

*Lej. 2*

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO**  
**FACULTAD DE INGENIERIA**

---



**DETERMINACION DE LOS VALORES  
ENERGETICOS EN PARTICULAS  
CUANTICAS, A PARTIR DE  
FUNCIONES EIGEN  
( REPORTE )**

**T R A B A J O**  
**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE**  
**INGENIERO MECANICO ELECTRICISTA**  
**P R E S E N T A**  
**JOSE LUIS JAIME ALAMO PARRALES**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## Introducción

La finalidad de este trabajo, es mostrar algunas de las aplicaciones prácticas del álgebra lineal y de los métodos para la resolución de ecuaciones diferenciales lineales, debido a que fueron los dos temas sobre los que giró el curso de Matemáticas Aplicadas, acreditado en la División de Estudios Superiores de la Facultad de Ingeniería, como equivalente del seminario de la licenciatura de Ing. Mec. Electricista.

Dada la amplitud de los dos temas mencionados, decidí buscar un problema real que resumiera en alguna forma en su resolución, la mayor parte del curso de matemáticas.

La resolución de la ecuación de Schrödinger, me pareció un problema adecuado, por ser una ecuación diferencial lineal, de segundo grado, que además depende de dos o más variables.

Como la resolución planteada desde el punto de vista de los valores eigen o valores característicos, según se le quiera llamar lleva implícito el uso de operadores lineales que deben cumplir entre otras, con las condiciones de espacios vectoriales, el ejemplo viene a ser bastante ilustrativo de las definiciones del álgebra lineal.

Por otra parte, el hecho de interpretar las soluciones de la ecuación de Schrödinger como uno de los postulados fundamentales de la mecánica cuántica, brindaba la oportunidad de conocer algunos de los principios básicos de la misma. La importancia de este hecho en mi caso, estriba en que es la interpretación cuántica de innumerables fenómenos, ignorados hasta hace no mucho tiempo, la que está dando la pauta para el análisis y comprensión de los mismos.

Entre algunos de estos fenómenos, el de la fusión nuclear es el que representa en mi caso un particular interés, debido a los cambios que su total comprensión y aplicación práctica, deberá provocar en toda la sociedad humana, hecho que seguramente no tardará más de veinte años en ocurrir.

Uno de estos cambios , y que afectará directamente a los profesionales de la ingeniería, será el abandono de la dependencia del petróleo para la obtención de energía que tiene actualmente el mundo moderno, por el uso de la energía proveniente de la fusión atómica controlada.

De tal forma que si se toman como ciertos algunos de los últimos informes sobre los adelantos de la fusión atómica, entre ellos un artículo publicado por la revista Scientific American (Enero de 1979), los experimentos más prometedores para lograr una fusión controlada, darán comienzo alrededor de 1985, tanto en los EE.UU. como en la Unión Soviética.

Lo anterior se debe a que será en esas fechas cuando estén terminadas las pruebas de los gigantescos aceleradores de partículas, que por medio de haces de electrones, sean capaces de provocar la fusión atómica, en forma mas o menos controlada.

Del resultado de estos experimentos, dependerá que a finales de la próxima década empiezen a funcionar los primeros reactores de fusión, para la generación de energía eléctrica.

Hay quienes piensan que en México donde a duras penas se está tratando de poner a punto la primera planta nucleoelectrónica a base de Uranio, pensar en la construcción de reactores de fusión, es un sueño fuera de lugar y de tiempo.

Cierto es que aún para las grandes potencias, llegar a controlar la fusión nuclear, representa un reto que les esta obligando a utilizar todos los recursos humanos y materiales posibles, recursos que obviamente no estan disponibles en México. Si a esto sumamos el hecho de que para muchas personas, hablar de fusión nuclear no tiene aplicación práctica en México, debido a nuestras grandes reservas petroleras, creo que debo en mi defensa agregar algunos comentarios acerca de este particular interés en la fusión atómica.

Pienso por un lado que seguir utilizando los amplios recursos petroleros de que dispone el país , para quemarlos a fin de obtener energía, es un crimen que seguramente nos reprocharán las futuras generaciones.

El petróleo representa tantas posibilidades de aplicación en beneficio de los pueblos, que creo que basta con mencionar la opción de fabricar industrialmente en forma masiva las proteínas sintéticas que destinadas a nutrir hombres y animales, pueden acabar si bien no en forma ideal, si eficazmente con el hambre en los países subdesarrollados.

Esta sola posibilidad, debe bastar para invalidar el temor de que si las potencias industriales acaban con su dependencia del petróleo en materia energética, el petróleo pierda su valor y sea comprado en adelante a precios ínfimos.

En cuanto a la generación de energía en México, el hecho de que el país dependa en mas de un 80% del petróleo, significa que cuando los generadores eléctricos en base a la fusión nuclear empiezen a funcionar, nosotros deberemos estar ya encaminados a dejar de quemar petróleo y gas, o quedaremos rezagados peligrosamente, ya que la obtención de energía, con la única exclusión de la energía solar, va a requerir inversiones de capital cada vez mayores.

En forma opuesta, los reactores de fusión, tenderán a ser cada vez mas baratos, y su combustible deuterio y tritio son elementos baratos y de obtención relativamente fácil.

Por mi parte pienso si se quiere de una manera un poco cínica, que si los mexicanos no podemos desarrollar la tecnología de los reactores de fusión nuclear, por estar fuera de nuestras posibilidades económicas, y de recursos humanos, debemos al menos estar en condiciones de saber utilizar en beneficio propio los logros de otros países. Quiero decir con esto que no necesitamos tener un gran número de expertos en cada una de las especialidades que deberán concurrir en el diseño de un reactor, y si en cambio individuos enterados desde un punto de vista mas general de los principios y posibilidades de las tecnologías de fusión nuclear.

Esto permitirá ir adaptando la industria mexicana dentro de sus posibilidades a fin de que los pagos por concepto de tecnología y servicios sean lo menos oneroso posible, ya que es sabido que por no ser la previsión y planeación cualidades de nuestros dirigentes políticos en general, estos son muy dados a ordenar la compra de equipos industriales en el último momento, lo que trae como consecuencia adquirir lo que este disponible en el mercado en esos momentos. Los resultados son que en muchas ocasiones, los

equipos resultan poco adecuados y ademas costosos para el país.

El hecho de haber vivido personalmente de los problemas que ocasionan estas compras de pánico, en razón de que trabajé un tiempo en una empresa estatal, me dio el convencimiento de que si no modificamos la costumbre de esperar el último momento para resolver los problemas a los finalmente de un modo u otro deberemos enfrentarnos, nunca podra desarrollarse el país.

En este caso particular, el problema será utilizar la energía de fusión atómica, y las plantas o reactores, es seguro que no las van a construir los físicos.

## Antecedentes.

Los antecedentes históricos de la ecuación de Schrödinger, surgieron a partir del problema de radiación del cuerpo negro, cuya solución por medio de la teoría clásica de la radiación presentaba obstáculos infranqueables.

