

ANSATZ PARA EL ESTADO FUNDAMENTAL DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖEDINGER CON UN CAMPO DE FUERZAS CENTRALES

Flego, Silvana P. y Torroba, Patricia L.

Grupo de Investigación Teórica y Aplicada en Teoría de la Información (GTyATI).
Área Departamental de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería,
Universidad Nacional de La Plata (UNLP).
1 y 115 s/n, (1900) La Plata, Buenos Aires, Argentina.
flego@fisica.unlp.edu.ar

Resumen

Recientemente fue propuesto un procedimiento, basado en la conexión existente entre la ecuación de Schrödinger (SE) y la Medida de Información de Fisher (FIM), que permite obtener un ansatz para las autofunciones del estado fundamental de una SE unidimensional, no relativística, cuyo potencial es convexo. La técnica fue utilizada con éxito para tratar modelos que incorporan potenciales convexos simétricos. En esta comunicación exploramos la potencia predictiva de ese formalismo en una situación no-simétrica. Específicamente, abordamos el problema de campos de fuerzas centrales y en particular, hallamos un ansatz para las autofunciones del estado fundamental de la ecuación radial del átomo de hidrógeno.

Palabras claves: Teoría de la Información, Medida de Fisher, Estructura de Legendre.

1. Introducción

La importancia de abordar el problema de campos de fuerzas centrales radica en que uno de los sistemas cuánticos de mayor interés son los átomos y éstas son las fuerzas que en ellos mantienen unidos a los núcleos y los electrones. Como es bien conocido, la naturaleza central del potencial permite reducir el problema tridimensional a un problema unidimensional para la coordenada radial [1]. Es necesario notar que, a pesar de la importancia de estos sistemas, en general, no se conoce la solución analítica explícita de las autofunciones, ni de las correspondientes autoenergías, de la ecuación de Schrödinger que gobierna al sistema, por lo que es necesario recurrir a cálculo numérico computacional o a teoría de perturbaciones.

Por otra parte, es bien conocido que existe una íntima conexión entre la medida de información de Fisher (FIM) y la ecuación de onda de Schrödinger (SE), la cual surge cuando el proceso de optimización de la FIM conduce a una ecuación tipo SE [2-6]. Emergen luego, una serie de intrigantes relaciones entre estos escenarios. En particular, teoremas puramente cuánticos, como el teorema del Virial y el Teorema de Hellmann-Feynman pueden ser re-interpretados como un tipo especial de relaciones de reciprocidad entre relevantes cantidades físicas [8], similar a aquellas exhibidas por el formalismo termodinámico vía sus propiedades de invariancia de Legendre [2-7]. Este hecho demuestra que una estructura de transformada de Legendre subyace la SE no-relativística [8] y a permitido introducir en la literatura, una serie de importantes nuevos resultados [9-16,18]. Destacamos entre ellos, por su vinculación con la presente comunicación, la inferencia de un ansatz para las autofunciones del estado fundamental de aquellas SE conteniendo un potencial convexo [16,18] La técnica fue exitosamente utilizada para tratar modelos que incorporan potenciales convexos simétricos [16,19,20]. Para modelos no-simétricos, la propuesta es incorporar en la teoría un potencial efectivo que implícitamente de cuenta del grado de asimetría del potencial [17]. En esta comunicación mostramos como puede ser implementado el procedimiento para abordar el problema de campos centrales simétricos. En particular, tratamos con la ecuación radial del átomo de hidrógeno, ya que representa dentro de la familia de campo de fuerzas centrales, el modelo fundamental más universal en la Física Moderna.

2. Breve reseña

2.1. Movimiento en un campo central simétrico

En la mecánica cuántica, de forma análoga al escenario clásico, el problema del movimiento de dos partículas que interactúan mutuamente puede reducirse al problema de una sola partícula [1]. Consideremos un sistema formado por dos partículas de masas m_1 y m_2 que se encuentran a una distancia r e interactúan según la ley $U(r)$. La ecuación de Schrödinger tendrá la forma

