

El problema de los dos cuerpos en mecánica cuántica.

El problema de los dos cuerpos en mecánica clásica es uno de los pocos problemas de interés que admite una solución analítica. Como veremos, en mecánica cuántica también se puede resolver de forma analítica. Es la primera vez que nos vamos a enfrentar con un problema en el que intervienen dos partículas.

Vamos a ver cómo tratar un problema de dos partículas en mecánica cuántica. Queremos analizar la interacción electromagnética de un protón y un electrón, de modo que la función de onda de las dos partículas en la representación coordenadas dependerá de seis variables y del tiempo de la forma:

$$\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e, t)$$

El significado físico de esta función de onda es el siguiente: el módulo al cuadrado de la función de onda nos da la densidad de probabilidad de encontrar al electrón y al protón en determinadas posiciones en el instante t , es decir, que:

$$|\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e, t)|^2 d^3\mathbf{r}_p d^3\mathbf{r}_e$$

es la probabilidad de encontrar al protón en el elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_p$ alrededor del punto \mathbf{r}_p y de encontrar simultáneamente al electrón en el elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_e$ alrededor del punto \mathbf{r}_e en el instante t . El hamiltoniano que describa el conjunto de las dos partículas será de la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{H}_e + \hat{H}_{int}$$

donde \hat{H}_p es el hamiltoniano del protón y que es un operador que actúa única y exclusivamente sobre las coordenadas \mathbf{r}_p (en la representación coordenadas), \hat{H}_e es el del electrón, que es un operador que actúa única y exclusivamente sobre las coordenadas \mathbf{r}_e y \hat{H}_{int} es el hamiltoniano de interacción que actuará tanto sobre las coordenadas \mathbf{r}_p como sobre las \mathbf{r}_e . Vamos a ver que en el caso en que las partículas no interaccionen, tanto la energía como la densidad de probabilidad que hemos visto anteriormente se comportan como se espera, es decir, que la energía total de las partículas es la suma de la energía de cada partícula y la densidad de probabilidad de encontrar a las partículas en determinadas posiciones es el producto de las densidades de probabilidad individuales de cada partícula.

Si no existe interacción entre las dos partículas el hamiltoniano será:

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{H}_e$$

Si queremos resolver el problema de autovalores del hamiltoniano, en este caso, podemos aplicar el método de separación de variables y buscar autofunciones del hamiltoniano de la siguiente forma:

$$\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e) = \psi_p(\mathbf{r}_p)\psi_e(\mathbf{r}_e)$$

Si $\psi_p(\mathbf{r}_p)$ es una autofunción de \hat{H}_p de autovalor E_p y $\psi_e(\mathbf{r}_e)$ una autofunción de \hat{H}_e de autovalor E_e , entonces podemos comprobar que la función $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e)$ es una autofunción de \hat{H} :

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e) = \left(\hat{H}_p + \hat{H}_e\right)\psi_p(\mathbf{r}_p)\psi_e(\mathbf{r}_e) = (E_p + E_e)\psi_p(\mathbf{r}_p)\psi_e(\mathbf{r}_e) = (E_p + E_e)\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e)$$

Por tanto $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e)$ es una autofunción de \hat{H} de autovalor $E_p + E_e$. Este resultado es el que cabría esperar, es decir, que la energía total de las dos partículas es igual a la suma de las energías de cada partícula. Por otro lado, si la función de onda es $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e) = \psi_p(\mathbf{r}_p)\psi_e(\mathbf{r}_e)$, la probabilidad de encontrar al protón en el elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_p$ alrededor del punto \mathbf{r}_p y de encontrar al electrón en el elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_e$ alrededor del punto \mathbf{r}_e , viene dada por:

$$|\psi_p(\mathbf{r}_p)\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2 d^3\mathbf{r}_p d^3\mathbf{r}_e = |\psi_p(\mathbf{r}_p)|^2 d^3\mathbf{r}_p |\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2 d^3\mathbf{r}_e$$

es decir, que es igual a la probabilidad de encontrar al protón en el elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_p$ alrededor del punto \mathbf{r}_p multiplicada por la probabilidad de encontrar al electrón en el elemento de volumen $d^3\mathbf{r}_e$ alrededor del punto \mathbf{r}_e . En resumen, cuando las dos partículas no interactúan las podemos tratar por separado y podemos diagonalizar sus hamiltonianos por separado.

Operadores de posición y cantidad de movimiento del centro de masas.