Así tenemos que según la termodinámica clásica, la potencia emisiva entre unidad de área, radiada por un cuerpo negro, está gobernada por la temperatura en la superficie del cuerpo, y se puede enunciar por la ley de Stefan-Boltzman, la que tiene la forma siguiente

$$E_r(T) = \sigma T^4 \quad \dots(1)$$

donde  $T$  es la temperatura en grados Kelvin y  $\sigma$  es una constante universal, que no depende de las paredes del cuerpo. La constante  $\sigma$  llamada de Stefan-Boltzman, tiene un valor determinado empíricamente de

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-15} \frac{\text{ergios}}{\text{cm}^2 \times \text{K}^4} \quad \dots(2)$$

La densidad de energía de la radiación, esta dada a su vez por la ley de Stefan-Boltzman por la relación

$$u = a T^4 \quad \dots(3)$$

donde

$$a = 7.56 \times 10^{-15} \frac{\text{ergios}}{\text{cm}^3 \times \text{K}^4}$$

Siguiendo con la teoría clásica de la termodinámica, la energía podía ser radiada por un espectro continuo de frecuencias, de tal modo que si llamamos a  $\rho(\omega)$  la densidad espectral del campo de radiación, y la definimos como:

$$\rho(\omega) = \frac{\delta u}{\delta \omega} \quad \dots(4)$$

Notamos que  $\rho$  depende de  $\omega$  que es la frecuencia, y de la temperatura  $T$ , y puesto que la densidad de energía  $u(\omega)$  posee componentes de todas las frecuencias,  $u(\omega)$  estará dada por la expresión

$$u(\omega) = \int_0^{\infty} \rho(\omega) d\omega \quad \dots(5)$$

Por otro lado el hecho de  $\rho(\omega)$  es independiente de la naturaleza de las paredes del cuerpo negro, permitió modelar las paredes por un conjunto de osciladores armónicos independientes que interaccionan con la radiación del campo.

Se llegó entonces a una expresión que relacionaba la energía media de un oscilador de frecuencia  $\omega$  con la densidad espectral de equilibrio a la temperatura  $T$  o sea

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{E}^t(\omega) \quad \dots(6)$$

Para un sistema en equilibrio, donde todos los osciladores tienen la misma energía, independientemente de la frecuencia, se puede substituir a  $\bar{E}^t(\omega)$  igualando las variables  $\bar{E} = \bar{E}^t(\omega)$  donde  $\bar{E}$  es el promedio temporal de energía por partícula y esta dada por la ecuación

$$\bar{E} = kT \quad \dots(7)$$

Al substituir  $\bar{E}$  por su valor anterior en  $\rho(\omega)$  obtenemos que

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2 kT}{\pi^2 c^3} \quad \dots(8)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann.

Para la definición de  $\rho(\omega)$  por la ecuación (8) conocida como la fórmula de Rayleigh-Jeans, los datos obtenidos experimentalmente, concordaron unicamente para frecuencias pequeñas, equivalentes a longitudes de onda de  $\lambda > 60,000 \text{ \AA}$

Sin embargo, una contradicción surgió cuando se trató de calcular la energía  $u(\omega)$  con la expresión (5)

Al hacer la substitución de  $\rho(\omega)$  por  $\frac{\omega^2 kT}{\pi^2 c^3}$ , resulta

$$u(\omega) = \int_0^{\infty} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT d\omega = \infty$$

Este resultado, es obviamente contradictorio con la ley de Stefan-Boltzman expresada por la ecuación (3).

Este problema pudo ser resuelto hasta el año de 1900 cuando Max Planck planteó el problema desde un punto de vista diferente, que partía de la hipótesis de que los osciladores en equilibrio podían contener energía unicamente en cantidades que fueran múltiplos enteros de un valor mínimo  $E_0$ , de tal modo que el valor de la energía sería  $E = nE_0$  para  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  y  $E_0$  podía depender de la frecuencia  $\omega$  pero no de la temperatura.

Así al calcular la energía de los osciladores a partir de dicha hipótesis se obtiene el valor medio

$$\bar{E} = \frac{E_0}{e^{E_0/kT} - 1}$$

para cada oscilador, de modo que al substituir

$$E = RT = \frac{E_0}{e^{\frac{E_0}{kT}} - 1}$$

se obtiene un valor

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{E_0}{e^{\frac{E_0}{kT}} - 1}$$

Planck escribió el resultado de manera que  $E_0$  dependiera de  $\omega$  o sea  $E_0 = \hbar \omega$  donde la constante  $\hbar$  fue determinada posteriormente. El asunto es que al substituir estos valores, tenemos que

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$$

con lo que el problema de la energía  $u(\omega)$  queda resuelto, pues

$$u(\omega) = \int \rho(\omega) d\omega = \int \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega = \frac{\pi^2 \hbar^4}{15 c^3 k^3} T^4$$

El resultado es consistente con la ley de Stefan-Boltzman ya que

$$a = \frac{\pi^2 \hbar^4}{15 c^3 k^3}$$

Dado que esta fórmula probó su validez al reproducir los resultados experimentales, el primer paso para la interpretación de muchos problemas pendientes, desde el punto de vista cuántico había sido dado.

Posteriormente Einstein repitió el éxito de la teoría cuántica al explicar el fenómeno fotoeléctrico utilizando el concepto de cuantos de energía, con lo que la interpretación de los fotones y moléculas en forma de paquetes de energía asociados con espectros discretos de frecuencia, se empezó a generalizar.

Dejare de lado otros antecedentes históricos a fin de no desviarme de objetivo, y abordaré un fenómeno que es el que dio origen a la ecuación de Schrödinger, la que representa el postulado fundamental de la mecánica cuántica.

Este experimento que fue durante mucho tiempo un experimento conceptual, ha sido ya llevado a cabo con diferentes variantes,

por varios investigadores. Yo me referire en particular, al que consiste en lanzar un haz de electrones hacia una pantalla donde donde es registrado de algún modo el contacto de los electrones con la pantalla, la que puede ser una placa fotográfica que impresione el choque. Si a mitad del camino entre la fuente de electrones y la pantalla antepone una placa que permita pasar a los electrones solo por una rendija, se observará que los electrones que lleguen a la placa fotográfica, inciden con un gran máximo central y una distribución de máximos y mínimos descendentes hacia los extremos. Ahora bien, si en lugar de una rendija se ponen varias mas, se verá que la distribución de máximos y mínimos en la placa que registra la llegada de los electrones, aumenta desproporcionadamente, formando una distribución netamente ondulatoria.

Este experimento es independiente de tiempo, ya que se obtiene el mismo efecto si los electrones son lanzados de uno en uno o todos a un tiempo, y dado que no se puede predecir hasta el momento en que lugar de la pantalla caerá cada electrón, se concluye que la distribución es estadística.

Debo aclarar sin embargo que esta interpretación estadística no es la más ortodoxa, ya que existen otros criterios que otorgan a los electrones una naturaleza dual mutuamente excluyente de onda y partícula, basados en fenómenos tales como el efecto Compton y el efecto fotoeléctrico. Yo por mi parte, adoptaré la interpretación estadística a fin de no ahondar en problemas de conceptos.

