

**Universidad Iberoamericana**

**Maite Ertze García**

**Carrera: Ingeniería Física, cuarto semestre.**

**Fecha de Entrega: 6 de Diciembre de 2004**

**Materia: Física Moderna**

**Profesor: Mario Alberto Rodriguez**

**Proyecto Final**

## Introducción

La diferencia fundamental entre la mecánica Newtoniana y la mecánica cuántica es precisamente lo que cada una describe. La mecánica Newtoniana se concentra en el movimiento de la partícula bajo la influencia de una fuerza aplicada, y da por hecho que estas cantidades, su posición, masa, velocidad, aceleración, etc. se pueden medir. Esto es completamente válido en nuestro día a día. Mecánica cuántica también consiste en relacionar magnitudes observables, pero el principio de incertidumbre altera radicalmente la definición de observable a nivel atómico. De acuerdo al principio de incertidumbre la posición y el momento de una partícula no puede ser exactamente medida al mismo tiempo, mientras que en la mecánica Newtoniana se asume que se puede medir exacta y adecuadamente. Por lo que en mecánica cuántica las relaciones entre posición, momento, energía y tiempo están exploradas a través de la probabilidad.

Se podrá pensar que la mecánica cuántica es un sustituto de la mecánica Newtoniana pero al inspeccionar de cerca veremos que la mecánica Newtoniana no es más que una versión aproximada de la mecánica cuántica.

Podemos decir que la mecánica cuántica moderna surge hacia 1925 como resultado del conjunto de trabajos realizados por Heisenberg, Schrödinger, Born, Dirac y otros, y es capaz de explicar de forma satisfactoria no sólo, la constitución atómica, sino otros fenómenos fisicoquímicos, además de predecir una serie de sucesos que posteriormente se comprobarán experimentalmente.

La mecánica cuántica se basa en la teoría de Planck, y tomo como punto de partida la dualidad onda-corpúsculo de Louis De Broglie y el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Los electrones y otras partículas poseen propiedades ondulatorias que pueden describirse mediante una función de onda, la cual en la mecánica Newtoniana es

$$\frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial t^2}$$

donde  $v$  es la velocidad.

Mientras que la función de onda en la mecánica cuántica se deriva directamente de la ecuación de Shrödinger.

## Ecuación de Shrödinger

### ■ Introducción

La teoría de Shrödinger de la mecánica cuántica trata de partículas microscópicas que actúan como si ciertos aspectos de su comportamiento estuvieran gobernados por una función de onda. Gracias a la ecuación de Shrödinger se puede especificar el movimiento ondulatorio que obedecen las partículas de un sistema microscopico. Dicha ecuación en tres dimensiones es la siguiente;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(r, t)}{\partial x^2} + V(r, t) \psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t}$$

La cual está basada en la hipótesis de Broglie - Eistein donde;

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad v = \frac{E}{h}$$

Tomando la Energía como la sumatoria de la cinética y la potencia.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$$

Tomando en cuenta la Linealidad y la función de onda para una partícula libre;

$$\psi(x, t) = A [\text{Cos}[kx - \omega t] + i \text{Sin}[kx - \omega t]]$$

Análogamente a la ecuación de onda clásica, la ecuación de Shrödinger es una ecuación en derivadas parciales en el espacio y en el tiempo, lo mismo que las

leyes de Newton descansa en su acuerdo con la experiencia. En una dimensión la ecuación de Shrödinger es;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + U \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

Donde en éste caso , U es la energía potencial.

La pasada ecuación es la ecuación de Shrödinger dependiente del tiempo, a diferencia de la ecuación de la onda clásica, esta ecuación relaciona la segunda derivada espacial de la función de onda con la primera derivada temporal de la función de onda y contiene el número imaginario  $i$ . Las funciones de onda que son soluciones de esta ecuación no son necesariamente reales.

Cuando la energía potencial U no depende del tiempo, la ecuación de Shrödinger dependiente del tiempo puede simplificarse escribiendo la función de onda en la forma ;

$$\Psi[\mathbf{x}, t] = \psi[\mathbf{x}] e^{-i\omega t}$$

El segundo miembro de la ecuación entonces toma forma;

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = i\hbar (-i\omega) \psi[\mathbf{x}] e^{-i\omega t} = \hbar \omega \psi[\mathbf{x}] e^{-i\omega t} = E_n \psi[\mathbf{x}] e^{-i\omega t}$$

En donde  $E_n = \hbar \omega$ , es la energía de la partícula.

Sustituyendo  $\psi[\mathbf{x}] e^{-i\omega t}$  en la ecuación y suprimiendo el factor  $e^{-i\omega t}$  se obtiene una ecuación para  $\Psi[\mathbf{x}]$  llamada ecuación de Shrödinger independiente del tiempo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2} + U(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) = E_n \frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial t}$$

### ■ Ecuación de Shrödinger en tres dimensiones

La ecuación independiente del tiempo unidimensional se extiende fácilmente a tres dimensiones.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U \Psi = E_n \Psi$$

En donde la función de onda  $\Psi$  y la energía potencial U son generalmente funciones de tres coordenadas dependiendo del sistema o el entorno donde se encuentre la onda. Puede tener coordenadas rectangulares, polares, esféricas, cilíndricas, etc.

### ■ Principio de Incertidumbre

Einstein demostró que la simultaneidad no era un concepto absoluto, sino que dos eventos que son simultáneos para un observador, ocurren a tiempos diferentes para otro observador que se mueve respecto al primero. La simultaneidad es un concepto relativo. Por lo tanto se pregunta cómo se mide realmente la posición y el impulso, o la energía y el tiempo.

En la teoría cuántica la respuesta es: no más de lo permitido por el principio de incertidumbre de Heisenberg.

En un experimento no se puede determinar simultáneamente el valor exacto de una componente del impulso, es decir  $p_x$  de una partícula y también el valor exacto de la coordenada correspondiente  $x$ . La precisión en la medición estará inherentemente limitada por el proceso de medida en si, por lo que

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Igualmente ocurre con el tiempo y la energía, por ejemplo; el tiempo durante el cual un fotón es emitido de un átomo con una variación de su energía  $\Delta E$ .

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

## Ecuación de Shrödinger independiente del Tiempo

### Soluciones a las ecuaciones de Shrödinger Independientes del Tiempo

#### ■ Introducción eigenvalores y eigenfunciones

Las funciones  $\psi[x]$  se llaman eigenfunciones. Lo cual significa: la primera parte de la palabre es decir "eigen" es la palabra alemana para característica.

La cuantización de la energía aparece de manera muy general en la teoría de Shrödinger , esta propiedad muy importante resulta del hecho de que solamente es posible encontrar soluciones aceptables a la ecuación de Shrödinger independiente del tiempo para ciertos valores de la energía total  $E$ .

Para que una solución sea aceptable, se requiere que una eigenfunción  $\psi[x]$  y su derivada con respecto a  $x$  tengan las siguientes propiedades

- a)  $\psi(x)$  y su derivada debe ser finita
- b)  $\psi(x)$  y su derivada debe ser monovaluada
- c)  $\psi(x)$  y su derivada debe ser continua

Las ecuaciones diferenciales tienen una amplia variedad de soluciones posibles y sólo cuando se selecciona de todas las posibles soluciones aquellas que satisfacen estos requerimientos es que se obtiene la cuantización de la energía u otras propiedades igualmente importantes en la teoría de Schrödinger

Así como existen eigenfunciones de la función de onda, existen eigenvalores para los niveles de energía. Un potencial particular tiene un conjunto particular de eigenvalores. Los primeros eigenvalores en la lista estarán separados discretamente en energía. A menos que el potencial crezca sin límite tanto para valores muy grandes como para valores muy pequeños de  $x$ , los eigenvalores resultan distribuidos de manera continua en la energía más allá de cierto valor de ésta.

A cada eigenvalor le corresponde una eigenfunción y una función de onda correspondiente. Cada que toma valores enteros sucesivos y que se utiliza para designar a un eigenvalor particular, se denomina número cuántico. Si el sistema está descrito por la función de onda  $\Psi_n(x, t)$ , se

Cada una de estas funciones de onda es una solución particular a la ecuación para el potencial cualquier combinación lineal de estas funciones también es solución

Para comprender mejor el significado de eigenvalores se aplica el método del balazo.

## Método del Balazo

Este método consiste en establecer condiciones de frontera, por lo que ocurrirá que para una eigenfunción sólo habrá un eigenvalor el cual hará válido estas condiciones. Se empieza en un punto y se debe encontrar el valor del eigenvalor que logre que la función llegue al punto esperado.

Se define una ecuación diferencial de segundo orden con un parámetro  $E_n$ .

$$eq = E_n \varphi[x] + \varphi''[x] / 2 == 0$$

$$E_n \varphi[x] + \frac{\varphi''[x]}{2} == 0$$

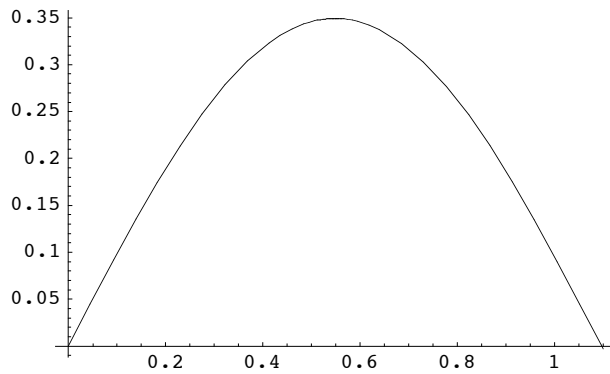
Se resuelve la ecuación con un parámetro  $E_n$  al azar

$$sol = \text{NDSolve}[{eq, \varphi[0] == 0, \varphi'[0] == 1} /. E_n -> 4.1, \varphi, \{x, 0, 1.1\}]$$

$$\{\{\varphi \rightarrow \text{InterpolatingFunction}[\{\{0., 1.1\}\}, <>]\}\}$$

Se grafica y se va modificando el parámetro  $E_n$  hasta que la grafica caiga sobre el valor  $x=1$

```
Plot[φ[x] /. sol, {x, 0, 1.1}]
```

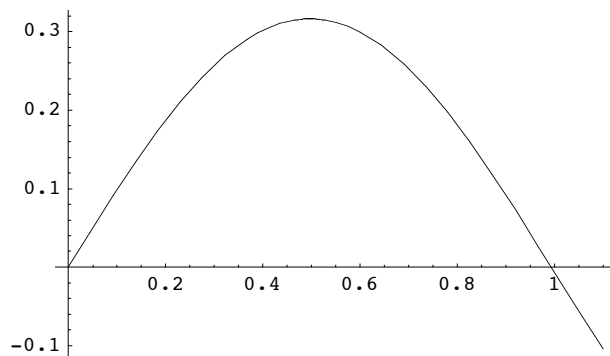


- Graphics -

```
sol2 = NDSolve[{eq, φ[0] == 0, φ'[0] == 1} /. En -> 5, φ, {x, 0, 1.1}]
```

```
{{φ -> InterpolatingFunction[{{0., 1.1}}, <>]}}
```

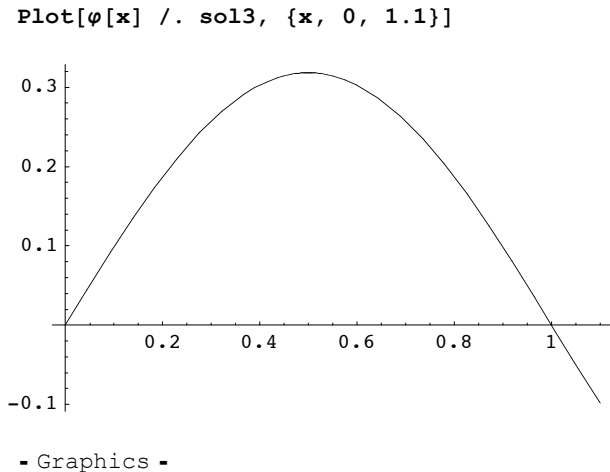
```
Plot[φ[x] /. sol2, {x, 0, 1.1}]
```



- Graphics -

```
sol3 = NDSolve[{eq, φ[0] == 0, φ'[0] == 1} /. En ->  $\frac{\pi^2}{2}$ , φ, {x, 0, 1.1}]
```

```
{{φ -> InterpolatingFunction[{{0., 1.1}}, <>]}}
```



Dadas las gráficas se concluye que el valor de  $E_n$  en este caso es de  $\frac{\pi^2}{2}$

### ■ El Potencial Cero

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo más simple es aquella en la cual  $V(x)$  es constante. Una partícula que se mueve bajo la acción de tal potencial es una partícula libre ya que la fuerza que actúa sobre ella es  $F = -dV(x)/dx = 0$ .

$$V(x) = 0$$

Su energía total  $E$  es también una constante. Para encontrar el comportamiento predicho por la mecánica cuántica para una partícula libre se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, haciendo  $V(x) = 0$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x)$$

Dicha demostración está dada en el Apéndice A

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i E t}{\hbar}}$$

Los eigenvalores  $E$  son iguales a la energía total de la partícula. Se sabe del análisis cualitativo que para este potencial no enlazante y para cualquier valor de  $E \geq 0$  existirá una solución aceptable de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Sabiendo ya la forma de la función de onda de una partícula libre:

$$\Psi[x_, t_] = \text{Cos}[k x - \omega t] + i \text{Sin}[k x - \omega t]$$

$$\text{Cos}[k x - t \omega] + i \text{Sin}[k x - t \omega]$$

Escribiéndola como exponencial compleja;

`FullSimplify[Ψ[x, t]]`

$$e^{i(kx - t\omega)}$$

El número de onda  $k$  y la frecuencia angular  $\omega$  son

$$p = \sqrt{2mE_n}$$

$$\sqrt{2} \sqrt{E_n m}$$

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\frac{\sqrt{2} \sqrt{E_n m}}{\hbar}$$

## Potencial de Pozo Cuadrado Infinito de extensión $a$

En esta sección se verán los eigenvalores y eigenfunciones que describen el comportamiento de una partícula de masa  $m$  ligada por un potencial  $V(x)$  de pozo cuadrado infinito de extensión  $a$ .

El potencial de pozo cuadrado infinito es el siguiente:

$$V[x] = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases}$$

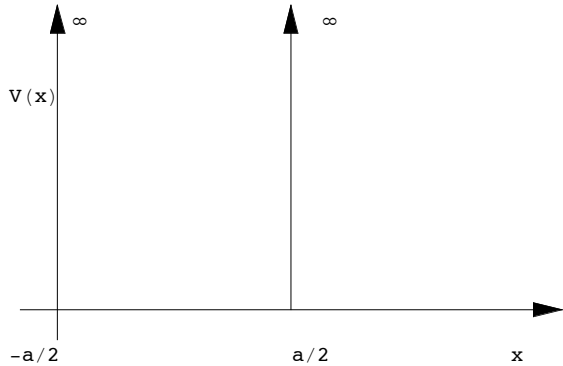
En el caso del potencial de pozo cuadrado infinito la energía potencial no depende del tiempo por lo tanto utilizamos la ecuación de Schrödinger Independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

`<< Graphics`Arrow``



```
Fig1 = Show[Graphics[{{Arrow[{0, 1}, {6.5, 1}], Arrow[{0.45, 0.99}, {0.45, 1.1}],
  Arrow[{3.25, 1}, {3.25, 1.1}]} (*, Line[{{4.39, 0.95}, {4.39, 1.1}}]} (*}},
  Text["-a/2", {0., 0.99}, {-0.5, 1}], Text["a/2", {3.35, 0.99}, {-0.5, 1}],
  Text["V(x)", {0., 1.075}, {-0.5, 1}], Text["∞", {3.65, 1.1}, {-0.5, 1}], Text["x",
  {5.9, 0.99}, {-0.5, 1}], Text["∞", {0.65, 1.1}, {-0.5, 1}]], PlotRange -> All];
```



Si la partícula tiene una energía total mayor que el potencial  $V_0$  entonces para la mecánica clásica solo puede estar ligado a la región  $-a/2 < x < +a/2$  ( es decir dentro del pozo). La partícula está ligada a esta región y va y viene entre los extremos con un impulso de magnitud constante en dirección alterna. Cualquier valor de  $E \geq 0$  de la energía total es posible. Pero en la mecánica cuántica únicamente son posibles ciertos valores discretos de  $E$ . Dichos valores discretos llamados eigenvalores serán encontrados posteriormente.