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(r) \quad (1)$$

donde Δ_1 y Δ_2 son los operadores de Laplace relativos a las coordenadas de las partículas. Definiendo la masa del sistema M , la posición del centro de masa del sistema \vec{R} , la masa reducida m y la posición relativa de las partículas \vec{r} en la forma habitual, el hamiltoniano se transforma en la suma de dos partes independientes

$$H = H_R + H_r = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \quad (2)$$

donde Δ_R y Δ son los operadores de Laplace relativos a las componentes de los vectores \vec{R} y \vec{r} , respectivamente. Las autofunciones $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ se pueden buscar como el producto de dos autofunciones $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{R}) \psi(\vec{r})$, donde la función $\varphi(\vec{R})$ describe el movimiento del CM como el de una partícula libre de masa M , y la función $\psi(\vec{r})$ describe el movimiento de una partícula de masa m en un campo central $U(r)$,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3)$$

Dada la simetría central, es conveniente expresar (3) en coordenadas esféricas. Luego,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \right] \psi(\vec{r}) + U(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (4)$$

donde \hat{L}^2 es el cuadrado del módulo del momento angular expresado en las mismas coordenadas. Dado que cuando el movimiento tiene lugar en un campo central, \hat{L} se conserva, podemos considerar los estados estacionarios en los cuales el momento y su proyección L_z tienen valores determinados. De acuerdo con esto se buscan soluciones de la ecuación anterior de la forma

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (5)$$

Por ser las $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funciones propias del momento, satisfacen

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6)$$

y se obtiene para la función radial $\chi(r)$ la siguiente ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \right] \chi(r) = E \chi(r) \quad (7)$$

Excluyendo la posibilidad de que la partícula "caiga" en el centro de fuerzas, es decir, considerando que si $U(r)$ tiende a infinito cuando $r \rightarrow 0$, lo hace más lentamente que $1/r^2$, la función de onda, y por tanto la densidad de probabilidad, se conservan finitas en todo el espacio (incluyendo a $r = 0$). Luego tendremos que

$$\chi(r) = r R(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$$

La ecuación (7) coincide por su forma con la ES para el movimiento unidimensional en un campo con energía potencial

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (8)$$

De esta forma, el problema del movimiento en un campo central se reduce a un problema de movimiento unidimensional en una región limitada por uno de sus lados,

$$\text{Condición de frontera : } \chi(0) = 0 \quad (9)$$

La condición de normalización también tiene carácter unidimensional,

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr = 1 \quad (10)$$

2.2. La Medida de Fisher

Trataremos con sistemas invariantes por traslación. Sea x una variable estocástica y sea $f(x) = |\psi(x)|^2$ la función densidad de probabilidad (PDF) para esta variable. En este contexto, la expresión de la FIM es dada por [2]

$$I = \int f(x) \left[\frac{\partial \ln f(x)}{\partial x} \right]^2 dx = 4 \int \left| \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right|^2 dx ; \quad f = |\psi|^2. \quad (11)$$

Consideremos un sistema especificado por un conjunto de M parámetros físicos μ_k .

$$\mu_k = \langle A_k \rangle = \int dx A_k(x) f(x), \quad k = 1, \dots, M. \quad (12)$$

El conjunto de los valores μ_k es considerado como el primer conocimiento (información empírica disponible). La PDF físicamente relevante minimiza la FIM condicionada al "primer conocimiento" (12) y a la condición de normalización $\int dx f(x) = 1$. Consecuentemente, introduciendo $(M+1)$ -multiplicadores de Lagrange λ_k ($\lambda_0 = \alpha$), el problema de optimización

$$\delta \left(I - \alpha \int dx f(x) - \sum_{k=1}^M \lambda_k \int dx A_k(x) f(x) \right) = 0, \quad (13)$$

conduce a una ecuación diferencial para la deseada $f(x)$ la cual, escrita en términos de la amplitud $\psi(x)$ es de la forma [3]

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \psi(x) = \frac{\alpha}{8} \psi(x), \quad f(x) = |\psi(x)|^2, \quad U(x) = -\frac{1}{8} \sum_{k=1}^M \lambda_k A_k(x), \quad (14)$$

y es interpretada como una Ecuación de Schrödinger (SE) para una partícula de masa unidad ($\hbar = 1$) moviéndose en un "pseudopotencial informacional" efectivo $U(x)$ en el cual el multiplicador de Lagrange asociado a la normalización juega el rol de un autovalor de energía ($E = \alpha / 8$) y los λ_k son determinados por medio de la información disponible [3].