Hemos llegado así ante el problema de modelar una función que represente el comportamiento ondulatorio de los electrones, observado en el experimento que relatamos atrás, o bien por la naturaleza ondulatoria del electrón según el criterio más ortodoxo.

## Desarrollo de la ecuación de Schrödinger

La primera dificultad en modelar la función de onda, consiste en obtener una variable compleja a fin de poder representar los efectos de suma y resta de amplitudes, propios de una onda, provocados por la diferencia de fases en ondas que se superponen.

Dado que la característica de interferencia provocada por la diferencia de fases se observa en la distribución de electrones definida como  $\rho(x)$  y que esta distribución tiene que ser una función real, pues no podemos disminuir el número de partículas en un punto agregando partículas negativas, o sobreponiéndolas, tenemos que añadir algunas restricciones a la función compleja:

- 1.- Que satisfaga a una ecuación de onda
- 2.- Que el cuadrado de su módulo sea proporcional a la densidad de electrones.

Esta segunda condición la expresamos en la forma

$$\rho(x) \sim |\psi|^2 = \psi^* \psi$$

donde  $\psi$  es la variable compleja. La condición dos trae consigo la necesidad de establecer un factor de proporcionalidad que ha quedado fijado del siguiente modo, con el fin de facilitar los cálculos

- 1.-  $N$  = número total de partículas de la muestra en el sistema, que debe ser lo bastante grande para que incluya a todos los entes representativos. (teóricamente  $N$  es infinito)

$$2.- \quad N = \int \rho(x) dx = A \int |\psi|^2 dx$$

donde  $A$  es el factor de proporcionalidad.

$$3.- \quad \int |\psi|^2 dx = \frac{N}{A} = 1$$

la normalización a la unidad, es para simplificar las operaciones

$$4.- \quad \rho(x) = |\psi|^2$$

- 5.- Definiendo a la densidad relativa como

$$\rho_{rel} = \frac{\rho(x)}{N} = |\psi|^2 = \psi^* \psi$$

$$6.- \quad \int \rho_{rel} dx = 1$$

7.- Podemos entonces interpretar a la densidad relativa como la probabilidad de que una partícula determinada caiga en tal o cual punto, y a la integral  $\int \rho_{rel} dx$  como la seguridad de que la partícula caerá en algún punto de todo el espacio del sistema.

8.- Por facilidad se utiliza  $\rho_{rel}$  o simplemente  $\rho = \psi^* \psi$

Con los puntos anteriores, dejaré por aclarado aunque a groso modo, la manera como fue simplificada la relación de proporcionalidad entre  $\rho(x)$  y la variable compleja, función compleja, amplitud de probabilidad, función de onda o función de Schrödinger, que son algunos de los muchos nombres que recibe la función  $\psi$  de acuerdo a la interpretación que dan diferentes autores.

Diremos entonces que se ha llegado a la conclusión de que es necesario definir a la función  $\psi$  a fin de representar el comportamiento ondulatorio de los electrones. Se acepta además que  $\psi$  es en general una función compleja, pero ¿que forma debe tener dicha función?

Es sabido que una onda plana, llamada así porque solo presenta variación en una dirección espacial  $x$ , puede representarse por la expresión

$$e^{ikx - i\omega t} \quad \dots(9)$$

o bien

$$\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)$$

donde:

$t$  = tiempo

$\frac{2\pi}{\lambda} = k \equiv$  número de onda

$\lambda$  = longitud de onda

$\omega$  = velocidad angular

La velocidad de la luz en el vacío se da por  $c$  donde

$$c = \lambda v = \frac{\lambda \omega}{2\pi}$$

Por tanto la expresión (9) para una onda luminosa se puede escribir de la forma

$$e^{ik(x - ct)} \quad \dots(10)$$

Si se aplica ahora el principio de superposición a fin de obtener la representación de un haz luminoso o paquete de ondas planas, cuya amplitud sea una función  $g(k)$ , se obtiene la expresión

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ik(x-ct)} dk \quad \dots(11)$$

Conviene aquí aclarar algunas de las particularidades de la ecuación (11) que serán utilizadas posteriormente. Sea  $f(x)$  una función tal que podemos definir su transformada de Fourier por la expresión

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx = F(k) \quad \dots(12)$$

La siguiente expresión es una propiedad de la transformada de Fourier:

$$\mathcal{F}\{f(x-ct)\} = F(k) e^{-ikct}$$

Por tanto

$$\begin{aligned} f(x-ct) &= \mathcal{F}^{-1} \left\{ F(k) e^{-ikct} \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [F(k) e^{-ikct}] e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ik(x-ct)} dk \end{aligned}$$

Si sustituimos  $\frac{F(k)}{2\pi} = g(k)$

obtenemos la expresión

$$f(x-ct) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ik(x-ct)} dk \quad \dots(13)$$

la que se puede interpretar como un paquete de ondas que se propaga en el espacio sin distorsión y con la velocidad de la luz.

Se tratará entonces de aplicar el modelo de onda luminosa, a ondas que esten formadas por partículas, como sería el caso de los electrones. Puestos en este camino, la velocidad angular de las partículas es función de  $k$  o sea  $\omega(k)$ , ya que no es posible que  $\omega = kc$

Si definimos a  $p$  como el momentum de cada una de las partículas, el valor de la energía cinética de cada partícula estará dado por

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

donde  $m$  es la masa de la partícula.

A fin de relacionar los parámetros ondulatorios con los mecánicos, tenemos la relación de Planck  $E = \hbar\omega$ , donde  $\hbar$  es

igual al número de Planck dividido por  $2\pi$ . Haciendo a continuación las debidas substituciones algebraicas, encontramos que la onda debe cumplir las siguientes relaciones:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} \quad ; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad \dots(14)$$

Debe aclararse que en las expresiones anteriores, no hay modo de derivar de la física clásica la substitución del número de onda  $k$  por  $p/\hbar$  o de  $\omega$  por  $E/\hbar$  y solo se hace en este caso por consistencia. Volviendo a la función  $\omega(k)$ , tenemos de las expresiones (14) que:

$$\omega(k) = \frac{k^2 \hbar^2}{2m\hbar} = \frac{k^2 \hbar}{2m}$$

Substituyendo la función  $f(x,t)$  por  $\psi(x,t)$  y la amplitud  $g(k)$  por  $A(k)$  la ecuación (13) toma la forma

$$\psi(x,t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{ikx - \frac{k^2 \hbar}{2m} t} dk \quad \dots(15)$$

El cambio de límites en la integral se debe a que los impulsos de las partículas son finitos y se restringen al intervalo  $(k_1, k_2)$  y a que fuera de estos límites la onda es nula.

La ecuación (15) representa un paquete de ondas que evoluciona con el tiempo, pero dejaremos esta observación para más adelante, y seguiremos con la ecuación de Schrodinger.

