



# Operadores de Creación y Aniquilación de Estados Cuánticos Radiales en Átomos Hidrogenoides

## Creation and Annihilation Operators of Radial Quantum States for the Hydrogen Atom

R. Carrillo M. <sup>\*a</sup>, R. Álvarez B. <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Popular del Cesar, Valledupar, Colombia.

Recibido 31.03.10; Aceptado 29.11.10; Publicado en línea 17.01.11.

### Resumen

Utilizando las identidades de Laguerre, se construyen los operadores de creación y aniquilación de estados cuánticos radiales asociados con las funciones de onda de átomos hidrogenoides. Además se encuentran las relaciones de conmutación y anticonmutación que cumplen estos operadores. Introduciendo una variación de fase global la cual deja invariante el hamiltoniano del sistema se encuentra el álgebra de Lie que cumplen dichos operadores. Se observa que esta álgebra es parecida a la del grupo de rotaciones del momento angular, pero en lugar de cumplir el álgebra del grupo SU(2) cumplen con el álgebra del grupo de simetría seudo ortogonal SU(1,1). La energía del sistema aparece automáticamente en el proceso de construcción de los operadores escalera, creación y aniquilación.

**Palabras clave:** Operadores de creación y aniquilación, Álgebra de Lie, Grupo SU(1,1), Estados radiales.

### Abstract

Employing Laguerre identities, raising and lowering operators are constructed of quantum radial states associated with the wave functions of hydrogen-like atoms. In addition, the commutation and anticommutation relations which these operators fulfill are found. Introducing a global phase variation that leaves invariant the Hamiltonian of the system, the Lie algebra is found, which these operators follow. It is observed that this algebra is similar to that of the rotation group of the angular momentum, but instead of following the SU(2) group algebra they follow the algebra of pseudo-orthogonal symmetric groups SU(1,1). The energy of the system appears automatically in the construction process of ladder, creation and annihilation operators.

**Keywords:** Creation and annihilation operators, Lie algebra, Group SU(1,1), Radial states.

**PACS:** 02.20-a; 02.20.Sv; 02.30.Vv.

© 2010 Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

## 1. Introducción

Una de las primeras formas conocidas para solucionar el átomo de hidrogeno fue realizada por W. Pauli [1], quien utilizó el vector de Kepler-Lenz y combinando con la ecuación de Heisenberg encontró la energía del sistema y los respectivos estados cuánticos. Hoy es común para solucionar el átomo de hidrogeno, hacerlo utilizando la

ecuación de Schrödinger y el método de series; acotando para los enteros 1, 2, 3, ..., n se obtienen los estados radiales y su respectiva energía.

En este artículo construimos un método alterno para encontrar los estados cuánticos radiales y su energía. Siguiendo la misma metodología que se utiliza para construir los operadores de creación y aniquilación del oscilador armónico [2], hemos construido un par de operadores esca-

\* roscarrillom@gmail.com

lera para encontrar estados cuánticos radiales del hidrógeno o tipo hidrogenoide; para ello se utilizaron las identidades de Laguerre. Adicionalmente aprovechando la invariancia bajo una fase global introducimos un parámetro compacto ( $\eta$ ) como lo hace R.P. Martinez y Romero [3], en la fase de los estados cuánticos correspondiente a un operador  $A_3$  y con los operadores  $A^+$ ,  $A^-$  construimos dos operadores adicionales  $A_1$  y  $A_2$ . Se demuestra que este conjunto de operadores cumplen con el álgebra de Lie, pues con ellos se puede construir también el operador de Casimir, de forma parecida a como se hace con el momento angular convencional y cuyos autovalores son los mismos del momento angular  $l(l+1)$ . Se demuestra que las reglas de conmutación y anticonmutación que cumplen estos operadores están en completa concordancia con esta álgebra Lie, y realizan la simetría del grupo SU(1,1) diferente al grupo de simetrías SU(2) que es satisfecho por la simetría rotacional del momento angular [4].

