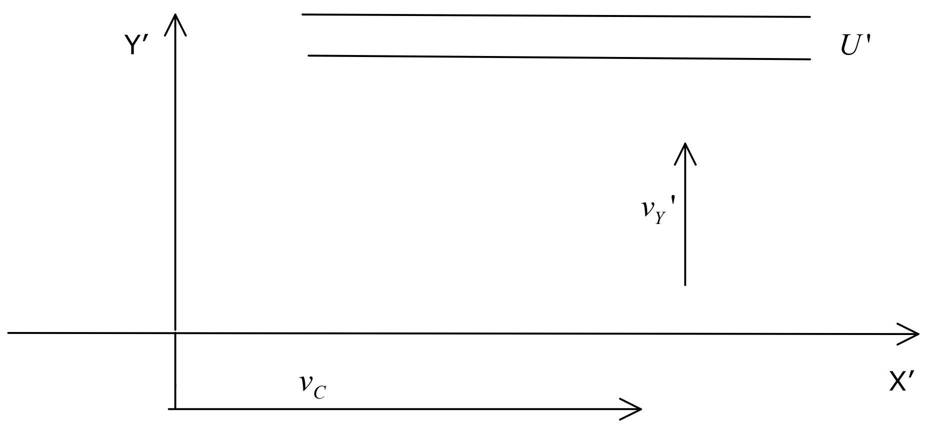
Análisis Relativista de la Ecuación de Schrödinger

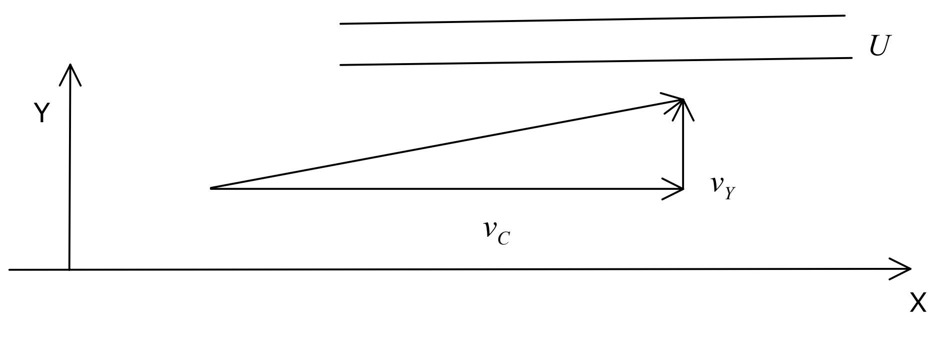
Rodolfo Hector CARABIO

ECUACION DE ONDA RELATIVISTA

Teniendo la dinámica relativista y la ecuación de Schrödinger, se esta a un paso de la formulación de una ley física amplia y exacta. La dinámica relativista es exacta para todo valor de la velocidad, pero nada dice acerca del comportamiento ondulatorio de las partículas, la ecuación de Schrödinger, que describe las propiedades ondulatorias de las partículas esta formulada en base a la dinámica clásica, son campos separados por completo.

Es posible estudiar la ecuación no relativista de Schrödinger a fin de hacerla invariante relativista, para lo cual se procede a plantear dicha ecuación en su forma independiente del tiempo para sistemas de referencia en movimiento relativo entre si, tal como en el esquema que sigue:





Se muestra una partícula libre y su comportamiento ante una barrera de potencial visto desde dos sistemas de referencia en movimiento relativo. En realidad se estaría representando el vector de onda de la partícula o un flujo de partículas, una onda plana libre de la acción de campos de fuerza hasta el límite de la barrera de potencial rectangular, esta representación es perfectamente valida en el formalismo matemático de la mecánica ondulatoria y también lo es con respecto a las propiedades experimentales de las partículas.

Esta barrera de potencial esta dispuesta de forma horizontal a fin de que su espacio de acción sea el mismo medido para los dos sistemas de referencia, en el interior de la barrera de potencial el campo de energía potencial puede variar si sus líneas equipotenciales son paralelas y horizontales a fin de que ambos sistemas de referencia las relacionen de forma sencilla entre ellos.

