PROYECTO DE INVESTIGACION PARA TESIS DE MAESTRIA EN CIENCIAS FISICAS

(Orientación Interacción de la Radiación con la Materia)

"Solución del átomo de hidrógeno confinado, con un protón de tamaño finito"

En un trabajo reciente, se ha derivado una solución rigurosa para el caso del átomo de hidrógeno confinado, suponiendo por simplicidad que el protón es una partícula puntual y de masa infinita.[1] En el caso real, el cociente entre la masa del protón y la masa del electrón es grande pero no infinito ($m_p / m_e \sim 1836$), y el protón posee además un tamaño finito ($r_p \sim 1$ fermi $= 10^{-15}$ m), aunque pequeño en la escala de distancias del radio de Bohr ($a_B \sim 10^{-10}$ m).

La presente propuesta teórica consiste en extender los resultados ya encontrados en la Ref. 1 (correspondientes a $r_p = 0$), para el caso $r_p \neq 0$. El interés teórico del problema reside que en general, la ecuación radial para el átomo de hidrógeno confinado admite dos soluciones independientes, denominadas funciones hipergeométricas confluentes, o funciones de Kummer.[2] Una de ellas, llamada regular, corresponde a una función de onda radial que (en ausencia de confinamiento, o sea el átomo de hidrógeno libre) o es finita en el origen (estados *s*) , o se anula en el mismo punto (estados *p*, *d*, *f*, ...). La otra solución, denominada irregular, tiene una amplitud infinita en el origen (diverge allí como 1/r) y es usualmente desechada pues no satisface la condición de contorno de que el producto de la coordenada radial por la función de onda radial debe anularse en el origen.[3] Es interesante notar que esta función de onda radial irregular, es normalizable, pues la divergencia en el origen es integrable. Ahora bien, si $r_p \neq 0$, el electrón está sometido a un potencial coulombiano para $r > r_p$, y a un potencial *no-coulombiano* (en general finito en el origen para todo modelo razonable de la estructura interna del protón) para $r < r_p$. Como consecuencia, para $r > r_p$ ambas soluciones regular e irregular para la ecuación de Schrödinger radial en un campo coulombiano son admisibles. La solución completa al problema (autoenergías y autoestados) en toda región del espacio resultará de imponer condiciones de contorno de continuidad (función de onda radial y su derivada) para $r = r_p$, entre las dos funciones radiales "interiores" (soluciones para $r < r_p$), y las dos funciones radiales "exteriores" (soluciones para $r > r_p$). Y puesto que se trata de un átomo de hidrógeno confinado, hay que imponer la condición de "pared dura" sobre la función de onda radial "exterior", consistente en que debe anularse exactamente cuando r = R. R representa aquí el radio de la esfera confinante. Basado en la experiencia adquirida para el caso ya resuelto de $r_p = 0$, se espera poder obtener de forma analítica una expresión para la ecuación de autovalores, la cual deberá ser resuelta de manera numérica, para diferentes valores

1 J. M. Ferreyra y C. R. Proetto, Am. J. Phys. **81**, 860 (2013).

2 M. Abramowitz y I. Stegun, en Handbook of Mathematical Functions, página 504. Este manual tiene una versión electrónica gratuita, que puede obtenerse de "http://dlmf.nist.gov".

3 A. A. Khelashvii y T. P. Nadarreishvii, Am. J. Phys. **79**, 668 (2010). Una buena discusión sobre la existencia de esta condición sobre la función de onda radial se encuentra en el libro Mecánica Cuántica, de A. Messiah, página 323 (Editorial Tecnos, Madrid, 1973).

de los parámetros r_p y R. Por último, también se propone resolver el mismo problema del átomo de hidrógeno confinado incluyendo correcciones relativistas. La motivación para ello es que en el límite de $R \rightarrow 0$, las energías para este sistema crecen como R^{-2}, y puede llegarse a una situación donde sería necesario resolver la ecuación de Dirac para el átomo de hidrógeno confinado.[4] El trabajo propuesto es *teórico*, e involucra una primera parte de cálculo *analítico*, seguida por una segunda parte de cálculo *numérico*.

Plan de Formación: se sugieren las siguientes 5 materias,

a) Física atómica, molecular y óptica.

b) Interacción de partículas y fotones con la materia condensada.

c) Sólidos I.

d) Curso de Funcional Densidad Aplicada a Atomos, Moleculas, Sólidos y Superficies.

e) Sistemas mesoscópicos y nanoestructurados.

Director: César R. Proetto, proetto@cab.cnea.gov.ar

Lugar de trabajo; Grupo de Teoría de Sólidos

Area de investigación propuesta: el área de investigación de la presente propuesta corresponde primariamente al ámbito de la física atómica y molecular. También tiene su relación con la física de sólidos, pues el modelo de un átomo de hidrógeno confinado se corresponde a la situación física de una impureza donora o aceptora confinada en un punto cuántico semiconductor.

4 La ecuación de Dirac para el átomo de hidrógeno sin confinamiento puede resolverse en forma exacta. Ver por ejemplo el libro Quantum Mechanics, de E. Merzbacher (Capítulo 24).