Para escenarios unidimensionales, $\psi(x)$ es real [1] y se tiene

$$I = \int \psi^2 \left(\frac{\partial \ln \psi^2}{\partial x} \right)^2 dx = 4 \int \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 dx = -4 \int \psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi dx \quad (15)$$

Luego, usando las expresiones (14) y (15) se encuentra una simple y conveniente expresión para la FIM,

$$I = \alpha + \sum_{k=1}^M \lambda_k \langle A_k \rangle. \quad (16)$$

La conexión entre la solución variacional f y la termodinámica fue establecida en términos de las típicas relaciones de reciprocidad (RR) de Legendre [7]. Estas constituyen el formal y esencial ingrediente termodinámico [17] y pueden ser re-derivadas 'a la Fisher' escribiendo (16) en una forma que enfatice el rol de las variables independientes relevantes,

$$I(\langle A_1 \rangle, \dots, \langle A_M \rangle) = \alpha + \sum_{k=1}^M \lambda_k \langle A_k \rangle. \quad (17)$$

La transformada de Legendre cambia la identidad de las variables independientes relevantes. Así, para el multiplicador de Lagrange α , que juega el rol de una autoenergía en (14), tenemos

$$\alpha(\lambda_1, \dots, \lambda_M) = I - \sum_{k=1}^M \lambda_k \langle A_k \rangle. \quad (18)$$

Luego, desde estas preliminares, se encuentran de forma trivial, las tres RR [3]

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \lambda_k} = -\langle A_k \rangle; \quad \frac{\partial I}{\partial \langle A_k \rangle} = \lambda_k; \quad \frac{\partial I}{\partial \lambda_i} = \sum_k \lambda_k \frac{\partial \langle A_k \rangle}{\partial \lambda_i}, \quad (19)$$

siendo la última una generalización del teorema de Euler.

Resulta muy interesante el hecho que las RR pueden ser re-derivadas a partir de fundamentos puramente cuánticos [8] a partir del teorema del Virial y del teorema de Hellmann-Feynman, mostrando que una estructura de Legendre subyace la unidimensional SE [8]. Una serie de importantes resultados han sido derivados a partir de este resultado [9-16]. Es nuestro interés actual hacer referencia a la inmediata consecuencia de poder inferir, para una amplia variedad de potenciales, un ansatz para la PDF y por tanto, para la función de onda del estado fundamental de la SE [16,18].

2.3. Ansatz para inferir la PDF de potenciales convexos

Una de las consecuencias directas de la estructura de Legendre subyacente en la SE, es que cuando el potencial que interviene en la teoría es una función *convexa simétrica*, es posible inferir un ansatz, libre de parámetros, para la autofunción correspondiente al estado fundamental de la SE [18]. El procedimiento es el siguiente.

Sea $U(x)$ un potencial convexo simétrico que alcanza su valor mínimo en el punto crítico $x_c = \xi$. Efectuando una transformación de traslación $u = x - \xi$ y denotando con barra las magnitudes referidas al nuevo referencial, tenemos

$$\bar{U}(u) = U(u + \xi) = U(x), \quad \bar{f}(u) = f(u + \xi) = f(x), \quad (20)$$

Debido a la invariancia traslacional de la FIM [2] $I = \bar{I}$, esta se puede expresar virialmente como,

$$I = -4 \left\langle \frac{\partial^2}{\partial u^2} \right\rangle = 4 \left\langle u \frac{\partial \bar{U}}{\partial u} \right\rangle \rightarrow \int du \bar{f}(u) \left(\frac{\partial \ln \bar{f}(u)}{\partial u} \right)^2 = 4 \int du \bar{f}(u) u \frac{\partial}{\partial u} \bar{U}(u) \quad (21)$$

Note que, si $U(x)$ es un potencial convexo simétrico respecto de $x_c = \xi$, se tiene que en el nuevo referencial, $\bar{U}(u)$ es un potencial convexo par,

$$\forall u \in \text{Dom}(\bar{U}), \quad u \frac{\partial}{\partial u} \bar{U}(u) \geq 0. \quad (22)$$