Esta claro que la probabilidad de que la partícula atraviese la barrera es la misma medida para ambos sistemas de referencia, ya que ven un mismo suceso físico, por tanto la variación de la función de onda a lo largo del eje Y debe ser la misma medida según dichos sistemas de referencia
Si consideramos que la componente de la velocidad en el eje Y es mucho menor que la componente horizontal, en el sistema de referencia en movimiento (X'Y') dicha componente representa la velocidad total de la partícula, y es allí donde teniendo en cuenta que:

$$v_Y' << c$$

Puede emplearse la ecuación de onda no relativista para describir el comportamiento de la partícula en el sistema de referencia X'Y'. Dado que alli es una onda libre la ecuación se puede escribir directamente con la función impulso tal como sigue:

$$\frac{d^2\Psi'}{dy'^2}+\frac{p_Y'^2}{\hbar^2}.\Psi'-\frac{2m}{\hbar^2}U'(y').\Psi'=0$$

Es necesario establecer la relación entre los campos de potencial que miden ambos sistemas de referencia, para hacerlo nombramos una velocidad transversal vy tal que es la velocidad mínima para que la partícula sortee la barrera de potencial, eso es suficiente para determinar la magnitud de la altura de la barrera medida en ambos sistemas de referencia

$$U'=mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-v_Y'^2/c^2}}-1\right)$$

$$U=mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}-\frac{1}{\sqrt{1-v_C{}^2/c^2}}\right)$$

La relación entre la velocidad transversal medida en ambos sistemas de referencia es:

$$v_Y=v_Y'\sqrt{1-v_C{}^2/c^2}$$

$$v=\sqrt{v_C{}^2+v_Y{}^2}$$

$$v=\sqrt{v_C{}^2+v_Y'^2(1-v_C{}^2/c^2)}$$

$$U=mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-[v_C{}^2+v_Y'^2(1-v_C{}^2/c^2)]/c^2}}-\frac{1}{\sqrt{1-v_C{}^2/c^2}}\right)$$

$$U=mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v_C{}^2}{c^2}-\frac{v_Y'^2}{c^2}+\frac{v_Y'^2v_C{}^2}{c^2}}}-\frac{1}{\sqrt{1-v_C{}^2/c^2}}\right)$$

$$U=mc^2\left(\frac{1}{\sqrt{1-v_C{}^2/c^2}\sqrt{1-v_Y'^2/c^2}}-\frac{1}{\sqrt{1-v_C{}^2/c^2}}\right)$$

$$U = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v_C{}^2 / c^2}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v_Y{}'^2 / c^2}} - 1 \right)$$

De acuerdo al anterior valor de U’, podemos escribir la relación:

$$U = \frac{U'}{\sqrt{1 - v_C{}^2 / c^2}}$$

La ecuación para el sistema de referencia X’Y’ puede escribirse:

$$\frac{d^2\Psi'}{dy'^2} + \frac{p_Y{}'^2}{\hbar^2}\Psi' - \frac{2m}{\hbar^2}U(y)\sqrt{1 - v_C{}^2 / c^2}.\Psi' = 0$$

Si el impulso medido transversal en el sistema de referencia X’Y’ es py’, el sistema de referencia en reposo medirá dicho impulso transversal como py tal que:

$$p_Y = p_Y{}'$$

(Es sabido y se demuestra en la literatura que el impulso transversal se conserva invariable en todo sistema de referencia en relatividad)

Entonces, dado que es un mismo suceso visto desde distintos sistemas de referencia sus funciones de onda deben serlo tambien:

$$\Psi' = \Psi$$

$$y' = y$$

Podemos establecer la ecuación según el sistema de referencia (XY) en la forma:

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{p_Y{}^2}{\hbar^2}\Psi - \frac{2m}{\hbar^2}U(y)\sqrt{1 - v_C{}^2 / c^2}.\Psi = 0$$

El factor de Lorentz puede escribirse en función de la energía en reposo y la energía total relativista de forma conveniente al problema usando la igualdad:

$$E_T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v_C{}^2 / c^2}} \Rightarrow \sqrt{1 - v_C{}^2 / c^2} = \frac{mc^2}{E_T}$$

Dado que la velocidad del centro de inercia en el esquema tiende a ser la velocidad total de la partícula, es aplicable la anterior igualdad.

