlm}(\alpha, \theta, \varphi)|^2 \sin^2\alpha d\alpha \sin\theta d\theta d\varphi = 1. \quad (3.62)$$

Por otro lado si abreviamos por

$$M_l = \sqrt{n^2(n^2 - 1) \cdots (n^2 - l^2)}, \quad (3.63)$$

entonces se puede encontrar que las funciones Π_{nl} están definidas por la relación

$$\Pi_{nl}(\alpha) = \frac{M_l}{\sin^{l+1}\alpha} \int_0^\alpha \cos n\beta \frac{(\cos\beta - \cos\alpha)^l}{l!} d\beta, \quad (3.64)$$

o por

$$\Pi_{nl}(\alpha) = \frac{\sin^l \alpha}{M_l} \frac{d^{l+1}(\cos n\alpha)}{d(\cos\alpha)^{l+1}}. \quad (3.65)$$

Por ejemplo, para $l = 0$, tenemos

$$\Pi_{n0}(\alpha) = \frac{\sin n\alpha}{\sin\alpha}. \quad (3.66)$$

3.5. La ecuación integral de los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

Además, las funciones Π_{nl} satisfacen las relaciones

$$-\frac{d\Pi_{nl}}{d\alpha} + l \cot\alpha \Pi_{nl} = \sqrt{n^2 - (l+1)^2} \Pi_{l+1}, \quad (3.67)$$

y

$$\frac{d\Pi_{nl}}{d\alpha} + (l+1) \cot\alpha \Pi_{nl} = \sqrt{n^2 - (l+1)^2} \Pi_{l-1}. \quad (3.68)$$

Juntando ambas expresiones encontramos que la función Π_{nl} satisface la ecuación diferencial⁴

$$\frac{d^2\Pi_{nl}}{d\alpha^2} + 2 \cot\alpha \frac{d\Pi_{nl}}{d\alpha} - \frac{(l+1)l}{\sin^2\alpha} \Pi_{nl} + (n^2 - 1) \Pi_{nl} = 0. \quad (3.69)$$

Los armónicos esféricos 4-dimensionales cumplen con un teorema de adición similar al de los armónicos esféricos tradicionales. El cual puede ser representado como⁵

$$n \frac{\sin n\omega}{\sin\omega} = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} \Theta_{nlm}^*(\alpha, \theta, \varphi) \Theta_{nlm}(\alpha', \theta', \varphi'), \quad (3.70)$$

donde ω es el ángulo del arco de círculo máximo que conecta los puntos $(\alpha, \theta, \varphi)$ y $(\alpha', \theta', \varphi')$.

3.5. La ecuación integral de los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

Procedemos a demostrar que la ecuación integral dada en la Ecuación (3.56) es idéntica a la ecuación integral de los armónicos esféricos 4-dimensionales.

Para ello empleamos el Teorema de Adición presentado en la sección anterior. También nos servimos de un resultado conocido de la Teoría de Ecuaciones Integrales. Este importante teorema afirma lo siguiente:

Consideremos una ecuación integral lineal y homogénea de la forma

$$\Theta(\Omega) = \lambda \int d\Omega' K(\Omega, \Omega') \Theta(\Omega'), \quad (3.71)$$

suponemos además que el kernel es simétrico, es decir

$$K(\Omega, \Omega') = K(\Omega', \Omega).$$

⁴Para ver un desarrollo consultar el artículo de Hylleraas, [11].

⁵Para una demostración del Teorema de Adición de los armónicos esféricos generalizados consultar [6] o [17] donde se da un tratamiento con Teoría de Representaciones.

3.5. La ecuación integral de los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

Si el kernel de la ecuación integral (3.71) admite una expansión de la forma

$$K(\Omega, \Omega') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_n^*(\Omega') f_n(\Omega)}{\lambda_n},$$

entonces las eigenfunciones y los eigenvalores de esta ecuación integral son $f_n(\Omega)$ y λ_n respectivamente. Es decir, que las eigenfunciones satisfacen la ecuación integral

$$f_n(\Omega) = \lambda_n \int d\Omega' K(\Omega, \Omega') f_n(\Omega'), \quad (3.72)$$

y además son ortogonales

$$\int d\Omega f_n^*(\Omega) f_m(\Omega) = 0 \quad \text{siempre que } m \neq n.$$

Además los eigenvalores pertenecen al campo de los números reales⁶.

Para aplicar este resultado a la ecuación integral (3.56) mostraremos que su kernel admite una expansión en armónicos esféricos 4-dimensionales. Consideremos la función

$$g : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$$

dada por

$$g(r) = \frac{1}{1 - 2rcos\omega + r^2}.$$

Por el Teorema de Taylor expandimos esta función en serie de potencias en la variable r y obtenemos

$$\frac{1}{1 - 2rcos\omega + r^2} = \sum_{n=1}^{\infty} r^{n-1} \frac{\sin n\omega}{\sin\omega}. \quad (3.73)$$

Ahora tomando $r = 1$ y sustituyendo el Teorema de Adición (Ecuación (3.70)) en el lado derecho de esta expansión tenemos que

$$\frac{1}{2(1 - cos\omega)} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{1}{n} \Theta_{nlm}^*(\alpha, \theta, \varphi) \Theta_{nlm}(\alpha', \theta', \varphi'). \quad (3.74)$$

Usamos la identidad trigonométrica

$$4 \sin^2 \frac{\omega}{2} = 2(1 - cos\omega),$$

⁶Para ver este resultado y otros análogos consultar [9] o [18].

3.5. La ecuación integral de los Armónicos Esféricos 4-dimensionales

que sustituimos en la ecuación (3.74) y encontramos

$$\frac{1}{4 \sin^2 \frac{\omega}{2}} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{\Theta_{nlm}^*(\alpha, \theta, \varphi) \Theta_{nlm}(\alpha', \theta', \varphi')}{n}. \quad (3.75)$$

Así pues hemos demostrado que el kernel de la ecuación integral dada en la Ecuación (3.56) admite una expansión en armónicos esféricos 4-dimensionales. Por nuestro resultado sabemos que los armónicos esféricos son las soluciones fundamentales a dicha ecuación integral

$$\Theta(\alpha, \theta, \varphi)_{nlm} = \frac{\lambda_{nlm}}{2\pi^2} \int \frac{\Theta_{nlm}(\alpha', \theta', \varphi') d\Omega'}{4 \sin^2 \frac{\omega}{2}}, \quad (3.76)$$

además los valores propios cumplen con

$$n = \frac{\lambda}{2\pi^2}. \quad (3.77)$$

Recordando que λ esta definida en la Ecuación (3.27) tenemos que

$$n = \frac{\lambda}{2\pi^2} = \frac{mZe^2}{2\pi^2 \hbar p_0}, \quad (3.78)$$

Además p_0 esta dado por la Ecuación (3.8) de donde

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2}, \quad (3.79)$$

que es exactamente la Fórmula de Bohr.

En resumen, demostramos que los armónicos esféricos 4-dimensionales satisfacen la ecuación de Schrödinger en su representación en el espacio de momentos dada en la Ecuación (3.56).

Capítulo 4

Energías de Ligadura de un átomo Hidrogenoide con un Potencial Extendido

En este capítulo presentamos una aplicación interesante de la metodología desarrollada en los Capítulos 1 y 2. Encontramos, de manera numérica, las energías de ligadura de un átomo tipo hidrogenoide con un potencial extendido; como ejemplo particular consideramos un átomo tipo hidrogenoide formado por un núcleo de un átomo de Uranio 235, ^{235}U , y sujeto a este un muón.

