

Modelo unidimensional de un átomo en un campo eléctrico fuerte

Norberto Aquino Aquino*

*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa,
Av. Michoacán y Purísima, Iztapalapa, Apartado postal 55-532, 09340 México D.F.*

(Recibido el 16 de junio de 1989; aceptado el 14 de marzo de 1990)

Resumen. Se propone un modelo unidimensional para el estudio del efecto Stark en el átomo de hidrógeno en el cual el potencial coulombiano se reemplaza por el potencial delta de Dirac. En presencia de campo eléctrico, el único estado estacionario del potencial delta se convierte en un estado cuasi estacionario al cual se le determina el corrimiento en la energía así como la vida media (esta última ya la había obtenido Fernández [2] pero desafortunadamente resultó errónea) y se compara con una fórmula de Oppenheimer para el efecto Stark del átomo de hidrógeno real.

PACS: 32.60.+i

1. Introducción

Cuando un átomo es puesto en presencia de un campo eléctrico externo y homogéneo, los estados estacionarios se vuelven inestables, estos estados antes ligados sobreviven como estados resonantes (cuasi estacionarios) con cierta vida media, es decir, se convierten en estados que decaen con el tiempo, así que los electrones que foman el átomo eventualmente lo abandonan. Esto se explica del hecho de que la energía potencial que sienten los electrones es menor afuera del átomo que adentro de él.

El espectro discreto de eigenvalores (para energía negativa) que es característico del átomo de hidrógeno es reemplazado por un espectro continuo en presencia de un campo eléctrico, sin importar de que magnitud sea dicho campo. Cuando la magnitud del campo es pequeña, la vida media del estado resonante es grande y la energía es cercana a la del átomo no perturbado, pero a medida que la magnitud del campo aumenta, la vida media disminuye y el corrimiento en el nivel de la energía se vuelve grande.

Toda energía de un estado resonante [1] se puede representar mediante un valor complejo de la energía

$$E = \text{Re}(E) + i \text{Im}(E),$$

*Estudiante asociado al IFUNAM.

donde $\text{Re}(E)$ y $\text{Im}(E)$ son la parte real e imaginaria de la energía (compleja) E , respectivamente, mientras que i representa la unidad de los números complejos.

El ancho de la resonancia Γ está relacionado con la parte imaginaria de la energía mediante

$$\Gamma = -2 \text{Im}(E),$$

mientras que la relación entre la vida media τ y el ancho de la resonancia Γ es

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}.$$

El objetivo de este trabajo es deducir las ecuaciones correctas para el corrimiento de la energía y la vida media de un modelo unidimensional en el cual el potencial coulombiano es reemplazado por una delta de Dirac atractiva. La fórmula para la vida media predicha por este modelo fue anteriormente obtenida por Fernández y Castro [2] quienes establecen una analogía con una celebrada fórmula obtenida por Oppenheimer [3] en 1928, pero desafortunadamente la deducción de Fernández y Castro es errónea.

2. El modelo

Como primer paso demostraremos que el potencial delta de Dirac atractivo en ausencia de campo eléctrico externo sólo posee un estado estacionario.

Partiendo de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en unidades atómicas en donde $m = \hbar = e = 1$

$$-\psi'' - 2V_0\delta(x)\psi = 2E_0\psi, \quad (1)$$

donde V_0 es la profundidad del potencial.

La función de onda del estado ligado de la delta aislada debe de ser continua en el origen, con derivada discontinua en el mismo punto y con valor cero en más y menos infinito [4,5,6]

$$\psi(0^+) = \psi(0^-), \quad \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -2V_0\psi(0),$$

y

$$\psi(x \rightarrow \mp\infty) = 0. \quad (2)$$

La única solución que produce estados ligados es

$$\psi(x) = A \exp(-k|x|), \quad k^2 = -2E_0 \quad \text{y} \quad E_0 = -\frac{V_0^2}{2}, \quad (3)$$

donde A es la constante de normalización de la función ψ .