Resulta finalmente la ecuación:

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{p_Y{}^2}{\hbar^2}\Psi - \frac{mc^2}{E_T}\frac{2m}{\hbar^2}U(y).\Psi = 0$$

Esta expresión es obtenida como una primera adaptación relativista, valida para valores pequeños del impulso transversal. Una expresión general consistiría en aceptarla como valida para todo valor del impulso transversal, pero además no solo el impulso transversal, sino del impulso total, tal como sigue:

$$1)\quad \frac{d^2\Psi}{dy^2}+\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi-\frac{mc^2}{E_T}\frac{2m}{\hbar^2}U(y).\Psi=0$$

En dinámica relativista una fuerza transversal (a lo largo del eje Y' en el esquema considerado) según el sistema de referencia (X'Y') tiene en el otro sistema de referencia (XY) un efecto no solo sobre la fuerza e impulso sobre dicho eje Y sino también en el impulso y energía según el eje horizontal, en efecto el impulso según la dirección transversal Y:

$$p_Y=\frac{mv_Y}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

Entonces si la fuerza en el sistema de referencia (X'Y') hace variar solo la velocidad transversal vy, en el sistema de referencia (XY) variara la velocidad transversal y también la velocidad total, por lo cual las componentes de las fuerzas actuantes en el sistema de referencia (XY) son de acuerdo al esquema utilizado:

$$p_Y=\frac{mv_Y}{\sqrt{1-({v_X}^2+{v_Y}^2)/c^2}}\Rightarrow F_Y=\frac{m}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\frac{dv_Y}{dt}+mv_Y\frac{v_Y(dv_Y/dt)}{c^2(1-v^2/c^2)^{3/2}}$$

En el esquema se tiene que la variación de la velocidad a lo largo del eje horizontal es cero, pero aun así hay variación de impulso y con ello una fuerza en esa dirección actuando, [y finalmente un campo de energía potencial cuya fuerza actúa sobre los ejes X e Y]

$$p_X=\frac{mv_X}{\sqrt{1-({v_X}^2+{v_Y}^2)/c^2}}\Rightarrow F_X=mv_X\frac{v_Y(dv_Y/dt)}{c^2(1-v^2/c^2)^{3/2}}$$

Es de notar que tal hecho contribuye a generalizar los razonamientos empleados hasta ahora ya que se considera no un campo de energía potencial transversal únicamente sino un campo cuya acción ejerce efecto sobre ambos ejes X e Y del esquema considerado

Al aceptar como expresión general la ecuación 1) de por si se determinaría la mecánica cuántico – relativista, pero para ello hay que demostrarlo, de principio puede investigarse si tal expresión es invariante relativista, es decir que la ecuación escrita respectivamente para ambos sistemas de referencia describe de la misma forma el comportamiento de la partícula antes las mismas situaciones físicas. Es evidente que la función de onda según el eje Y debe ser igual para iguales valores del impulso según dicho eje, tal componente del impulso es lo que se ve igual para todo sistema de referencia en relatividad.

Para hacerlo, si escriben las ecuaciones para ambos sistemas de referencia.

$$a)\quad \frac{d^2\Psi'}{dy'^2}+\frac{{p_Y}'^2}{\hbar^2}\Psi-\frac{mc^2}{E_T'}\frac{2m}{\hbar^2}U'.\Psi=0$$

$$b)\quad \frac{d^2\Psi}{dy^2}+\frac{{p_Y}^2}{\hbar^2}\Psi-\frac{mc^2}{E_T}\frac{2m}{\hbar^2}U.\Psi=0$$

Aquí la relación entre las energías totales relativistas se obtiene a partir de las formulas:

$$E_T' = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v_Y'^2 / c^2}}$$

$$E_T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}}$$

De acuerdo a la relación mostrada en el esquema considerado al principio:

$$v^2 = v_C^2 + v_Y^2$$

$$v_Y^2 = v_Y'^2 (1 - v_C^2 / c^2)$$

$$E_T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - [v_C^2 + v_Y'^2 (1 - v_C^2 / c^2)] / c^2}}$$

$$E_T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v_C^2 / c^2} \sqrt{1 - v_Y'^2 / c^2}}$$