Derivando la función  $\psi(x,t)$  con respecto al tiempo, obtenemos

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{ikx - \frac{k^2 \hbar}{2m} t} dk \right]$$

esto es:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \int_{k_1}^{k_2} -A(k) \frac{k^2 \hbar}{2m} e^{i(kx - \frac{k^2 \hbar}{2m} t)} dk$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{k_1}^{k_2} A(k) k^2 e^{i(kx - \frac{k^2 \hbar}{2m} t)} dk \quad \dots(16)$$

Por otra parte obteniendo la segunda derivada de  $\psi(x,t)$  con respecto a  $x$ , tenemos que

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = \int_{k_1}^{k_2} i^2 k^2 A(k) e^{i(kx - \frac{k^2 \hbar}{2m} t)} dk \quad \dots(17)$$

Multiplicando  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$  por  $i\hbar$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \int k^2 A(k) e^{i(kx - \frac{\hbar^2 k^2 t}{2m})} dk \quad \dots(18)$$

Además si se multiplica a

tenemos

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \text{ por } -\frac{\hbar^2}{2m}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \int k^2 A(k) e^{i(kx - \frac{\hbar^2 k^2 t}{2m})} dk \quad \dots(19)$$

comparando (18) y (19), tenemos que

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad \dots(20)$$

La ecuación (20), es la ecuación de Schrödinger para una partícula libre, y podemos generalizarla para el caso de la partícula que se mueve dentro de un potencial  $V(x)$ , en la forma siguiente:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x,t) \quad \dots(21)$$

La ecuación (21) es la forma completa de la ecuación de Schrödinger que nos proponemos resolver.

### Solución de la ecuación de Schrödinger

Recordemos primeramente, que la función de onda  $\psi(x,t)$  para la partícula libre, esta definida por la ecuación (15) o sea

$$\psi(x,t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{i(kx - \frac{\hbar^2 k^2 t}{2m})} dk$$

recordemos tambien que la energía cinética para una partícula está definida como  $E$  donde

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

donde  $p$  representa el momentum y  $m$  es la masa de la partícula, a su vez  $k$  fué definido por las ecuaciones (14) como

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

en consecuencia podemos substituir a  $-\frac{i\hbar^2 k^2}{2m} t$  en términos de la

energía o sea

$$\frac{-i\hbar^2 k^2}{2m} t = -\frac{iE}{\hbar} t \quad \dots(22)$$

con esto  $\psi(x,t)$  queda en la forma

$$\psi(x,t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{-i\frac{E}{\hbar}t + ikx} dk \quad \dots(23)$$

Derivando a con respecto al tiempo tenemos

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar} \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{-i\frac{E}{\hbar}t + ikx} dk \quad \dots(24)$$

Multiplicando despues a (24) por  $\hbar$  tenemos

$$\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hbar \frac{E}{\hbar} \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{-i\frac{E}{\hbar}t + ikx} dk = E \psi(x,t)$$

En consecuencia la ecuación (20) puede ser igualada en sus dos términos con  $E\psi(x,t)$  esto es:

$$\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = E \psi(x,t) \quad \dots(25)$$

La ecuación (25), no es sino la ecuación de Schrödinger para el caso de la partícula libre que ya había sido definida anteriormente. Generalizando ahora la ecuación (25) para el caso de la partícula que se mueve dentro de un potencial  $V(x)$ , obtenemos nuevamente la ecuación completa de Schrödinger que hemos de resolver.

$$\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x,t) = E \psi(x,t) \quad \dots(26)$$

Podemos suponer ahora que la función  $\psi(x,t)$  es separable, esto es que se puede escribir a  $\psi$  como un producto de una función de  $x$  y una función de  $t$ :

$$\psi(x,t) = \phi(x) \zeta(t) \quad \dots(28)$$

Podemos entonces, obtener dos ecuaciones distintas a partir de la ecuación (26):

$$\hbar \phi(x) \frac{d\zeta(t)}{dt} = E \phi(x) \zeta(t) \quad \dots(28)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \phi(x) \right] \zeta(t) = E \phi(x) \zeta(t) \quad \dots(29)$$

Dividiendo a la ecuación (28) por  $\phi(x)$  y simplificando

$$\frac{d\zeta(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E \zeta(t) \quad \dots(30)$$

La solución de la ecuación (28) la obtenemos a continuación integrando

$$\frac{d\zeta(t)}{\zeta(t)} = -\frac{i}{\hbar} E dt$$

$$\ln \zeta(t) = -\frac{i}{\hbar} E t + C_1$$

por tanto

$$\xi(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} + e^{c_1}$$

$$\xi(t) = c e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad \dots(31)$$

Volviendo ahora a la ecuación (29), podemos simplificarla como

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \phi(x) = E \phi(x)$$

o bien

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \phi(x) = E \phi(x) \quad \dots(32)$$

donde  $\nabla^2$  representa el Laplaciano en una dimensión

$$\nabla^2 \equiv \frac{d^2}{dx^2}$$

La ecuación (32) es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Definimos al operador L como

$$L = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \quad \dots(33)$$

El operador L es lineal (Ver apéndice) y en consecuencia la ecuación (32) puede ahora tomar la forma

$$L \phi(x) = E \phi(x)$$

o bien

$$L \phi(x) = \lambda \phi(x) \quad \dots(34)$$

de modo que podemos identificar a la ecuación (34) como un problema de valores y funciones eigen asociados a la transformación lineal L

Viene entonces al caso definir a las funciones y valores eigen:

Si V es un espacio vectorial sobre un campo K y dada una transformación lineal T de V en V. Un vector  $v_0 \neq 0$  de V es llamado un vector eigen si existe una escalar  $\lambda$  en K tal que  $Tv_0 = \lambda v_0$

en cuyo caso  $\lambda$  es llamado un valor eigen de T.

Al aplicar la definición anterior a la ecuación (34), hemos considerado a la función  $\phi(x)$  como un elemento de un espacio vectorial  $\mathcal{F}(x)$ . Los valores eigen por su parte deberán corresponder a valores de los estados permisibles de energía E para un problema específico. Aunque de momento, solo es posible observar en la ecuación (34) que los valores de  $\lambda$  pueden ser discretos o continuos.

A continuación se enumeran tres de las principales propiedades de las funciones eigen, que son de importancia para la solución de la ecuación (34).

- 1) Un conjunto  $\{\phi_n(x)\}$  de funciones eigen asociadas a n valores diferentes de  $\lambda_n$  es linealmente independiente.
- 2) El conjunto de funciones  $\{\phi_n(x)\}$  es ortonormal.
- 3) El conjunto  $\{\phi_n(x)\}$  es completo.

Podemos anotar como consecuencia de los tres puntos anteriores, que cualquier función  $\phi(\cdot)$  puede desarrollarse en la forma.

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x)$$

donde

$$a_n = \int \phi(x) \phi_n(x) dx \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

Luego

$$\psi(x, t) = \xi(t) \phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \phi_n(x) \quad \dots (35)$$

representa la solución general de la ecuación (26).

A continuación efectuaremos la demostración de las tres propiedades de las funciones eigen enumeradas anteriormente.

Iniciaremos con la demostración de independencia lineal de las funciones:

Supongase que  $\{\phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_n(x)\}$  son funciones eigen de la transformación  $L$ , asociada a los valores  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  respectivamente, asumiendo que  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  son distintos.