Vamos a tratar ahora el problema del átomo de hidrógeno. El átomo de hidrógeno está compuesto por un protón y un electrón que interactúan mediante el potencial Coulomb. Por tanto, el hamiltoniano del sistema de las dos partículas es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_p|}$$

donde los operadores momento que aparecen en esta expresión, en la representación coordenadas, son:

$$\hat{\mathbf{p}}_p = -i\hbar\vec{\nabla}_p \quad \text{y} \quad \hat{\mathbf{p}}_e = -i\hbar\vec{\nabla}_e$$

Queremos resolver el problema de autovalores del hamiltoniano. Como existe interacción entre las dos partículas no podemos encontrar autofunciones de la forma $\psi(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_e) = \psi_p(\mathbf{r}_p)\psi_e(\mathbf{r}_e)$. Sabemos que en mecánica clásica el problema de los dos cuerpos se puede reducir a uno sólo. Vamos a ver que en mecánica cuántica se puede hacer lo mismo. En primer lugar, vamos a analizar cómo se reduce el problema a una sola partícula en mecánica clásica para tener una idea de cómo hacerlo en mecánica cuántica. La función lagrangiana clásica para el conjunto de las dos partículas viene dada por la siguiente expresión:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m_p\dot{\mathbf{r}}_p^2 + \frac{1}{2}m_e\dot{\mathbf{r}}_e^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|^2}$$

Podemos definir los momentos \mathbf{p}_p y \mathbf{p}_e conjugados de las variables \mathbf{r}_p y \mathbf{r}_e de la siguiente forma:

$$\mathbf{p}_p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_p} = m_p \dot{\mathbf{r}}_p \quad \text{y} \quad \mathbf{p}_e = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_e} = m_e \dot{\mathbf{r}}_e$$

Para reducir el problema a una sola partícula se utilizan una nuevas coordenadas: coordenadas para el movimiento del centro de masas y coordenadas para el movimiento

relativo, y que vienen dadas por las siguientes expresiones:

$$\mathbf{r}_{cm} = \frac{m_p \mathbf{r}_p + m_e \mathbf{r}_e}{m_p + m_e} \quad \text{y} \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$$

Podemos expresar las antiguas coordenadas en función de las nuevas de la siguiente forma:

$$\mathbf{r}_p = \mathbf{r}_{cm} - \frac{m_e}{m_p + m_e} \mathbf{r} \quad \text{y} \quad \mathbf{r}_e = \mathbf{r}_{cm} + \frac{m_p}{m_p + m_e} \mathbf{r}$$

Vamos a expresar la función lagrangiana en función de las nuevas coordenadas como sigue:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2} m_p \left(\dot{\mathbf{r}}_{cm} - \frac{m_e}{m_p + m_e} \dot{\mathbf{r}} \right)^2 + \frac{1}{2} m_e \left(\dot{\mathbf{r}}_{cm} + \frac{m_p}{m_p + m_e} \dot{\mathbf{r}} \right)^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \\ &= \frac{1}{2} (m_p + m_e) \dot{r}_{cm}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \dot{r}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \end{aligned}$$

o bien en función de la masa reducida $\mu = m_p m_e / (m_p + m_e)$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (m_p + m_e) \dot{r}_{cm}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

A continuación podemos definir los momentos conjugados de las variables \mathbf{r}_{cm} y \mathbf{r} de la siguiente forma:

$$\mathbf{p}_{cm} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_{cm}} = (m_p + m_e) \dot{\mathbf{r}}_{cm} \quad \text{y} \quad \mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \mu \dot{\mathbf{r}} = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \dot{\mathbf{r}}$$

Vamos a ver qué relación existe entre los nuevos momentos y los antiguos:

$$\mathbf{p}_{cm} = \mathbf{p}_p + \mathbf{p}_e \quad \text{y} \quad \mathbf{p} = \frac{m_p}{m_p + m_e} \mathbf{p}_e - \frac{m_e}{m_p + m_e} \mathbf{p}_p$$

Finalmente, la función hamiltoniana en función de las nuevas variables será:

$$\mathcal{H} = \frac{p_{cm}^2}{2(m_p + m_e)} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

A la vista de la función hamiltoniana podemos dividir el problema en dos: por un lado el movimiento del centro de masas corresponde al de una partícula libre de masa $m_p + m_e$ y por otro, el movimiento relativo corresponde a una partícula de mas μ que se mueve en el potencial de Coulomb.

Todo lo que hemos visto utilizando la descripción clásica nos va a servir a continuación para simplificar el problema de los dos cuerpos en mecánica cuántica. Al igual que hemos hecho en mecánica clásica, vamos a considerar un sistema formado por un protón y un electrón que interactúan mediante el potencial de Coulomb. El operador hamiltoniano correspondiente al sistema de las dos partículas será:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_p|^2}$$