Resulta la siguiente relación entre las energías totales relativistas de las partículas según ambos sistemas de referencia:

$$E_T = \frac{E_T'}{\sqrt{1 - v_C^2 / c^2}}$$

Volvemos a escribir las ecuaciones de onda para ambos sistemas de referencia pero introduciendo las ultimas expresiones para la energía total y potencial en la ecuación (b)

$$a) \quad \frac{d^2\Psi'}{dy'^2} + \frac{p'^2}{\hbar^2} E_Y' \Psi - \frac{mc^2}{E_T'} \frac{2m}{\hbar^2} U' \Psi = 0$$

$$b) \quad \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{p_Y^2}{\hbar^2} \Psi - \frac{mc^2}{\left(\dfrac{E_T'}{\sqrt{1 - v_C^2 / c^2}} \right)} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{U'}{\sqrt{1 - v_C^2 / c^2}} \Psi = 0$$

Operando en la ecuación b) resulta que es invariante relativista, en efecto queda en la forma:

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{p_Y^2}{\hbar^2} \Psi - \frac{mc^2}{E_T'} \frac{2m}{\hbar^2} U'.\Psi' = 0$$

De acuerdo a lo establecido en el esquema:

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} = \frac{d^2\Psi'}{dy'^2}$$

$$p_Y' = p_Y$$

Entonces resulta:

$$\frac{d^2\Psi'}{dy'^2} + \frac{p'^2}{\hbar^2} \Psi' - \frac{mc^2}{E_T'} \frac{2m}{\hbar^2} U'.\Psi' = 0$$

Es decir que las ecuaciones de onda basadas en ambos sistemas de referencia describen lo mismo para la misma situación física, este importante resultado establece la ecuación relativista de la mecánica cuántica hasta el límite de lo que puede establecer el esquema utilizado

Operando la expresión para el impulso relativista en función de su relación con la energía total relativista de una partícula y escribiendo la ecuación en forma genérica para los sistemas de referencia en reposo según el eje X:

$$E_T{}^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$
$$p^2 = \frac{E_T{}^2 - m^2c^4}{c^2}$$

Resulta:

$$2)\quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{E_T{}^2 - m^2c^4}{c^2\hbar^2}\Psi - \frac{mc^2}{E_T}\frac{2m}{\hbar^2}U(x).\Psi = 0$$

Obtenemos en 2) la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo en una dimensión en forma relativista, esta ecuación en ausencia de campo de fuerzas se reduce a la ecuación de onda plana, para bajas velocidades se reduce a la ecuación no relativista de Schrodinger.

APLICACIÓN AL ATOMO DE HIDROGENO

Veamos la aplicación de la ecuación obtenida 2) a los niveles de energía del átomo de hidrogeno. Para lo cual planteamos el laplaciano en coordenadas esféricas con las variables ya separadas, es sabido el método de expresar la función de onda como producto de funciones según las variables respectivas radiales, angular cenital y angular azimutal:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r).\Theta(\theta).\Phi(\phi)$$

La ecuación relativista con variables separadas más simple es la que carece de momento angular del electrón y puede escribirse en la forma:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{E_T{}^2 - m^2c^4}{\hbar^2}R - \frac{mc^2}{E_T}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\beta}{r}R = 0$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{1}{r^2}ctg\theta\frac{d\Theta}{d\theta} = 0$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{1}{sen^2\phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = 0$$

En la teoría no relativista se agregan los números cuánticos orbital (l) y magnético (ml) a fin de obtener una descripción mas completa de las funciones de onda posibles y los estados energéticos del electrón en torno al núcleo

En realidad para obtener tal descripción se introduce la posibilidad de que el electrón tenga un momento angular L y una proyección de momento angular Lz según el eje Z

En la adición de los números cuánticos orbital y magnético a la ecuación para el campo central simétrico del electrón en el núcleo se hace fácilmente, en efecto se tiene en cuenta la energía rotacional debida al momento de impulso L del electrón, este momento de impulso (o momento angular) tiene una energía rotacional asociada que según la física clásica es:

$$E = \frac{L^2}{2mr^2}$$

Para introducir esta magnitud física en la ecuación diferencial planteada se necesita hacerlo en base a las unidades de medidas adecuadas en la ecuación de Schrodinger, esto se hace en forma simple

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{L^2}{2mr^2}$$
$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

Dado condiciones de contorno se tiene que los valores del momento angular L están cuantizados

$$L^2 / \hbar^2 = l(l+1)$$

Sin embargo en la teoría relativista no es posible separar la energía radial de la rotacional como en la teoría clásica.