4.1. Deducción del Potencial Extendido

A lo largo de esta tesis hemos venido trabajando con potenciales tipo coulombianos

$$V_c(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}.$$

Una característica importante de su comportamiento asintótico es que tiende a menos infinito a medida que el radio tiende a cero, como se aprecia en la Figura 4.1

Los potenciales tipo Coulomb suponen al núcleo del átomo hidrogenoide como puntual. Ahora, si el núcleo es pesado, es decir formado por varias decenas de nucleones, es más correcto considerar que el núcleo posee un radio distinto de cero. Bajo este supuesto ya no se puede suponer un potencial de atracción tipo Coulomb sino surge la necesidad de emplear un potencial que contemple estas características, el cual hemos llamado *potencial Extendido*.

Suponemos entonces que nuestro átomo hidrogenoide esta compuesto de un núcleo no puntual y una partícula sujeta a este por atracción eléctrica, la cual seguiremos considerando puntual. Asumimos que el radio del núcleo esta regido por la ley¹

$$R = A_0 \cdot A^{\frac{1}{3}}, \quad (4.1)$$

¹Ver [14, Capítulo 54, pág. 612].

4.1. Deducción del Potencial Extendido

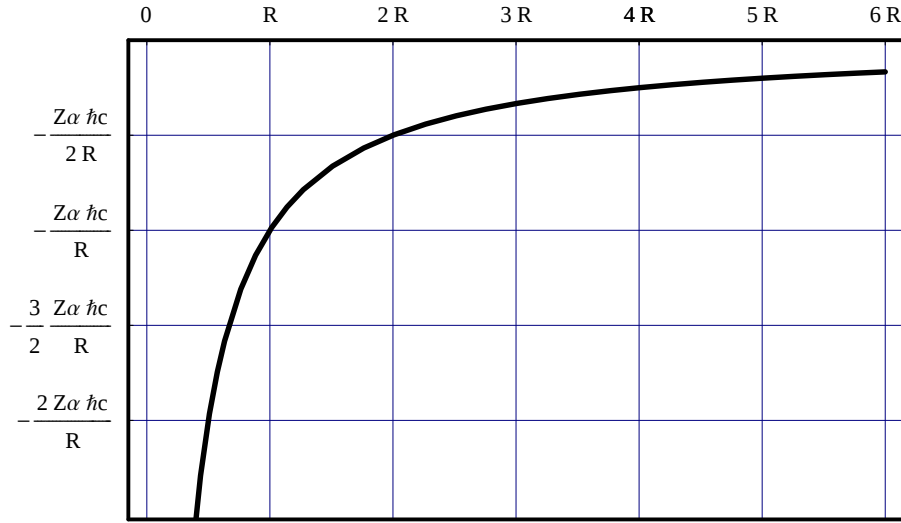


Figura 4.1: Gráfica de un Potencial Coulombiano; $R=7.59$ fm, $Z=92$.

donde $A_0 = 1.23$ fermis y A es el número de nucleones.

Pasamos a encontrar la forma explícita del potencial extendido. Para ello primero encontraremos el potencial eléctrico debido a este núcleo no puntual, de aquí deducimos el potencial eléctrico y finalmente hallaremos el potencial extendido.

4.1.1. El Campo Eléctrico debido al núcleo

Suponemos al núcleo como una esfera de radio R uniformemente cargada como representamos en la Figura 4.2. A continuación calculemos el campo eléctrico en puntos que estén a una distancia radial r mayor que el radio R del núcleo. Para lo cual consideramos una superficie gaussiana esférica y concéntrica de radio r como se muestra en la Figura 4.2-(a). Por simetría, el vector campo eléctrico $\mathbf{E}$ y el vector elemento de área $d\mathbf{A}$ son ambos radiales, entonces el ángulo formado entre ambos es siempre cero. Aplicando *Ley de Gauss*² tenemos

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{A} = \oint E dA = E \oint dA = E(4\pi r^2) = \frac{q}{\epsilon_0}, \quad (4.2)$$

donde q es la carga neta encerrada por la superficie. Para nuestro caso $q = +Ze$. De aquí

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r^2}. \quad (4.3)$$

²Ver [14, Capítulo 29, pág. 45].

4.1. Deducción del Potencial Extendido

Para el caso en que la distancia radial r sea menor que el radio R del núcleo, consideramos la superficie gaussiana esférica y concéntrica de radio r como se muestra en la Figura 4.2-(b). Bajo las mismas consideraciones que el caso anterior aplicamos la Ley de Gauss de donde

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{A} = E(4\pi r^2) = \frac{q'}{\varepsilon_0} \quad (4.4)$$

donde q' es aquella parte de la carga total q contenida dentro de la esfera de radio r . También de la Ley de Gauss se sabe que la parte que queda afuera de nuestra superficie gaussiana no contribuye en forma alguna al campo eléctrico E . Entonces

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q'}{r^2}. \quad (4.5)$$

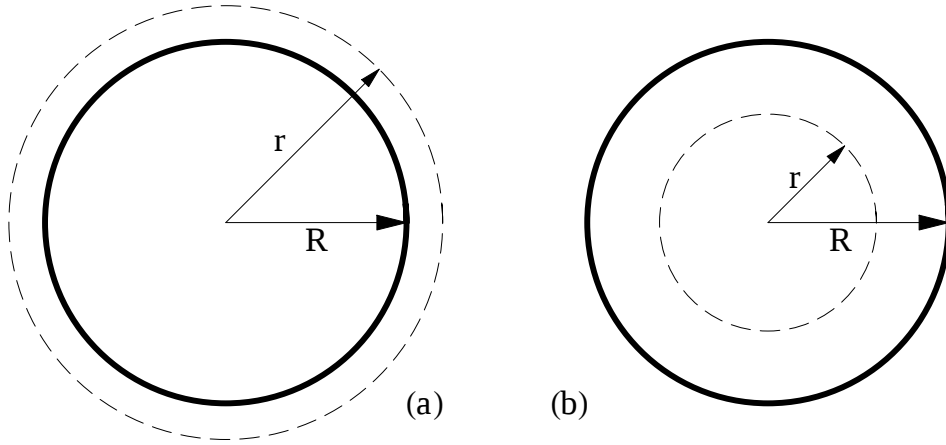


Figura 4.2: Un núcleo como una esfera uniformemente cargada.

Puesto que estamos suponiendo que la carga esta distribuida uniformemente en todo el núcleo se tiene que la densidad de carga ϱ cumple con

$$\varrho = \frac{dq}{d\nu} = \frac{q'}{\nu'} = \frac{q}{\nu}, \quad (4.6)$$

donde q' denota la carga neta contenida en el volumen ν' . Y por q entendemos la carga neta encerrada en el volumen total del núcleo, ν . Entonces tenemos que

$$\varrho = \frac{q'}{\frac{4}{3}\pi r^3} = \frac{q}{\frac{4}{3}\pi R^3}, \quad (4.7)$$

de donde

$$q' = q \left(\frac{r}{R} \right)^3 \quad (4.8)$$

Entonces

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{R^3} r. \quad (4.9)$$

Resumiendo ambos casos, el potencial eléctrico E está dado por

$$E(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r^2}, & \text{si } r > R; \\ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{R^3} r, & \text{si } r < R. \end{cases} \quad (4.10)$$

4.1.2. El Potencial Eléctrico debido al núcleo

Así pues hemos encontrado el campo eléctrico debido al núcleo, nuestra siguiente tarea es encontrar el potencial eléctrico asociado a éste. Como E es campo conservativo la función escalar potencial eléctrico, $\bar{V} : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$, cumple con³

$$\bar{V}(r) - \bar{V}(a) = - \int_a^r \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s}. \quad (4.11)$$

También se sabe que el valor de la integral es independiente de la trayectoria seguida. Elejimos la más simple de todas ellas: la línea recta que parte del infinito y termina en el centro de la esfera.