## 2. Construcción de los Operadores de Creación y Aniquilación

Se plantea la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi) \quad (1)$$

y cuando se hace la separación de variables de (1), se obtiene la ecuación radial como sigue:

$$rR''(r) + \frac{2}{r}R'(r) + \left[ \frac{2E}{ae^2} + \frac{2z}{ar} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (2)$$

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}; \quad m_e \text{ es la masa del electrón.}$$

La solución de (2) es de la forma

$$R(r) = e^{-\alpha r} r^l M(r); \quad \alpha = \left( \frac{-2E}{ae^2} \right)^{\frac{1}{2}},$$

la cual lleva a que se cumpla con la ecuación:

$$rM''(r) + (2l+2-2\alpha r)M'(r) + \left( \frac{2z}{a} - 2\alpha - 2\alpha l \right) M(r) = 0.$$

Haciendo la transformación con variable adimensional  $\xi = 2\alpha r$ , se obtiene la ecuación

$$\xi \frac{d^2 M}{d\xi^2}(\xi) + (2[l+1]-\xi) \frac{dM}{d\xi}(\xi) + \left( \frac{z}{a\alpha} - 1 - l \right) M(\xi) = 0 \quad (3)$$

Esta es la ecuación de Laguerre. Para darle mejor formalidad hacemos  $m = 2l + 1$  o  $m - l = l + 1$  quedando la ecuación de Laguerre

$$\xi \frac{d^2 M}{d\xi^2}(\xi) + (m+1-\xi) \frac{dM}{d\xi}(\xi) + \left( \frac{z}{a\alpha} + l - m \right) M(\xi) = 0 \quad (4)$$

Si hacemos  $n = \frac{z}{a\alpha}$  un entero positivo y  $n+l = s$ , la energía se genera automáticamente despejando  $\alpha$  y se tiene la ecuación asociada de Laguerre,

$$\left[ \xi \frac{d^2 M}{d\xi^2}(\xi) + (m+1-\xi) \frac{dM}{d\xi}(\xi) + (s-m)M(\xi) = 0 \right] \quad (5)$$

la cual tiene por solución los polinomios asociados de Laguerre  $L_s^m(\xi) = L_{n+l}^m(\xi) = L_{n+l}^{2l+1}$  (estados radiales)

Y la solución para la parte radial es

$$R_{n,l}(\xi) = N_{n,l} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi); \quad (6)$$

$N_{n,l}$  es el coeficiente de normalización bien definido. Además de (5) también se cumplen las siguientes relaciones de recurrencia para los polinomios de Laguerre [5]

$$L_{n+1}^m(\xi) + \frac{(n+1)(\xi+m-2n-1)}{n-m+1} L_n^m(\xi) + \frac{(n+1)n^2}{n-m+1} L_{n-1}^m(\xi) = 0 \quad (7)$$

$$\xi \frac{d}{d\xi} \{ L_n^m(\xi) \} = (\xi - m) L_n^m(\xi) + (m - n - 1) L_n^{m-1}(\xi) \quad (8)$$

$$(n+1) L_n^{(m-1)}(\xi) = (n+1) L_n^{(m)}(\xi) - L_{n+1}^{(m)}(\xi) = 0 \quad (9)$$

Con las anteriores relaciones y (6) se obtienen los operadores escalera. Combinándolos apropiadamente y con delicadeza algebraica obtenemos las siguientes relaciones.

$$\left\{ \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{\xi}{2} + n + 1 \right\} R_{n,l}(\xi) = \frac{(n+1)^2}{n^2} [(n-l)(n+l+1)]^{\frac{1}{2}} R_{n+1,l}(\xi), \quad (10)$$

$$\left\{ \xi \frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2} + 1 - n \right\} R_{n,l}(\xi) = -\frac{(n-1)^2}{n^2} [(n+l)(n-l-1)]^{\frac{1}{2}} R_{n-1,l}(\xi) \quad (11)$$