La energía rotacional en dinámica clásica, no relativista, es una magnitud que se resta de la energía cinética total del movimiento del electrón en torno al núcleo para obtener la energía radial de dicho movimiento, esta energía radial tiene incidencia en la forma de la función de onda radial.

En dinámica relativista la separación de la energía radial y rotacional no esta definida como en la dinámica clásica, pero como se esta resolviendo matemáticamente la ecuación, se introduce el numero cuántico k en forma análoga a como se introduce el numero cuántico orbital l, aunque de forma algo diferente como se muestra a continuación

$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{E_T{}^2 - mc^2}{c^2\hbar^2}R + \frac{mc^2}{E_T}\frac{2m\beta}{\hbar^2}\frac{R}{r} - k^2\frac{R}{r^2} = 0$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{1}{r^2}ctg\theta\frac{d\Theta}{d\theta} + k^2\frac{\Theta}{r^2} + -\frac{m_l{}^2}{sen^2\theta}\frac{\Theta}{r^2} = 0$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l{}^2.\frac{\Theta}{r^2} = 0$$

Para simplificar la ecuación radial hacemos la sustitución:

$$R(r) = \Re(r)/r$$

Resulta:

$$\frac{d^2\Re}{dr^2} + \frac{E_T{}^2 - mc^2}{c^2\hbar^2}\Re + \frac{mc^2}{E_T}\frac{2m\beta}{\hbar^2}\frac{\Re}{r} - k^2\frac{\Re}{r^2} = 0$$

Para resolverla se hace uso del método (ver solución exacta a la ecuación de Schrodinger)

$$p(r) = a + \frac{b}{r}$$

$$p'(r) - p^2(r) = -a^2 - \frac{2ab}{r} - \frac{b^2 + b}{r^2}$$

Debe cumplirse entonces el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{E_T{}^2 - m^2c^4}{c^2\hbar^2} = -a^2$$

$$\frac{mc^2}{E_T}\frac{2m\beta}{\hbar^2} = -2ab$$

$$k^2 = b^2 + b$$

Y entonces la función de onda será (véase "Solución Exacta a la Ecuación de Schrodinger")

$$\Re(r) = C.r^{-b}.\exp(-ar)$$

Despejando el valor de (a) en la segunda ecuación del sistema e introduciéndolo en la primera ecuación de dicho sistema se tiene:

$$\frac{E_T{}^2 - m^2c^4}{c^2\hbar^2} = -\frac{(m^2c^2)^2\beta^2}{b^2E_T{}^2\hbar^4}$$

$$E_T{}^4 - m^2c^4E_T{}^2 + \frac{(m^2c^3)^2\beta^2}{b^2\hbar^2} = 0$$

$$E_T = \sqrt{\frac{m^2c^4}{2} \pm \sqrt{\frac{(m^2c^4)^2}{4} - \frac{(m^2c^3)^2\beta^2}{b^2\hbar^2}}}$$

$$E_T = mc^2\sqrt{\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 - \frac{4\beta^2}{b^2\hbar^2}}}$$

Introduciendo el concepto de la constante de estructura fina:

$$\alpha = \frac{\beta}{c\hbar}$$

$$E_T = mc^2\sqrt{\frac{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\alpha^2}{b^2}}}{2}}$$