Si el conjunto  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\}$  no es linealmente independiente, existirá un número  $j$  tal que  $j < n$ , de modo que  $j$  es igual al número máximo de vectores independientes, en tal caso existe un conjunto

$\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_j\}$  linealmente independiente, pero el conjunto  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_j, \phi_{j+1}\}$  es dependiente, lo que significa la existencia de unas constantes  $c_1, c_2, \dots, c_j$  no todas iguales a cero, de modo que:

$$i) \quad \phi_{j+1} = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 + \dots + c_j \phi_j$$

luego

$$ii) \quad L \phi_{j+1} = c_1 L \phi_1 + c_2 L \phi_2 + \dots + c_j L \phi_j$$

o bien por tratarse de funciones eigen

$$iii) \quad \lambda_{j+1} \phi_{j+1} = c_1 \lambda_1 \phi_1 + c_2 \lambda_2 \phi_2 + \dots + c_j \lambda_j \phi_j$$

Substituyendo en (iii) a  $\phi_{j+1}$  por la expresión dada en (i), vemos que :

$$iv) \quad \lambda_{j+1} \phi_{j+1} = \lambda_{j+1} (c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 + \dots + c_j \phi_j)$$

restando ahora (iii) a (iv)

$$(\lambda_{j+1} \phi_{j+1}) - (\lambda_{j+1} \phi_{j+1}) = 0 = (\lambda_{j+1} - \lambda_1) c_1 \phi_1 + (\lambda_{j+1} - \lambda_2) c_2 \phi_2 + \dots + (\lambda_{j+1} - \lambda_j) c_j \phi_j$$

Pero como los valores  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_j$  son distintos, los

$$(\lambda_{j+1} - \lambda_1), (\lambda_{j+1} - \lambda_2), \dots, (\lambda_{j+1} - \lambda_j)$$

no pueden ser todos iguales a cero, el conjunto  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_j\}$

resulta dependiente, lo cual es una contradicción. Concluimos entonces que el conjunto  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\}$  es independiente.

Ortogonalidad de las funciones eigen de la ecuación de Schrödinger.

Decimos que un conjunto de funciones  $\{\phi_n\}$  definidas en el intervalo  $(a,b)$  es ortogonal si cumple con la condición

$$\int_a^b \phi_n(x) \phi_m(x) dx = 0 \quad \text{si } n \neq m \text{ para } n = 1, 2, \dots$$

Escribiendo entonces la ecuación (32) para el estado  $n$ , tenemos que

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \phi_n(x) = E_n \phi_n(x)$$

o bien

$$\nabla^2 \phi_n(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \phi_n(x) = 0 \quad \dots(36)$$

La ecuación para un estado  $m$ , sera entonces

$$\nabla^2 \phi_m(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_m - V(x)) \phi_m(x) = 0 \quad \dots(37)$$

Luego multiplicando a (36) por  $\phi_m$  y a (37) por  $\phi_n$  y restando despues los resultados tenemos :

$$\phi_m \nabla^2 \phi_n - \phi_n \nabla^2 \phi_m + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_m) \phi_n \phi_m = 0 \quad \dots(38)$$

Integrando ahora la ecuación (38)

$$\int_a^b [\phi_m \nabla^2 \phi_n - \phi_n \nabla^2 \phi_m] dx + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_m) \int_a^b \phi_n \phi_m dx = 0 \quad \dots(39)$$

La primera integral se puede substituir por

$$\int_a^b \frac{d}{dx} \left[ \phi_m \frac{d\phi_n}{dx} - \phi_n \frac{d\phi_m}{dx} \right] dx = \left[ \phi_m \frac{d\phi_n}{dx} - \phi_n \frac{d\phi_m}{dx} \right]_a^b \dots(40)$$

Si escogemos los límites de la integral  $(a,b)$  fuera de la región de definición de la función  $\phi_n$ , la ecuación (40) se anula siempre.

La ecuación (39) se ha reducido entonces a

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E_n - E_m] \int_a^b \phi_m \phi_n dx = 0$$

Donde si  $n = m$ ,  $(E_n - E_m) = 0$  por tanto la función se anula.

Para  $n \neq m$ , la integral es cero necesariamente.

Luego la condición de ortogonalidad se cumple.

Decimos ahora que un conjunto de funciones es ortonormal si:

$$a) \int_a^b \phi_n \phi_m dx = 0 \quad \text{para } n \neq m$$

$$b) \int_a^b \phi_n \phi_n dx = 1 \quad \text{para } n = m$$

La condición a) fue demostrada previamente, y dado que la función  $\phi(x)$  está normalizada a la unidad desde un principio por la ecuación (6), de modo que

$$\int_a^b |\phi(x)|^2 dx = 1$$

Decimos que las funciones  $\phi(x)$  son ortonormales.

Se dice que un conjunto de funciones ortonormales  $\{\phi_n(x)\}$  es completo, si no existe función  $f(x)$  alguna tal que

$$\int_a^b f(x) \phi_i(x) dx = 0 \quad \text{para toda } i = 1, 2, \dots, n$$

Trataremos de demostrar entonces que el conjunto de funciones eigen  $\{\phi_n(x)\}$  que es solución de la ecuación de Schrödinger es completo.

Suponemos entonces que existe alguna función  $f(x)$  que no pertenece al conjunto ortonormal  $\{\phi_n(x)\}$  y que es solución de la ecuación de Schrödinger para algún valor  $E_f$  de la energía. Luego como solamente tenemos  $n$  valores permisibles de la energía para un problema específico de la ecuación de Schrödinger, hemos asociado por definición de valores eigen una función  $\phi_i$  para cada valor  $E_i$ . De aquí resulta que el valor  $E_f$  es igual a algún valor  $E_i$  de energía, cuya solución es  $\phi_i(x)$ , de modo que  $f(x)$  y  $\phi_i(x)$  son soluciones de un mismo valor  $E_i$ .

Las ecuaciones de Schrodinger correspondientes son:

$$E_i f(x) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] f(x) \quad \dots(i)$$

$$E_i \phi_i(x) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \phi_i(x) \quad \dots(ii)$$

Multiplicando a (i) por  $\phi_i(x)$  y a (ii) por  $f(x)$ , y restando despues tenemos:

$$E_i f(x) \phi_i(x) - E_i \phi_i(x) f(x) = 0 = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \phi_i f - \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_i + V \phi_i \right] f$$

luego

$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left[ \phi_i \frac{df}{dx} - f \frac{d\phi_i}{dx} \right]$$

integrando tenemos

$$\phi_i \frac{df}{dx} - f \frac{d\phi_i}{dx} = 0 \quad \dots(iii)$$

Ya que  $\phi_i \equiv \frac{d\phi_i}{dx} \equiv 0$  para  $x$  fuera del dominio,  $D = 0$

La ecuación (iii) puede quedar ahora como

$$\phi_i \frac{df}{dx} = f \frac{d\phi_i}{dx}$$

o bien

$$\frac{1}{f} \frac{df}{dx} = \frac{1}{\phi_i} \frac{d\phi_i}{dx}$$

... (iv)

