Capítulo 4. Aplicación de la ecuación de onda al átomo de hidrógeno.

4.1. Ecuación de onda para un potencial central eléctrico

Si utilizamos un sistema de coordenadas esféricas para las dimensiones extendidas y elíptico para las compactadas y consideramos un potencial eléctrico tridimensional la ecuación de onda independiente del tiempo sería:

$$(\nabla_{6D}{}^2 + k^2) \cdot H = 0$$

donde $k = \frac{E_{onda}}{\hbar c} i$

La energía total de la pulsación tendrá los siguientes términos:

- Energía de la pulsación en reposo: $E_0 = mc^2$
- Energía cinética: E_c

Como la energía cinética no es conocida a priori y el electrón se va a mover en un campo potencial eléctrico podemos expresarla como la diferencia entre:

- Energía mecánica: E_m
- Energía potencial eléctrica. Si consideramos que debido a su gran masa con respecto al electrón el protón se mantiene inmóvil podemos expresar la energía debida al campo eléctrico como:

  $$E_{ELEC} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{Qq}{r} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

Por tanto tendremos que:

$$k = \frac{E_{onda}}{\hbar c} i = \frac{mc^2 + E_m - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}}{\hbar c} i = \left(\frac{mc^2 + E_m}{\hbar c} - \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \right) i$$

y si llamamos a $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\varepsilon_0}$

podemos escribir:

$$\nabla_{6D}{}^2 H - \left(\frac{mc^2 + E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)^2 H = 0$$

Desarrollando tenemos:

$$\nabla^2 H - \left(\frac{m^2c^4}{\hbar^2c^2} + \frac{E_m{}^2}{\hbar^2c^2} + \frac{2E_m mc^2}{\hbar^2c^2} + \frac{\alpha^2}{r^2} - \frac{2mc^2\alpha}{\hbar cr} - \frac{2E_m\alpha}{\hbar cr}\right) H = 0$$

agrupando nos queda:

$$\nabla^2 H - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 H - \left(\frac{E_m}{\hbar c}\right)^2 H - \frac{2mc^2}{\hbar c}\left(\frac{E_c}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right) H - \left(\frac{\alpha^2}{r^2} - \frac{2E_m\alpha}{\hbar cr}\right) H = 0$$

Se puede solucionar mediante separación de variables

$H(\xi, \eta, x, y, z) = \Phi(\xi, \eta) \cdot \Psi(r, \theta, \phi)$

que permite separar los laplacianos utilizando el mismo postulado que en la página 19.

$$\nabla_{\xi,\eta}{}^2 \Phi - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \Phi = 0 \quad \text{De solución análoga a la de la partícula libre.} \quad \text{(I)}$$

$$\nabla_{r,\theta,\phi}{}^2 \Psi - \left[\left(\frac{E_m}{\hbar c}\right)^2 - \frac{2E_m\alpha}{\hbar cr}\right]\Psi - \frac{2mc^2}{\hbar c}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0 \quad \text{(II)}$$

Sacando factor común en (II)

$$\nabla^2 \Psi - \frac{E_m}{\hbar c}\left[\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{2\alpha}{r}\right]\Psi - \frac{2mc^2}{\hbar c}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

En el caso no relativista $mc^2 >>> E_m$ y el término $\frac{E_m}{\hbar c}\left[\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{2\alpha}{r}\right]\Psi$

es despreciable frente a

$$\frac{2mc^2}{\hbar c}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi$$

y por tanto podemos escribir: $$\boxed{\nabla^2\Psi - \frac{2m_0 c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0}$$

4.2. Ecuación de Schrodinger independiente del tiempo

Resulta sencillo obtener la ecuación de Schrodinger a partir de la relación anterior. En efecto, si consideramos :

$$\nabla^2\Psi - \frac{2m_0 c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

y despreciando el término $\frac{\alpha^2}{r^2}$ frente a $\frac{\alpha}{r}$

$$\nabla^2\Psi + \frac{2m_0 c}{\hbar}\left(\frac{E}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi = 0$$

o, lo que es lo mismo

$$\frac{\hbar}{2m_0 c}\nabla^2\Psi + \left(\frac{E}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi = 0$$

y recordando que:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\varepsilon_0}$$

Nos queda:

$$\frac{\hbar}{2m_0 c}\nabla^2\Psi + \left(\frac{E}{\hbar c} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c r}\right)\Psi = 0$$