Al igual que en mecánica clásica no podemos separar el movimiento de las dos partículas. Sin embargo, al igual que en mecánica clásica, podemos utilizar unos nuevos operadores, de modo que al final nos quede un operador hamiltoniano que corresponda al movimiento independiende de dos "partículas": el centro de masas y el movimiento relativo. Lo que tenemos que hacer es definir unos nuevos operadores que se relacionen con los antiguos de la misma forma que las variables clásicas. Es decir, que vamos a definir los siguientes operadores:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}}_{cm} &= \frac{m_p \hat{\mathbf{r}}_p + m_e \hat{\mathbf{r}}_e}{m_p + m_e} & \hat{\mathbf{r}} &= \hat{\mathbf{r}}_e - \hat{\mathbf{r}}_p \\ \hat{\mathbf{p}}_{cm} &= \hat{\mathbf{p}}_p + \hat{\mathbf{p}}_e & \hat{\mathbf{p}} &= \frac{m_p}{m_p + m_e} \hat{\mathbf{p}}_e - \frac{m_e}{m_p + m_e} \hat{\mathbf{p}}_p\end{aligned}$$

Vamos a ver que los operadores $\hat{\mathbf{r}}_{cm}$, $\hat{\mathbf{p}}_{cm}$ y $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ son canónicos conjugados (es decir, que verifican las reglas de conmutación correspondientes a operadores canónicos conjugados). Vamos a partir de que los operadores $\hat{\mathbf{r}}_p$, $\hat{\mathbf{p}}_p$ y $\hat{\mathbf{r}}_e$, $\hat{\mathbf{p}}_e$ son canónicos conjugados y, por tanto, verifican las siguientes reglas de conmutación:

$$[\hat{r}_{pi}, \hat{p}_{pj}] = i\hbar\delta_{ij} \quad \text{y} \quad [\hat{r}_{ei}, \hat{p}_{ej}] = i\hbar\delta_{ij}$$

Vamos a comenzar con los operadores del centro de masas:

$$\begin{aligned}[\hat{r}_{cmi}, \hat{p}_{cmj}] &= \left[\frac{m_p \hat{r}_{pi} + m_e \hat{r}_{ei}}{m_p + m_e}, \hat{p}_{pj} + \hat{p}_{ej} \right] = \\ &= \left[\frac{m_p \hat{r}_{pi}}{m_p + m_e}, \hat{p}_{pj} \right] + \left[\frac{m_e \hat{r}_{ei}}{m_p + m_e}, \hat{p}_{ej} \right] = \\ &= \frac{m_p}{m_p + m_e} i\hbar\delta_{ij} + \frac{m_e \hat{r}_{ei}}{m_p + m_e} i\hbar\delta_{ij} = i\hbar\delta_{ij}\end{aligned}$$

Podemos hacer lo mismo para las variables del movimiento relativo:

$$\begin{aligned}[\hat{r}_i, \hat{p}_j] &= \left[\hat{r}_{ei} - \hat{r}_{pi}, \frac{m_p}{m_p + m_e} \hat{p}_{ej} - \frac{m_e}{m_p + m_e} \hat{p}_{pj} \right] = \\ &= \left[\hat{r}_{ei}, \frac{m_p}{m_p + m_e} \hat{p}_{ej} \right] + \left[\hat{r}_{pi}, \frac{m_e}{m_p + m_e} \hat{p}_{pj} \right] = \\ &= \frac{m_p}{m_p + m_e} i\hbar\delta_{ij} + \frac{m_e}{m_p + m_e} i\hbar\delta_{ij} = i\hbar\delta_{ij}\end{aligned}$$

Estas reglas de conmutación nos aseguran que en la representación $\{|\hat{\mathbf{r}}_{cm}\rangle\}$ el operador $\hat{\mathbf{p}}_{cm}$ actúa de la forma $-i\hbar\vec{\nabla}_{cm}$ y del mismo modo, en la representación $\{|\hat{\mathbf{r}}\rangle\}$ el operador $\hat{\mathbf{p}}$ actúa de la forma $-i\hbar\vec{\nabla}$. De todas formas, podemos comprobarlo a partir de cómo actúan los operadores $\hat{\mathbf{p}}_p$ y $\hat{\mathbf{p}}_e$ en la representación coordenadas. Como ejemplo vamos a calcular cómo actúa el operador \hat{p}_{cmx} , que según hemos dicho debe valer $-i\hbar\partial/\partial x_{cm}$. Vamos a

verificarlo:

$$\begin{aligned}
 \hat{p}_{cmx} &= \hat{p}_{px} + \hat{p}_{ex} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_p} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_e} = \\
 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{cm}} \frac{\partial x_{cm}}{\partial x_p} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_p} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{cm}} \frac{\partial x_{cm}}{\partial x_e} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_e} = \\
 &= -i\hbar \frac{m_p}{m_p + m_e} \frac{\partial}{\partial x_{cm}} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar \frac{m_e}{m_p + m_e} \frac{\partial}{\partial x_{cm}} - i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \\
 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{cm}}
 \end{aligned}$$

como queríamos demostrar.

También se puede demostrar fácilmente que los operadores del centro de masas conmutan con los del movimiento relativo, de modo que las partículas "centro de masas" y "movimiento relativo" son independientes.