Obsérvese que (10) y (11) son operadores de creación y aniquilación de estados radiales  $R_n(\xi)$ : con (10) se sube de  $R_{n,l}(\xi)$  a  $R_{n+1,l}(\xi)$ , con (11) se desciende de  $R_{n,l}(\xi)$  a  $R_{n-1,l}(\xi)$ , dejando fijo "l". Obsérvese que hay una cota inferior: si n=1 la aniquilación cae a cero; así podemos establecer un estado fundamental  $R_{1,l}(\xi)$  y los operadores son:

$$\hat{A}^+ = \left\{ \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{\xi}{2} + n + 1 \right\} \text{ Crea un estado radial} \quad (12)$$

$$\hat{A}^+ R_{n,l}(\xi) = C_{n+1} R_{n+1,l}(\xi);$$

$$C_{n+1} = \frac{(n+1)^2}{n^2} [(n-l)(n+l+1)]^{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{A} = \left\{ \xi \frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2} - n + 1 \right\} \text{ Aniquila un estado radial} \quad (13)$$

$$\hat{A}R_{n,l}(\xi) = C_{n-1}R_{n-1,l}(\xi);$$

$$C_{n-1} = -\frac{(n-1)^2}{n^2}[(n+l)(n-l-1)]^{1/2}R_{n-1,l}(\xi)$$

A continuación se da una ejemplificación:

Tomemos  $R_{2,1}(\xi)$  y operemos con  $\hat{A}^+$

$$\hat{A}^+ R_{2,1}(\xi) = C_3 R_{3,1}(\xi)$$

$$\left\{ \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{\xi}{2} + 1 + n \right\} \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \xi e^{-\frac{\xi}{2}} = \frac{(2-1)(2+1)^2}{2^2} \sqrt{\frac{2+1+1}{2-1}} R_{3,1}(\xi)$$

Resolviendo

$$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \xi \frac{d}{d\xi} \left\{ \xi e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} - \frac{\xi}{2} \xi e^{-\frac{\xi}{2}} + 3\xi e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} = \frac{(1)(3)^2}{2^2} \sqrt{\frac{4}{1}} R_{3,1}(\xi)$$

$$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \xi \left\{ e^{-\frac{\xi}{2}} - \frac{1}{2} \xi e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} - \frac{\xi^2}{2} e^{-\frac{\xi}{2}} + 3\xi e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} = \frac{9}{2} R_{3,1}(\xi)$$

$$\frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \xi e^{-\frac{\xi}{2}} - \frac{\xi^2}{2} e^{-\frac{\xi}{2}} - \frac{\xi^2}{2} e^{-\frac{\xi}{2}} + 3\xi e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} = R_{3,1}(\xi)$$

$$\frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ 4\xi - \xi^2 \right\} e^{-\frac{\xi}{2}} = R_{3,1}(\xi).$$

Ahora tomemos  $R_{3,1}(\xi)$  y operemos con  $\hat{A}$  para generar  $R_{2,1}(\xi)$

$$\hat{A}R_{3,1}(\xi) = C_2 R_{2,1}(\xi)$$

$$\frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \xi \frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2} + 1 - 3 \right\} (4\xi - \xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} = -\frac{(4)(2)^2}{3^2} \sqrt{\frac{3-1-1}{3+1}} R_{2,1}(\xi)$$

Resolviendo,

$$\frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \xi \frac{d}{d\xi} \left\{ (4\xi - \xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} + \frac{\xi}{2} (4\xi - \xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} - 2(4\xi - \xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} = -\frac{16}{9} \sqrt{\frac{1}{4}} R_{2,1}(\xi)$$

$$\frac{1}{9\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ \xi \left\{ (4-2\xi) e^{-\frac{\xi}{2}} - \frac{1}{2} (4\xi - \xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} + \frac{1}{2} (4\xi - \xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} - (8\xi - 2\xi^2) e^{-\frac{\xi}{2}} \right\} = -\frac{8}{9} R_{2,1}(\xi)$$

$$-\frac{1}{8\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ 4\xi - 2\xi^2 - 2\xi^2 + \frac{\xi^3}{2} + 2\xi^2 - \frac{\xi^3}{2} - 8\xi + 2\xi^2 \right\} e^{-\frac{\xi}{2}} = R_{2,1}(\xi)$$

$$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \xi e^{-\frac{\xi}{2}} = R_{2,1}(\xi)$$