Además, si consideramos que a es el punto al infinito y que el valor del potencial es cero en ese punto, entonces

$$\bar{V}(r) = - \int_{\infty}^r \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s}. \quad (4.12)$$

Para encontrar la fórmula explícita del potencial eléctrico realizamos la integración en dos casos. Calculemos el potencial eléctrico en un punto situado a una distancia radial r del centro del núcleo tal que $r > R$. Notemos que el ángulo que forman el campo $\mathbf{E}$ y la diferencial de trayectoria $d\mathbf{s}$ es de 180° y entonces

$$\bar{V}(r) = - \int_{\infty}^r \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = \int_{\infty}^r E ds = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Ze \int_{\infty}^r s^{-2} ds, \quad (4.13)$$

de donde

$$\bar{V}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r}. \quad (4.14)$$

³Ver [14, Cap. 30, pág. 73].

4.1. Deducción del Potencial Extendido

Para el caso en que la distancia radial cumpla con $r < R$ tenemos

$$\begin{aligned}\bar{V}(r) &= \int_{\infty}^r E ds = \int_{\infty}^R E ds + \int_R^r E ds \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{R} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{R^3} \int_R^r s ds.\end{aligned}\tag{4.15}$$

de donde

$$\bar{V}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze(3R^2 - r^2)}{2R^3}.\tag{4.16}$$

Resumiendo, la función potencial eléctrico está dada por

$$\bar{V}(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r}, & \text{si } r > R; \\ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze(3R^2 - r^2)}{2R^3}, & \text{si } r < R. \end{cases}\tag{4.17}$$

Sabemos que en mecánica cuántica el concepto de *potencial* es en realidad *energía potencial*. El potencial eléctrico se define a partir de la energía potencial eléctrica como

$$V(r) = q \bar{V}(r),$$

donde q es la carga de la partícula sujeta al núcleo, que en nuestro caso resulta ser $-e$, de donde

$$V_e(r) = \begin{cases} -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}, & \text{si } r > R; \\ -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2(3R^2 - r^2)}{2R^3}, & \text{si } r < R. \end{cases}\tag{4.18}$$

y es precisamente a esta función $V_e : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ que llamamos **Potencial Extendido**.

A diferencia del potencial coulombiano el potencial extendido no tiene una singularidad en $r = 0$, sino que tiene un valor perfectamente definido, a saber

$$V(0) = -\frac{3Z\alpha\hbar c}{2R}.\tag{4.19}$$

como se observa en la Figura 4.3.

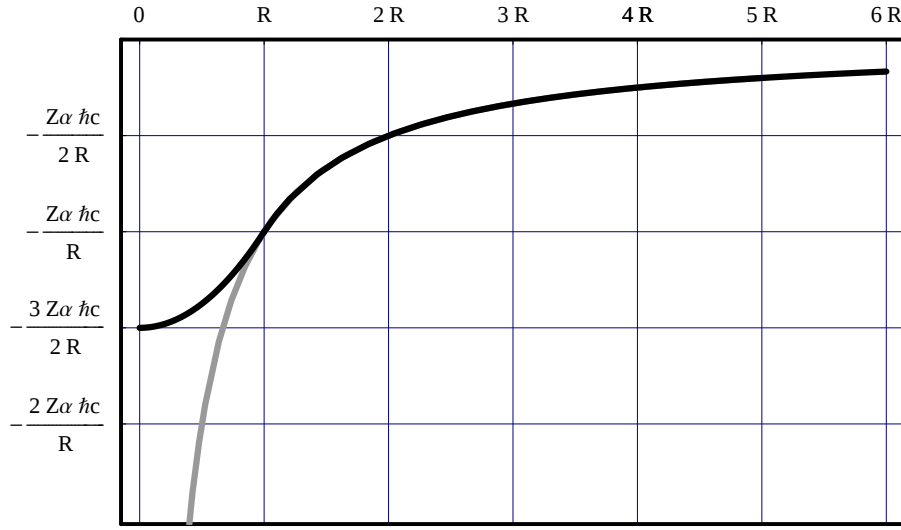


Figura 4.3: Gráfica de un Potencial Extendido; $R=7.59$ fm, $Z=92$.

4.2. La Transformada de Fourier de un Potencial Extendido

La metodología para resolver nuestro problema es completamente análoga a la del Capítulo 1. El desarrollo presentado en las tres primeras secciones de ese capítulo fueron totalmente generales. En la primera sección hemos deducido la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos que resultó ser una ecuación integral cuya función incógnita resultó ser función de tres variables (Ecuación (1.9)). En la segunda sección simplificamos la ecuación integral de Schrödinger a una ecuación integral cuya función incógnita depende de una sola variable (Ecuación(1.16)). En la tercera sección presentamos una forma de calcular la transformada de Fourier de un potencial bajo el único supuesto de que el potencial sea central. Como nuestro Potencial Extendido también es central podemos partir de la Ecuación (1.20).

Antes de proceder con la transformada de Fourier modificamos ligeramente la forma del potencial extendido, lo escribimos como

$$V_e(r) = V_c(r) + \Delta V(r). \quad (4.20)$$

donde V_c es el potencial de Coulomb y ΔV esta dada por

$$\Delta V(r) = \begin{cases} 0, & \text{si } r > R, \\ -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R^3} (3R^2 - r^2) + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} & \text{si } r < R. \end{cases} \quad (4.21)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} V_l(p, p') &= \frac{2}{\pi \hbar^3} \int_0^\infty r^2 dr j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) V_e(r) j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right) \\ &= \frac{2}{\pi \hbar^3} \int_0^\infty r^2 dr j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) V_c(r) j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right) + \frac{2}{\pi \hbar^3} \int_0^\infty r^2 dr j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \Delta V(r) j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

La primera integral es la transformada de Fourier del potencial coulombiano dada en la Ecuación (1.26) y entonces

$$V_l(p, p') = -\frac{Z \hbar c}{\pi \hbar} \frac{\alpha}{pp'} Q_l(z) + \frac{I_l(p, p')}{\pi \hbar pp'}. \quad (4.22)$$

donde la función $I_l : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ esta dada por

$$I_l(p, p') = \frac{2 pp'}{\hbar^2} \int_0^R r^2 dr j_l\left(\frac{pr}{\hbar}\right) \left[-\frac{Z \hbar c}{2R^3} \alpha (3R^2 - r^2) + \frac{Z \hbar c}{r} \alpha \right] j_l\left(\frac{p'r}{\hbar}\right). \quad (4.23)$$

Observemos que si $R = 0$, entonces la integral I_l es idéntica a cero, $I_l(p, p') = 0$, luego entonces $V_l(p, p')$ se reduce al potencial encontrado en la Ecuación (1.26), es decir, el potencial coulombiano es un caso particular de este potencial generalizado.

4.3. Discretización de la Ecuación Integral Lineal

Una vez que tenemos la expresión para $V_l(p, p')$ procedemos exactamente igual que en la Sección 1.4. Cambiamos la variable continua de la ecuación integral lineal que en seguida escribimos por una variable discreta; con objeto de obtener un sistema infinito de ecuaciones lineales.

