

## Comentarios sobre la solución radial del átomo de hidrógeno

Habíamos llegado a la condición necesaria para cortar el desarrollo en serie de potencias propuesto para resolver la ecuación radial del átomo de hidrógeno, obtenida luego de la separación de variables. Es decir, propusimos el potencial de Coulomb para  $V(r)$  en la ecuación radial que nos quedó luego de encontrar los valores permitidos de la constante de separación  $\lambda = l(l+1)$ . Explicitamos las dependencias extremas de la función de onda radial, para radios muy pequeños y muy grandes,

$$R(r) = u(r)/r ; \text{ definiendo } \rho = \kappa r , u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} \omega(\rho),$$

y entonces quedó planteada una ecuación para  $\omega(\rho)$ , que proponemos resolver mediante un desarrollo en serie de potencias de  $\rho$

$$\omega(\rho) = \sum_0^{(\text{inf})} a_k \rho^k .$$

Encontramos la relación que deben satisfacer los coeficientes contiguos  $a_k$  y  $a_{k+1}$  del desarrollo en serie, y notamos que cuando el orden de la potencia es suficientemente alto, la serie tiene el comportamiento correspondiente a la función  $e^{2\rho}$ , que produce divergencia de  $u(\rho)$  al crecer  $\rho$ . Por lo tanto, como procedimos con la ecuación angular del átomo de hidrógeno y el oscilador armónico (y también en la solución de la ecuación de Laplace en electromagnetismo), buscamos soluciones en forma de polinomios. Estas soluciones, serán las que definan los valores de la energía  $E$ , que corresponderán a soluciones físicamente aceptables. En el caso de la presente ecuación, se trata de los polinomios de Laguerre.

La condición de truncamiento de la serie para la potencia de orden  $N$ , dará el valor de la energía que corresponderá a esa solución. Esta condición es

$$\rho_0(E) = 2(N + l + 1), \text{ donde } \rho_0(E) = (2m|E|)^{1/2} Ze^2 / \hbar .$$

Es decir, fijo el grado del polinomio, y deduzco el valor de  $E$  que resulta del truncamiento.

Una cosa importante a notar, es que la energía que extraigamos de la condición de truncamiento depende de la suma  $N + l + 1$  que es un número entero, ya que  $N$  es entero mayor o igual que cero. Entonces llamamos  $n$  a ese número entero (*número cuántico principal*), y de allí resulta la expresión conocida para la energía, inversamente proporcional al cuadrado de  $n$ , del modelo de Bohr.

Entonces cuando fijamos el valor de  $n = N + l + 1$ , vemos que en general podemos mantener ese valor para más de un par de valores de  $N$  y de  $l$ , por lo que podemos tener varios polinomios, de distinto grado, correspondientes a la misma energía. Por ejemplo, para  $n = 2$ , ( $N=0, l=1$ ) y ( $N=1, l=0$ ) nos darán dos soluciones posibles para ese valor de energía, que simbolizamos  $R_{nl}$ . Estas dos soluciones corresponden a polinomios de Laguerre de orden 0 y 1 respectivamente, pero asociados con números de momento angular  $l=1$  y 0 respectivamente. Estos dos polinomios corresponden al mismo valor de la energía (es decir de  $n$ ) y tienen grado distinto. A los polinomios de Laguerre correspondientes a un dado  $n$  se los suele caracterizar por los índices ( $N$ ) y  $(2l + 1)$ , con el símbolo  $L_{(N)}^{(2l+1)}$ . Así, la forma general de los estados estacionarios del átomo de hidrógeno tienen finalmente la forma

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = r^l e^{-\kappa r} L_{(N)}^{(2l+1)}(2\kappa r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Como vemos del análisis de los valores que pueden tomar  $N$  y  $l$  para un dado  $n$ , la energía presenta

*degeneración*: para un mismo valor de energía, se tienen más de una función de estado estacionario posible, dependiente de polinomios de Laguerre de distinto grado, y con valores distintos de  $l$  y  $N$ . Además, para cada valor de  $l$ , también tenemos los posibles valores del número cuántico  $m$ . Entonces, analizando los distintos valores que puede tomar  $l$  cuando fijamos  $n$ , podemos ver que  $l$  va desde  $l=0,1,\dots,n-1$ . Cada valor corresponde a una función de onda distinta, asociada al mismo nivel de energía caracterizado por  $n$ .

Entonces, en resumen, lo que este análisis nos deja es la forma general de los autoestados, con funciones radiales y angulares conocidas (tabuladas) y el conocimiento de la degeneración de los niveles de energía. Con esto podemos contabilizar los estados que hay asociados a los distintos niveles de energía.

Como dijimos, la parte angular de las soluciones son los armónicos esféricos, como en todo problema de potencial central. Para el caso específico del potencial de Coulomb, encontramos que los valores de la energía de los estados estacionarios depende únicamente del número  $n$ .

En este link, por ejemplo, hay una tabla de las funciones y unos lindos dibujos de las densidades de probabilidad.

<http://panda.unm.edu/Courses/Finley/P262/Hydrogen/WaveFns.html>