Por el momento V_0 es una constante que puede tomar cualquier valor, pero como queremos relacionar este modelo con el del átomo de hidrógeno real, es necesario tomar a V_0 igual a 1 para que la energía del estado ligado de la delta tenga la misma magnitud que la del estado base no perturbado del átomo de hidrógeno

$$V_0 = 1, \quad E_0 = -\frac{1}{2}. \tag{4}$$

Ahora consideremos el caso más general en el que se incluye también al campo eléctrico ϵ en unidades atómicas, de modo que una unidad atómica de campo eléctrico equivale a 5.141885×10^9 V/cm, así que aun campos tan intensos como 1×10^8 V/cm son apenas del orden de 1×10^{-2} unidades atómicas de campo eléctrico.

Así, la ecuación de Schrödinger toma la siguiente forma

$$-\psi''(x) - 2V_0\delta(x)\psi(x) + 2\epsilon x\psi(x) = 2E\psi(x), \tag{5}$$

cuando $x \neq 0$ esta ecuación se simplifica a

$$\psi''(x) - 2\epsilon x\psi(x) + 2E\psi(x) = 0, \tag{6}$$

que se reduce a la ecuación diferencial de Airy [7]

$$\psi''(z) - z\psi(z) = 0, \tag{7}$$

mediante el siguiente cambio de variable

$$z = (2\epsilon)^{1/3} \frac{x - E}{\epsilon}. \tag{8}$$

Al valor de z correspondiente a $x = 0$ lo llamaremos Z_0 , así

$$Z_0 = -(2\epsilon)^{1/3} \frac{E}{\epsilon}. \tag{9}$$

La ecuación diferencial de Airy (7) tiene dos soluciones independientes [7] que son las bien conocidas funciones de Airy $\text{Ai}(z)$ y $\text{Bi}(z)$, cuyo wronskiano es el siguiente

$$\text{Ai}(z) \text{Bi}'(z) - \text{Ai}'(z) \text{Bi}(z) = \frac{1}{\pi}. \tag{10}$$

Para nuestro problema la solución físicamente aceptable es,

$$\psi(z) = \alpha \text{Ai}(z), \quad \alpha = \text{cte.} \quad Z > Z_0 \tag{11}$$

ya que esta función decae rápidamente en esta región, que es lo que uno espera, debido a que la barrera impuesta por el campo eléctrico no permite que el electrón

viaje en forma indefinida hacia la derecha, mientras que la función $\text{Bi}(z)$ no puede ser solución porque crece muy rápidamente en esta región.

Para $Z < Z_0$ la solución son ondas salientes de la forma

$$\psi(z) = \gamma[\text{Ai}(z) - i \text{Bi}(z)] \quad \text{con } \gamma = \text{cte.} \quad (12)$$

La solución es continua para toda z , en particular es continua en Z_0 , así que tenemos la siguiente relación

$$\gamma = \frac{\alpha \text{Ai}(Z_0)}{\text{Ai}(Z_0) - i \text{Bi}(Z_0)}. \quad (13)$$

Como la derivada de ψ es discontinua en $x = 0$, para obtener una relación que contenga a la energía es necesario hacer una integración de la ecuación (5) en una vecindad alrededor de $x = 0$ y después hacer que esta vecindad tienda a cero; es conveniente hacer el cambio de variable de x a z [Ec. (8)] antes de realizar la integración, en términos de la variable z este resultado se expresa de la siguiente manera

$$\psi'(Z_0^+) - \psi'(Z_0^-) = -\frac{2V_0\psi(Z_0)}{(2\epsilon)^{1/3}}. \quad (14)$$

Haciendo uso de las ecuaciones del wronskiano, Ec. (10), y la Ec. (13), y tomando en cuenta que $\psi(Z_0) = \alpha \text{Ai}(Z_0)$, la Ec. (14) se puede escribir como

$$\text{Ai}^2(Z_0) - i \text{Ai}(Z_0) \text{Bi}(Z_0) = -\frac{iq}{2\pi}, \quad (15)$$

en donde q está relacionado con el campo eléctrico a través de

$$q = (2\epsilon)^{1/3} V_0^{-1}. \quad (16)$$

La Ec. (15) ya había sido obtenida anteriormente por Popov [8] en términos de funciones de Hankel, E. Ley-Koo [9], Fernández y Castro [2] y Aquino [10].