Partimos de la ecuación integral lineal dada en la Ecuación (1.16)

$$\int_0^\infty p'^2 dp' V_l(p, p') \phi_l(p') = \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p).$$

Sustituyendo la Ecuación (4.35) obtenemos

$$\int_0^\infty p' dp' \left[\frac{I_l(p, p')}{\pi \hbar} - \frac{Z \hbar c}{\pi \hbar} \alpha Q_l(z) \right] \phi_l(p') = p \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p). \quad (4.24)$$

De igual manera definimos como

$$\Lambda_l(p) = p \left[E - \frac{p^2}{2m} \right] \phi_l(p), \quad (4.25)$$

4.3. Discretización de la Ecuación Integral Lineal

y sustituyendo tenemos

$$\int_0^{\infty} dp' \left[\frac{I_l(p, p')}{\pi \hbar} - \frac{Z \hbar c \alpha}{\pi \hbar} Q_l(z) \right] \frac{\Lambda_l(p')}{\left[E - \frac{p'^2}{2m} \right]} = \Lambda_l(p). \quad (4.26)$$

Cambiamos el intervalo de integración no acotado $[0, \infty)$ al intervalo acotado $[-1, +1]$ mediante el cambio de variable

$$p = \hbar b \frac{1+x}{1-x}. \quad (4.27)$$

Por el *Teorema de Cambio de Variable* tenemos que

$$\int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[\frac{I_l(p, p')}{\pi} - \frac{Z \hbar c \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{\Lambda_l(p'(x'))}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2} = \Lambda_l(p(x)). \quad (4.28)$$

Recordemos que perseguimos que la función $\Lambda_l \circ p$ quede solo definida en el intervalo $[-1, +1]$. Con el cambio de variable dado en la Ecuación (4.27) conseguimos esto. Toda función continua cuyo rango sea el $[-1, +1]$ admite una expansión en polinomios de Legendre. Entonces expandimos $\Lambda_l \circ p$

$$\Lambda_l \circ p(x) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l P_s(x). \quad (4.29)$$

Sustituyendo esta expansión en la Ecuación (4.28)

$$\sum_{s=0}^{\infty} \int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[\frac{I_l(p, p')}{\pi} - \frac{Z \hbar c \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{P_s(x)}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2} = \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l P_s(x), \quad (4.30)$$

Multiplicando por el polinomio de Legendre de grado t , $P_t(x)$, ambos lados y luego integrando en el intervalo $[-1, +1]$ tenemos

$$\begin{aligned} \sum_{s=0}^{\infty} \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[\frac{I_l(p, p')}{\pi} - \frac{Z \hbar c \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{P_s(x) P_t(x)}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2} \\ = \sum_{s=0}^{\infty} a_s^l \int_{-1}^1 P_s(x) P_t(x) dx, \end{aligned} \quad (4.31)$$

y usando la propiedad de ortogonalidad de los polinomios de Legendre

4.4. Energías de Ligadura de un átomo hidrogenoide formado con un núcleo de Uranio 235 y un muón

$$\int_{-1}^1 P_s(x) P_t(x) dx = \frac{2}{2t+1} \delta_{st},$$

se llega a

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n^l \left(H_{st}^l - \frac{2}{2t+1} \delta_{st} \right) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad (4.32)$$

donde

$$H_{st}^l = \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 \frac{2b \, dx'}{(1-x')^2} \left[\frac{I_l(p, p')}{\pi} - \frac{Z \, \hbar c \, \alpha}{\pi} Q_l(z(x, x')) \right] \frac{P_s(x) P_t(x)}{E - \frac{(\hbar c \, b)^2}{2mc^2} \left(\frac{1+x'}{1-x'} \right)^2}, \quad (4.33)$$

esta última expresión es totalmente análoga a la encontrada en la Ecuación (1.37) del Capítulo 1.

Entonces la Ecuación (4.32) representa un sistema infinito de ecuaciones lineales tal y como lo expresamos en la Ecuación (1.38).

4.4. Energías de Ligadura de un átomo hidrogenoide formado con un núcleo de Uranio 235 y un muón

En la búsqueda del espectro de energía de un átomo hidrogenoide nos auxiliamos de algoritmos numéricos, por esta razón aproximamos la expansión infinita de Λ_l o p a un número finito de sumandos. Esto se traduce en el planteamiento de un sistema finito de ecuaciones lineales, el cual es totalmente análogo al encontrado en la Ecuación (2.3). Ahora para ejecutar el programa FORTRAN 77 necesitamos especificar las características del átomo hidrogenoide; es decir proporcionar la masa de la partícula circundante, el número de protones en el núcleo y el número l .

Consideremos como ejemplo particular un átomo hidrogenoide conformado por un núcleo de un átomo de Uranio 235 (el cuál consta de 92 protones y 143 neutrones, para dar el total de 235 nucleones), y como partícula sujeta a dicho núcleo tenemos un muón, el cuál tiene una masa de 105.7 MeV y cuya carga eléctrica es la del electrón, $-e$. En la Figura 4.4 presentamos un esquema de este átomo hidrogenoide comunmente llamado átomo muónico.

Debido a la cantidad de nucleones este átomo hidrogenoide posee un radio no despreciable y por tal razón introducimos el potencial extendido dado en la Ecuación (4.20). Este potencial describe más aproximadamente la interacción del núcleo y su partícula circundantes. De acuerdo con la fórmula para el radio del núcleo descrito por la Ecuación (4.1) tenemos que para el núcleo de este átomo hidrogenoide su radio es

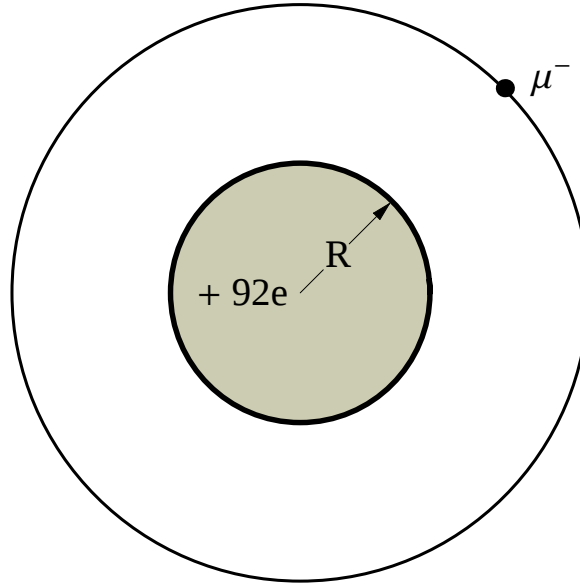


Figura 4.4: Átomo hidrogenoide formado por un núcleo no puntual de 235 nucleones y un muón orbitando.

$$\begin{aligned} R &= 1.23 \text{ fm} \cdot (235)^{\frac{1}{3}} \\ &= 7.59 \text{ fm}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Encontremos las energías de enlace para nuestro átomo muónico. La forma de proceder es exactamente análoga a lo desarrollado en el Capítulo 2.

Consideremos el caso l igual a cero, que como vimos, de este caso se desprende todo el espectro de energía. El potencial está dado por

$$V_0(p, p') = \frac{I_0(p, p')}{\pi \hbar p p'} - \frac{Z \hbar c}{\pi \hbar} \frac{\alpha}{p p'} Q_0(z), \quad (4.35)$$

donde

$$I_0(p, p') = \frac{2}{\pi} \int_0^R dr \sin\left(\frac{p r}{\hbar}\right) \left[-\frac{Z \hbar c}{2 R^3} (3 R^2 - r^2) + \frac{Z \hbar c \alpha}{r} \right] \sin\left(\frac{p' r}{\hbar}\right) dr. \quad (4.36)$$

Esta última integral la calculamos de manera numérica. Sólo resta especificar valores para la energía E y los índices s y t y quedará completamente determinada la integral H_{st}^0 de la Ecuación (4.33).