El potencial de pozo cuadrado infinito es una situación en la cual la partícula se mueve en una región restringida del espacio bajo la influencia de una fuerza que la mantiene dentro de esta región.

Para comenzar a resolver el problema se realiza una análisis cualitativo de las formas de las eigenfunciones que son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo de potencial cuadrado.

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases}$$

El problema por lo tanto se descompone en tres regiones :  $x < -a/2$  (izquierda del pozo),  $-a/2 < x < +a/2$  (dentro del pozo) y  $x > +a/2$  (a la derecha del pozo). La solución general para la ecuación general para la región interna del pozo es

$$\psi(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \quad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mEn}}{\hbar} \quad -a/2 < x < +a/2$$

El primer término describe ondas que viajan en la dirección en la que  $x$  crece y el segundo describe ondas viajeras en la dirección en la que  $x$  decrece.

La descripción clásica de la partícula rebotando dentro del pozo sugiere que la eigenfunción en esta región debería corresponder a una mezcla igual de ondas que viajan en ambas direcciones. Las ondas viajeras dirigidas en oposición y de igual

amplitud se combinarán para formar una onda estacionaria, lo cual se puede obtener haciendo iguales las constantes arbitrarias, es decir  $A=B$ , por lo tanto

$$\psi(x) = B (e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}) = B' \frac{(e^{ik_1x} + e^{-ik_1x})}{2} \quad \text{donde } B' = 2B$$

Pero esta combinación de exponenciales complejas dan

$$\psi[x] = B' \text{Cos}[k_1x]$$

Esta eigenfunción describe una onda estacionaria ya que una inspección de la función de onda asociada  $\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$  demuestra que tiene nodos en las posiciones fijas en las que el coseno es igual a cero.

Realizando lo mismo pero ahora haciendo  $-A=B$  nos queda de la forma :

$$\psi(x) = A (e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}) = A' \frac{(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x})}{2i} \quad \text{donde } A' = 2iA$$

Esta combinación de exponenciales complejas nos dan:

$$\psi[x] = A' \text{Sin}[k_1x]$$

Dado que las dos son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y para el mismo valor de la energía y como la ecuación diferencial es lineal en la función de onda, su suma también es solución :

$$\psi[x] = A' \text{Sin}[k_1x] + B' \text{Cos}[k_1x]$$

Esta es una solución general para el interior del pozo la cual se describe como una onda estacionaria.

La cual se simplifica eliminando las primas:

$$\psi[x] = A \text{Sin}[kx] + B \text{Cos}[kx] \quad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mEn}}{\hbar} \quad -a/2 < x < a/2$$

Resolvemos la ecuación para obtener las constantes A, B y k aplicando las condiciones de frontera y dado que la función de onda en los nodos es decir en  $x = \pm \frac{a}{2}$  es igual a cero.

```
Clear["Global`*"];
```

```
 $\psi[x_] = A \text{Sin}[kx] + B \text{Cos}[kx]$ 
```

```
B Cos[kx] + A Sin[kx]
```

```
Para x = a / 2
```

$$\psi\left[\frac{a}{2}\right]$$

$$B \cos\left[\frac{a k}{2}\right] + A \sin\left[\frac{a k}{2}\right]$$

**Para  $x = -a/2$**

$$\psi\left[-\frac{a}{2}\right]$$

$$B \cos\left[\frac{a k}{2}\right] - A \sin\left[\frac{a k}{2}\right]$$

Sumandolas obtenemos

$$\psi\left[\frac{a}{2}\right] + \psi\left[-\frac{a}{2}\right]$$

$$2 B \cos\left[\frac{a k}{2}\right]$$

Restandolas obtenemos

$$\psi\left[\frac{a}{2}\right] - \psi\left[-\frac{a}{2}\right]$$

$$2 A \sin\left[\frac{a k}{2}\right]$$

Donde ambas son iguales a cero

Para que sean eigenfunciones de la solución  $\psi(x)$  y  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  deberán ser finitas en cualquier parte, monovaluadas y  $\psi(x)$  será continua en cualquier parte,  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  será discontinua en  $x = \pm a/2$ .

Para encontrar el valor del parámetro  $k$  y las constantes  $A$  y  $B$  :

- a) Se escogera una  $k$  que  $\cos\left[\frac{a k}{2}\right] = 0$  y tomando a  $A$  como cero
- b) Se escogera una  $k$  de modo que  $\sin\left[\frac{a k}{2}\right] = 0$  y tomando a  $B$  igual a cero

Estas son dos clases de soluciones , se veran las dos :

a)  $\psi[x] = B \cos[k x]$       donde       $\cos\left[\frac{a k}{2}\right] = 0$

Valores de  $kn = \frac{n \pi}{a}$        $n = 1, 3, 5, 7, \dots$

b)  $\psi[x] = A \sin[k x]$       donde       $\sin\left[\frac{a k}{2}\right] = 0$

Valores de  $kn = \frac{n \pi}{a}$        $n = 2, 4, 6, 8, \dots$

Se utilizo el número cuántico  $n$  para denotar las diferentes soluciones y eigenfunciones. También utilizamos este número para encontrar los eigen valores correspondientes con la relación

$$k = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \quad \text{y} \quad kn = \frac{n\pi}{a}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

Set::write : Tag Times in  $\frac{kn^2 \hbar^2}{2m}$  is Protected.

$$\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2a^2 m}$$

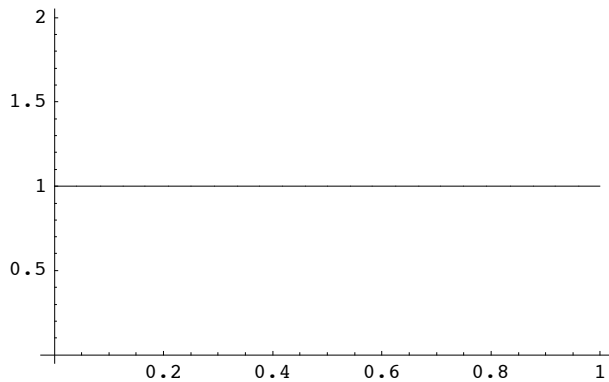
Donde  $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$

Solo ciertos valores discretos son permitidos para la energía total, es decir está cuantizada.

Gráfica del pozo cuadrado de potencial infinito y sus primeros eigenvalores Pagina 260

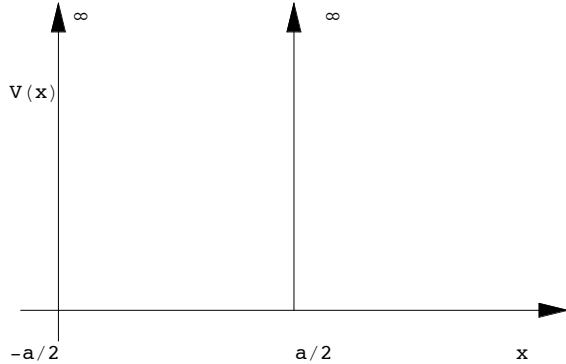
```
<< Graphics`Arrow`
```

```
G1 = Plot[1, {x, 0, 1}]
```



```
- Graphics -
```

```
Fig1 = Show[Graphics[{{Arrow[{0, 1}, {6.5, 1}], Arrow[{0.45, 0.99}, {0.45, 1.1}],
  Arrow[{3.25, 1}, {3.25, 1.1}]} (*,Line[{{4.39,0.95},{4.39,1.1}}]}*),
  Text["-a/2", {0., 0.99}, {-0.5, 1}], Text["a/2", {3.35, 0.99}, {-0.5, 1}],
  Text["V(x)", {0., 1.075}, {-0.5, 1}], Text["∞", {3.65, 1.1}, {-0.5, 1}], Text["x",
  {5.9, 0.99}, {-0.5, 1}], Text["∞", {0.65, 1.1}, {-0.5, 1}], PlotRange -> All];
```



**Solución analítica para un potencial de pozo cuadrado.**

La descripción del movimiento clásico de una partícula ligada en un pozo cuadrado sugiere que sería más apropiado buscar soluciones a la ecuación de Schrödinger en la forma de ondas estacionarias. Por lo tanto, se toma una solución general de la ecuación independiente del tiempo en la región ;

$$-a/2 < x < +a/2 \quad \text{dado } V(x) = 0$$

La eigenfunción de onda estacionaria para partícula libre;

$$\psi[x] = A \sin[k_1 x] + B \cos[k_1 x] \quad \text{donde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$$

En las regiones  $x < -a/2$  y  $x > a/2$  la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene las soluciones generales como se verá en la próxima sección son;

$$\psi[x] = C e^{ik_1 x} + D e^{-ik_1 x} \quad x < -a/2$$

$$\psi[x] = F e^{-k_1 x} + G e^{k_1 x} \quad x > a/2$$

$$\text{donde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}{\hbar} \quad E < V_0$$

Para determinar las constantes arbitrarias, primero las eigenfunciones deben ser finitas para toda x, por lo que  $x \rightarrow -\infty$ . Por lo tanto;

$$D = 0$$

Y para que permanezca finita en el límite  $x \rightarrow \infty$ ;

$$\mathbf{F} = 0$$

Luego, las primeras eigenfunciones y sus primeras derivadas deben ser continuas en  $x=-a/2$  y  $x=a/2$ . con lo que se obtienen cuatro ecuaciones.

$$\text{eq1} = -A \sin\left[k_1 \frac{a}{2}\right] + B \cos\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = C e^{-k_1 \frac{a}{2}}$$

$$C e^{-\frac{a k_{11}}{2}}$$

$$\text{eq2} = A k_1 \cos\left[k_1 \frac{a}{2}\right] + B k_1 \sin\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = C k_{11} e^{-k_1 \frac{a}{2}}$$

$$C e^{-\frac{a k_{11}}{2}} k_{11}$$

$$\text{eq3} = A \sin\left[k_1 \frac{a}{2}\right] + B \cos\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = G e^{-k_1 \frac{a}{2}}$$

$$e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G$$

$$\text{eq4} = A k_1 \cos\left[k_1 \frac{a}{2}\right] - B k_1 \sin\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = -G e^{-k_1 \frac{a}{2}}$$

$$-e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G$$

$$\text{eq5} = \text{eq1} - \text{eq3}$$

$$C e^{-\frac{a k_{11}}{2}} - e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G$$

$$2 A \sin\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = [G - C] e^{-\frac{a k_{11}}{2}}$$

$$\text{eq6} = \text{eq1} + \text{eq3}$$

$$C e^{-\frac{a k_{11}}{2}} + e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G$$

$$2 B \cos\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = [G + C] e^{-\frac{a k_{11}}{2}}$$

$$\text{eq7} = \text{eq4} - \text{eq2}$$

$$-e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G - C e^{-\frac{a k_{11}}{2}} k_{11}$$

$$-e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G - C e^{-\frac{a k_{11}}{2}} k_{11}$$

$$2 B k_1 \sin\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = [G + C] k_{11} e^{-\frac{a k_{11}}{2}}$$

$$\text{eq8} = \text{eq4} + \text{eq2}$$

$$-e^{-\frac{a k_{11}}{2}} G + C e^{-\frac{a k_{11}}{2}} k_{11}$$

$$2 A k_1 \cos\left[k_1 \frac{a}{2}\right] = -[G - C] k_{11} e^{-\frac{a k_{11}}{2}}$$

Si  $B \neq 0$ , y  $[G+C] \neq 0$ , se divide eq7 entre eq6 y se obtiene;

$$E1 = k1 \operatorname{Tan}\left[k1 \frac{a}{2}\right] = k11$$

$$k11$$

Si  $A \neq 0$  y  $(G-C) \neq 0$  se divide eq8 entre eq5 y se obtiene;

$$E2 = k1 \operatorname{Cot}\left[k1 \frac{a}{2}\right] = -k11$$

$$-k11$$

Al sumar las ecuaciones obtenidas tenemos;

$$k1 \operatorname{Tan}\left[k1 \frac{a}{2}\right] + k1 \operatorname{Cot}\left[k1 \frac{a}{2}\right] = 0$$

Y multiplicando por  $\operatorname{Tan}\left[k1 \frac{a}{2}\right]$ ;

$$k1 \operatorname{Tan}^2\left[k1 \frac{a}{2}\right] + k1 = 0$$

$$\operatorname{Tan}^2\left[k1 \frac{a}{2}\right] = -1$$

Pero no puede ser válida si tanto  $k1$  como  $a/2$  son reales. Entonces, solamente es posible que o satisfagan  $E1$  pero no  $E2$  y viceversa. Las eigenfunciones del pozo de potencial cuadrado forman dos clases.

