12.9. Átomo de hidrógeno en coordenadas parabólicas

Las coordenadas parabólicas se definen a partir de las relaciones

$$\begin{aligned} x_1 &= \sqrt{\xi\eta}\,\cos(\phi), && (12.170)\\ x_2 &= \sqrt{\xi\eta}\,\mathrm{sen}(\phi), && (12.171)\\ x_3 &= \frac{1}{2}\left(\xi-\eta\right), && (12.172) \end{aligned}$$

donde $\xi \in [0,\infty], \eta \in [0,\infty], \phi \in [0,2\pi]$. La forma de la ecuación de Schrödinger para el pozo culombiano en estas coordenadas es

$$\left\{\frac{4}{\xi+\eta}\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{4}{\xi+\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+k^2+\frac{b}{(\xi+\eta)}\right\}\Psi(\vec{r}) = 0. \qquad (12.173)$$

Se ha definido $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ y $b=\frac{4mZe^2}{\hbar^2}$.
La posibilidad de separar coordenadas nos lleva a proponer que las soluciones sean del tipo

$$\Psi(\vec{r}) = \Xi(\xi)\Upsilon(\eta)\Phi(\phi). \qquad (12.174)$$

Estamos interesados en los estados ligados de manera que los estados deben ser de cuadrado sumable, esto es

$$\int_0^\infty\int_0^\infty d\xi d\eta\frac{1}{4}(\xi+\eta)\int_0^{2\pi}d\phi\,\Xi^*(\xi)\Upsilon^*(\eta)\Phi^*(\phi)\Xi(\xi)\Upsilon(\eta)\Phi(\phi) < \infty. \qquad (12.175)$$

En esta integral no se pueden separar las variables ξ y η. Esto no supone ninguna restricción especial ya que (12.175) implica que $\Xi(\xi)$ y $\Upsilon(\eta)$ deben anularse cuando ξ y η tiendan a infinito respectivamente. Por otra parte al igual que en el caso del oscilador armónico cuando utilizamos las coordenadas cilíndricas, la función $\Phi(\phi)$ debe ser univaluada o sea que $\Phi(\phi)=\Phi(\phi+2\pi)$.
Utilizando la forma factorizada en la ecuación de Schrödinger llegamos a las tres ecuaciones diferenciales siguientes

$$\begin{aligned} \left\{\frac{d^2}{d\phi^2}+m^2\right\}\Phi(\phi) &= 0, && (12.176)\\ \left\{\frac{d}{d\xi}\xi\frac{d}{d\xi}+\frac{1}{4}k^2\xi+\frac{1}{4}b+\beta-\frac{m^2}{4\xi}\right\}\Xi(\xi) &= 0, && (12.177)\\ \left\{\frac{d}{d\eta}\eta\frac{d}{d\eta}+\frac{1}{4}k^2\eta+\frac{1}{4}b-\beta-\frac{m^2}{4\eta}\right\}\Upsilon(\eta) = 0,, & && (12.178) \end{aligned}$$

donde m y β son las constantes de separación. La primera de las ecuaciones se resuelve fácilmente, y la condición de periodicidad de las soluciones impone que la constante de separación m debe tomar los valores $0,\pm1,\pm2,\ldots$.

La solución de las otras dos ecuaciones, de estructura similar, es un poco más laboriosa. Comenzaremos definiendo las variables

$$\rho_1 = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\xi, \tag{12.179}$$

$$\rho_2 = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}\eta. \tag{12.180}$$

Recuerdese que se están considerando estados de energía negativa. En estas nuevas variables las dos ecuaciones diferenciales se pueden escribir como

$$\left\{\frac{d}{d\rho_1}\rho_1\frac{d}{d\rho_1} - \frac{1}{4}\rho_1 + \beta_+ - \frac{m^2}{4\rho_1}\right\}\Xi(\rho_1) = 0, \tag{12.181}$$

$$\left\{\frac{d}{d\rho_2}\rho_2\frac{d}{d\rho_2} - \frac{1}{4}\rho_2 + \beta_- - \frac{m^2}{4\rho_2}\right\}\Upsilon(\rho_2) = 0, \tag{12.182}$$

con $\beta_\pm = \left[(b \pm 4\beta)/(4\sqrt{-2mE/\hbar^2})\right]$. Ambas ecuaciones son idénticas y seguiremos con una sóla de ellas particularizando cuando sea necesario el diferente valor de β.
Llamando ρ a la variable ρ_1, y β a β_+ en la primera de las ecuaciones anteriores, y considerando el comportamiento asintótico y la condición de regularidad en el origen, la solución debe ser del tipo

$$\Xi(\rho) \propto e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^{|m|}u(\rho), \tag{12.183}$$

que llevada sobre la ecuación diferencial establece que $u(\rho)$ debe ser solución de la ecuación diferencial

$$\left\{\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{1+2|m|}{\rho} - 1\right)\frac{d}{d\rho} - \frac{|m| - \left(\beta - \frac{1}{2}\right)}{\rho}\right\}u(\rho) = 0. \tag{12.184}$$

Ecuación que admite como solución la forma

$$u(\rho) \propto F(|m| - \beta + \frac{1}{2}, 1 + 2|m|, \rho), \tag{12.185}$$

que proporciona una solución, $\Psi(\vec{r})$, de cuadrado sumable si $|m| - \beta + \frac{1}{2} = -n$ con $n = 0, 1, 2, \ldots$. Esto significa que las condiciones cuánticas son

$$|m| - \beta_+ + \frac{1}{2} = -n_+, \tag{12.186}$$

$$|m| - \beta_- + \frac{1}{2} = -n_-, \tag{12.187}$$

o bien

Valor n	Coordenas polares (n, ℓ, m)	Coordenadas parabólicas $(n_+, n_, m)$	Dimensión
1	(1,0,0)	(0,0,0)	**1**
2	(2,0,0), (2,1,1), (2,1,0), (2,1,-1)	(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1),(0,0,-1)	**4**
3	(3,0,0), (3,1,1), (3,1,0), (3,1,-1) (3,2,2), (3,2,1), (3,2,0), (3,2,-1) (3,2,-2)	(2,0,0), (1,1,0), (1,0,1), (1,0,-1) (0,2,0), (0,1,1), (0,1,-1), (0,0,2) (0,0,-2)	**9**

Cuadro 12.5: Vectores de los primeros subespacios de energía definida del átomo de hidrógeno en coordenadas polares esféricas y coordenadas parabólicas.

$$\frac{b+4\beta}{4\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}} = n_+ + |m| + \frac{1}{2}, \tag{12.188}$$

$$\frac{b-4\beta}{4\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}} = n_- + |m| + \frac{1}{2}, \tag{12.189}$$

Ecuaciones de las que podemos despejar β llegando a que

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{b^2}{16(n_+ + n_- + |m| + 1)^2} = -\frac{(Ze^2)^2 m}{2\hbar^2(n_+ + n_- + |m| + 1)^2}. \tag{12.190}$$

Notese que la energía depende del número natural que resulta de la suma de n_+, n_- y $|m|$ presentando degeneración, y que sumado con la unidad sólo puede tomar valores positivos igual que el número cuántico principal. Podemos comprobar explícitamente para los primeros valores de n que la degeneración de los niveles en coordenadas polares esféricas y en estas coordenadas es la mimas. En la Tabla 12.5 se muestran los vectores permitidos en los primeros subespacios obtenidos al separar el problemas en ambos sistemas de coordenadas.