Hay que señalar que la Ec. (15) es una fórmula aplicable para calcular el eigenvalor complejo de la energía E para cualquier magnitud de campo eléctrico (donde aún sea válida la ecuación de Schrödinger), mientras que en el caso del átomo de hidrógeno real (de tres dimensiones) no existe una fórmula análoga.

3. Campos fuertes menores a 1×10^8 Volt/cm

Los campos eléctricos (estables) más intensos que se pueden producir en los laboratorios para realizar experimentos del efecto Stark en átomos y moléculas son del

orden de 1×10^5 o 10^6 V/cm. Sin embargo, estos campos tan intensos, en unidades atómicas de campo, son apenas del orden de 10^{-4} y 10^{-5} , respectivamente.

Ahora resolveremos la Ec. (15) para campos eléctricos que en unidades atómicas sean menores que 0.02 (es decir, campos menores a 1×10^8 V/cm) o lo que es equivalente para valores de Z_0 mayores que 3, así que podremos hacer uso de la forma asintótica de las funciones de Airy [7] (esta aproximación es válida debido a que las funciones de Airy son altamente convergentes o divergentes)

$$\text{Ai}(Z_0) = \frac{1}{2} \pi^{-1/2} Z_0^{-1/4} e^{-\xi} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k c_k \xi^{-k}, \tag{17a}$$

$$\text{Bi}(Z_0) = \pi^{-1/2} Z_0^{-1/4} e^{\xi} \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^{-k}, \tag{17b}$$

donde

$$c_0 = 1; \quad c_k = \frac{\Gamma(3k + \frac{1}{2})}{54^k k! \Gamma(k + \frac{1}{2})}, \tag{18}$$

y

$$\xi = \frac{2}{3} Z_0^{3/2}. \tag{19}$$

Sustituyendo estas expresiones en la Ec. (15) y despejando Z_0 se obtiene

$$Z_0 = \frac{1}{q^2} \left[\sum_{k=0}^{\infty} b_k \xi^{-k} + \frac{i}{2} e^{-2\xi} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{-k} \right]^2, \tag{20}$$

donde

$$a_k = (-1)^k \sum_{j=0}^k c_j c_{k-j} \quad \text{y} \quad b_k = \sum_{j=0}^k (-1)^j c_j c_{k-j}. \tag{21}$$

Para encontrar una expresión para la energía E , a partir de la Ec. (20), procedemos de la siguiente manera: tomamos $E = E_0 = -1/2$ y sustituimos en la Ec. (9), a continuación este valor se sustituye en la Ec. (19), con lo cual ξ es igual a

$$\xi = \frac{1}{3\epsilon}, \tag{22}$$

obsérvese que este valor es mayor que 10 (ya que $\epsilon < 0.02$), así que si sustituimos este valor en el lado derecho de la Ec. (20) y desarrollamos esta expresión reteniendo tan sólo los términos en ϵ de hasta segundo orden, mientras que en el lado derecho

de (20) se sustituye el valor de Z_0 [Ec. (9)] y se despeja el valor de la energía E de donde se encuentra que

$$\operatorname{Re}(E) = -\frac{1}{2}[1 + 18b\epsilon^2 + O(\epsilon^4)] \quad \text{con } b = 0.069444, \quad (23)$$

en esta expresión sólo aparecen potencias pares de ϵ cuyos coeficientes son siempre positivos, mientras que la parte imaginaria de la energía queda como

$$\operatorname{Im}(E) = -\frac{1}{2}[1 + d_1\epsilon + d_2\epsilon^2 + O(\epsilon^3)] \exp\left[-\frac{2}{3\epsilon}\right] \quad (24)$$

donde $d_1 = -0.41667$ y $d_2 = 1.33680$.