Primera Clase

$$E1 = k1 \operatorname{Tan}\left[k1 \frac{a}{2}\right] = k11$$

$$A=0$$

$$G-C=0$$

Entonces resulta;

$$B \operatorname{Cos}\left[k1 \frac{a}{2}\right] = G e^{-k11 \frac{a}{2}}$$

$$G = B \operatorname{Cos}\left[k1 \frac{a}{2}\right] e^{k11 \frac{a}{2}} = C$$

Y las eigenfunciones son;

$$\left[B \operatorname{Cos}\left[k1 \frac{a}{2}\right] e^{k11 \frac{a}{2}}\right] e^{k11 \frac{a}{2}} \quad x < -a/2$$

$$\psi[x] = [B] \operatorname{Cos}[k1x] \quad -a/2 < x < a/2$$

$$\left[B \operatorname{Cos}\left[k1 \frac{a}{2}\right] e^{k11 \frac{a}{2}}\right] e^{-k11 \frac{a}{2}} \quad x > a/2$$

Segunda Clase

$$k_1 \cot \left[ k_1 \frac{a}{2} \right] = -k_{11}$$

$$B=0$$

$$G+C=0$$

Entonces;

$$A \sin \left[ k_1 \frac{a}{2} \right] = G e^{-k_{11} \frac{a}{2}}$$

$$G = A \sin \left[ k_1 \frac{a}{2} \right] e^{k_{11} \frac{a}{2}} = -C$$

Y las eigenfunciones son;

$$\left[ -A \sin \left[ k_1 \frac{a}{2} \right] e^{k_{11} \frac{a}{2}} \right] e^{k_{11} \frac{a}{2}} \quad x < -a/2$$

$$\psi[x] = [A] \sin[k_1 x] \quad -a/2 < x < a/2$$

$$\left[ A \sin \left[ k_1 \frac{a}{2} \right] e^{k_{11} \frac{a}{2}} \right] e^{-k_{11} \frac{a}{2}} \quad x > a/2$$

Considerando la primera clase, evaluando  $k_1$  y  $k_{11}$  y multiplicando por  $a/2$  la ecuación queda;

$$E_q = \sqrt{\frac{m E_n a^2}{2 \hbar}} \tan \left[ \sqrt{\frac{m E_n a^2}{2 \hbar}} \right] = \sqrt{\frac{m (V_0 - E_n) a^2}{2 \hbar}}$$

Para una partícula dada de masa  $m$  y un pozo de potencial dado de profundidad  $V_0$  y ancho  $a$  existe una ecuación en una incógnita  $E_n$ . Sus soluciones son los valores permitidos para la energía total de la partícula que son los eigenvalores para las eigenfunciones de primera clase. Las soluciones de esta ecuación trascendente solamente se pueden obtener por métodos numéricos o gráficos. Se presenta un método gráfico simple que ilustrará los rasgos importantes de la ecuación. Haciendo el cambio de variable;

$$\xi = \sqrt{\frac{m E_n a^2}{2 \hbar}}$$

$$\frac{\sqrt{\frac{a^2 E_n m}{\hbar}}}{\sqrt{2}}$$



$$\xi \tan[\xi] = \sqrt{\frac{m (V_0 - E_n) a^2}{2 \hbar}}$$

Set::write : Tag Times in  $\frac{\sqrt{\frac{a^2 E_n m}{\hbar}} \tan\left[\frac{\sqrt{\frac{a^2 \ll 2 \gg m}{\hbar}}}{\sqrt{2}}\right]}{\sqrt{2}}$  is Protected.

$$\frac{\sqrt{\frac{a^2 m (-E_n + V_0)}{\hbar}}}{\sqrt{2}}$$

Graficamos la función ;

$$P(\xi) = \xi \tan[\xi]$$

$$\frac{\sqrt{\frac{a^2 E_n m}{\hbar}} \tan\left[\frac{\sqrt{\frac{a^2 E_n m}{\hbar}}}{\sqrt{2}}\right]}{\sqrt{2}}$$

y la función

$$q(\xi) = \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} - \xi$$

Set::write : Tag Times in  $q \sqrt{\frac{a^2 E_n m}{\hbar}} / \sqrt{2}$  is Protected.

$$\sqrt{-\frac{\sqrt{\frac{a^2 E_n m}{\hbar}}}{\sqrt{2}} + \frac{a^2 m V_0}{2 \hbar}}$$

Las intersecciones especifican los valores de  $\xi$  que son soluciones de

$$\xi \tan[\xi] = \sqrt{\frac{m (V_0 - E_n) a^2}{2 \hbar}}$$

Gráfica de;

$$P(\xi) = q(\xi)$$

Página 798

$$GP(\xi) = \text{Plot}[P(\xi), \{E_n, 0, 2\pi\}];$$

$P(\xi)$  tiene ceros en  $\xi = 0, \pi, 2\pi \dots$  y asíntotas en  $\xi = \pi/2, 3\pi/2,$

$5\pi/2 \dots$ . La función  $q(\xi)$  es un cuarto de círculo de radio  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}}$ . Es

evidente que el número de soluciones dependen del radio del círculo, cada solución resulta una eigenvalor para  $E_n <$

Vo que corresponde a una eigenfunción de la primera clase. Si  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} < \pi$ ;

existe uno de estos eigenvalores ; dos si  $\pi \leq \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} < 2 \pi$ ;

tres si  $2 \pi \leq \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} < 3 \pi \dots \dots$

Para el caso en que  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} = 4$ , el cual también está ilustrado en la figura, existen dos soluciones  $\xi \approx 1.25$  y  $\xi \approx 3.60$ .

De la ecuación  $\xi = \sqrt{\frac{m E_n a^2}{2 \hbar}}$ , los eigenvalores son;

$$E_n = \xi^2 \frac{2 \hbar^2}{m a^2} = \xi^2 \frac{2 \hbar^2}{m V_0 a^2} V_0 \approx \left(\frac{1.25}{4}\right)^2 V_0 \approx 0.0977 V_0$$

y

$$E_n = \xi^2 \frac{2 \hbar^2}{m V_0 a^2} V_0 \approx \left(\frac{3.6}{4}\right)^2 V_0 \approx 0.810 V_0$$

Los eigenvalores que corresponden a eigenfunciones de la segunda clase se determinana de las soluciones de una ecuación análoga que es;

$$-\xi \cot[\xi] = \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar} - \xi^2}$$

Gráfica página 798

$$\mathbf{GP}(\xi) = \mathbf{Plot}[\mathbf{P}(\xi), \{\mathbf{E}_n, 0, 2 \pi\}];$$

En este caso no hay valores para  $E < V_0$ , pero si habrá uno si  $\pi/2 \leq \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} < 3 \pi/2$ ;

dos si  $3 \pi/2 < \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} < 5 \pi/2 \dots \dots \dots$

La gráfica muestra  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} = 4$ , la solución es  $\xi \approx 2.47$  y el eigenvalor es;

$$E_n = \xi^2 \frac{2 \hbar^2}{m V_0 a^2} V_0 \approx \left(\frac{2.47}{4}\right)^2 V_0 \approx 0.383 V_0$$

Por lo que podemos ver que existe un número restringido de valores permitidos para la energía para  $E < V_0$ , los cuales son lo eigenvalores discretos para los estados ligados de la partícula. Para  $E > V_0$ , está permitido cualquier valor de  $E$ , los eigenva-

lores para los estados no ligados forman un continuo. Incrementando los valores de  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}}$  se encontrará un eigenvalor ligado a la segunda clase. Y para los valores aún más grandes se tendrá otro eigenvalor más de la primera clase. Entonces otro eigenvalor de la segunda clase queda ligado, y así sucesivamente. Si consideramos como ejemplo  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} = 4$ , el potencial y los eigenvalores discretos y continuos son;

Gráfica pág 799

Donde se utilizan los números cuánticos  $n=1,2,3,\dots$  para marcar los eigenvalores. Para este potencial solamente los 3 primeros eigenvalores son ligados.

A partir de;

$$\text{Sol1} = \xi \tan[\xi] = \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar} - \xi^2}$$

$$\frac{\sqrt{\frac{a^2 m (-E_n + V_0)}{\hbar}}}{\sqrt{2}}$$

$$\text{Sol2} = -\xi \cot[\xi] = \sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar} - \xi^2}$$

$$\sqrt{-\xi^2 + \frac{a^2 m V_0}{2 \hbar}}$$

Para un valor dado de  $\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}}$  se pueden evaluar las formas de las eigenfunciones;

$$\psi_1[x] = B \cos[k_1 x]$$

$$B \cos[k_1 x]$$

$$\psi_2[x] = A \sin[k_1 x]$$

$$A \sin[k_1 x]$$

$$\xi = k_1 \frac{a}{2}$$

$$\frac{2 k_1}{a}$$

$$\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar} - \xi^2} = k_1 \frac{a}{2}$$

$$\text{Set::write : Tag Power in } \sqrt{-\frac{4 k_1^2}{a^2} + \frac{a^2 m V_0}{2 \hbar}} \text{ is Protected.}$$

$$\frac{a k_1}{2}$$

Las constantes A y B se ajustan de modo que cada eigenfunción satisfaga la condición de normalización. Para el caso

$$\sqrt{\frac{m V_0 a^2}{2 \hbar}} = 4$$

Las tres eigenfunciones normalizadas que corresponden a los eigenvalores  $E_1, E_2, E_3$ , son;

$$17.9 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{3.80 \frac{x}{a/2}} \quad x \leq -a/2$$

Cuando  $-a/2 \leq x \leq a/2$

$$\psi_1[x] = 1.26 \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[1.25 \frac{x}{a/2}\right]$$

$$\frac{1.26 \cos\left[\frac{2.5x}{a}\right]}{\sqrt{a}}$$

$$17.9 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-3.80 \frac{x}{a/2}} \quad x \leq a/2$$

$$-18.6 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{3.16 \frac{x}{a/2}} \quad x \leq -a/2$$

Cuando  $-a/2 \leq x \leq a/2$

$$\psi_2[x] = 1.23 \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left[2.47 \frac{x}{a/2}\right]$$

$$\frac{1.23 \sin\left[\frac{4.94x}{a}\right]}{\sqrt{a}}$$

$$18.6 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-3.16 \frac{x}{a/2}} \quad x \geq a/2$$

$$-5.8 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{1.74 \frac{x}{a/2}} \quad x \leq -a/2$$

Cuando  $-a/2 \leq x \leq a/2$

$$\psi_3[x] = 1.13 \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[3.6 \frac{x}{a/2}\right]$$

$$\frac{1.13 \cos\left[\frac{7.2x}{a}\right]}{\sqrt{a}}$$

$$-5.8 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-1.74 \frac{x}{a/2}} \quad x \geq a/2$$

En la gráfica se representa como función de  $\frac{x}{a/2}$  las eigenfunciones multiplicadas por  $\sqrt{a}$ ;

Gráfica página 800

## Fenómeno de Tunelamiento

### Potencial Escalón

- **Energía de la partícula es menor al potencial al que se encuentran.**

Una partícula viaja en dirección creciente de  $x$ , donde en  $x=0$  el potencial cambia bruscamente para ser posteriormente constante.

$$V_0 \quad x > 0$$

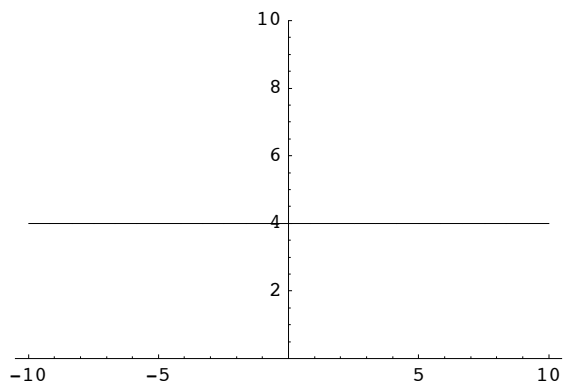
$$V(x) =$$

$$0 \quad x < 0$$

$$f[x] = 8$$

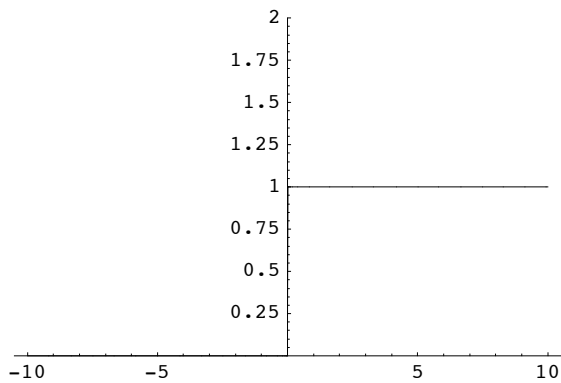
$$g[x] = 0$$

$$T = \text{Plot}[4, \{x, -10, 10\}, \text{PlotRange} \rightarrow \{0, 10\}]$$



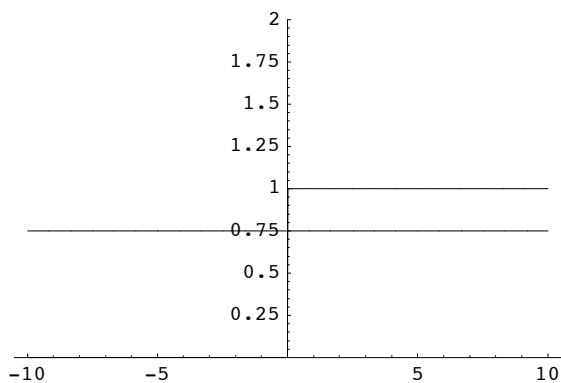
- Graphics -

```
R = Plot[UnitStep[0 + x], {x, -10, 10}, PlotRange -> {0, 2}]
```



```
- Graphics -
```

```
Show[T, R]
```



En este caso la energía de la partícula (reperesentada por la línea horizontal ) es menor que el potencial  $V(x)$ , el cual cambia abruptamente de 0 a uno en  $x=0$ .

Para encontrar la eigenfunción que modela el movimiento de la partícula, se resuelve la ecuación de Shrodinger independiente del tiempo del lado de las  $x$  negativas con un potencial 0, y después el lado positivo con un potencial  $V_0$ . Se debe de considerar que en  $x=0$  la función y su derivada deben de ser monovaluadas, finitas y continuas;

Para  $x < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x)$$

El resultado es :

$$\psi(x) = e^{\frac{\pm \sqrt{2mE}}{\hbar} x} = e^{\pm kx} \quad \text{donde} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Pero para obtener la solución general se debe tener dos constantes porque se tiene una segunda derivada, entonces se hace la combinación lineal de ésta solución

y una idéntica con signo de la exponencial contrario, lo que significará que la onda viaje en dirección contraria, y se obtiene:

$$\psi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

En  $x > 0$ , el  $V_0$  es mayor que  $E$  por lo que se espera tener una función que se aproxime a tener valores de cero. Esta pequeña área de probabilidad que tendrá la función, es la que rompe con la física clásica.

$$\psi(x) = e^{-k_2 x}$$

y para encontrar  $k_2$  sustituimos en la ecuación de Shrodinger;

$$\frac{d^2 e^{-k_2 x}}{dx^2} = (-k_2)^2 e^{-k_2 x} = k_2^2 \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} k_2^2 \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

y obteniendo la combinación lineal de la eigenfunción tendremos;

$$\psi(x) = C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Resolvemos el sistema para encontrar el valor de la constantes.

Para que las funciones sean finitas en la región  $x > 0$ , esta tiende al infinito debido a la constante  $C$  por lo que para que sea finita hacemos que el valor de  $C=0$ , e igualamos en  $x=0$  las regiones para considerar la continuidad.

$$A e^{ik_1 \cdot 0} + B e^{-ik_1 \cdot 0} = D e^{-k_2 \cdot 0}$$

$$\text{eq1} = A + B = D$$

Realizamos lo mismo pero con las derivadas de estas;

$$\psi'(x) = ik_1 A e^{ik_1 x} - ik_1 B e^{-ik_1 x} \quad \psi'(x) = -k_2 D e^{-k_2 x}$$

$$x = 0 \rightarrow ik_1 A e^0 - ik_1 B e^0 = -k_2 D e^0$$

$$ik_1 A - ik_1 B = -k_2 D$$

$$\text{eq2} = A - B = \frac{-k_2}{k_1} D$$

Sumando eq1 y eq2;

$$2A = D \left( 1 + \frac{i k_2}{k_1} \right)$$

Restamos eq1 y eq2;

$$2B = D \left( 1 - \frac{i k_2}{k_1} \right)$$

Tenemos ambos coeficientes en función de la constante D por lo tanto;

$$\psi(x) = \frac{D}{2} \left( 1 + \frac{i k_2}{k_1} \right) e^{i k_1 x} + \frac{D}{2} \left( 1 - \frac{i k_2}{k_1} \right) e^{-i k_1 x} \quad x \leq 0$$

$$\psi(x) = D e^{-k_2 x} \quad x \geq 0$$

$$0$$

La función será;

$$\Psi(x, t) = A e^{i(k_1 x - E t/\hbar)} + B e^{-i(k_1 x - E t/\hbar)} \quad x \leq 0$$

$$\Psi(x, t) = D e^{-k_2 x} e^{i E t/\hbar} \quad x \geq 0$$

Para encontrar la densidad de probabilidad para  $x > 0$  debemos tener en cuenta que existe un factor llamado de reflexión el cual refleja la onda ( este factor se explicará más adelante, se menciona aquí para comprender el porque se obtiene de esta manera la densidad de probabilidad). La onda incidente así como la reflejada conservan la misma amplitud, y la misma posición de los nodos por lo que se convierte en una onda estacionaria entonces para calcular la densidad de probabilidad se multiplica la onda por el conjugado y se eleva al cuadrado.