Luego, se infiere el ansatz \bar{f}_A que, por construcción, verifica (21). Simplemente se pide que

$$\left(\frac{\partial \ln \bar{f}_A(u)}{\partial u} \right)^2 = 4 u \frac{\partial}{\partial u} \bar{U}(u) \quad (23)$$

y se obtienen dos soluciones independientes, las cuales expresadas en el referencial original $x = u + \xi$, son dadas por

$$f_A^\pm(x) = A \exp \left(\pm 2 \int dx \sqrt{(x - \xi) \frac{\partial}{\partial x} U(x)} \right) \quad (24)$$

La ec.(24) proporciona una herramienta para construir un ansatz para la PDF relatada a *potenciales convexos simétricos* respecto del punto crítico $x_c = \xi$.

Cuando el potencial es simétrico, es de esperar que la PDF sea simétrica y presente su valor máximo donde el potencial es mínimo. Este concepto intuitivo permite aceptar de forma natural la relación local (23) e inferir el ansatz. Cuando el potencial no es simétrico, la (23) ya no es aceptable. En [18] se propone introducir un potencial efectivo $U_{ef}(x)$ y tratar con el de forma análoga al caso simétrico. En la próxima sección vamos a mostrar como puede esto ser realizado.

3. Ansatz para las autofunciones del Átomo de Hidrógeno

Consideremos el movimiento del electrón en el átomo de hidrógeno. Suponiendo que el núcleo no se mueve, este problema se reduce al del movimiento de una partícula en un campo coulombiano de atracción y su SE radial es dada por (7)

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + U(r) \right] \chi(r) = E \chi(r), \quad \text{con } U(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (25)$$

Definiendo

$$r = a_0 x, \quad E = EE_H, \quad \chi(r) = \chi(a_0 x) \equiv \psi(x), \quad \text{con } a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad E_H = \frac{me^4}{\hbar^2}$$

la SE radial para el átomo de hidrógeno en unidades atómicas se escribe como

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + U_l(x) \right] \psi(x) = E \psi(x), \quad U_l(x) = \frac{l(l+1)}{2x^2} - \frac{1}{x} \quad (26)$$

Comenzamos asociando a la ES (26) una FIM [10] y establecemos que el estado fundamental tiene asociada una PDF $f(x) = \psi_0^2(x)$. Luego, procedemos a estudiar el potencial,

Para todos los valores de l , el potencial es no-simétrico. Para $l \neq 0$ el potencial presenta un mínimo absoluto en $x_c = l(l+1)$. No obstante, para $l = 0$, el potencial es una función estrictamente creciente. Esto nos sugiere considerar un potencial efectivo conteniendo una adicional contribución centrífuga. Proponemos

$$U_{l,ef}(x) = U_l(x) + \frac{\lambda_l}{2x^2} = \frac{l(l+1) + \lambda_l}{2x^2} - \frac{1}{x} \quad (27)$$

Dado que $U_{l,ef}(x)$ presenta un mínimo absoluto en $\xi_l = l(l+1) + \lambda_l$, podemos usar (24) para inferir un ansatz para la autofunción del estado fundamental de la SE. Luego,

$$f_A(x) = \psi_A^2(x) \quad \rightarrow \quad \psi_A(x) = A \exp\left(\pm \int dx \sqrt{(x - \xi_l) \frac{\partial}{\partial x} U_{l,ef}(x)} \right) \quad (28)$$

$$\psi_A(x) = A \exp\left(\pm \int dx \sqrt{(x - \xi_l) \left(-\frac{\xi_l}{x^3} + \frac{1}{x^2} \right)} \right) \quad (29)$$

Finalmente, una integración elemental conduce a

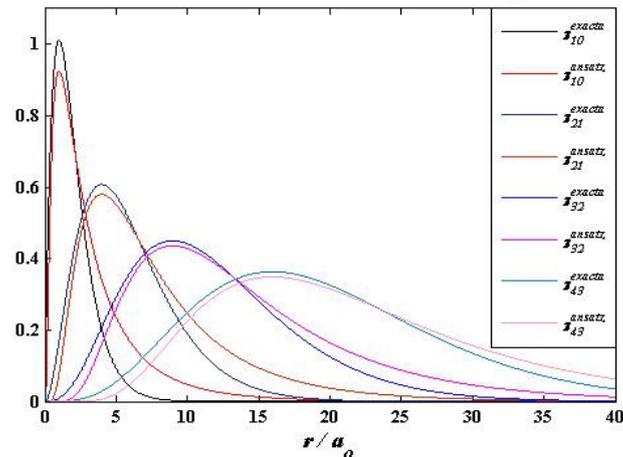
$$\psi_A(x) = N \exp\left(-\frac{2}{\sqrt{x}} (x + \xi_l) \right) \quad (30)$$

donde el signo de la exponencial es elegido de manera de satisfacer las condiciones de contorno y N es la constante de normalización.