Integrando (iv)

$$L_n f(x) = L_n \phi_i(x) + L_n c$$

Por tanto  $f(x) = c \phi_i(x)$

Finalmente

$$\int_a^b f(x) \phi_i(x) dx = c ; \text{ si } c \neq 0$$

$$\int_a^b f(x) \phi_i(x) dx \neq 0 \therefore \{\phi_n(x)\} \text{ es completo.}$$

Se ha demostrado que el conjunto de soluciones  $\{\phi_n(x)\}$  de la ecuación (34), cumple con las condiciones de independencia lineal, ortonormalidad y que forman un conjunto completo, como consecuencia la solución general de la ecuación de Schrodinger (26), está dada en términos de las funciones eigen por:

$$\psi(x,t) = \sum c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \phi_n(x) \quad \dots(41)$$

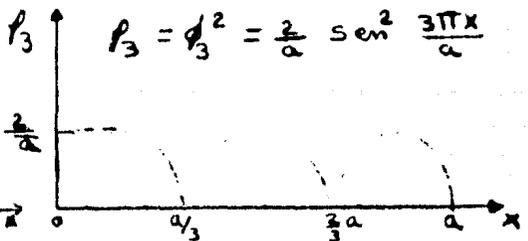
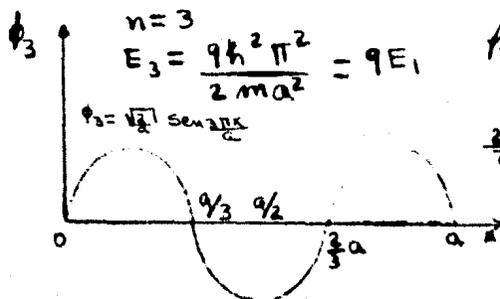
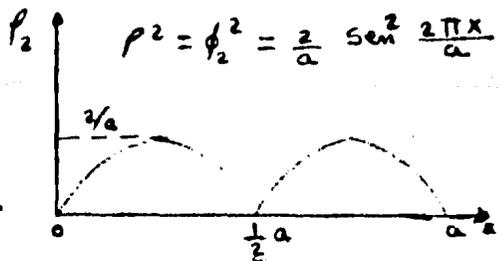
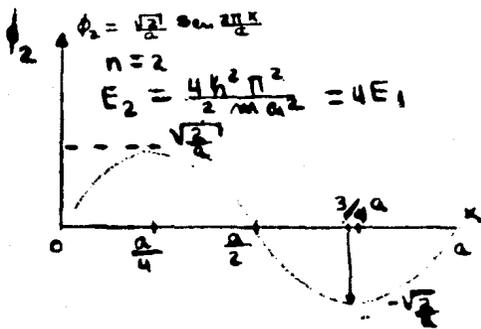
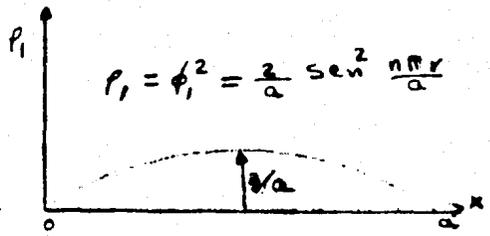
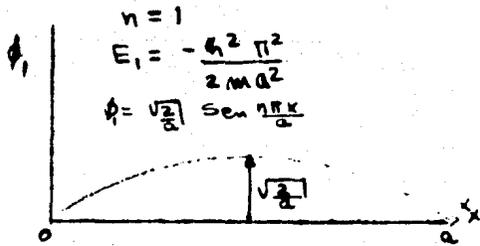
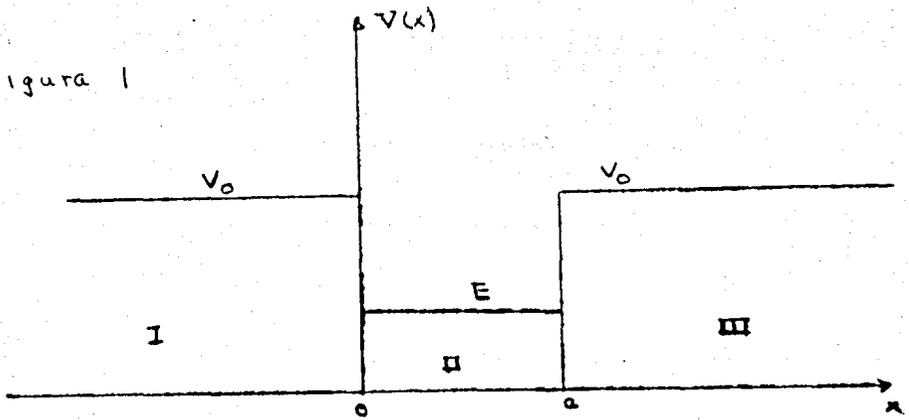
El paso siguiente, será entonces comprobar la validez de las soluciones para un problema específico. El primer problema por resolver, es clásico, y se refiere al caso de un electrón atrapado en un pozo de potencial.

Para esto se ha dividido el espacio  $x$  en tres regiones distintas, según puede observarse en la figura (1)

Región I  $x \leq 0$ ;  $E = 0$ ;  $V(x) = V_0$

Región II  $0 < x < a$ ;  $E < V_0$ ;  $V(x) = 0$

Figura 1



Región III  $x \geq a$  ;  $E = 0$  ;  $V(x) = V_0$

(Nota : El potencial  $V(x)$  para la región II se puede igualar a cero , en vista de que la energía total del electrón , es igual a la suma de su energía potencial  $V(x)$ , más la energía cinética, es decir:

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

Donde  $p$  es el momentum, y  $m$  la masa del electrón. Puede entonces moverse el marco de referencia del potencial  $V(x)$  hasta que

$$V(x) = 0 \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq a.$$

$$\text{Con esto} \quad E = \frac{p^2}{2m_0}$$

Volviendo ahora a la solución del problema, el método a seguir para resolver la ecuación en todo el espacio, consistirá en obtener la solución para cada región y después ligar las soluciones.

Para esto fijaremos inicialmente las condiciones de frontera de  $\phi(x)$

$$\phi(0) = 0 \quad ; \quad \phi(a) = 0$$

A continuación enumeramos las condiciones generales que debe cumplir la solución de una función de onda, para que el modelo sea físicamente válido:

- i)  $\phi(x)$  debe ser continua en toda la región de definición
- ii)  $\phi(x)$  debe cumplir con la condición de unicidad para cualquier punto.
- iii)  $\phi(x)$  debe ser cuadráticamente integrable, y más específicamente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$$

- iv)  $\phi(x)$  debe cumplir las condiciones de frontera del problema.

Podemos ya empezar la solución del problema, por la región II donde  $0 \leq x \leq a$ .

Sabemos ya que

$$k = \frac{p}{h} \quad , \quad \text{y} \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad , \quad \text{además} \quad V(x) = 0$$

De donde

$$k^2 = \frac{2mE}{h^2}$$

Es posible entonces que  $k^2$  sea positiva o negativa, dependiendo del valor de  $E$  ( $\dagger$ )

Usando ahora la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo.