$$\Psi^* \Psi = D^* e^{-k_2 x} e^{-i E t/\hbar} * D e^{-k_2 x} e^{i E t/\hbar} = D^* D e^{-2 k_2 x} \quad x > 0$$

Para graficar la densidad de probabilidad asignamos valores la partícula es un electrón, y las unidades serán eV;

$$E_n = 4;$$

$$V_0 = 8;$$

$$m = 0.5110;$$

$$\hbar = 0.6582;$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2 m E}}{\hbar}$$

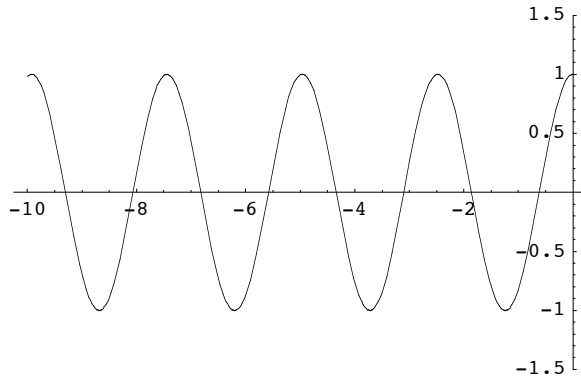
$$2.5323$$



$$k_{11} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

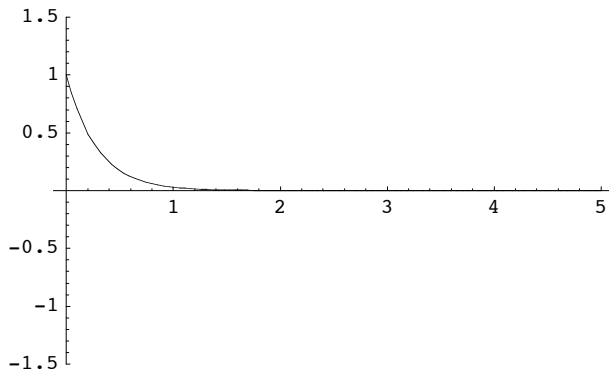
3.52984

```
G1 = Plot[Cos[k1 * x], {x, -10, 0}, PlotRange -> {-1.5, 1.5}]
```



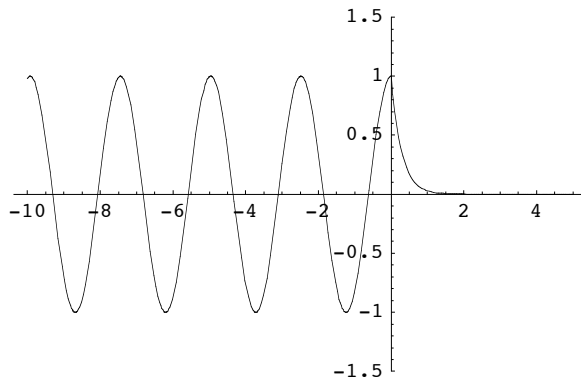
- Graphics -

```
G2 = Plot[e-k11 * x + .0001, {x, 0, 5}, PlotRange -> {-1.5, 1.5}]
```



- Graphics -

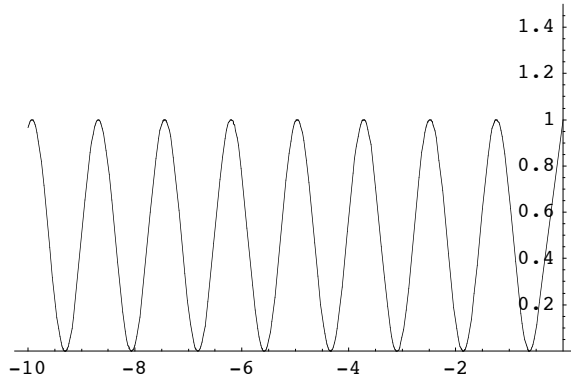
```
Show[G1, G2]
```



- Graphics -

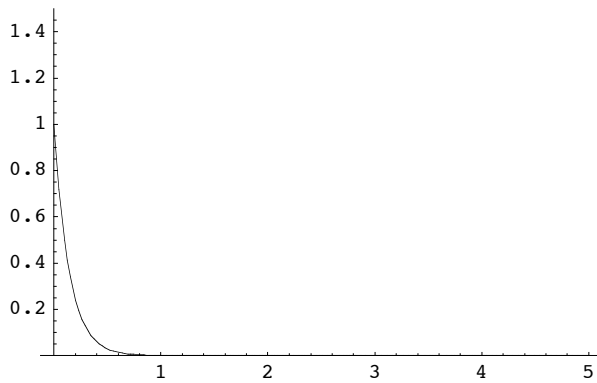
La cual es también la gráfica de la función de onda, aunque en realidad sea la de la función de probabilidad.

```
G1 = Plot[ $\frac{1}{2} \text{Cos}[k1 * 2 x] + .5$ , {x, -10, 0}, PlotRange -> {0, 1.5}]
```



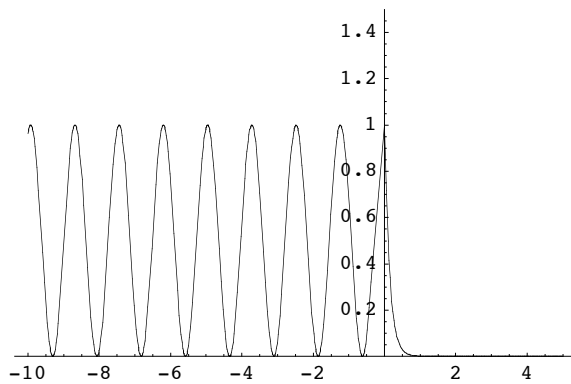
- Graphics -

```
G2 = Plot[ $e^{2k11 i x+.0001}$ , {x, 0, 5}, PlotRange -> {0, 1.5}]
```



- Graphics -

```
Show[G1, G2]
```



- Graphics -

Como podemos ver en la gráfica, la probabilidad de que la partícula se encuentre en la región  $x > 0$  es muy pequeña y se llama penetración de la región clásicamente excluida

## ■ La barrera de Potencial

El potencial es de la forma;

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0 \text{ o } x > a \end{cases}$$

Según la mecánica clásica una partícula de energía total  $E$  en la región

$$x < 0$$

que incide sobre una barrera en la dirección  $x$  en la que

crece  $x$  tendrá una probabilidad de ser reflejada igual a uno, si  $E < V_0$ ; y una probabilidad uno de ser transmitida a la región  $x > a$  si  $E > V_0$ . En la mecánica cuántica,

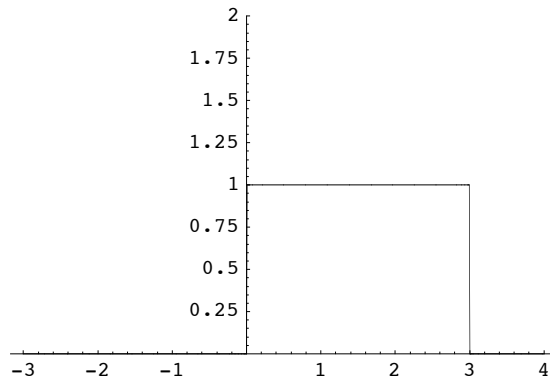
si  $E$  es mucho mayor que  $V_0$  la teoría predice que habrá algo de reflexión excepto para ciertos valores de  $E$ . Si  $E$  es mucho menor que  $V_0$  la mecánica cuántica predice que existe cierta probabilidad de que la partícula sea transmitida a través de la barrera a la región  $x > a$ .

En el tunelamiento a través de una barrera cuya altura excede su energía total, una partícula se comporta como una onda. Pero en la región lejana a la barrera se puede detectar como una partícula localizada sin introducir una incertidumbre significativa en el conocimiento de su energía. Entonces, se puede observar la penetración por una partícula de una región clásicamente excluida de ancho limitado.

Se sabe que para la barrera de potencial deberán existir soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para todos los valores de la energía total

$E \geq 0$ . Se sabe también que la ecuación se parte en tres ecuaciones, definidas por las tres regiones;  $x < 0$  (izquierda de la barrera);  $0 < x < a$  (interior de la barrera) y  $x > a$  (la derecha de la barrera).

```
Plot[UnitStep[x] - UnitStep[x - 3], {x, -3, 4}, PlotRange -> {0, 2}]
```



- Graphics -

Donde en este caso  $a=3$

Distinguiremos las regiones;

- a) izquierda de la barrera  $x < 0$
- b) interior de la barrera  $0 < x < a$ 
  - b1)  $E_n < V_0$
  - b2)  $E_n > V_0$
- c) derecha de la barrera  $x > a$

Las soluciones para las ecuaciones de la izquierda y derecha de la barrera es decir a y b son las de una partícula libre de energía total E. Sus soluciones generales son:

$$\psi[x] = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad x < 0$$

$$\psi[x] = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} \quad x > a$$

$$\text{Donde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$$

En la región interior de la barrera, la forma de la ecuación y su solución general depende de si

$$E_n < V_0 \text{ o } E_n > V_0$$

Estos casos los distinguimos como b1 y b2.

La solución general para b1 es;

$$\psi[x] = Fe^{-k_{11}x} + Ge^{k_{11}x} \quad 0 < x < a$$

$$\text{donde} \quad k_{11} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}{\hbar} \quad E < V_0$$

La solución para b2 es;

$$\psi[\mathbf{x}] = F e^{i k_{11} x} + G e^{-i k_{11} x} \quad 0 < \mathbf{x} < a$$

$$\text{donde} \quad k_{11} = \frac{\sqrt{2 m (E_n - V_0)}}{\hbar} \quad E > V_0$$

En este caso particular nuestra energía es  $E < V_0$ , por lo tanto tenemos las siguientes ecuaciones;

$$\psi[\mathbf{x}] = A e^{i k_1 x} + B e^{-i k_1 x} \quad \mathbf{x} < 0$$

$$\psi[\mathbf{x}] = C e^{i k_1 x} + D e^{-i k_1 x} \quad \mathbf{x} > a$$

$$\text{Donde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2 m E_n}}{\hbar}$$

Y

$$\psi[\mathbf{x}] = F e^{-k_{11} x} + G e^{k_{11} x} \quad 0 < \mathbf{x} < a$$

$$\text{donde} \quad k_{11} = \frac{\sqrt{2 m (V_0 - E_n)}}{\hbar} \quad E < V_0$$

Por lo tanto se resuelve el sistema de ecuaciones donde A se refiere a la amplitud de la onda incidente y la podemos asignar arbitrariamente. Como estamos suponiendo que la partícula incide desde el lado izquierdo, no habría ninguna posibilidad de que una partícula incidiera en la barrera viniendo desde las x positivas, por lo que podemos decir que  $D = 0$ . Obtenemos las siguientes ecuaciones;

$$a) \psi(\mathbf{x}) = A e^{i k_1 x} + B e^{-i k_1 x} \quad \mathbf{x} < 0$$

$$b1) \psi(\mathbf{x}) = F e^{k_2 x} + G e^{-k_2 x} \quad 0 > \mathbf{x} > a$$

$$c) \psi(\mathbf{x}) = C e^{i k_1 x} \quad \mathbf{x} > a$$

Satisfaciendo la propiedad de continuidad en  $x = 0$  y  $x = a$  (que es donde hay unos cambios repentinos en el valor del potencial):

Cuando  $x=0$ , La ecuación "a" es igual a la ecuación "b1"

$$A e^{i k_1 0} + B e^{-i k_1 0} = F e^{k_2 0} + G e^{-k_2 0}$$

Entonces obtenemos la ecuación;

$$1) A + B = F + G$$

Cuando  $x=0$ , Las derivadas de las ecuaciones "a y b1" también son iguales

$$i k_1 A e^{i k_1 0} - i k_1 B e^{-i k_1 0} = k_2 F e^{k_2 0} - k_2 G e^{-k_2 0}$$

Entonces obtenemos la ecuación;

$$2) i k_1 A - i k_1 B = k_2 F - k_2 G$$

Cuando  $x=a$ , La ecuación "c" es igual a la ecuación "b1"

$$3) C e^{i k_1 a} = F e^{k_2 a} + G e^{-k_2 a}$$

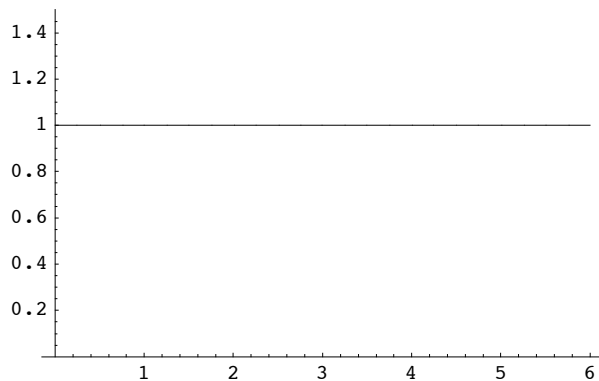
Cuando  $x=a$ , Las derivadas de las ecuaciones "c" y "b1" son iguales

$$4) i k_1 C e^{i k_1 a} = k_2 F e^{k_2 a} - k_2 G e^{-k_2 a}$$

La forma de la densidad de probabilidad correspondiente a la eigenfunción.  $\Psi^* \Psi$  para una situación típica de penetración de barrera es, página 243

En la región  $x > a$  la función de onda es una onda viajera pura y por lo tanto su densidad de probabilidad es constante;

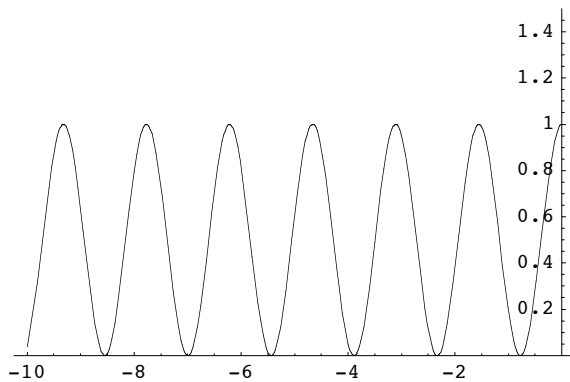
```
G2 = Plot[1, {x, 0, 6}, PlotRange -> {0, 1.5}]
```



- Graphics -

En la región  $x < 0$  la función de onda es fundamentalmente una onda estacionaria pero tiene una componente pequeña de onda viajera debido a que la onda viajera reflejada tiene una amplitud menor que la de la onda incidente, por lo tanto la densidad de probabilidad en esta región oscila pero tiene valores mínimos algo mayores que cero;

```
G1 = Plot[1/2 Cos[√(2 * 0.5110 * 4 * 2 * x)] + .5, {x, -10, 0}, PlotRange -> {0, 1.5}]
```



- Graphics -

En la región  $0 < x < a$  la función de onda tiene comportamiento de los dos tipos pero principalmente es una onda estacionaria de amplitud exponencialmente decreciente y su comportamiento se puede ver en la densidad de probabilidad general para la eigenfunción previamente señalada.

La razón  $T$ , del flujo de probabilidad transmitido a través de la barrera a la región  $x > a$ , al flujo de probabilidad incidente sobre la barrera. Este coeficiente de transmisión es;

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[ 1 + \frac{(e^{k_{11}a} - e^{-k_{11}a})}{16 \frac{E_n}{v_0} \left(1 - \frac{E_n}{v_0}\right)} \right]^{-1} \quad \text{donde} \quad k_{11}a = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E_n}{V_0}\right)}$$

□

El coeficiente de transmisión está relacionado con la probabilidad de que la partícula atraviese la barrera de potencial, mientras que el coeficiente de reflexión está relacionada con la probabilidad de que la partícula sea reflejada y es el siguiente.