En verdad puede observarse que los operadores funcionan subiendo y bajando estados cuánticos.

### 3. Álgebra Generada por los Operadores Escalera

Se puede demostrar de manera sencilla que los operadores  $A^+$ ,  $A$  cumplen con las siguientes condiciones de conmutación y anticonmutación respectivamente:

$$[A^+, A]_- R_{n,l}(\xi) = -2n R_{n,l}(\xi) \quad (14)$$

$$[A^+, A]_+ R_{n,l}(\xi) = -2\{n^2 - l(l+1)\} R_{n,l}(\xi) \quad (15)$$

Estas ecuaciones son invariantes bajo un cambio global de fase, lo que quiere decir que el sistema físico descrito no cambia si las funciones  $R_{n,l}(\xi)$  transforman a  $e^{in\eta} R_{n,l}(\xi)$  siendo  $\eta$  una variable compacta con  $\eta \in [0, 2\pi]$ . Podemos asociar con  $\eta$  un operador de rotación,

$$\hat{A}_3 = -i \frac{\partial}{\partial \eta}, \text{ tal que } \hat{A}_3 e^{in\eta} = -i \frac{\partial}{\partial \eta} e^{in\eta} = n e^{in\eta} \quad (16)$$

y redefiniendo los operadores de creación y aniquilación como sigue

$$\hat{A}_+ = i e^{i\eta} \left[ \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{\xi}{2} - i \frac{\partial}{\partial \eta} + 1 \right] \quad (17)$$

$$\hat{A}_- = i e^{-i\eta} \left[ \xi \frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2} + i \frac{\partial}{\partial \eta} + 1 \right] \quad (18)$$

que actúan sobre la base en espacio de Hilbert  $|n, l\rangle = e^{in\eta} R_{n,l}$ .

Estos vectores cumplen con la condición de ortogonalidad  $\langle n', l' | n, l \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'}$ .

Usando las definiciones (16)-(18) se demuestra que los operadores  $\hat{A}$  satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\hat{A}_3, \hat{A}_\pm] = \pm \hat{A}_\pm \text{ y } [\hat{A}_+, \hat{A}_-] = -2\hat{A}_3 \quad (19)$$

Las ecuaciones (19) nos recuerdan las relaciones de conmutación del momento angular entre los operadores  $\hat{L}_Z$  y  $\hat{L}_\pm$ ; sólo se diferencian por el signo (-) en el

segundo conmutador de (19). En analogía con el momento angular podemos definir dos operadores más  $\hat{A}_1$  y  $\hat{A}_2$  como sigue:

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{2}(\hat{A}_+ + \hat{A}_-), \quad \hat{A}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{A}_+ - \hat{A}_-) \quad (20)$$

los cuales junto con  $\hat{A}_3$  satisfacen las reglas de conmutación siguientes:

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = -i\hat{A}_3; \quad [\hat{A}_2, \hat{A}_3] = i\hat{A}_1; \quad [\hat{A}_3, \hat{A}_1] = \hat{A}_2$$

Vemos que cumplen las reglas de conmutación parecidas a las del momento angular, que es consistente con el álgebra de Lie de grupos de simetría rotación O(3) el cual es isomorfo de SU(2); nuestros operadores no cumplen con simetría SU(2) sino que son consistentes con el grupo SU(1,1).