Pasamos a construir las matrices H para distintos valores de la energía E de igual manera que lo hicimos en la Sección 2.3 del Capítulo 2. Para cada valor de energía E le asociamos el determinante de su correspondiente matriz H . Todos estos pasos fueron

4.4. Energías de Ligadura de un átomo hidrogenoide formado con un núcleo de Uranio 235 y un muón

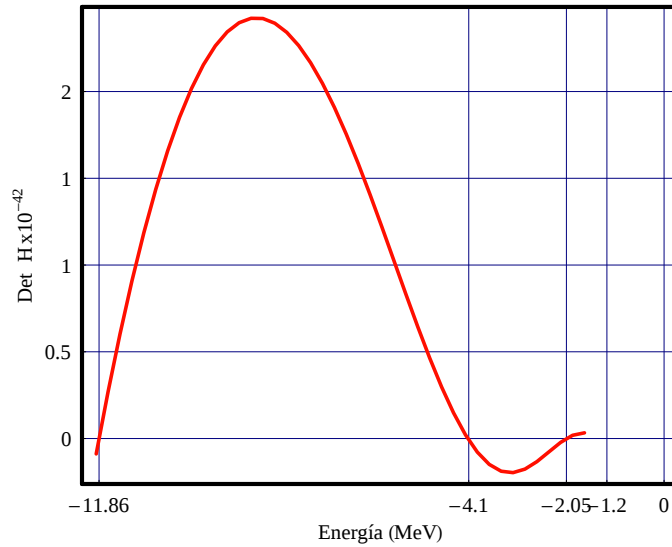


Figura 4.5: Los ceros del gráfico muestran las energías de enlace para el átomo hidrogenoide con un Potencial Extendido.

hechos con el mismo programa FORTRAN 77. Sólo fue necesario modificar ligeramente el programa `atomohidrogeno.f`, con objeto de que realice los calculos para el potencial extendido en vez de considerar únicamente el potencial coulombiano.

Ejecutando este programa obtenemos las Figuras 4.5 y 4.6, en donde como ya sabemos los ceros del determinante de $H(E)$ representan las únicas energías permitidas para nuestro átomo muónico.

Presentamos las primeras energías de enlace encontradas de manera numérica con una precisión de dos dígitos. Recordemos que el algoritmo utilizado para estimar los ceros es el *método de bisección*

- $E_1 = -11.86$ MeV,
- $E_2 = -4.10$ MeV,
- $E_3 = -2.05$ MeV,
- $E_4 = -1.22$ MeV,
- $E_5 = -0.80$ MeV,
- $E_6 = -0.57$ MeV.

Ahora, quisiéramos comparar estas energías obtenidas con las correspondientes bajo los supuestos de que el núcleo es puntual y que el potencial de atracción es coulombiano. Para hallar estas energías podemos proceder de dos maneras: (1) usar de manera

4.4. Energías de Ligadura de un átomo hidrogenoide formado con un núcleo de Uranio 235 y un muón

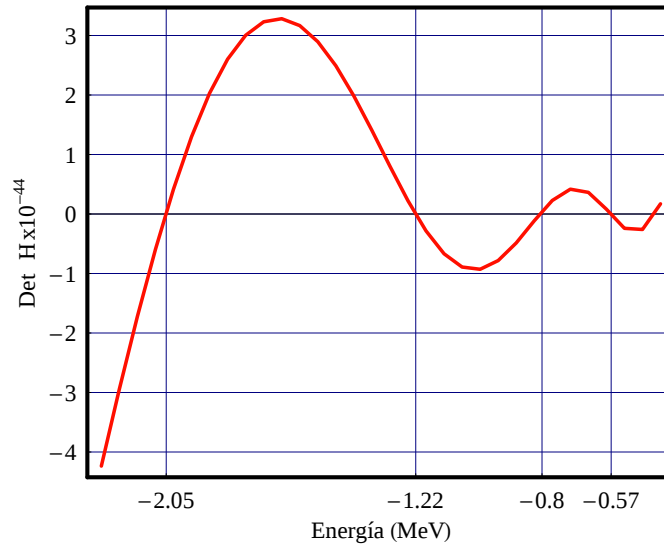


Figura 4.6: Ampliación de la Figura 4.5.

directa la Fórmula de Bohr (Ecuación (2.5) del Capítulo 2.) ó (2) ejecutar el programa `atomohidrogeno.f` bajo los supuestos de que el radio del núcleo es cero y que el potencial es el de Coulomb. Con objeto de corroborar los algoritmos computacionales procedemos de ambas maneras. Para los propósitos del punto (2) se corrió el programa FORTRAN 77 y los gráficos obtenidos se presentan en las Figuras 4.7 y 4.8 (aclaramos que todos los gráficos presentados en esta tesis son sólo una herramienta visual y no obtenemos de manera directa de ellos los correspondientes ceros sino a través del método de bisección). Aproximamos las energías de enlace en dos dígitos significativos y en la tercera columna de la Tabla 4.1 se presentan los resultados. En esta misma tabla, en la cuarta columna, presentamos las energías obtenidas de aplicar directamente la fórmula de Bohr. También, en la segunda columna, se escribieron las energías obtenidas anteriormente suponiendo un núcleo no puntual y el potencial extendido. En la última columna escribimos los errores porcentuales.

E_n (MeV).	Núcleo no puntual Pot. Ext.	Núcleo puntual Método Numérico	Núcleo puntual Fórmula de Bohr	Error %
E_1	-11.86	-23.67	-23.675	49.98
E_2	-4.10	-5.91	-5.919	30.73
E_3	-2.05	-2.63	-2.630	22.05
E_4	-1.22	-1.47	-1.479	17.51
E_5	-0.80	-0.94	-0.947	15.52
E_6	-0.57	-0.65	-0.657	3.24

Cuadro 4.1: Comparación de las energías suponiendo un núcleo puntual y no puntual.

4.4. Energías de Ligadura de un átomo hidrogenoide formado con un núcleo de Uranio 235 y un muón

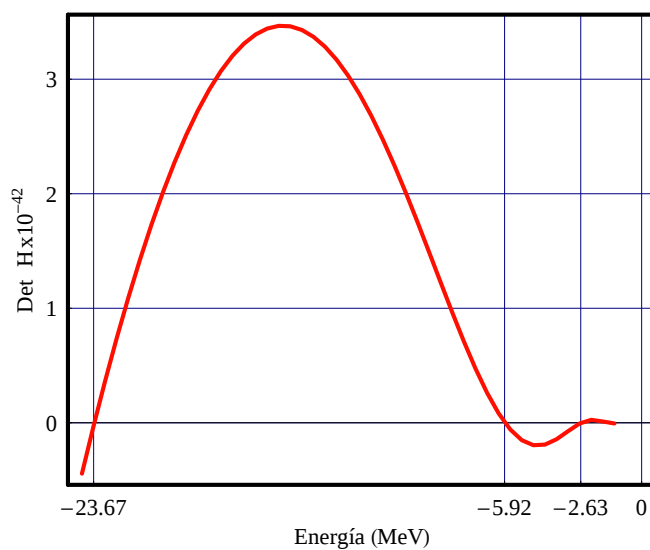


Figura 4.7: Los ceros del gráfico muestran las energías de enlace para el átomo hidrogenoide bajo el supuesto de que el potencial es coulombiano.

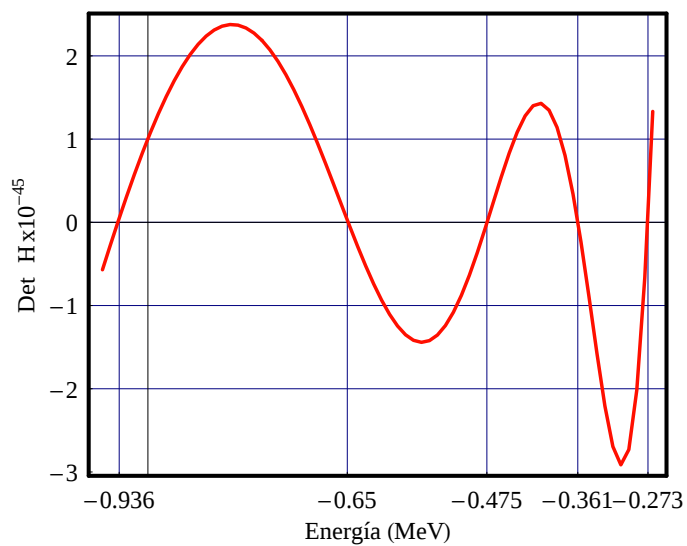


Figura 4.8: Ampliación del gráfico 4.7.