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^* \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad E > V_0$$

Por lo tanto concluimos que  $R < 1$  cuando  $E > V_0$ , cuando la energía total de la partícula es mayor que la altura del potencial. Esto está en contraste con el valor de  $R = 1$  cuando  $E < V_0$  en el caso de las partículas clásicas, pero lo sorprendente no es que  $R < 1$  sino que  $R > 0$ , pues clásicamente la partícula debe ser totalmente reflejada.

La evaluación de  $T$  es ligeramente más complicada que la evaluación de  $R$  ya que la velocidad de la partícula es distinta en cada región. Ambos coeficientes están definidos realmente en términos de las relaciones de los flujos de probabilidad. Un flujo de probabilidad es la probabilidad por segundo de encontrar una partícula cruzando algún punto de referencia en una dirección particular.

$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A}$$

La relación ;  $R + T = 1$

Es la motivación de definir los coeficientes de reflexión y de transmisión en términos de los flujos de probabilidad.

En el coeficiente de reflexión  $v_1$  es la velocidad de la partícula en la región  $x$  menor que cero y las velocidades se cancelan, En el coeficiente de transmisión  $v_2$  es la velocidad de la partícula en la región de  $x$  mayor que cero o después del potencial. Entonces

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{y} \quad v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

Por lo tanto nos queda que;

$$T = \frac{k_2 (2 k_1)^2}{k_1 (k_1 + k_2)^2} = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Esto se entiende mejor si se observa gráficamente, por lo que le asignaremos valores a las constantes  $k_1$  y  $k_2$ , tomando en cuenta que tenemos a un electrón:

Demostración de  $R + T = 1$ ;

$$\begin{aligned} R + T &= 1 \\ \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} &= \\ \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} &= \frac{k_1^2 - 2 k_1 k_2 + k_2^2 + 4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_1^2 + 2 k_1 k_2 + k_2^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_1 + k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = 1 \end{aligned}$$

Es lógica esta relación ya que la partícula o se refleja o se trasmite.

$$\begin{aligned} R &= \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left( \frac{\frac{\sqrt{2 m E_n}}{\hbar} - \sqrt{\frac{2 m}{\hbar^2} (E_n - V_0)}}{\frac{\sqrt{2 m E_n}}{\hbar} + \sqrt{\frac{2 m}{\hbar^2} (E_n - V_0)}} \right)^2 = \\ &= \frac{\left( \frac{\sqrt{2 m}}{\hbar} \right)^2 (\sqrt{E_n} - \sqrt{E_n - V_0})^2}{\left( \frac{\sqrt{2 m}}{\hbar} \right)^2 (\sqrt{E_n} + \sqrt{E_n + V_0})^2} = \frac{\left( \sqrt{\frac{E_n}{E_n}} - \sqrt{\frac{E_n - V_0}{E_n}} \right)^2}{\left( \sqrt{\frac{E_n}{E_n}} + \sqrt{\frac{E_n - V_0}{E_n}} \right)^2} = \frac{\left( 1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E_n}} \right)^2}{\left( 1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E_n}} \right)^2} \end{aligned}$$

Por lo tanto;

$$R = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E_n}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E_n}}} \right)^2 = 1 - T$$

Lo obtenemos en función de  $E_n/V_0$ ;

$$\begin{aligned} R &= \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left( \frac{\frac{\sqrt{2 m E_n}}{\hbar} - \sqrt{\frac{2 m}{\hbar^2} (E_n - V_0)}}{\frac{\sqrt{2 m E_n}}{\hbar} + \sqrt{\frac{2 m}{\hbar^2} (E_n - V_0)}} \right)^2 = \\ &= \frac{\left( \frac{\sqrt{2 m}}{\hbar} \right)^2 (\sqrt{E_n} - \sqrt{E_n - V_0})^2}{\left( \frac{\sqrt{2 m}}{\hbar} \right)^2 (\sqrt{E_n} + \sqrt{E_n + V_0})^2} = \frac{\left( \sqrt{\frac{E_n}{V_0}} - \sqrt{\frac{E_n - V_0}{V_0}} \right)^2}{\left( \sqrt{\frac{E_n}{V_0}} + \sqrt{\frac{E_n - V_0}{V_0}} \right)^2} = \frac{\left( \sqrt{\frac{E_n}{V_0}} - \sqrt{\frac{E_n}{V_0} - 1} \right)^2}{\left( \sqrt{\frac{E_n}{V_0}} + \sqrt{\frac{E_n}{V_0} - 1} \right)^2} \end{aligned}$$

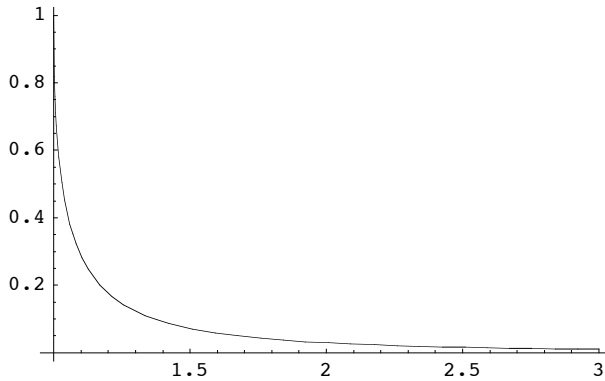
Por lo tanto;



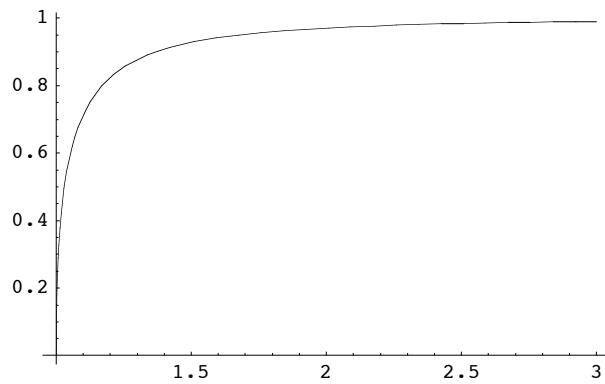
$$R = 1 - T = \left( \frac{\sqrt{\frac{E_n}{V_o}} - \sqrt{\frac{E_n}{V_o} - 1}}{\sqrt{\frac{E_n}{V_o}} + \sqrt{\frac{E_n}{V_o} - 1}} \right)^2$$

Ahora graficamos la transmitancia en función de la reflexión. Para valores menores que 1 el coeficiente de reflexión valdrá 1 y el de transmisión cero.

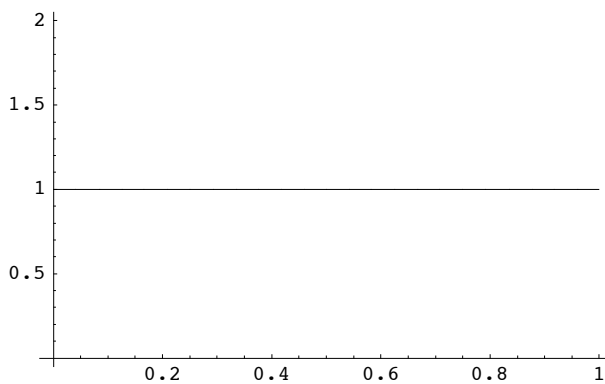
$$G1 = \text{Plot}\left[\left(\frac{\sqrt{x} - \sqrt{x-1}}{\sqrt{x} + \sqrt{x-1}}\right)^2, \{x, 1, 3\}\right];$$



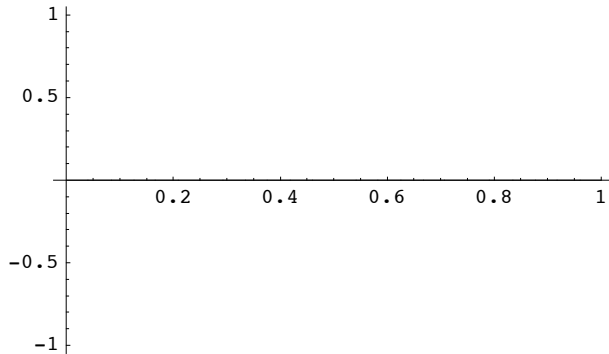
$$G2 = \text{Plot}\left[1 - \left(\frac{\sqrt{x} - \sqrt{x-1}}{\sqrt{x} + \sqrt{x-1}}\right)^2, \{x, 1, 3\}\right];$$



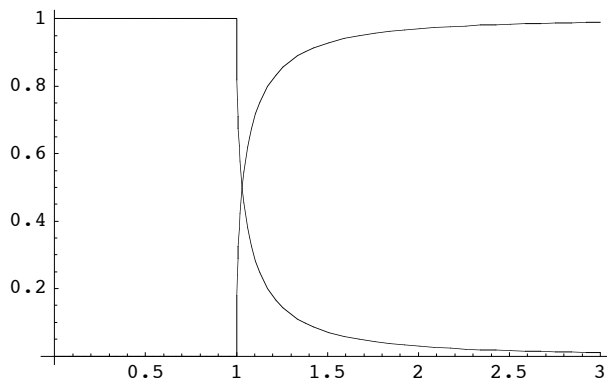
$$G3 = \text{Plot}[1, \{x, 0, 1\}];$$



```
G4 = Plot[0, {x, 0, 1}];
```



```
Show[G1, G2, G3, G4]
```



- Graphics -

## Movimiento de un Paquete Gaussiano de Ondas

Para obtener la trayectoria o movimiento de un paquete de ondas se suman un número casi infinitamente grande de ondas totalmente desfasadas ( diferente frecuencia y longitud de onda ) y se hace una superposición de onda de éstas. Para realizar esto utilizamos como herramienta la transformada de Fourier la cual localiza el paquete de ondas en un lugar del espacio de manera que no se repita en otro diferente. Después se varía el tiempo y se ve que si el paquete mantiene su forma mientras se desplaza en el tiempo quiere decir que tienen las diferentes ondas la misma velocidad. Por lo que la velocidad de las ondas armónicas no depende de la longitud de onda y de la frecuencia. El paquete sufrió de un cambio cuando se encuentra con un potencial el cual cambia su geometría. Pero lo que nos indica donde va a estar la partícula es la probabilidad es decir donde probablemente se encuentre la partícula es lo que en realidad nos da información sobre ella y su movimiento.

Como ya sabemos las partículas tienen propiedades tanto de partículas como de onda, en la mecánica cuántica la propiedad de ondulatoria es mucho más evidente, por lo tanto una partícula se puede describir a través de su función de onda asociada.

Este movimiento de la partícula, es decir su propagación se puede analizar a través de un paquete de ondas, cuya amplitud se modula para formar varias ondas que a su vez forman un grupo.

Los fenómenos de singular importancia que distinguen las ondas de las partículas son la interferencia y difracción. La interferencia es la combinación por superposición de dos o más ondas que se encuentran en un punto en el espacio. La difracción es la desviación que sufren las ondas alrededor de los bordes y esquinas que se produce cuando una porción de un frente de onda se ve cortada o interrumpida por una barrera o un obstáculo.

Analizaremos un paquete de ondas que se encuentra dentro de una caja cuyos extremos tienen un potencial infinito

### ■ Paquete de ondas dentro de una caja

$$a[n_] := 1 / \text{Sqrt}[2]$$

$$a[n_, t_] = a[n] E^{(-Ie[n] t/\hbar)}$$

$$\frac{e^{-\frac{t I e[n]}{\hbar}}}{\sqrt{2}}$$

$$\psi[x_, t_] = \frac{e^{-\frac{i\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}} \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{\sqrt{L}} + \frac{e^{-\frac{2i\pi^2 t \hbar}{L^2 m}} \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{\sqrt{L}}$$

$$\frac{e^{-\frac{i\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}} \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{\sqrt{L}} + \frac{e^{-\frac{2i\pi^2 t \hbar}{L^2 m}} \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{\sqrt{L}}$$

$$I \hbar D[\psi[x, t], t] == \text{hamiltonean}[0] @ \psi[x, t] // \text{ExpandAll}$$

$$\frac{e^{-\frac{i\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}} \pi^2 \hbar^2 \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{2L^{5/2} m} + \frac{2e^{-\frac{2i\pi^2 t \hbar}{L^2 m}} \pi^2 \hbar^2 \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{L^{5/2} m} ==$$

$$\text{hamiltonean}[0] \left[ \frac{e^{-\frac{i\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}} \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{\sqrt{L}} + \frac{e^{-\frac{2i\pi^2 t \hbar}{L^2 m}} \text{Sin}\left[\frac{\pi x}{L}\right]}{\sqrt{L}} \right]$$

$$\psi[0, t] == \psi[L, t] == 0$$

True

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{sq}}[x_, t_] = & \frac{\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2 \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right]^2}{L^2} + \frac{2\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{3\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}\right] \cos\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2 \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right] \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right]}{L^2} + \\
& \frac{\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2 \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right]^2}{L^2} + \frac{\sqrt{L^2} \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right]^2 \sin\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2}{L^2} + \\
& \frac{2\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{3\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}\right] \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right] \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right] \sin\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2}{L^2} + \frac{\sqrt{L^2} \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right]^2 \sin\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2}{L^2} \\
& \frac{\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2 \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right]^2}{L^2} + \frac{2\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{3\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}\right] \cos\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2 \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right] \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right]}{L^2} + \\
& \frac{\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2 \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right]^2}{L^2} + \frac{\sqrt{L^2} \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right]^2 \sin\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2}{L^2} + \\
& \frac{2\sqrt{L^2} \cos\left[\frac{3\pi^2 t \hbar}{2L^2 m}\right] \sin\left[\frac{\pi x}{L}\right] \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right] \sin\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2}{L^2} + \frac{\sqrt{L^2} \sin\left[\frac{2\pi x}{L}\right]^2 \sin\left[\frac{\text{Arg}[L]}{2}\right]^2}{L^2}
\end{aligned}$$