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

Obtenemos

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \phi(x) = 0 \quad \dots(42)$$

Utilizando ahora  $k^2$  para el caso de  $E^-$ , obtenemos

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + k^2 \phi(x) = 0 \quad \dots(43)$$

La solución de la ecuación (43) es de la forma

$$\phi(x) = e^{kx} + e^{-kx}$$

Esta solución no cumple con las condiciones de frontera.

$$\phi(0) = \phi(a) = 0$$

Consecuentemente la energía debe ser positiva. Luego la solución de (43) es :

$$\phi(x) = A \cos kx + B \operatorname{sen} kx$$

Substituyendo en la frontera  $x = 0$  ; obtenemos que

$$\phi(0) = A = 0$$

Substituyendo ahora en  $x = a$

$$\phi(a) = B \operatorname{Sen} ka = 0$$

En tal caso la función se cumple solo si

$$ka = n\pi \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots$$

Luego

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad \dots(44)$$

de donde

$$k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{a^2}$$

Substituyendo a  $k^2$  en términos de la energía según se ha definido con anterioridad , obtenemos ahora :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{a^2}$$

Luego

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots \quad (45)$$

La expresión anterior, confirma que los valores E de la energía son discretos para el electrón en el pozo de potencial, de acuerdo a lo que se había supuesto en la teoría.

Si cambiamos ahora la constante B por  $A_n$ , expresamos a la función  $\phi_n(x)$  como

$$\phi_n(x) = A_n \operatorname{Sen} \frac{n\pi x}{a} \quad \text{para } 0 < x < a \quad \dots(46)$$

Determinaremos ahora la función  $\phi(x)$  fuera de los límites del pozo, donde  $x \leq 0$  ó  $x \geq a$ ;  $V(x) = V_0$ .

La ecuación de Schrodinger es entonces

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2 \cdot m}{\hbar^2} [E - V_0] \phi(x) = 0 \quad \dots(47)$$

Poniendo

$$q^2 = \frac{2 \cdot m}{\hbar^2} [V(x) - E]$$

la ecuación (47) se puede escribir

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} - q^2 \phi(x) = 0$$

La solución de esta ecuación es de la forma

$$\phi(x) = A_1 e^{qx} + B_1 e^{-qx}$$

Como la función debe ser acotada en todo punto, tenemos que para  $x < 0$ ,  $\phi(x)$  es acotada únicamente si  $B_1 = 0$ , por tanto

$$\phi(x) = A_1 e^{qx}; \text{ si } x \leq 0$$

Por otra parte para  $x > a$

$$\phi(x) = A_1 e^{qx} + B_1 e^{-qx}$$

es una función acotada únicamente si  $A_1 = 0$

Luego

$$\phi(x) = B_1 e^{-qx} \quad \text{para } x \geq a$$

Como la función  $\phi(x)$  debe ser continua por toda la región, y hemos obtenido

$$\phi(0) = 0 \quad \text{y} \quad \phi(a) = 0$$

de la ecuación (46), esto implica que  $A_1 = B_1 = 0$

Por tanto la función se anula fuera del pozo.

Consecuentemente la condición de ortonormalidad de la función  $\phi_n(x)$  que por pertenecer al conjunto  $\{\phi_n(x)\}$  debe cumplir con

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(x)|^2 dx = 1$$

se ha reducido a la ecuación

$$\int_0^a |A_n \text{Sen } \frac{n\pi x}{a}|^2 dx = 1$$

Pero  $\text{Sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 1 - \text{Cos} \frac{2n\pi x}{a}$

Substituyendo en la integral

$$\frac{A_n^2}{2} \int_0^a (1 - \text{Cos} \frac{2n\pi x}{a}) dx = 1$$

Luego

Por tanto  $\frac{A_n^2}{2} \left[ x \Big|_0^a - \frac{a}{2n\pi} \text{Sen} \frac{2n\pi x}{a} \Big|_0^a \right] = \frac{A_n^2 a}{2} = 1$

Luego

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{Sen} \frac{n\pi x}{a} \quad \dots(48)$$

Finalmente cualquier función  $\phi(x)$  esta dada por :

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \text{Sen} \frac{n\pi x}{a} \quad \text{para } 0 < x < a \dots(49)$$

Por tanto la solución general para la amplitud  $\psi(x,t)$  dada por la ecuación (35) es :

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= 0 \quad \text{para } x \leq 0 \\ \psi(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{\frac{-i\hbar \pi^2 n^2 t}{2ma^2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \text{Sen} \frac{n\pi x}{a} \quad \dots(50) \\ \psi(x,t) &= 0 \quad \text{para } x \geq a \end{aligned}$$

Se comprueba entonces que la función  $\phi(x)$  cumple con las condiciones de un modelo de onda físicamente válido. Esto es  $\phi(x)$  es continua en la región donde se ubica el electrón y se anula fuera de ella.

La función es única dentro y fuera del pozo, es integrable y cumple las condiciones de frontera.

Finalmente es posible obtener la distribución electrónica  $\rho(x)$  dentro del pozo. Para esto se han graficado en la figura num. 2 diversos valores de energía con sus correspondientes funciones  $\phi(x)$  y las respectivas distribuciones electrónicas  $\rho(x)$  donde

$$\rho(x) \equiv \psi^* \cdot \psi = |\phi(x)|^2$$

Puede observarse en la grafica de  $\rho(x)$  que la distribución en los límites del pozo es cero, esto concuerda con la realidad, debido a la repulsión de las cargas eléctricas.

Igualmente puede observarse que para estados de energía altamente excitados, la distribución electrónica tiende a ser continua.

Resolveremos ahora el problema cuántico de la partícula libre más simple:

Si bien para este caso particular se tiene ya la solución más general que es :

$$\psi(x,t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{-i\frac{E}{\hbar}t + ikx} dk \quad \dots(51)$$

donde  $\psi(x,t)$  representa un paquete de ondas, obtener la función arbitraria  $A(k)$ , representa en general un problema matemático de cierta dificultad para el cálculo de la función, ya que implica un análisis de Fourier como puede observarse a continuación :

Supongamos que las partículas tienen ya una distribución inicial para una amplitud  $\psi_0(x,t)$  en  $t=0$

Debe luego determinarse la amplitud  $\psi(x,t)$  para  $t > 0$

Podemos obtener inicialmente  $\psi(x,0) = \psi_0(x)$  a partir de la ecuación (51) esto es :

$$\psi_0(x) = \int A(k) e^{ikx} dk$$

Por tanto  $A(k)$  es igual a la transformada de Fourier de  $\psi_0$  o sea :

$$A(k) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_0 e^{-ikx} dx$$

luego

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int \left[ \int \psi_0 e^{-ikx} dx \right] e^{-i\frac{E}{\hbar}t + ikx} dk \quad \dots(52)$$

La solución de la ecuación (52) puede obtenerse utilizando el llamado propagador de la función, que matemáticamente es una función de Green.

Puede sin embargo observarse a simple vista, que la solución de la ecuación (52) es en general bastante más complicada que la resolución de la ecuación de Schrödinger para el mismo caso de la partícula libre. Esta es la razón por la que siempre que es posible se prefiere utilizar la ecuación de Schrödinger, aunque no deja de tener sus complicaciones, como veremos más adelante.