Observamos de la Tabla 4.1 que son muy aproximados, como era de esperarse, los resultados de las columnas 3 y 4, pues en ambos casos se considera al núcleo puntual y el potencial de Coulomb. Uno lo calcula de manera numérica y otro analítica. También hacemos notar que las energías de enlace del átomo hidrogenoide con un potencial extendido difieren considerablemente con respecto a las obtenidas suponiendo un núcleo puntual y un potencial coulombino, esto aprecia al contemplar los errores porcentuales.

4.4.1. Sobre los datos numéricos obtenidos

Una forma de verificar los resultados numéricos obtenidos del potencial extendido consistió en dar valores de R más pequeños que el encontrado en la Ecuación 4.34. Esto repercute en el potencial extendido sucediendo que a medida que R tiende a cero el potencial extendido se aproxima cada vez al potencial de Coulomb. De hecho de las Ecuaciones (4.35) y (4.36) podemos corroborar que cuando $R = 0$ entonces el potencial extendido se reduce al potencial de Coulomb. Calculandose los distintos gráficos de energía, E , contra determinante de $H(E)$ se encontró que los distintos gráficos obtenidos se parecían cada vez más al gráfico que consideran al núcleo puntual y el potencial de Coulomb, dado en las Figuras 4.7 y 4.8. Esta convergencia la podemos apreciar en la Figura 4.9.

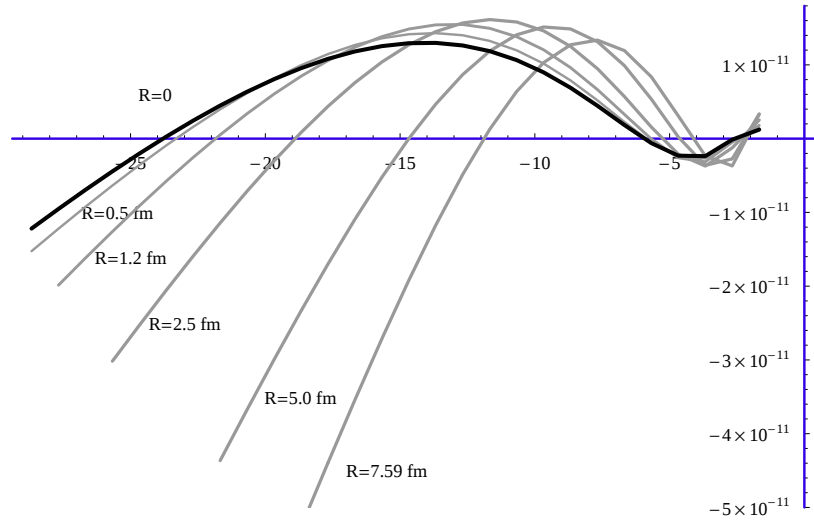


Figura 4.9: Convergencia de las energías de enlace para distintos valores de R . En el eje horizontal: energía E , en le eje vertical: determinante de $H(E)$.

También, se estimo de manera numérica la diferencia entre la energía del estado base para el caso $R = 0$ y una R suficientemente pequeña. Esta diferencia ΔE estuvo acorde con lo obtenido de la *Teoría de Perturbaciones*. Verificandose que existe una convergencia a las energías de ligadura que arroja la fórmula de Bohr.

Conclusiones

A lo largo de esta tesis presentamos dos formas de tratar la ecuación de Schrödinger planteada para el átomo hidrogenoide. Una de ellas fue la solución exacta presentada por el físico ruso V. Fock que resuelve el problema de encontrar los eigenvalores y las eigenfunciones de ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos. La otra y que conforma la esencia de esta tesis es el tratamiento numérico en el espacio de momentos. Aproximamos los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger en su forma integral para un átomo hidrogenoide considerando: (1) un potencial coulombiano y (2) un potencial extendido. En el caso (1) comprobamos que los resultados obtenidos para el espectro de energía están muy cercanos a los obtenidos de manera teórica a través de la Fórmula de Bohr. En el caso (2) consideramos un núcleo no puntual compuesto por varias docenas de nucleones. El potencial de atracción entre el núcleo y la partícula circundante es más próximo al potencial extendido descrito en el último capítulo. Encontramos que bajo estas circunstancias los resultados obtenidos para las energías de enlace difieren de manera apreciable a las que se obtienen suponiendo un núcleo puntual y por tanto un potencial de Coulomb.

Presentamos nuevamente la Tabla 4.1 en la cual podemos observar de manera comparativa los distintos resultados obtenidos en los puntos (1) y (2) descritos arriba. Esta abla resume en gran medida el trabajo realizado en toda la tesis.

E_n (MeV).	Núcleo no puntual Pot. Ext.	Núcleo puntual Método Numérico	Núcleo puntual Fórmula de Bohr	Error %
E_1	-11.86	-23.67	-23.675	49.98
E_2	-4.10	-5.91	-5.919	30.73
E_3	-2.05	-2.63	-2.630	22.05
E_4	-1.22	-1.47	-1.479	17.51
E_5	-0.80	-0.94	-0.947	15.52
E_6	-0.57	-0.65	-0.657	3.24

Cuadro 4.2: Comparación de las energías de enlace de un átomo hidrogenoide suponiendo un núcleo puntual y no puntual.

En esta tabla contrastamos en la columna 3 y 4 lo obtenido de la Fórmula de Bohr y la aproximación numérica para un átomo hidrogenoide considerando al núcleo puntual, corroborándose lo eficiente y preciso de la solución numérica desarrollada. Por último, notamos que el espectro de energía de un átomo hidrogenoide con un núcleo no puntual contrasta con lo obtenido de manera teórica.

Queda claro que las soluciones analíticas son muchos más elegantes, refinadas y precisas en cuanto al lenguaje matemático se refiere. Sus soluciones suelen ser cerradas y explican la fenomenología del problema original.

Por otro lado las soluciones numéricas son aproximaciones, ciertamente tan precisas como se quiera, pero son al final de todo aproximaciones, suelen ser menos elegantes y tienen muchas limitaciones. Pero una indiscutible ventaja es que, a diferencia de las soluciones analíticas, las soluciones numéricas pueden abarcar un gran cúmulo de problemas tanto de la física como de la ingeniería o de otras áreas. En algunos casos la solución numérica sólo es parcial pero proporcionará información útil sobre el comportamiento del problema en cuestión. En otros casos las soluciones numéricas pueden ser suficientemente buenas para dejar de lado la búsqueda de soluciones analíticas.

Con el planteamiento y búsqueda de aproximaciones numéricas surge la necesidad de implementar algoritmos numéricos, por ejemplo, en esta tesis aproximamos integrales dobles usando el *método de cuadratura de Gauss* o calculamos el determinante de una matriz de gran tamaño, por lo cual se vuelve indiscutible el uso y manejo de algún lenguaje de programación de alto nivel. En esta tesis, como ya hemos mencionado, se empleó el lenguaje FORTRAN 77.

En nuestro caso, la metodología usada pudo ser generalizada fácilmente para atacar problemas que carecen de una solución analítica como lo es el encontrar el espectro de energía de un átomo hidrogenoide con un potencial extendido.