El conocimiento a-priori que en el estado fundamental la probabilidad de encontrar al electrón en la órbita determinada por el radio de Bohr $r = a_0$ ($x = 1$) es máxima, nos sugiere elegir $\lambda_0 = 1$. En general, proponemos $\lambda_l = l + 1$ y tenemos $\xi_l = (l + 1)^2$.

En la figura están graficadas la autofunción exacta del estado fundamental de la SE radial [26] y la correspondiente autofunción-ansatz (30) para valores de $l = 0, 1, 2, 3$. Como el lector puede observar, el ansatz es una buena aproximación a la autofunción radial exacta.

Autofunciones correspondientes al estado fundamental de las ES radiales del Atomo de Hidrógeno



4. Conclusiones

A partir de la conexión Fisher-Schrödinger obtuvimos un ansatz para las autofunciones correspondiente al estado fundamental de la ecuación radial del átomo de hidrógeno. Consideramos que, a pesar de la necesidad de recurrir al conocimiento previo relacionado con la posición de los orbitales del electrón, estamos frente a una poderosa herramienta para abordar situaciones no-simétricas.

Bibliografía

1. W. Greiner and B. Müller, *Quantum mechanics. An Introduction*. (Springer, Berlin, 1988).
2. B. R. Frieden, *Science from Fisher Information: A Unification* (Cambridge, University Press; Cambridge, 2004).
3. B. R. Frieden, A. Plastino, A. R. Plastino, B. H. Soffer, *Phys. Rev. E* **60** (1999) 48-53.
4. M. Reginatto, *Phys. Rev. E* **58** (1998) 1775.
5. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino: *Condensed Matter Theories 18*. Nova Science Publishers. Inc. USA. (2003) 245-258, and ref. cited therein.
6. S. P. Flego, B. R. Frieden, A. Plastino, A. R. Plastino, B. H. Soffer, *Phys. Rev. E* **68** (2003) 016105.
7. S. P. Flego, F. Olivares, A. Plastino and M. Casas. *Entropy*, **13** (2011) 184.
8. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, *Physica A* **390** (2011) 2276-2282.
9. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, *Physica A* **390** (2011) 4702-4712.
10. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, *Ann. Phys. (N.Y.)* **326** (2011) 2533-2543.
11. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, *J. Math. Phys.* **52** (2011) 082103.
12. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, *J. Modern Phys.* **2** (2011) 1390.
13. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino. *IRJPC* **2** (1) (2011) 25-54.
14. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino. *Entropy* **13** (2011) 2049-2058.
15. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino: *Cent. Eur. J. Phys.* **10**(2) (2012) 390-397.
16. S. P. Flego, A. Plastino and A. R. Plastino, *Phys. Scr.* **85** (2012) 055002(7pp).
17. A. Desloge, *Thermal Physics* (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1968).
18. Flego, Silvana P.: *Ansatz libre de parámetros para obtener la función de distribución de probabilidades de Fisher de potenciales convexos*, en: *Actas de las Segundas Jornadas de Investigación y Transferencia*, Fac. de Ingeniería, Universidad Nacional de la Plata (UNLP), 2013.
19. Flego, Silvana P., Uriona, Hugo N.: *Autofunción-ansatz para el estado fundamental de la ecuación de Coffey-Evans*, en: *Actas de las Segundas Jornadas de Investigación y Transferencia*, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de la Plata (UNLP), 2013.
20. Flego, Silvana P., Palacio, Luis E.: *Ansatz libre de parámetros para inferir el estado fundamental de la ecuación de Mathieu*, en: *Actas de las Segundas Jornadas de Investigación y Transferencia*, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de la Plata (UNLP), 2013.