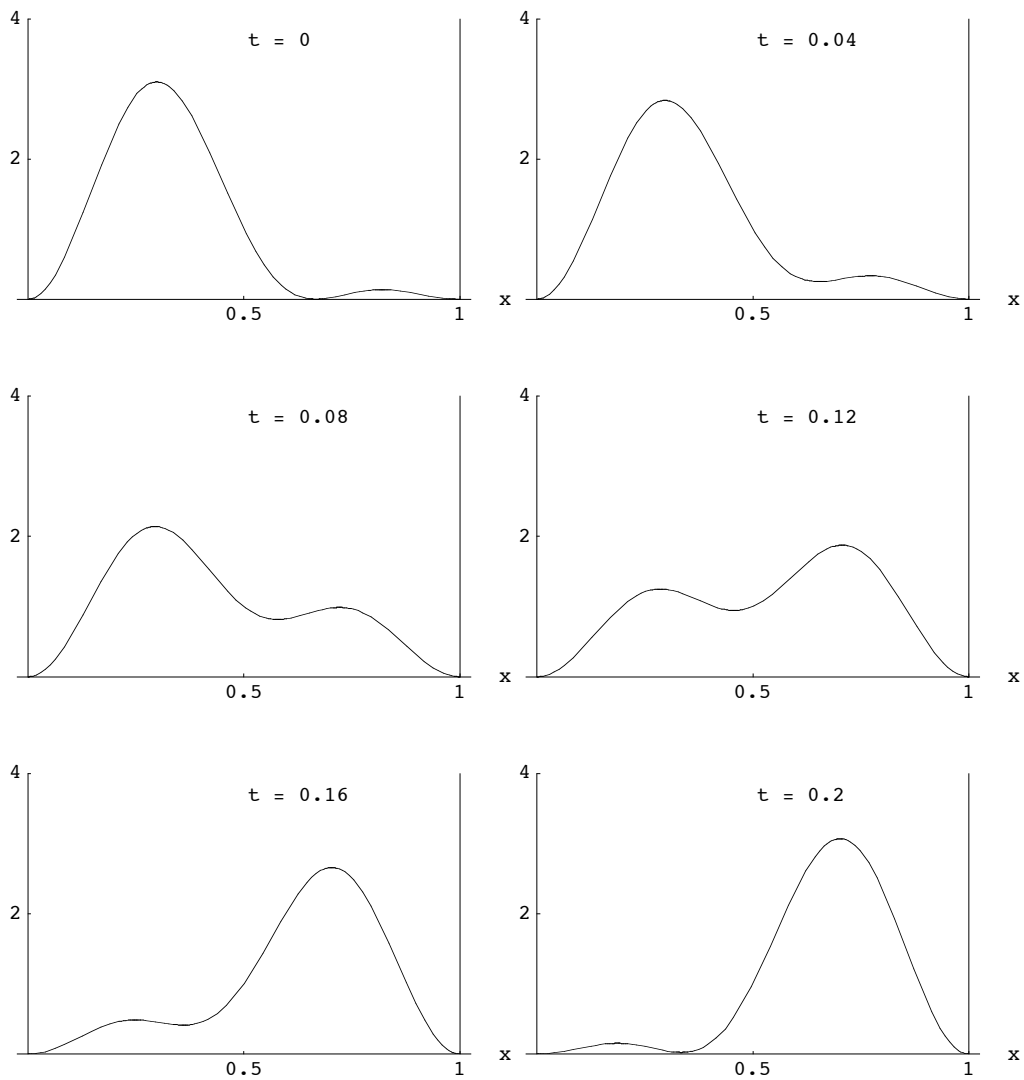
`psisqPlot[t_] :=`

```

Plot[Evaluate[ψsq[x, t] /. {ħ → 1, L → 1, m → 1} // N], {x, 0, 1}, PlotRange → {0, 4},
  AxesLabel → {" x", ""}, Ticks → {{{0, 0}, {0.5, 0.5}, {1, 1}}, {{0, 0}, {2, 2}, {4, 4}}},
  Epilog → {Text["t = " <> ToString[t], {0.5, 3.7}], {-1, 0}], {Line[{{1, 0}, {1, 4}}]}},
  DisplayFunction → Identity];

```

```
Show[GraphicsArray[Table[{psisqPlot[t], psisqPlot[t + 0.04]}, {t, 0, 0.2, .08}],  
GraphicsSpacing -> {0, .2}, DisplayFunction -> $DisplayFunction];
```



Lo que podemos observar es que al chocar con la pared la cual tiene un potencial infinito esta se refleja o "regresa" y ocurre lo mismo con la otra pared, en sí dentro de la caja no existe potencial pero basta con el potencial de las paredes para deformar la geometría del paquete de ondas.

## Extra

Estudiaremos el caso de un electrón dentro de una esfera hueca con potencial cero, en la cual la función de onda es cero en la frontera de la esfera. Este caso utilizamos la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas esféricas.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(r, \theta, \varphi)}{\partial x^2} + V(r, \theta, \varphi) \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

Una partícula dentro de una esfera hueca con un potencial cero;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

La función de onda puede ser expresada como;

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]$$

Laplaciano en coordenadas esféricas;

$$\left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \psi^2} + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r} + \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r^2} \right]$$

Resolvemos la ecuación diferencial;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \psi^2} + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r} + \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r^2} \right] = E [R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \psi''[\varphi] R[r] \Theta[\theta] + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \Theta'[\theta] R[r] \psi[\varphi] + \frac{1}{r^2} \Theta''[\theta] R[r] \psi[\varphi] + \frac{2}{r} R'[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi] + R''[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi] \right] = E [R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{1}{r^2} \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{2}{r} \frac{R'[r]}{R[r]} + \frac{R''[r]}{R[r]} \right] = E$$

Multiplicamos por  $r^2$

$$\text{Csc}^2[\theta] \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Cot}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} + 2r \frac{R'[r]}{R[r]} + r^2 \frac{R''[r]}{R[r]} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{Csc}^2[\theta] \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Cot}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -r^2 \frac{R''[r]}{R[r]} - 2r \frac{R'[r]}{R[r]} - \frac{2mE}{\hbar^2} = -\mu^2$$

$$r^2 R''[r] + 2r R'[r] = \left[ -\frac{2mE}{\hbar^2} + \mu^2 \right] R[r]$$

Ecuación de Bessel Esférica

$$r^2 R''[r] + 2r R'[r] + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \mu^2 \right] R[r] = 0$$

Armónicos esféricos;

$$\text{Csc}^2[\theta] \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Cot}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -\mu^2$$

Para realizar la separación de variables;

Multiplicamos por  $\text{Sin}^2[\theta]$ ;

$$\frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \text{Sin}^2[\theta] \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -\mu^2 \text{Sin}^2[\theta]$$

$$\frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} = -\mu^2 \text{Sin}^2[\theta] - \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} - \text{Sin}^2[\theta] \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -\beta^2$$

$$\psi''[\varphi] + \beta^2 \psi[\varphi] = 0$$

$$\text{Sin}^2[\theta] \Theta''[\theta] + \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \Theta'[\theta] = [-\mu^2 \text{Sin}^2[\theta] + \beta^2] \Theta[\theta]$$

Ecuación de Legendre

$$\text{Sin}^2[\theta] \Theta''[\theta] + \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \Theta'[\theta] + [\mu^2 \text{Sin}^2[\theta] - \beta^2] \Theta[\theta] = 0$$

## Soluciones

$$\psi''[\varphi] + \beta^2 \psi[\varphi] = 0$$

$$\psi[\varphi] = A e^{i\beta\varphi}$$

Podemos observar que la componente  $\psi$  tiene un solo valor en un punto dado en el espacio es decir

Grafica, pag 157 [besser](#)

Por lo tanto debe ser cierto que

$$\psi[\varphi] = \psi[\varphi + 2\pi]$$

$$\psi[\varphi] = A e^{i\beta\varphi} = A e^{i\beta[\varphi + 2\pi]}$$

Lo cual solo pasa si  $\beta$  es cero o un número entero. Por lo tanto;

$$\beta = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ecuación de Legendre

$$\sin^2[\theta] \Theta''[\theta] + \sin[\theta] \cos[\theta] \Theta'[\theta] + [\mu^2 \sin^2[\theta] - \beta^2] \Theta[\theta] = 0$$

$$\Theta[\theta] = P_{\mu-\beta}[\cos[\theta]] \rightarrow \text{Polinomios de Legendre del orden } \mu - \beta$$

Son los polinomios de Legendre de orden  $\mu - \beta$ , por lo tanto  $\mu$  siempre debe valer  $\beta + 1$  para que  $\mu - \beta$  no sea un número negativo así como tampoco  $\mu$  puede ser un número negativo pues el orden de los polinomios debe siempre ser positivo.

Por lo tanto  $\mu = 0, 1, 2, 3, \dots$

Ecuación de Bessel Esférica

$$r^2 R''[r] + 2r R'[r] + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \mu^2 \right] R[r] = 0$$

$$R[r] = j_{\mu} \text{BesselEsférica} \left[ \frac{r \sqrt{2mEn}}{\hbar} \right] = \sqrt{\frac{\pi}{2r \sqrt{2mEn} \hbar}} J_{\mu + \frac{1}{2}} \text{Bessel} \left[ \frac{r \sqrt{2mEn}}{\hbar} \right]$$

Por condiciones de frontera, la función de onda en la cascara de la esfera, de radio  $a$ ; es cero, por lo tanto;

$$R[a] = 0 \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2a \sqrt{2mEn} \hbar}} J_{\mu + \frac{1}{2}} \text{Bessel} \left[ \frac{a \sqrt{2mEn}}{\hbar} \right] = 0$$

$\sqrt{\frac{\pi}{2a \sqrt{2mEn} \hbar}}$  no puede ser cero por lo tanto;

$$J_{\mu + \frac{1}{2}} \text{Bessel} \left[ \frac{a \sqrt{2mEn}}{\hbar} \right] = 0$$

Lo que quiere decir que  $\frac{a \sqrt{2mEn}}{\hbar} = j_{\mu + \frac{1}{2}, n}$

$$j_{\mu + \frac{1}{2}, n} = \text{enésimo cero de la función de Bessel de orden } \mu + \frac{1}{2}$$

Para encontrar los valores de  $En$ , despejamos  $En$ :

$$En = \left( \frac{j_{\mu + \frac{1}{2}, n} \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

Ahora sustituimos  $m$  (masa del electrón en kg),  $a$  (radio de la esfera m),  $\hbar$  (constante de planck en Joule\*seg),  $\mu$  (que va cambiando) y  $n$  (va cambiando)



$$m = 9.109 \times 10^{-31}$$

$$9.109 \times 10^{-31}$$

$$r_{\text{electrón}} = 5.29 \times 10^{-11}$$

$$5.29 \times 10^{-11}$$

$$a = 10000 r_{\text{electrón}}$$

$$5.29 \times 10^{-7}$$

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$$

$$1.055 \times 10^{-34}$$

$$\mu=0, n=1$$

$$E_n = \left( \frac{j_{\mu+\frac{1}{2}, n} \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

<< NumericalMath`BesselZeros`

$$\mu=0$$

`j0 = BesselJZeros[1/2 + #, 5] & /@ Range[0, 4]`

```
{ {3.14159, 6.28319, 9.42478, 12.5664, 15.708},
  {4.49341, 7.72525, 10.9041, 14.0662, 17.2208},
  {5.76346, 9.09501, 12.3229, 15.5146, 18.689},
  {6.98793, 10.4171, 13.698, 16.9236, 20.1218},
  {8.18256, 11.7049, 15.0397, 18.3013, 21.5254} }
```

`j0[[1]]`

```
{3.14159, 6.28319, 9.42478, 12.5664, 15.708}
```

$$\mu=0, n=1$$

$$E_{n01} = \left( \frac{j0[[1]] \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

```
{2.15473 \times 10^{-25}, 8.61892 \times 10^{-25}, 1.93926 \times 10^{-24}, 3.44757 \times 10^{-24}, 5.38682 \times 10^{-24} }
```

Nos damos cuenta que las  $j_0$ , es el valor  $\pi$  multiplicado por  $n$  conforme  $n$  aumenta.

$$E_{n\mu n} = \left( \frac{n \pi \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

```
2.15473 \times 10^{-25} n^2
```

$$\mu=1$$

```
j1 = BesselJZeros[3/2, 10]
```

```
{4.49341, 7.72525, 10.9041, 14.0662, 17.2208, 20.3713, 23.5195, 26.6661, 29.8116, 32.9564}
```

$$E_{n1} = \left( \frac{j1[[1]] \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

```
4.40803 × 10-25
```

$$E_{n2} = \left( \frac{j1[[2]] \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

```
1.30292 × 10-24
```

$\mu=2$

```
j2 = BesselJZeros[5/2, 10]
```

```
{5.76346, 9.09501, 12.3229, 15.5146, 18.689, 21.8539, 25.0128, 28.1678, 31.3201, 34.4705}
```

$\mu=3$

```
j3 = BesselJZeros[7/2, 10]
```

```
{6.98793, 10.4171, 13.698, 16.9236, 20.1218, 23.3042, 26.4768, 29.6426, 32.8037, 35.9614}
```

$\mu=4$

```
j4 = BesselJZeros[9/2, 10]
```

```
{8.18256, 11.7049, 15.0397, 18.3013, 21.5254, 24.7276, 27.9156, 31.0939, 34.2654, 37.4317}
```

## Solución General

Por lo tanto la solución a la ecuación es;

```
Clear["Global`*"]
```

```
 $\Psi[r, \theta, \varphi] = R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]$ 
```

```
R[r]  $\Theta[\theta] \psi[\varphi]$ 
```

$$R[r] = \sqrt{\frac{\pi}{2r \sqrt{2mE_n} \hbar}} J_{\mu+\frac{1}{2}} \text{BesselJ}\left[\frac{r \sqrt{2mE_n}}{\hbar}\right]$$

```
BesselJ::argr : BesselJ called with 1 argument; 2 arguments are expected.
```

$$3.50397 \times 10^{-10} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{E_n} r}} \text{BesselJ}[1.27938 \times 10^{19} \sqrt{E_n} r] J_{\frac{1}{2}+\mu}$$

$$\psi[\varphi] = A e^{i\beta[\varphi+2\pi]}$$

$$A e^{i\beta[2\pi+\varphi]}$$

$$\Theta[\theta] = P_{\mu-\beta}[\text{Cos}[\theta]];$$

$$\Psi[r, \theta, \varphi] = R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi];$$

Para obtener el valor de la constante A, esta va a ser diferente para los diferentes valores de  $n, \beta, \mu$ . Entonces resolvemos la probabilidad la cual es igual a uno para cada caso y obtenemos la A para cada caso.

Obtenemos los polinomios de Legendre para  $\mu=0, \beta=0$

$$\Theta[\theta]$$

$$P_{-\beta+\mu}[\text{Cos}[\theta]]$$

$$P_{\mu-\beta}[\text{Cos}[\theta]] = \text{TableForm}[\text{Table}[\text{LegendreP}[\mu - \beta, \text{Cos}[\theta]], \{\mu - \beta, 5\}]]$$

Table::write : Tag Plus in  $\mu - \beta$  is Protected.

$$\text{Table}[\text{LegendreP}[\mu - \beta, \text{Cos}[\theta]], \{\mu - \beta, 5\}]$$

$$\alpha = \mu - \beta$$

$$-\beta + \mu$$

$$P_{\alpha}[\text{Cos}[\theta]] = \text{TableForm}[\text{Table}[\text{LegendreP}[\alpha, \text{Cos}[\theta]], \{\alpha, 5\}]]$$

$$\text{Cos}[\theta]$$

$$-\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}$$

$$-\frac{3 \text{Cos}[\theta]}{2} + \frac{5 \text{Cos}[\theta]^3}{2}$$

$$\frac{3}{8} - \frac{15 \text{Cos}[\theta]^2}{4} + \frac{35 \text{Cos}[\theta]^4}{8}$$

$$\frac{15 \text{Cos}[\theta]}{8} - \frac{35 \text{Cos}[\theta]^3}{4} + \frac{63 \text{Cos}[\theta]^5}{8}$$

$$\text{Para } \beta = 0 \text{ y } \mu = 1, \alpha = 1 \rightarrow \text{Cos}[\theta]$$

$$P_1[\text{Cos}[\theta]] = \text{Cos}[\theta]$$

$$\text{Cos}[\theta]$$

$$\beta = 0$$

$$0$$

$$\mu = \beta + 1$$

$$1$$

$$\Psi[r, \theta, \varphi]_{n, \mu, \beta} == A e^{i\beta[\varphi+2\pi]} \sqrt{\frac{\pi}{2 r \sqrt{2 m E n} \hbar}} \text{BesselJ}\left[0, \frac{r \sqrt{2 m E n} \mu n}{\hbar}\right] P_{\alpha}[\text{Cos}[\theta]]$$

```
Clear["Global`*"]
```

$$\Psi[r, \theta, \varphi]_{1,1,0} == A e^{i\beta[\varphi+2\pi]} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2r\sqrt{2mEn01}}{\hbar}}} \text{BesselJ}\left[0, \frac{r\sqrt{2mEn01}}{\hbar}\right] P_1[\text{Cos}[\theta]];$$

Donde la constante A es igual a uno para simplificar la solución.