#### 4. Operadores de Casimir, Autofunciones y Autovalores

Igualmente como en el momento angular,  $\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$  conmuta con todos los operadores  $\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3$  y es el operador de Casimir en el álgebra de Lie. En nuestro caso podemos buscar un operador equivalente en el grupo SU(1,1) del álgebra que nos ocupa.

De la ecuación (15) y (16) podemos encontrar inmediatamente que

$$[\hat{A}^+, \hat{A}]_+ |n, l\rangle = -2\hat{A}_3^2 |n, l\rangle + 2l(l+1) |n, l\rangle$$

También se demuestra fácilmente que el anticonmutador cumple la identidad  $-\frac{1}{2}[\hat{A}^+, \hat{A}] = A_1^2 + A_2^2$  con lo que se obtiene

$$[-\hat{A}_1^2 - \hat{A}_2^2 + \hat{A}_3^2] |n, l\rangle = l(l+1) |n, l\rangle$$

De donde se puede observar inmediatamente que el operador  $\hat{A}_c^2 = -\hat{A}_1^2 - \hat{A}_2^2 + \hat{A}_3^2$  tiene autovalor  $l(l+1)$  y función propia  $|n, l\rangle$  que también es función propia de los  $\hat{A}_i$ , no es positivo como puede observarse, cumple con el papel del operador de Casimir, conmuta con  $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3$ ;  $[\hat{A}_c^2, \hat{A}_i] = 0$ ;  $i=1,2,3$ ; igual que para el momento angular podemos definir un vector  $\hat{A}_c$ , como  $\hat{A}_c = i\hat{A}_1\hat{i} + i\hat{A}_2\hat{j} + \hat{A}_3\hat{k}$ ; donde  $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$  son vectores unitarios en las direcciones x,y,z respectivamente.

La simetría rotacional como puede observarse es consistente con el grupo seudo rotacional SU(1,1).

#### 5. Conclusiones

Hemos construido en un proceso detallado los operadores escalera para átomos hidrogenoides. Estos operadores suben estados cuánticos radiales de “n” a “n+1” y bajan estados de “n” a “n-1” dejando  $l$  fijo. La construcción se hizo siguiendo la metodología que se hace en el oscilador armónico cuántico.

También se ha encontrado un álgebra de Lie que se satisface en el grupo seudo ortogonal SU(1,1). Como consecuencia fundamental emergen la energía y las autofunciones del operador de Casimir lo mismo que sus valores propios. Se observa que el hamiltoniano, el operador de Casimir y la componente  $\hat{A}_3$  tienen una base común de estados cuánticos. Dejando “ $l$ ” fijo y aplicando los operadores  $\hat{A}_\pm$  generamos todos los polinomios de Laguerre que conforman los estados radiales. Es un procedimiento muy interesante y simple, porque no necesita resolver complicadamente la ecuación de Laguerre.

El número cuántico “ $l$ ” juega un papel importante como número cuántico principal en el sentido que es fijo y se procede a calcular la función de onda manteniendo “ $l$ ”. Esto es que la simetría rotacional juega un rol importante, porque el hamiltoniano radial de sistema siempre presenta el término centrífugo  $\frac{l(l+1)}{r^2}$ , lo que demuestra que nuestro método exhibe una propiedad importante: el uso del álgebra y sus simetrías.

#### Referencias

- [1] W. Pauli. On the hydrogen spectrum from the standpoint of the new quantum mechanics: classics of science, volume five. Sources of quantum mechanics. Edited B.L. Van Der Waerden.
- [2] M. Kraev. Mecánica Cuántica: primera edición. Bucaramanga: U.I.S, 1989.
- [3] R.P. Martinez y Romero. An operator solution for the hydrogen atom using the phase as an additional variable. Am. J. Physics. 75(7), julio 2007.
- [4] Susumo Okubo. Introduction to octonion and other non-associative algebras in Physics 1. Cambridge University Press, 1995.
- [5] Y. Ayant y M. Borg. Funciones Especiales. España, Madrid: edición Alhambra, 1974.