Apéndices

Apéndice A

Analogías entre los Armónicos Esféricos 3 y 4 Dimensionales

Propiedad de	$\int \Theta_{nlm}^*(\alpha, \theta, \phi) \Theta_{n'l'm'}(\alpha, \theta, \phi) d\Omega = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$	$d\Omega = \sin^2 \alpha \sin \theta d\theta d\phi d\alpha$
Ortonormalidad	$\int Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$	$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi d\alpha$
Teorema de	$n \frac{\sin n\omega}{\sin \omega} = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} \Theta_{nlm}^*(\alpha, \theta, \phi) \Theta_{nlm}(\alpha', \theta', \phi')$	
Adición	$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \gamma) = \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta', \phi') Y_l^m(\theta, \phi)$	
Teorema	$f(\alpha, \theta, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l a_{nml} \Theta_{nlm}(\alpha, \theta, \phi)$	
de Expansión	$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{ml} Y_l^m(\theta, \phi)$	
	$\Theta_{n,l,-m}(\alpha, \theta, \phi) = (-1)^{m+l} \Theta_{nlm}^*(\alpha, \theta, \phi)$	
	$Y_l^{-m} = (-1)^m Y_l^{m*}$	

Cuadro A.1: Analogías entre los Armónicos Esféricos 3 y 4 Dimensionales

Apéndice B

Código del Programa Fortran 77

Presentamos el código completo del programa atomohidrogeno.f.

```
* #####
* #
* #   Calcula el Plot Energia VS. Determinante para un Potencial   #
* #   Extendido                                                    #
* #                                                                 #
* #####

PROGRAM HYDROGENOIDE
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION BB1(200),BB2(200)
DIMENSION SS(200),E(200)
COMMON/GAUSS/XXX(200),WWW(200),NG
COMMON/BBDET/H(200,200)
COMMON/PARAMETER/b,Ra,Z,alfa,hc,Pi,pm
open(3,file='tmp.txt')

***** C O N S T A N T E S *****
*
*   alfa = cte de estructura fina= q**2/(4*Pi*Epsilon*hbarra*c) *
*   hc = hbarra*c
*
*****

      alfa=1./137.0359895
      hc=197.3269606
      Pi=3.1415926535897

***** P A R A M E T R O S *****
*
*   b = Sqrt[2*m*c**2*E1]/hbarra*c; E1= Energía del Estado Base *
*   b = Parámetro en el cambio de variable del intervalo de [-1,+1]*
```

```

*   Ra = Radio del núcleo=1.23*A**(1/3); A= Número de Nucleones      *
*   Z = Número de protones                                           *
*   pm = m*c**2 (Masa de la partícula en MeV's)                      *
*****
      Z=1.
      pm=0.51099
c   Z=92. c   pm=105.

      E1= pm*(Z*alfa)**2/2.
      b = Sqrt(2*pm*E1)/hc
      NA=235
      Ra=1.23*NA**(1./3.)

*****      G E N E R A L I D A D E S      *****
*
*   E(L)= Matriz que guarda los distintos valores de la energia en *
*           valor absoluto.                                         *
*   XXX(J)= Abscissas +/- Zeros of Legendre Polynomials.           *
*   WWW(i)= Weight Factors = W(i)                                   *
*   H= Matriz que guarda los elementos para una Energia fija      *
*   AL,BL,CL,DL = Limites de la doble integral                    *
*****

      AL=-1.
      BL=1.
      CL=-1.
      DL=1.

*****      P R E C I S I O N   E N   E L   A L G O R I T M O      *****
*
*   NG= Numero de puntos en la cuadratura de Gauss.                *
*   NMAT= Tamano de la matriz H                                     *
*   NPP= Numero de puntos para hacer el Plot de E .vs. Det(E)      *
*           Numero de valores distintos que toma la energia.        *
*****

      NG  = 37
      NPP = 35
      NMAT= 35
*****      M A I N      *****

```

```

CALL GAUSSP(NG,xxx,www)
write(3,*)'ListPlot[{

do 15 L=1,NPP
****  n=1 ***** c      E(L)=23.6752 + (L-23.)*1.
      E(L)=11.67 + (L-29.)*0.4
****  n=2 ***** c      E(L)=(3.4014 + (L-34.)*0.1)*1.E-6 c
****  n=3 *****
c      E(L)=1.511743E-6 + (L-34.)*0.04*1.E-6 ****  n=4 ***** c
E(L)=0.85035E-6

do 14 MM=1,NMAT
do 13 NN=1,NMAT

*   Calculo de la doble integral para un valor de E,MM y NN fijos, para
*   ir construyendo la matriz H.

DO 2 J=1,NG
SUMAF=0.
Y=TRANSF(XXX(J),DL,CL)
DO 4 LL=1,2
SS(1)=AL
SS(2)=XXX(j)
SS(3)=BL

DO 3 I=1,NG
X=TRANSF(XXX(I),SS(LL+1),SS(LL))
BB1(I)=FUN(Y,X,E(L),MM,NN)
3  CONTINUE
CALL PRINCIPAL(BB1,SS(LL+1),SS(LL),SUMA)
SUMAF=SUMAF+SUMA
4  CONTINUE
BB2(J)=SUMAF
2  CONTINUE
CALL PRINCIPAL(BB2,DL,CL,SUMA)

*
*   Suma fracciones a la diagonal de la matriz H
*   a la cual se le calculara el determinante.
*

if(mm .EQ. nn) then
H(mm,nn)=suma-2./(2.*(mm-1.)+1.)
else

```

```

        H(mm,nn)=suma
    endif

c    WRITE(5,*)H(mm,nn)

13        continue 14    continue

        write(3,*)'{' , -E(L), ', ', DET(NMAT), '}', '
*    Continua con el algoritmo cambiando el valor de la energia

15    continue
        write(3,*)'}]'
        STOP
        END

* #####
* #                                                                 #
* #    Valor de la Funcion Integrando para una y,x,E,MM,NN fijos.  #
* #    Donde MM,NN indican los                                     #
* #    grados de los polinomios de Legendre.                       #
* #####

FUNCTION FUN(y,x,E,MM,NN)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION PP1(200),PP2(200)
COMMON/PARAMETER/b,Ra,Z,alfa,hc,Pi,pm
C2=(hc*b)**2 / (2.*pm)

*    Valor del polinomio de Legendre de grado MM-1 en el punto x, este
*    valor es almacenado en el lugar MM del vector columna PP1

        call legendre(mm-1,x,PP1)
        call legendre(nn-1,y,PP2)
        PP = PP1(MM)*PP2(NN)

c    POTENCIAEXT= DELTAPOT(y,x) + POTCOUL(y,x)
        POTENCIAEXT=  POTCOUL(y,x)

        EE= -E*(1.-y)**2 - C2* (1.+y)**2

        FUN = 2.*b * PP * POTENCIAEXT * 1./EE
        RETURN