Por lo tanto nuestra función de onda;

$$\Psi[r, \theta, \varphi]_{1,1,0} == e^{i\beta[\varphi+2\pi]} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2r\sqrt{2mEn01}}{\hbar}}} \text{BesselJ}\left[0, \frac{r\sqrt{2mEn01}}{\hbar}\right] P_1[\text{Cos}[\theta]];$$

```
j0 = BesselJZeros[1/2 + #, 5] & /@ Range[0, 4]
```

```
{{3.14159, 6.28319, 9.42478, 12.5664, 15.708},
 {4.49341, 7.72525, 10.9041, 14.0662, 17.2208},
 {5.76346, 9.09501, 12.3229, 15.5146, 18.689},
 {6.98793, 10.4171, 13.698, 16.9236, 20.1218},
 {8.18256, 11.7049, 15.0397, 18.3013, 21.5254}}
```

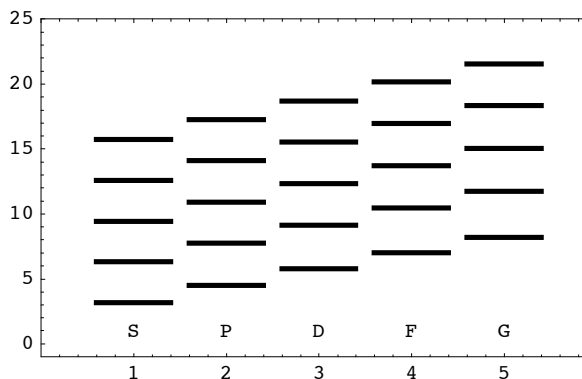
Para encontrar los eigenvalores de  $\mu$  se utilizan los valores de Bessel ceros para diferentes ondas. A continuación se grafican los valores de  $\mu$  para diferentes ondas.

```
TableForm[j0, TableSpacing -> 1,
 TableHeadings -> {"S-Wave", "P-Wave", "D-Wave", "F-Wave", "G-Wave"},
 {"First", "Second", "Third", "Fourth", "Fifth"}]
```

	First	Second	Third	Fourth	Fifth
S-Wave	3.14159	6.28319	9.42478	12.5664	15.708
P-Wave	4.49341	7.72525	10.9041	14.0662	17.2208
D-Wave	5.76346	9.09501	12.3229	15.5146	18.689
F-Wave	6.98793	10.4171	13.698	16.9236	20.1218
G-Wave	8.18256	11.7049	15.0397	18.3013	21.5254

```
levels = Table[{{i - 0.4, j0[[i, j]]}, {i + 0.4, j0[[i, j]]}},
 {i, 1, Length[j0]}, {j, 1, Length[j0[[1]]]}];
```

```
Show[Graphics[{Thickness[0.01], Map[Line, levels, {2}]}], Graphics[Text["S", {1, 1}]],
Graphics[Text["P", {2, 1}]], Graphics[Text["D", {3, 1}]], Graphics[Text["F", {4, 1}]],
Graphics[Text["G", {5, 1}]], Frame -> True, PlotRange -> {{0, 5.9}, {-1, 25}}];
```



```
Plot[R[r, 0, k] /. {k -> (j0[[0 + 1]])} // Evaluate, {r, 0, 1},
PlotStyle -> {{}, Dashing[{0.01}], Dashing[{0.02}], Dashing[{0.03}],
Dashing[{0.04}], Dashing[{0.05}]}, PlotLabel -> StyleForm["ψ", FontSize -> 14],
Epilog -> Text[StyleForm["S(l=0)-State", FontSize -> 14], {0.6, 2}];
```

### Conclusion

A partir del tratamiento de Schrödinger se pueden asignar a un electrón tres números, que se conocen como números cuánticos:  $n$ , conocido como número cuántico principal, que puede ser cualquier número entero mayor que 0.  $l$ , que representa el momento angular orbital del electrón y que puede tomar valores enteros entre 0 y  $n-1$ . Finalmente,  $m$ , el número magnético orbital que puede tomar valores entre  $-l$  y  $l$ . Con estos números se llega a una aproximación del estado de un electrón. Sin embargo, es necesario tomar en cuenta otro número cuántico, el espín, cuyo concepto fue introducido por Uhlenbeck y Goudsmit en 1925 para explicar la división de las líneas espectrales cuando la fuente se colocaba en un campo magnético.

Al resolver la ecuación de Schrodinger para una partícula dentro de una esfera, obtuvimos tres eigenvalores cuantizados. Estos valores los nombramos como  $\beta$ ,  $\mu$  y  $E_n$ ; éstos valores son similares a los eigenvalores del átomo de hidrógeno, los cuales se nombran comúnmente como  $m_l$ ,  $l$  y  $n$ . Comparándolo con nuestros resultados los valores que obtuvimos de  $\beta$  son los de  $m_l$ , los de  $\mu$  son los de  $l$  y los de  $n$  son los de  $n$ .

El valor de  $\beta$  ( $m_l$ ) lo obtuvimos al resolver la eigenfunción en función de  $\varphi$ , el cual es el número cuántico magnético. Estos valores dependen del valor de  $\mu$  ( $l$ ), y toma los valores de:

$$\beta = m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$$

El número cuántico  $\mu$  ( $l$ ) se le llama el número cuántico orbital el cual se obtuvo de la solución de la ecuación de Legendre en función de  $\theta$ , éstos valores dependen del número cuántico  $n$  y toma los valores de :

$$\mu = l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$$

Finalmente el número cuántico  $n$  el cuál se le llama el número cuántico total. El cual toma los valores de 0 en adelante en números enteros. Este número le asigna el valor a la energía en ese estado cuántico el cual se da por la forma:

$$E_n = \left( \frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

Las diferentes funciones de onda dependen de éstos tres números cuánticos.

## Conclusiones

Como podemos observar, la mecánica cuántica es muy importante para estudiar el comportamiento de partículas ya que a su microscópico tamaño influye mucho el principio de incertidumbre, por lo tanto no podemos medir con exactitud la posición y momento, o la energía y el tiempo. Entonces recurrimos a la probabilidad de encontrar la partícula, la cual está dada a través del cuadrado de la función de onda, la cual es muy diferente a la onda clásica y se rige a través de la ecuación de Schrödinger. Gracias a esta ecuación, podemos describir el movimiento de una onda y el efecto de un potencial que interactúa con ella. En este artículo observamos diferentes casos para la solución de la ecuación de Schrödinger al presentarse con diferentes potenciales.

En la vida diaria utilizamos la mecánica Newtoniana y no tomamos en cuenta los efectos cuánticos esto se debe a que el principio de incertidumbre de Heisenberg relacionado con la constante  $\hbar$  es muy pequeño para la vida macroscópica, por lo que sin utilizar la mecánica cuántica se hace una buena aproximación del movimiento, estado, etc. de las moléculas, objetos etc. macroscópicamente hablando. Mientras que a nivel atómico o microscópico el efecto del principio de incertidumbre es bastante grande tanto que se recurre a la probabilidad para encontrar los estados de las partículas, velocidades, posición, etc.

Aunque no utilizemos en la vida diaria, a nivel macroscópico la mecánica cuántica y la ecuación de Schrödinger, un sistema macroscópico si se puede describir a través de esta.

## Bibliografía

- Beiser Arthur. *Concepts of Modern Physics*. Editorial McGraw-Hill, revised edition. EUA.
- Eisberg Robert, Resnick Robert. *Física Cuántica, átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. Editorial Limusa. México.
- Tipler Paul A. *Física para la ciencia y la tecnología, Volumen 2*. Editorial Reverté, cuarta edición. España.
- [http://chimera.javeriana.edu.co/bo90/bo90n\\_p11/TEORIA%20ATOMICA.htm](http://chimera.javeriana.edu.co/bo90/bo90n_p11/TEORIA%20ATOMICA.htm)

## Apéndice: Partícula libre dentro de una esfera hueca de radio $a$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas esféricas.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(r, \theta, \varphi)}{\partial x^2} + V(r, \theta, \varphi) \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

Una partícula dentro de una esfera hueca con un potencial cero;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

La función de onda puede ser expresada como;

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]$$

Laplaciano en coordenadas esféricas;

$$\left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \psi^2} + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r} + \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r^2} \right]$$

Resolvemos la ecuación diferencial;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \psi^2} + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r} + \frac{\partial^2 R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]}{\partial r^2} \right] = E[R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \psi''[\varphi] R[r] \Theta[\theta] + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \Theta'[\theta] R[r] \psi[\varphi] + \frac{1}{r^2} \Theta''[\theta] R[r] \psi[\varphi] + \frac{2}{r} R'[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi] + R''[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi] \right] = E[R[r] \Theta[\theta] \psi[\varphi]]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\text{Csc}^2[\theta]}{r^2} \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \frac{\text{Cot}[\theta]}{r^2} \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{1}{r^2} \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{2}{r} \frac{R'[r]}{R[r]} + \frac{R''[r]}{R[r]} \right] = E$$

Multiplicamos por  $r^2$

$$\text{Csc}^2[\theta] \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Cot}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} + 2r \frac{R'[r]}{R[r]} + r^2 \frac{R''[r]}{R[r]} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{Csc}^2[\theta] \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Cot}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -r^2 \frac{R''[r]}{R[r]} - 2r \frac{R'[r]}{R[r]} - \frac{2mE}{\hbar^2} = -\mu^2$$

$$r^2 R''[r] + 2r R'[r] = \left[ -\frac{2mE}{\hbar^2} + \mu^2 \right] R[r]$$

Ecuación de Bessel Esférica

$$r^2 R''[r] + 2r R'[r] + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \mu^2 \right] R[r] = 0$$

Armónicos esféricos;

$$\text{Csc}^2[\theta] \frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Cot}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -\mu^2$$

Para realizar la separación de variables;

Multiplicamos por  $\text{Sin}^2[\theta]$ ;

$$\frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} + \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} + \text{Sin}^2[\theta] \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -\mu^2 \text{Sin}^2[\theta]$$

$$\frac{\psi''[\varphi]}{\psi[\varphi]} = -\mu^2 \text{Sin}^2[\theta] - \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \frac{\Theta'[\theta]}{\Theta[\theta]} - \text{Sin}^2[\theta] \frac{\Theta''[\theta]}{\Theta[\theta]} = -\beta^2$$

$$\psi''[\varphi] + \beta^2 \psi[\varphi] = 0$$

$$\text{Sin}^2[\theta] \Theta''[\theta] + \text{Sin}[\theta] \text{Cos}[\theta] \Theta'[\theta] = [-\mu^2 \text{Sin}^2[\theta] + \beta^2] \Theta[\theta]$$



Ecuación de Legendre

$$\sin^2[\theta] \Theta''[\theta] + \sin[\theta] \cos[\theta] \Theta'[\theta] + [\mu^2 \sin^2[\theta] - \beta^2] \Theta[\theta] = 0$$

---

## Soluciones

$$\psi''[\varphi] + \beta^2 \psi[\varphi] = 0$$

$$\psi[\varphi] = A e^{i\beta\varphi}$$

Podemos observar que la componente  $\psi$  tiene un solo valor en un punto dado en el espacio es decir

Grafica, pag 157 besser

Por lo tanto debe ser cierto que

$$\psi[\varphi] = \psi[\varphi + 2\pi]$$

$$\psi[\varphi] = A e^{i\beta\varphi} = A e^{i\beta[\varphi + 2\pi]}$$

Lo cual solo pasa si  $\beta$  es cero o un número entero. Por lo tanto;

$$\beta = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ecuación de Legendre

$$\sin^2[\theta] \Theta''[\theta] + \sin[\theta] \cos[\theta] \Theta'[\theta] + [\mu^2 \sin^2[\theta] - \beta^2] \Theta[\theta] = 0$$

$$\Theta[\theta] = P_{\mu-\beta}[\cos[\theta]] \rightarrow \text{Polinomios de Legendre del orden } \mu - \beta$$

Son los polinomios de Legendre de orden  $\mu - \beta$ , por lo tanto  $\mu$  siempre debe valer  $\beta + 1$  para que  $\mu - \beta$  no sea un número negativo así como tampoco  $\mu$  puede ser un número negativo pues el orden de los polinomios debe siempre ser positivo.

Por lo tanto  $\mu = 0, 1, 2, 3, \dots$

Ecuación de Bessel Esférica

$$r^2 R''[r] + 2rR'[r] + \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \mu^2 \right] R[r] = 0$$

$$R[r] = j_\mu \text{BesselEsférica} \left[ \frac{r \sqrt{2mE}}{\hbar} \right] = \sqrt{\frac{\pi}{2r \sqrt{2mE}}} J_{\mu + \frac{1}{2}} \text{Bessel} \left[ \frac{r \sqrt{2mE}}{\hbar} \right]$$

Por condiciones de frontera, la función de onda en la cascara de la esfera, de radio  $a$ ; es cero, por lo tanto;

$$R[a] = 0 \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2 a \sqrt{2 m E n}}{\hbar}}} J_{\mu+\frac{1}{2}} \text{Bessel} \left[ \frac{a \sqrt{2 m E n}}{\hbar} \right] = 0$$

$$\sqrt{\frac{\pi}{\frac{2 a \sqrt{2 m E n}}{\hbar}}} \text{ no puede ser cero por lo tanto;}$$

$$J_{\mu+\frac{1}{2}} \text{Bessel} \left[ \frac{a \sqrt{2 m E n}}{\hbar} \right] = 0$$

$$\text{Lo que quiere decir que } \frac{a \sqrt{2 m E n}}{\hbar} = j_{\mu+\frac{1}{2}, n}$$

$$j_{\mu+\frac{1}{2}, n} = \text{enésimo cero de la función de Bessel de orden } \mu + \frac{1}{2}$$

Para encontrar los valores de En, despejamos En :

$$E_n = \left( \frac{j_{\mu+\frac{1}{2}, n} \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2 m}$$

Ahora sustituimos m (masa del electrón en kg), a (radio de la esfera m),  $\hbar$  (constante de planck en Joule\*seg),  $\mu$  (que va cambiando) y n(va cambiando)

$$m = 9.109 \times 10^{-31}$$

$$9.109 \times 10^{-31}$$

$$r_{\text{electrón}} = 5.29 \times 10^{-11}$$

$$5.29 \times 10^{-11}$$

$$a = 10000 r_{\text{electrón}}$$

$$5.29 \times 10^{-7}$$

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$$

$$1.055 \times 10^{-34}$$

$$\mu=0, n=1$$

$$E_n = \left( \frac{j_{\mu+\frac{1}{2}, n} \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2 m}$$

<< NumericalMath`BesselZeros`

$$\mu=0$$

$$j_0 = \text{BesselJZeros}[1/2, 10]$$

$$\{3.14159, 6.28319, 9.42478, 12.5664, 15.708, 18.8496, 21.9911, 25.1327, 28.2743, 31.4159\}$$

`j0[[1]]`

3.14159

$\mu=0, n=1$

$$E_{n01} = \left( \frac{j0[[1]] \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

$2.15473 \times 10^{-25}$

Nos damos cuenta que las  $j_0$ , es el valor  $\pi$  multiplicado por  $n$  conforme  $n$  aumenta.

$$E_{n\mu n} = \left( \frac{n \pi \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

$2.15473 \times 10^{-25} n^2$

$\mu=1$

`j1 = BesselJZeros[3/2, 10]`

{4.49341, 7.72525, 10.9041, 14.0662, 17.2208, 20.3713, 23.5195, 26.6661, 29.8116, 32.9564}

$$E_{n11} = \left( \frac{j1[[1]] \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