Multiplicando por $\hbar c$ y reordenando:

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\Psi + \left(E - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\Psi = 0 \qquad \rightarrow \qquad \boxed{\left(\frac{-\hbar^2}{2m_0} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\Psi = E\nabla^2\Psi}$$

4.3. Solución para las dimensiones extendidas. Caso no relativista

Si partimos de la ecuación:

$$\nabla^2\Psi - \frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

, aplicando el laplaciano en esféricas tenemos

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 Sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(Sen\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 Sen^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi} - \frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

Si descomponemos

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)P(\theta)T(\phi)$$

tenemos entonces:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2R'PT\right) + \frac{1}{r^2 Sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(Sen\theta RP'T\right) + \frac{1}{r^2 Sen^2\theta}RPT'' - \frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)RPT - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)RPT = 0$$

Si multiplicamos por

$$\frac{r^2 Sen^2\theta}{RPT}\quad \frac{Sen^2\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) + \frac{Sen\theta}{P}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right) + \frac{T''}{T} - r^2Sen^2\theta\frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right) - r^2Sen^2\theta\left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right) = 0$$

Como tenemos un término que solo depende de ϕ y la suma debe ser constante por fuerza tenemos que:

$$\frac{T''}{T} = cte = -m_l^2$$

y cuya solución es

$T(\phi) = C_4 e^{-im_l\phi}$ con m_l semientero.

Sustituyendo entonces y dividiendo por $Sen^2\theta$

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) + \frac{1}{PSen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right) - \frac{m_l^2}{Sen^2\theta} - r^2\frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right) - \alpha^2 = 0$$

Ya tenemos separadas las variables.

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right)-r^2\frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c}-\frac{\alpha}{r}\right)-\alpha^2=l(l+1)$$

$$\frac{1}{PSen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right)-\frac{m_l^2}{Sen^2\theta}=-l(l+1)$$

Como $\alpha^2 << l(l+1)$ podemos escribir:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right)-r^2\frac{2m_0c}{\hbar}\left(\frac{E_m}{\hbar c}-\frac{\alpha}{r}\right)=l(l+1) \qquad \text{(a)}$$

$$\frac{1}{PSen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right)-\frac{m_l^2}{Sen^2\theta}=-l(l+1) \qquad \text{(b)}$$

$$\frac{T''}{T}=-m_l^2 \qquad \text{(c)}$$

La ecuación (b) se trata de la función asociada de Legendre, que junto con la ecuación (c) proporciona la solución de los armónicos esféricos. Las condiciones de contorno restringen la solución a l=0,1,2,…. junto con la condición $0 \le |ml| \le l$

En principio m_l puede adoptar valores semienteros, pero los polinomios de Legendre de orden semientero presentan valores infinitos para $\theta = 1$, por lo que no pueden tener significado físico.

Vamos a analizar la ecuación (a) para determinar los niveles de energía:

Si aplicamos la regla de la cadena y reagrupamos

$$2rR'+r^2R''-r^2\left(\frac{2m_0c^2E_m}{(\hbar c)^2}-\frac{2m_0c^2\alpha}{\hbar cr}\right)R=l(l+1)R$$

Definimos la función

$u(r)=rR$

$u'(r)=rR'+R$

$u''(r)=R'+rR''+R'=2R'+rR''$

lo que nos permite escribir los dos primeros términos de forma simplificada:

$2rR'+r^2R''=r(2R'+rR'')=ru''$ y por tanto:

$$u'' - \left(\frac{2m_0c^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{2m_0c^2\alpha}{\hbar c r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0$$

Si realizamos un estudio asintótico de la función anterior cuando $r \to \infty$ se puede escribir:

$$u'' - \left(\frac{2m_0c^2E_m}{(\hbar c)^2} \right) u = 0$$

si llamamos

$$\beta^2 = \frac{2mc^2E_c}{(\hbar c)^2}$$

podemos escribir:

$$u'' - \left(\beta^2 - \frac{2m_0c\alpha}{\hbar r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0$$

Dividiendo por β^2:

$$\frac{u''}{\beta^2} - \left(1 - \frac{2m_0c\alpha}{\beta^2\hbar r} + \frac{l(l+1)}{\beta^2 r^2} \right) u = 0$$

Como r aparece siempre multiplicado por β podemos realizar el siguiente cambio de variable $\rho = \beta \cdot r$ definiendo la función $U(\rho)$:

$$U'' - \left(1 - \frac{2m_0c\alpha}{\beta\hbar\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) U = 0$$