```

END

```
*****
*   Calcula el valor de la transformada del potencial de Coulomb   *
*   que se conserva en la funcion integrando para un par x,y.     *
*   Distintos valores del l comentados.                           *
*****
```

```
FUNCTION POTCOUL(y,x)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
  COMMON/PARAMETER/b,Ra,Z,alfa,hc,Pi,pm
  C1 = -1.*Z*hc*alfa / Pi
```

```
*** l=0      *****
c  POTCOUL= C1 * log(Abs((1.-x*y)/(x-y)))
*** l=1      *****
      QQ1= ( (1.-x*y)**2 +(x-y)**2 ) / ((1.-x**2)*(1.-y**2))
      POTCOUL = C1 * (QQ1 *log(Abs((1.-x*y)/(x-y))) -1.)
*** l=2      *****
c  QQ1=3*((1.-x*y)**2+(x-y)**2)/((1.-x**2)*(1.-y**2))**2 -1. c
QQ2= 3./2.* ((1.-x*y)**2 +(x-y)**2 ) / ((1.-x**2)*(1.-y**2)) c
POTCOUL= C1 * (QQ1/2. *log(Abs((1.-x*y)/(x-y))) - QQ2)
```

```
      return
      end
```

```
*****
*   Calcula el valor de la transformada del potencial RESIDUO      *
*   que se conserva en la funcion integrando para un par x,y.     *
*   unicamente el valor de l=0.                                    *
*****
```

```
FUNCTION DELTAPOT(y,x)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  dimension BBB(200),YYY(200)
  COMMON/PARAMETER/b,Ra,Z,alfa,hc,Pi,pm
  COMMON/GAUSS/XXX(200),WWW(200),NG
  C1= -1.*alfa*hc*Z/(2.*Pi*Ra**3)
  C2= 2*alfa*hc*Z/Pi
```

```
      P1=b*(1.+x)/(1.-x)
      P2=b*(1.+y)/(1.-y)
```

```

S1= -dcos((P1-P2)*Ra)/(P1-P2)**2 + dcos((P1+P2)*Ra)/(P1+P2)**2
S2 = ((Ra*(P1-P2))**2 - 2) * dsin((P1-P2)*Ra)/(P1-P2)**3
S3 = P2*cos(P2*Ra)*sin(P1*Ra) - P1*cos(P1*Ra)*sin(P2*Ra)
S4= 6*Ra**2/(P1**2-P2**2)
S5 = ((Ra*(P1+P2))**2 - 2) * dsin((P1+P2)*Ra)/(P1+P2)**3

DO j=1,NG
YYY(j)=TRANSF(XXX(j),Ra,0.d0)
ENDDO

DO i=1,NG
BBB(i)=dsin(P1*YYY(i))*dsin(P2*YYY(i)) / YYY(i)
ENDDO
call principal(BBB,Ra,0.d0,suma)

DELTAPOT= C1*(2*Ra*S1 - S2 + S3*S4 + S5) + C2* suma
return
end

* #####
* #
* #   Calcula el determinante de una Matriz H (declarada desde #
* #   MAIN como un  COMMON) dando unicamente el tamano N.      #
* #
* #####
*
FUNCTION DET (N)
implicit double precision(a-h,o-z)
COMMON/BBDET/H(200,200)

      DO 1 J=2,N
1      H(1,J)=H(1,J)/H(1,1)
      DO 8 K=2,N
      KK=K-1
      KKK=K+1
      DO 2 J=K,N
      DO 2 L=1,KK
2      H(J,K)=H(J,K)-H(J,L)*H(L,K)
      DO 4 J=KKK,N
      DO 3 L=1,KK
3      H(K,J)=H(K,J)-H(K,L)*H(L,J) 4

```

```

      H(K,J)=H(K,J)/H(K,K) 8
      CONTINUE
      DET=1
      DO 9 I=1,N
      DET=DET*H(I,I)
9      CONTINUE
      RETURN
      END

*****
* Integracion Numerica.GAUSSP es llamado desde el comienzo del *
* programa obteniendose los ceros de los polinomios (XXX(i)) y *
* los pesos (WWW(i)), quedando fijos durante todo el           *
* programa. Las matrices XXX y WWW fueron declaradas como un  *
* COMMON.                                                       *
*****

      SUBROUTINE GAUSSP(nupu,xxx,aaa)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      PARAMETER(NMAX=1000)
      DIMENSION XDBLE(NMAX),WDBLE(NMAX),xxx(200),aaa(200)
      DATA PIN,PFI/-1.0D0,1.0D0/
      CALL GAULEG(PIN,PFI,XDBLE,WDBLE,NUPU)
      do i=1, nupu
      xxx(i)=xdble(i)
      aaa(i)=wdbble(i)
      enddo
      return
      END

*
* #####
* #
* #      Subrutina para el calculo de los puntos de integracion #
* #      y sus correspondientes pesos.                          #
* #
* #####
*

      SUBROUTINE GAULEG(X1,X2,X,W,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z),INTEGER(I-N)
      DIMENSION X(N),W(N)
      PARAMETER (EPS=3.D-16)
      PHIPA=DATAN(1.0D0)*4.0D0

```

```

      M=(N+1)/2
      XM=0.5D0*(X2+X1)
      XL=0.5D0*(X2-X1)
      DO 12 I=1,M
      Z=DCOS(PHIPA*(I-.25D0)/(N+.5D0))
1  CONTINUE
      P1=1.D0
      P2=0.D0
      DO 11 J=1,N
      P3=P2
      P2=P1
      P1=((2.D0*J-1.D0)*Z*P2-(J-1.D0)*P3)/J
11  CONTINUE
      PP=N*(Z*P1-P2)/(Z*Z-1.D0)
      Z1=Z
      Z=Z1-P1/PP
      IF(DABS(Z-Z1).GT.EPS)GO TO 1
      X(I)=XM-XL*Z
      X(N+1-I)=XM+XL*Z
      W(I)=2.D0*XL/((1.D0-Z*Z)*PP*PP)
      W(N+1-I)=W(I)
12  CONTINUE
      RETURN
      END

```

Apéndice C

Constantes Físicas y Unidades

Presentamos las constantes físicas usadas a lo largo de la tesis y sus respectivos valores numéricos. Para las longitudes emplemos la unidad llamada *fermi*, fm, y cuya equivalencia en metros es $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$. Las unidades utilizadas para la energía fueron *mega electrón-volts*, MeV's.

Constante	Símbolo	Definición	Valor y Unidades
Carga elemental	e		$1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$
Cte. de Estructura Fina	α	$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	137.0359895
Radio de Bohr	a	$\frac{1}{\alpha} \frac{\hbar c}{mc^2}$	52917.7249 fm
Cte. Cambio de Variable	b	$\frac{\sqrt{2mc^2E}}{\hbar c}$	Átomo de Hidrógeno: $1.895059 \times 10^{-5} \text{ fm}^{-1}$ Átomo Hidrogenoide del Cap. 4: 0.301936 fm^{-1}
Cte. Potencial Yukawa	γ		fm^{-1}
Energía del Electrón	mc^2		0.5109989 MeV
Energía del Muón	mc^2		105.7 MeV

Cuadro C.1: Constantes físicas y sus valores numéricos.

Referencias

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics, Volume I*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics, Volume II*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [3] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1995.
- [4] S. Gasiorowics, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, New York, 1996.
- [5] G. J. Borse, *Fortran 77 and Numerical Methods for Engineers*, PWS-KENT Publishing Company, Boston, 1991.
- [6] Felipe Ramírez Romero, *Tesis Profesional: El grupo de Rotaciones en Cuatro Dimensiones y su Aplicación a algunos Problemas Físicos*; dirigida por el Dr. Elpidio Chacón. UNAM, Facultad de Ciencias, 1972.
- [7] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Dover Publications, Inc., New York, 1972.
- [8] V. Fock, *On the Theory of the Hydrogen Atom*, Traducido del alemán al inglés por Robert B. Teese. Título Original: *Zur Theorie des Wasserstoffatoms*, Zeitschrift für Physik 98, 145, 1935.
- [9] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Acedemic Press, Inc., Oxford, Ohio, 1985.
- [10] I.M. Gel'fand, *Lectures on Linear Algebra*, Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics, number 9, Interscience Publishers, Inc., New York, 1961.
- [11] E. Hylleraas, *On the Wave Equation of the Kepler Problem in Momentum Space*, Zeitschrift für Physik 74, 216, 1932.
- [12] C. Prieto, *Topología Básica*, Fondo de Cultura Económica, México DF., 2003.

- [13] M. Spiegel, J. Liu y L. Abellanas, *Fórmulas y Tablas de Matemática Aplicada*, McGraw-Hill, Madrid, 2000.
- [14] D. Halliday, R. Resnick y K. Krane, *Física Volumen II, Cuarta Edición Versión Ampliada*, CECSA, México, 1994.
- [15] G. E. Brown and A. D. Jackson, *The nucleon-nucleon interaction*, North-Holland Publishing, Amsterdam, 1976.
- [16] R. Courant and F. John, *Introduction to Calculus and Analysis, Volume II*, Springer Verlag, New York, 1989.
- [17] J. D. Talman, *Special Functions: A group theoretic Approach*, Mathematical Physics, Monograph Series, New York, 1968.
- [18] A. J. Jerri, *An introduction to Integral Equations with Applications, Second Edition*, John Wiley & Sons, New York, 1999.