Mientras que por una lamentable equivocación Fernández y Castro [2] obtienen la siguiente fórmula

$$\operatorname{Im}(E) = -\frac{1}{2}[1 + O(\epsilon)] \exp\left[-\frac{2\epsilon}{3}\right] \quad (25)$$

y hacen mención de que esta fórmula se parece a la celebrada fórmula de Oppenheimer [3], pero esta es

$$\Gamma \sim \epsilon^{1/4} \exp\left[-\frac{2}{3\epsilon}\right] \quad (26)$$

para el ancho de la resonancia del estado más bajo del efecto Stark en el hidrógeno, desafortunadamente también la ecuación de Oppenheimer resultó ser errónea [11] (pero con la dependencia exponencial correcta), la ecuación correcta para la parte imaginaria de la energía en el efecto Stark en el átomo de hidrógeno fue obtenida por Silverstone, Harrell y Grot [11] mediante la aplicación de teoría de perturbaciones de alto orden, esta fórmula para el estado más bajo del efecto Stark en el átomo de hidrógeno es

$$\operatorname{Im}(E) = -\frac{2}{\epsilon}[1 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2 + O(\epsilon^3)] \exp\left[-\frac{2}{3\epsilon}\right], \quad (27)$$

donde $a_1 = -8.91667$ y $a_2 = 25.5566$.

Obsérvese que la fórmula (24) que predice el modelo unidimensional muestra la dependencia exponencial correcta en el campo eléctrico, pero no así el término $1/\epsilon$ del átomo de hidrógeno real.

Conclusiones

El modelo unidimensional para el efecto Stark muestra la misma dependencia exponencial en el campo eléctrico que el modelo real de tres dimensiones del átomo

de hidrógeno en la parte imaginaria de la energía, también existe una analogía en la parte real de la energía [Ec. (23)] y es que la serie de potencias de ϵ sólo contiene potencias pares y todos sus coeficientes son positivos como en el caso del efecto Stark en el átomo de hidrógeno [12]. Un hecho que vale la pena resaltar es un comentario de Fernández y Castro [2] en el sentido de que el potencial $\delta(x)$ al igual que el potencial coulombiano es singular en el origen y satisface que $x\delta'(x) = -\delta(x)$ lo cual nos hace recordar la relación $\mathbf{r} \cdot \nabla(1/r) = -1/r$.

Agradecimientos

Deseo agradecer al Dr. M. Moshinsky del IFUNAM el haberme sugerido este problema, así como sus útiles consejos y observaciones.

Referencias

1. L.D. Landau y E. Lifshitz, *Mecánica Cuántica (teoría no relativista)*, Ed. Reverté, Barcelona España (1978).
2. F.M. Fernández and E.A. Castro, *Am. J. Phys.* **53** (1985) 757.
3. J.R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **31** (1928) 66.
4. S. Gasiorowics, *Quantum Physics*, Ed. Wiley Int. Second, Ed. New York (1974) pp. 93-94.
5. A.A. Frost, *J. Chem. Phys.* **25** (1956) 1150.
6. I.R. Lapidus, *Am. J. Phys.* **38** (1970) 905.
7. M. Abramowitz and Stegun, *Handbook of mathematical functions*, U.S. Govt. Printing Office, Washington, DC (1954).
8. V.S. Popov, *Sov. Phys. JETP* **47** (1978) 232.
9. E. Ley-Koo, *Memorias del XXV Congreso Nacional de Física de la SMF*, Universidad Veracruzana, Xalapa, Ver. México (1982).
10. N. Aquino, *Memorias del XXVIII Congreso Nacional de Física de la SMF*, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son., México (1985).
11. H.J. Silverstone, E. Harrell and C. Grot, *Phys. Rev.* **A24** (1981) 1925.
12. I.W. Herbst and B. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **41** (1978) 67.

Abstract. A one dimensional model for the Stark effect is proposed, in which the coulombian potential is replaced by a Dirac's delta potential. When an electric field exists the only one stationary state of delta potential becomes in an quasi-stationary one. We compute the energy shift and the life time (this has been already obtained by Fernández [2], but unfortunately his formula is erroneous) and comparing with the Oppenheimer's formula for the Stark effect of the real hydrogen atom.