Si llamamos $\rho_0 = \dfrac{2m_0c\alpha}{\beta\hbar}$ tenemos

$$U'' - \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) U = 0 \qquad \text{(d)}$$

La ecuación (d) aparece en forma muy similar en la resolución de la ecuación de Schrodinger radial del átomo de hidrógeno y puede encontrarse su resolución en la literatura mediante su estudio asintótico y posterior desarrollo en serie. La condición para que la serie de términos no sea infinita es que para algún valor de j se cumpla la igualdad siguiente:

$2(j + l + 1) = \rho_0$ donde j es un número entero.

si llamamos n=j+l+1 nos queda:

$$\boxed{2n = \rho_0}$$

Si recordamos las definiciones: $\beta^2 = \frac{2mc^2E_m}{(\hbar c)^2}$ y $\rho_0 = \frac{2m_0 c\alpha}{\beta\hbar}$

podemos obtener la relación que cuantifica los niveles energéticos del electrón en el átomo de hidrógeno:

$$\frac{2mc\alpha}{\hbar\frac{\sqrt{2mE_m}}{\hbar}} = 2n- > \frac{mc\alpha}{\sqrt{2mE_m}} = n$$

Elevando al cuadrado

$$\frac{mc^2\alpha^2}{2E_m} = n^2$$

Y eligiendo la solución negativa

$$\boxed{E_m = -\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2}}$$

que proporciona los mismos niveles energéticos que la ecuación de Schrodinger.

En realidad la ecuación (a) se trata de una variación de la función asociada de Lagerre y por tanto proporciona las mismas soluciones. Finalmente recalcar que la solución final vendrá dada por el producto de las 3 soluciones, es decir:

$$H(\xi,\eta,x,y,z,t) = \Phi(\xi,\eta)\cdot\Psi(r,\theta,\phi)\cdot e^{-\omega ti}$$

, y que de dichas soluciones se pueden obtener los momentos angulares, que serían:

– Momento angular orbital $L = \sqrt{l(l+1)}\cdot\hbar$
– Proyección sobre el eje z del momento angular orbital $L_z = m_l\hbar$
– Momento angular de espín $L_s = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$

4.4. Solución para las dimensiones extendidas. Caso relativista

Si partimos de la ecuación de onda para las dimensiones extendidas:

$$\nabla^2\Psi - \frac{E_m}{\hbar c}\left[\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{2\alpha}{r}\right]\Psi - \frac{2mc^2}{\hbar c}\left(\frac{E_m}{\hbar c} - \frac{\alpha}{r}\right)\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

sacando factor común y reordenando tenemos:

$$\nabla^2\Psi - \left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right]\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

aplicando el laplaciano en esféricas tenemos:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 Sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(Sen\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2Sen^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi} - \left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right]\Psi - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)\Psi = 0$$

Si descomponemos $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)P(\theta)T(\phi)$tenemos entonces:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2R'PT\right) + \frac{1}{r^2Sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(Sen\theta RP'T\right) + \frac{1}{r^2Sen^2\theta}RPT'' - \left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right]RPT - \left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right)RPT = 0$$

Si multiplicamos por $\dfrac{r^2Sen^2\theta}{RPT}$

$$\frac{Sen^2\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) + \frac{Sen\theta}{P}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right) + \frac{T''}{T} - r^2Sen^2\theta\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right] - r^2Sen^2\theta\left(\frac{\alpha^2}{r^2}\right) = 0$$

Como tenemos un término que solo depende de ϕ y la suma debe ser constante por fuerza tenemos que:

$\dfrac{T''}{T} = cte = -m_l^2$ con $m_l$semientero.

Sustituyendo entonces y dividiendo por $Sen^2\theta$

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) + \frac{1}{PSen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right) - \frac{m_l^2}{Sen^2\theta} - r^2\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right] - \alpha^2 = 0$$

Ya tenemos separadas las variables.

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) - r^2\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right] = l'(l' + 1)$$

$$\frac{1}{PSen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right) - \frac{m_l^2}{Sen^2\theta} - \alpha^2 = -l'(l' + 1)$$

Si llamamos $\alpha^2 - l'(l'+1) = -l(l+1)$ nos quedaría:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) - r^2\left[\frac{E_m^{\;2} + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right] = l'(l'+1) \qquad \text{(a')}$$

$$\frac{1}{PSen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(Sen\theta P'\right) - \frac{m_l^2}{Sen^2\theta} = -l(l+1) \qquad \text{(b')}$$

$$\frac{T''}{T} = cte = -m_l^2 \qquad \text{(c')}$$

La segunda ecuación solo tiene solución para l entero positivo, por tanto podemos obtener los valores de l' en función de los posibles valores de l.