El valor del coeficiente (b), se obtiene de la tercera de las ecuaciones del sistema:

$$k^2 = b^2 + b$$

$$b^2 + b - k^2 = 0$$

$$b = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4k^2}}{2}$$

De los dos valores posibles el único que satisface una función finita para la solución radial:

$$\Re(r) = C.r^{-b}.\exp(-ar)$$

Es:

$$b = \frac{-1-\sqrt{1+4k^2}}{2}$$

Con lo cual resulta una función de onda aceptable:

$$\Re(r) = C.r^n.\exp(-ar)$$

Siendo:

$$n = \frac{1+\sqrt{1+4k^2}}{2}$$

La condición de contorno de la función angular cenital exige que k²=l(l+1), resultando:

$$n = l+1$$

Entonces la expresión en tal caso para la energía de enlace relativista del electrón cuando los números cuánticos n= l+1 es:

$$E = mc^2\left(\sqrt{\frac{1\pm\sqrt{1-4\alpha^2/n^2}}{2}}-1\right)$$

El desarrollo en serie de potencias para la energía de enlace hasta el término en cuarta potencia de la constante de estructura fina:

$$E = mc^2\sqrt{\frac{1+(1-2\alpha^2/n^2-2\alpha^4/n^4)}{2}}-mc^2$$

$$E = mc^2\left[\sqrt{1-\left(\frac{\alpha^2}{n^2}+\frac{\alpha^4}{n^4}\right)}-1\right]$$

Desarrollando la raíz hasta el término del orden de la cuarta potencia se tiene:

$$E = mc^2\left[\left(1-\frac{\alpha^2/n^2+\alpha^4/n^4}{2}-\frac{\alpha^4}{8n^4}\right)-1\right]$$

Resulta:

$$E = -mc^2\left(\frac{\alpha^2}{2n^2}+\frac{5\alpha^4}{8n^4}\right)$$

No se han considerado aquí los efectos sobre los niveles de energía debidos al espin del electrón.
El análisis de la ecuación relativista 2) de Schrodinger hallada como invariante ante el cambio de sistema de referencia:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{E_T{}^2-m^2c^4}{c^2\hbar^2}\Psi-\frac{mc^2}{E_T}\frac{2m}{\hbar^2}U(x).\Psi = 0$$

Indica por su forma que si la energía total de la partícula en el campo de energía potencial es menor a su energía en reposo (un estado ligado) entonces resulta un aumento de la magnitud del efecto del campo de energía potencial con respecto al calculo no relativista, clásico, esto se aprecia en el caso del electrón en el átomo, allí la energía total del electrón es menor que su energía en reposo y el resultado de la ecuación relativista son niveles de energía mas profundos que los obtenidos mediante la ecuación no relativista de Schrodinger

Para el caso contrario (por ejemplo el caso del oscilador armónico cuántico), la energía total es mayor que la energía en reposo de la partícula y la aplicación de la ecuación de onda relativista resultara en una serie de niveles de energía de menor magnitud que los calculados por la ecuación no relativista

ESPIN

No se han observado resultados en esta formulación que incluyan el espin, después de todo las cualidades inerciales de las partículas deben ser independientes de su categoría en fermiones o bosones, la interacción del momento magnético de las partículas es una situación física adicional, la cual históricamente se ha podido incluir en la ecuación de Schrodinger dando los correspondientes valores de la estructura fina del espectro del átomo de hidrogeno

TÉRMINO DE DARWIN

Tomando en consideración el tamaño del núcleo atómico y el hecho que el electrón no puede estar dentro del volumen ocupado por dicho núcleo, surge una corrección a los niveles de energía del electrón en el átomo, llamada "termino de Darwin".

En cuanto a este termino, es curioso como puede ser que su valor numérico compense exactamente la diferencia energía entre los niveles 2P(1/2) y 2P(3/2); 3P(3/2)y 3D(5/2) y siguientes del átomo de hidrogeno cuando el tamaño del protón y la velocidad de la luz (corrección relativista) no guardan una relación matemática definida (ciertamente las correcciones de estructura fina debidas al acoplamiento espin – orbita son del orden de v^2/c^2 y las atribuidas al tamaño del protón – termino de Darwin - son del orden del mismo valor)

Referencia:

Puede verse lo planteado a este respecto en el artículo:

http://www7b.biglobe.ne.jp/~kcy05t/dirachy.html

RODOLFO CARABIO

rodolfohectorcarabio@yahoo.com.ar