$4.40803 \times 10^{-25}$

$$E_{n12} = \left( \frac{j1[[2]] \hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

$1.30292 \times 10^{-24}$

$\mu=2$

`j2 = BesselJZeros[5/2, 10]`

{5.76346, 9.09501, 12.3229, 15.5146, 18.689, 21.8539, 25.0128, 28.1678, 31.3201, 34.4705}

$\mu=3$

`j3 = BesselJZeros[7/2, 10]`

{6.98793, 10.4171, 13.698, 16.9236, 20.1218, 23.3042, 26.4768, 29.6426, 32.8037, 35.9614}

$\mu=4$

`j4 = BesselJZeros[9/2, 10]`

{8.18256, 11.7049, 15.0397, 18.3013, 21.5254, 24.7276, 27.9156, 31.0939, 34.2654, 37.4317}

## Solución General

Por lo tanto la solución a la ecuación es;

$$\Psi[\mathbf{r}, \theta, \varphi] = \mathbf{R}[\mathbf{r}] \Theta[\theta] \psi[\varphi]$$

$$\mathbf{R}[\mathbf{r}] \Theta[\theta] \psi[\varphi]$$

$$\mathbf{R}[\mathbf{r}] = \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2r\sqrt{2mEn}}{\hbar}}} J_{\mu+\frac{1}{2}} \text{BesselJ}\left[\frac{r\sqrt{2mEn}}{\hbar}\right]$$

BesselJ::argr : BesselJ called with 1 argument; 2 arguments are expected. More...

$$3.50397 \times 10^{-10} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{En} r}} \text{BesselJ}[1.27938 \times 10^{19} \sqrt{En} r] J_{\frac{1}{2}+\mu}$$

$$\psi[\varphi] = \mathbf{A} e^{i\beta[\varphi+2\pi]}$$

$$\mathbf{A} e^{i\beta[2\pi+\varphi]}$$

$$\Theta[\theta] = \mathbf{P}_{\mu-\beta}[\text{Cos}[\theta]]$$

$$\mathbf{P}_{-\beta+\mu}[\text{Cos}[\theta]]$$

$$\Psi[\mathbf{r}, \theta, \varphi] = \mathbf{A} e^{i\beta[\varphi+2\pi]} \mathbf{P}_{\mu-\beta}[\text{Cos}[\theta]] \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2r\sqrt{2mEn}}{\hbar}}} J_{\mu+\frac{1}{2}} \text{BesselJ}\left[\frac{r\sqrt{2mEn}}{\hbar}\right]$$

BesselJ::argr : BesselJ called with 1 argument; 2 arguments are expected. More...

$$3.50397 \times 10^{-10} \mathbf{A} e^{i\beta[2\pi+\varphi]} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{En} r}} \text{BesselJ}[1.27938 \times 10^{19} \sqrt{En} r] J_{\frac{1}{2}+\mu} \mathbf{P}_{-\beta+\mu}[\text{Cos}[\theta]]$$

Para obtener el valor de la constante A, esta va a ser diferente para los diferentes valores de  $n, \beta, \mu$ . Entonces resolvemos la probabilidad la cual es igual a uno para cada caso y obtenemos la A para cada caso.

Obtenemos los polinomios de Legendre para  $\mu=0, \beta=0$

$$\Theta[\theta] = \mathbf{P}_{\mu-\beta}[\text{Cos}[\theta]]$$

$$\mathbf{P}_{-\beta+\mu}[\text{Cos}[\theta]]$$

$$\mathbf{P}_{\mu-\beta}[\text{Cos}[\theta]] = \text{TableForm}[\text{Table}[\text{LegendreP}[\mu - \beta, \text{Cos}[\theta]], \{\mu - \beta, 5\}]]$$

Table::write : Tag Plus in  $\mu - \beta$  is Protected. More...

$$\text{Table}[\text{LegendreP}[\mu - \beta, \text{Cos}[\theta]], \{\mu - \beta, 5\}]$$

$$\alpha = \mu - \beta$$

$$-\beta + \mu$$

$$P_\alpha [\text{Cos}[\theta]] = \text{TableForm}[\text{Table}[\text{LegendreP}[\alpha, \text{Cos}[\theta]], \{\alpha, 5\}]]$$

$$\text{Cos}[\theta]$$

$$-\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}$$

$$-\frac{3 \text{Cos}[\theta]}{2} + \frac{5 \text{Cos}[\theta]^3}{2}$$

$$\frac{3}{8} - \frac{15 \text{Cos}[\theta]^2}{4} + \frac{35 \text{Cos}[\theta]^4}{8}$$

$$\frac{15 \text{Cos}[\theta]}{8} - \frac{35 \text{Cos}[\theta]^3}{4} + \frac{63 \text{Cos}[\theta]^5}{8}$$

Para  $\beta = 0$  y  $\mu = 1$ ,  $\alpha = 1 \rightarrow \text{Cos}[\theta]$

$$P_1 [\text{Cos}[\theta]] = \text{Cos}[\theta]$$

$$\text{Cos}[\theta]$$

$$P_2 = -\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}$$

$$-\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}$$

$$\beta = 1$$

$$1$$

$$\mu = \beta + 1$$

$$2$$

$$\Psi[\mathbf{r}, \theta, \varphi]_{n,\mu,\beta} == \mathbf{A} e^{i\beta(\varphi+2\pi)} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2r\sqrt{2mE_n01}}{\hbar}}} \text{BesselJ}\left[0, \frac{r\sqrt{2mE_n\mu n}}{\hbar}\right] P_\alpha[\text{Cos}[\theta]]$$

$$\Psi[\mathbf{r}, \theta, \varphi]_{1,2,1} == \mathbf{A} e^{i\beta(\varphi+2\pi)} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2r\sqrt{2mE_n01}}{\hbar}}} \text{BesselJ}\left[0, \frac{r\sqrt{2mE_n01}}{\hbar}\right] P_2$$

$$\left(3.50397 \times 10^{-10} \mathbf{A} e^{i1[2\pi+\varphi]} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{E_n} r}} \text{BesselJ}[1.27938 \times 10^{19} \sqrt{E_n} r] \text{Cos}[\theta] J_{\frac{5}{2}}\right)_{1,2,1} ==$$

$$0.000514296 \mathbf{A} e^{i(2\pi+\varphi)} \sqrt{\frac{1}{r}} \text{BesselJ}[0, 5.93874 \times 10^6 r] \left(-\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}\right)$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^a \left(0.0005142956348249516 \cdot \mathbf{A} e^{i1[2\pi+\varphi]} \sqrt{\frac{1}{r}} \text{BesselJ}[0, 5.938738475595071 \cdot r]\right)$$

$$\left(-\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}\right) * \left(0.0005142956348249516 \cdot \mathbf{A} e^{-i1[2\pi+\varphi]} \sqrt{\frac{1}{r}}\right)$$

$$\text{BesselJ}[0, 5.938738475595071 \cdot r] \left(-\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2}\right) \right) dr d\theta d\varphi$$

$$-7.2385 \times 10^{-7} \mathbf{A}^2$$

La probabilidad es igual a uno por lo tanto;

`Solve[-7.238496963948072`*^-7 A^2 == 1, A]`

`{{A -> 0. - 1175.37 i}, {A -> 0. + 1175.37 i}}`

Graficamos;

`A = 1175.37`

1175.37

`r = a / 2`

$2.645 \times 10^{-7}$

`0.0005142956348249516` A e^{i (2 \pi + \varphi)} \sqrt{\frac{1}{r}} BesselJ[0, 5.938738475595071`*^6 r] \left( -\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2} \right)`

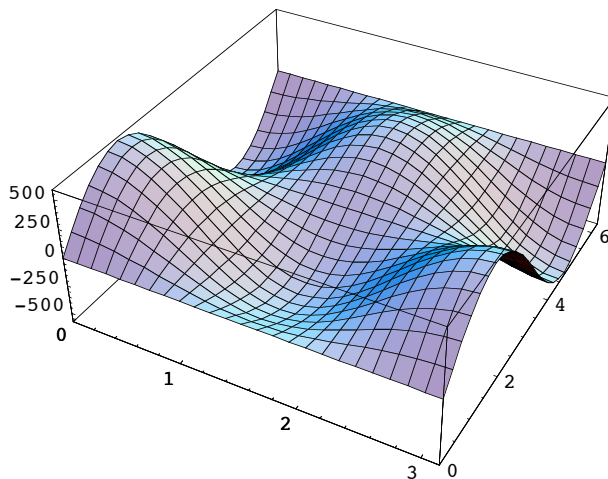
`554.776 e^{i (2 \pi + \varphi)} \left( -\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2} \right)`

Graficamos la parte real de la función de onda  $\Psi[r, \theta, \varphi]_{1,2,1}$ ,

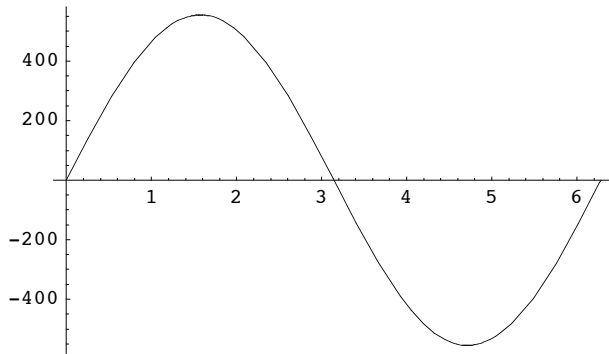
ya que no tendría sentido graficar la

imaginaria. Esta es la parte de los armónicos esféricos en  $r = a / 2$

`Plot3D[554.7760689775104` Sin[2 \pi + \varphi] \left( -\frac{1}{2} + \frac{3 \text{Cos}[\theta]^2}{2} \right), {\theta, 0, \pi}, {\varphi, 0, 2 \pi}];`

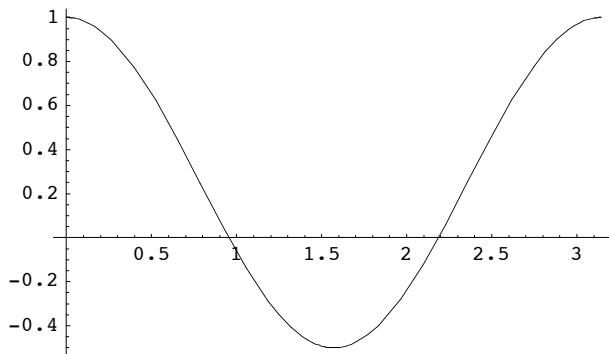


```
Plot[554.7760689775104` Sin[2 π + φ] , {φ, 0, 2 π}]
```



- Graphics -

```
Plot[ (-1/2 + (3 Cos[θ]^2)/2) , {θ, 0, π}]
```



- Graphics -

```
j0 = BesselJZeros[1/2 + #, 5] & /@ Range[0, 4]
```

```
{{3.14159, 6.28319, 9.42478, 12.5664, 15.708},
 {4.49341, 7.72525, 10.9041, 14.0662, 17.2208},
 {5.76346, 9.09501, 12.3229, 15.5146, 18.689},
 {6.98793, 10.4171, 13.698, 16.9236, 20.1218},
 {8.18256, 11.7049, 15.0397, 18.3013, 21.5254}}
```

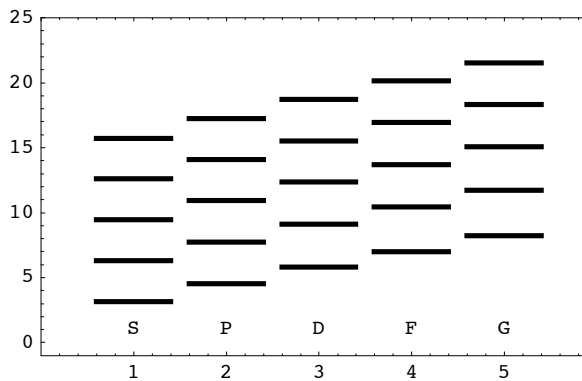
Para encontrar los eigenvalores de  $\mu$  se utilizan los valores de Bessel ceros para diferentes ondas. A continuación se grafican los valores de  $\mu$  para diferentes ondas.

```
TableForm[j0, TableSpacing -> 1,
  TableHeadings -> {"S-Wave", "P-Wave", "D-Wave", "F-Wave", "G-Wave"},
  {"First", "Second", "Third", "Fourth", "Fifth"}]
```

	First	Second	Third	Fourth	Fifth
S-Wave	3.14159	6.28319	9.42478	12.5664	15.708
P-Wave	4.49341	7.72525	10.9041	14.0662	17.2208
D-Wave	5.76346	9.09501	12.3229	15.5146	18.689
F-Wave	6.98793	10.4171	13.698	16.9236	20.1218
G-Wave	8.18256	11.7049	15.0397	18.3013	21.5254

```
levels = Table[{{i - 0.4, j0[[i, j]]}, {i + 0.4, j0[[i, j]]}},
  {i, 1, Length[j0]}, {j, 1, Length[j0[[1]]]}];
```

```
Show[{Graphics[{Thickness[0.01], Map[Line, levels, {2}]}], Graphics[Text["S", {1, 1}]],
  Graphics[Text["P", {2, 1}]], Graphics[Text["D", {3, 1}]], Graphics[Text["F", {4, 1}]],
  Graphics[Text["G", {5, 1}]]}, Frame -> True, PlotRange -> {{0, 5.9}, {-1, 25}}];
```



## Conclusion

A partir del tratamiento de Schrödinger se pueden asignar a un electrón tres números, que se conocen como números cuánticos:  $n$ , conocido como número cuántico principal, que puede ser cualquier número entero mayor que 0.  $l$ , que representa el momento angular orbital del electrón y que puede tomar valores enteros entre 0 y  $n-1$ . Finalmente,  $m$ , el número magnético orbital que puede tomar valores entre  $-l$  y  $l$ . Con estos números se llega a una aproximación del estado de un electrón. Sin embargo, es necesario tomar en cuenta otro número cuántico, el espín, cuyo concepto fue introducido por Uhlenbeck y Goudsmit en 1925 para explicar la división de las líneas espectrales cuando la fuente se colocaba en un campo magnético.

Al resolver la ecuación de Schrodinger para una partícula dentro de una esfera, obtuvimos tres eigenvalores cuantizados. Estos valores los nombramos como  $\beta$ ,  $\mu$  y  $E_n$ ; éstos valores son similares a los eigenvalores del átomo de hidrógeno, los cuales se nombran comúnmente como  $m_l$ ,  $l$  y  $n$ . Comparándolo con nuestros resultados los valores que obtuvimos de  $\beta$  son los de  $m_l$ , los de  $\mu$  son los de  $l$  y los de  $n$  son los de  $n$ .

El valor de  $\beta$  ( $m_l$ ) lo obtuvimos al resolver la eigenfunción en función de  $\varphi$ , el



cual es el número cuántico magnético. Estos valores dependen del valor de  $\mu (l)$ , y toma los valores de:

$$\beta = m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \pm l$$

El número cuántico  $\mu (l)$  se le llama el número cuántico orbital el cual se obtuvo de la solución de la ecuación de Legendre en función de  $\theta$ , éstos valores dependen del número cuántico  $n$  y toma los valores de :

$$\mu = l = 0, 1, 2, 3 \dots (n-1)$$

Finalmente el número cuántico  $n$  el cuál se le llama el número cuántico total. El cual toma los valores de 0 en adelante en números enteros. Este número le asigna el valor a la energía en ese estado cuántico el cual se da por la forma:

$$E_n = \left( \frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2 \frac{1}{2m}$$

Las diferentes funciones de onda dependen de éstos tres números cuánticos.