$\alpha^2 - l' - l'^2 = -l(l+1) -> l'^2 + l' - \alpha^2 - l(l+1) = 0$

Ecuación de segundo grado cuyas soluciones para los primeros valores de l son:

l	l'	
0	-5,3254190509x10^{-5}	-0,9999467485
1	0,9999822494	1,9999822494
2	1,9999893497	-2,9999893497
3	2,9999923927	-3,99…..

Parece evidente que la solución con significado físico es la primera, por tanto podemos escribir:

l	l'	$\delta = l - l'$
0	-5,3254190509x10^{-5}	5,325419051x10^{-5}
1	0,9999822494	1,775055653x10^{-5}
2	1,9999893497	1,065029359x10^{-5}
3	2,9999923927	7,607344624x10^{-6}
4	3,9999940832	5,916821056x10^{-6}
5	4,999995159	4,841x10^{-6}
6	5,9999959037	4,096259329x10^{-6}
7	6,9999964499	3,55009114x10^{-6}

Ya estamos en condiciones por tanto de resolver la ecuación (a'):

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2R'\right) - r^2\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right] = l'(l'+1)$$

aplicando la regla de la cadena y multiplicando por R tenemos:

$$2rR' + r^2R'' - r^2\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right]R = l'(l'+1)R$$

Realizamos la siguiente sustitución:

$u(r) = rR$

$u'(r) = rR' + R$

$u''(r) = R' + rR'' + R' = 2R' + rR''$

lo que nos permite escribir los dos primeros términos de forma simplificada:

$2rR' + r^2R'' = r(2R' + rR'') = ru''$ y por tanto:

$$ru'' - r^2\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right]\frac{u}{r} = l'(l'+1)\frac{u}{r}$$

operando tenemos:

$$u'' - r\left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr}\right]u = l'(l'+1)\frac{u}{r}$$

Dividiendo por r y reordenando:

$$u'' - \left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2} - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar cr} + \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right]u = 0$$

Si realizamos un estudio asintótico de la función anterior cuando $r -\ > \infty$ se puede escribir:

$$u'' - \left[\frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2}\right]u = 0$$

si llamamos

$$\beta^2 = \frac{E_m{}^2 + 2mc^2E_m}{(\hbar c)^2}$$

podemos escribir:

$$u'' - \left[\beta^2 - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\hbar c r} + \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right]u = 0$$

Dividiendo por β^2 :

$$\frac{u''}{\beta^2} - \left[1 - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\beta^2 \hbar c r} + \frac{l'(l'+1)}{\beta^2 r^2}\right]u = 0$$

Como r aparece siempre multiplicado por β podemos realizar el siguiente cambio de variable ρ = $\beta \cdot r$ definiendo la función $U(\rho)$:

$$U'' - \left[1 - \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\beta \hbar c \rho} + \frac{l'(l'+1)}{\rho^2}\right]U = 0$$

Si llamamos

$$\rho_0 = \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\beta \hbar c}$$

podemos escribir: $U'' - \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l'(l'+1)}{\rho^2}\right]U = 0$ (d')

La ecuación (d') aparece en la resolución de la ecuación de Schrodinger radial del átomo de hidrógeno y puede encontrarse su resolución en la literatura mediante su estudio asintótico y posterior desarrollo en serie. La condición para que la serie de términos no sea infinita es que para algún valor de j se cumpla la igualdad siguiente:

$2(j + l' + 1) = \rho_0$ donde j es un número entero. Si escribimos l' en función de l tendremos:

$2(j + l - \delta(l) + 1) = \rho_0$ si llamamos n=j+l+1 nos queda:

$2(n - \delta(l)) = \rho_0$ y llamando $n'(l) = n - \delta(l)$ la condición resulta en :

$$\boxed{2n'(l) = \rho_0}$$

Si recordamos las definiciones:

$$\beta^2 = \frac{E_m{}^2 + 2mc^2 E_m}{(\hbar c)su} \text{ y } \rho_0 = \frac{(2E_m + 2mc^2)\alpha}{\beta \hbar c}$$

podemos obtener la relación que cuantifica los niveles energéticos del electrón en el átomo de hidrógeno si consideramos que la energía mecánica es negativa y por tanto su raiz cuadrada imaginaria:

$$n'(l) = \frac{(E_m + mc^2)\alpha}{i\sqrt{E_m^{\ 2} + 2mc^2E_m}}$$

Si elevamos al cuadrado (apareciendo por supuesto soluciones extras) tenemos:

$$n'^2 = \frac{-(E_m + mc^2)^2\alpha^2}{E_m^{\ 2} + 2mc^2E_m}$$

operando

$$n'^2E_m^{\ 2} + 2n'^2mc^2E_m = -(E_m\alpha + \alpha mc^2)^2$$

desarrollando el cuadrado del binomio y operando:

$$n'^2E_m^{\ 2} + 2n'^2mc^2E_m + E_m^{\ 2}\alpha^2 + \alpha^2(mc^2)^2 + 2E_m\alpha^2mc^2 = 0$$

reordenando nos quedaría:

$$(n'^2 + \alpha^2)E_m^{\ 2} + 2mc^2(n'^2 + \alpha^2)E_m + \alpha^2(mc^2)^2 = 0$$

ecuación de segundo grado en E_m del tipo $ax^2 + bx + c = 0$ donde

$$a = n'^2 + \alpha^2$$

$$b = 2mc^2(n'^2 + \alpha^2)$$

$$c = \alpha^2(mc^2)^2$$

Y la solución será:

$$E_m = \frac{-2mc^2(n'^2 + \alpha^2) \pm \sqrt{4m^2c^4(n'^2 + \alpha^2)^2 - 4\cdot(n'^2 + \alpha^2)\cdot\alpha^2\cdot m^2c^4}}{2(n'^2 + \alpha^2)}$$

Sacando factor común:

$$E_m = -2mc^2\left[\frac{(n'^2 + \alpha^2) \pm \sqrt{(n'^2 + \alpha^2)^2 - (n'^2 + \alpha^2)\cdot\alpha^2}}{2(n'^2 + \alpha^2)}\right]$$

y simplificando queda:

$$\boxed{E_m = -mc^2\left[1 \pm \sqrt{\frac{n'^2}{n'^2 + \alpha^2}}\right]}$$

La segunda solución coincide numéricamente con la corrección relativista de primer orden a la ecuación de Schrodinger que aparece en la literatura.

$$E = -\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+\frac{1}{2}}\right)$$

Los resultados numéricos se muestran a continuación:

La soluciones anteriores no reproducen cuantitativamente la estructura fina ni cualitativamente la estructura hiperfina porque en la expresión de la energía no se han introducido los términos magnéticos ni el momento magnético nuclear, pero basta para demostrar que las dos formulaciones son equivalentes.

n	l	l'	n'(l)	E (n') eV	E(n,l) eV
1	0	-5,32822E-05	0,999946746	-13,5991928	-13,5991927
2	0	-5,32822E-05	1,999946746	-3,399718986	-3,399718973
2	1	0,99998224	1,999982249	-3,399598285	-3,399598285
3	0	-5,32822E-05	2,999946746	-1,510967775	-1,510967772
3	1	0,99998224	2,999982249	-1,510932012	-1,510932012
3	2	1,999989344	2,99998935	-1,51092486	-1,51092486
4	0	-5,32822E-05	3,999946746	-0,84991348	-0,849913479
4	1	0,99998224	3,999982249	-0,849898393	-0,849898393
4	2	1,999989344	3,99998935	-0,849895375	-0,849895375
4	3	2,999992389	3,999992393	-0,849894082	-0,849894082
5	0	-5,32822E-05	4,999946746	-0,543942219	-0,543942219
5	1	0,99998224	4,999982249	-0,543934495	-0,543934495
5	2	1,999989344	4,99998935	-0,54393295	-0,54393295
5	3	2,999992389	4,999992393	-0,543932288	-0,543932288
5	4	3,99999408	4,999994083	-0,54393192	-0,54393192

Figura 4.1.

La solución radial a la ecuación de onda es muy similar a la tradicional en Mecánica Cuántica, pero con las siguientes diferencias:

– Ψ representa (es proporcional a) el potencial de las fuerzas electrofuertes, electromagnéticas o electrodébiles, **y pierde su interpretación probabilista.**

– **La longitud característica a** debe ser igual a la mitad del radio de Bohr. ($a_0/2$).