La ecuación de Schrödinger para una partícula libre es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = E \psi(x,t) \quad \dots(53)$$

donde  $\psi(x,t) = \phi(x)\xi(t)$

luego

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \quad \dots(54)$$

Puesto que  $k \equiv \frac{p}{\hbar}$  tenemos

$$k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \dots(55)$$

Luego

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + k^2 \phi(x) = 0 \quad \dots(56)$$

La solución general de (56) es de la forma

$$\phi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} \quad \dots(57)$$

Sabemos por la ecuación 31 que

$$\xi(t) = c e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Por tanto la solución completa de (53) es :

$$\psi(x,t) = A e^{-i\frac{E}{\hbar}t + ikx} + B e^{-i\frac{E}{\hbar}t - ikx}$$

o bien

$$\psi(x,t) = A e^{-i(\frac{E}{\hbar}t + kx)} + B e^{-i(\frac{E}{\hbar}t - kx)}$$

Podemos observar que los dos términos de  $\psi(x,t)$  representan a una onda plana que se propaga hacia la derecha en el caso del primer término, y hacia la izquierda para el segundo.

Si localizamos la onda exclusivamente para partículas moviéndose a la derecha, la constante B se anula, luego para  $B = 0$

$$\psi(x,t) = A e^{-i(\frac{E}{\hbar}t + kx)} \quad \dots(58)$$

Calculando ahora la densidad de distribución

$$\rho \equiv \psi^* \psi = |A|^2 \quad \dots(59)$$

Por tanto la densidad resulta igual a una constante, de modo que al integrar la densidad  $\rho$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty \quad \dots(60)$$

El resultado es ilógico para cualquier sistema finito, y es el resultado de haber sobresimplificado la función  $\psi(x,t)$  al facto-

rizarla, ya que hemos obtenido una distribución de partículas uniforme en el espacio, y constante en el tiempo.

El problema ha sido resuelto utilizando dos artificios que son las llamadas normalizaciones de Born y Dirac, por medio de las que se puede resolver el problema de la partícula libre sin resolver la ecuación más general.

El método de normalización de Born, consiste en suponer que la función  $\phi(x)$  es periódica, por tanto

$$\phi(x) = \phi(x + L)$$

donde el periodo  $L \rightarrow \infty$

De tal forma

$$\phi(x) = A e^{ikx} = A e^{ik(x+L)}$$

o bien

$$e^{ikx} = e^{ikx} e^{ikL}$$

De donde

$$e^{ikL} = \frac{e^{ikx}}{e^{ikx}} = 1$$

La ecuación anterior se cumple únicamente si

$$kL = 2\pi n \quad \text{para } n = 0, 1, 2, \dots$$

Tenemos entonces que

$$k = \frac{2\pi n}{L}$$

La condición para que  $\psi(x,t)$  sea cuadráticamente integrable, se cumple si

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = A^2 L = 1 \quad \dots(61)$$

$$\text{Finalmente } A = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad \dots(62)$$

utilizando

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{2\pi n}{L} x - i \frac{E}{\hbar} t}$$

Luego

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{2\pi n}{L} x} \quad \text{para } n = 0, 1, 2, \dots$$

Obtenemos a continuación el valor de la energía:

Para esto

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad ; \quad p = \hbar k$$

luego  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  ; substituyendo a  $k$  por el valor obtenido

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad ; \quad \text{para } n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n^2 \quad \dots(63)$$

Vemos que los valores de la energía continúan siendo discretos.  
Finalmente para un paquete de ondas

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{\frac{-iz\pi^2 \hbar n^2}{mL^2} t + \frac{iz\pi n x}{L}} \quad \dots(64)$$

Normalización de Dirac

Definimos inicialmente a la función impulso  $\delta(x)$

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x \neq 0 \\ \infty & \text{para } x = 0 \end{cases} ; \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = \int_{-\frac{\epsilon}{2}}^{\frac{\epsilon}{2}} \delta(x) dx = 1; \text{ para } \epsilon > 0$$

La función  $\delta(x)$  tiene además la propiedad de :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$

Utilizando las propiedades de la transformada de Fourier, la que esta definida como :

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

para toda función tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$$

Tenemos entonces

$$\mathcal{F}\{\delta(x)\} = F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = e^{-ikx} \Big|_{x=0} = 1$$

Definida la transformada inversa como

$$F^{-1}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

tenemos

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} 1 e^{ikx} dk$$

Y puesto que  $\mathcal{F}\{\delta(x-x_0)\} = F(k) e^{-ikx_0}$  es una propiedad de la transformada de Fourier, obtenemos

$$\mathcal{F}\{\delta(x-x_0)\} = 1 e^{-ikx_0}$$

luego

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} 1 e^{ik(x-x_0)} dk$$

... (65)

Volviendo ahora al resultado que hemos obtenido para la función de onda de la partícula libre:

$$\psi(x,t) = A e^{\frac{-iE}{\hbar} t + ikx} = f(t) \phi(x)$$

donde  $\phi(x) = A e^{ikx}$

como  $k = \frac{P}{\hbar}$  ; podemos llamar a  $\phi(x) = \phi_p(x) = A e^{\frac{iP}{\hbar} x}$

luego

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x) \phi_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{P-P'}{\hbar} x} dx$$

... (66)

donde  $p = p'$

o bien

$$|A|^2 k \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \frac{x}{k} (p-p')} dx$$

Utilizando ahora la ecuación (65) donde sustituimos a  $k$  por  $\frac{x}{k}$ ;

y  $x = p$ ;  $x_0 = p'$ . Tenemos:

$$2\pi k |A|^2 \delta(p-p') = k |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \frac{x}{k} (p-p')} dx$$

Luego 
$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x) \phi_{p'}(x) dx = \delta(p-p')$$

La constante  $A$  es arbitraria, por tanto simplificando al máximo

$$A^2 = \frac{1}{2\pi k}$$

finalmente

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x) \phi_{p'}(x) dx = \delta(p-p')$$

Que es un resultado que se puede manejar.

Tenemos entonces las soluciones finales que son:

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k}} e^{i \frac{p}{k} x}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k}} e^{-i \frac{E}{k} t + i \frac{p}{k} x}$$

La normalización de Dirac, es utilizada para el caso de espectros continuos, ya que  $E = \hbar \omega$

Luego

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k}} e^{-i \omega t + i \frac{p}{k} x}$$

Con el ejemplo de la partícula libre, damos por concluido este trabajo, esperando haber probado la utilidad de las funciones eigen para la solución de un problema físico importante, que si bien se ha resuelto en forma muy simplificada, puede ser tratado en una buena parte de sus formas más complejas utilizando los conceptos aquí desarrollados.

Debo añadir solamente que la teoría desarrollada se refiere exclusivamente a partículas no relativistas ya que se ha utilizado la definición no relativista de energía cinética:  $E = \frac{p^2}{2m}$ .

## Apéndice.

## Espacios vectoriales y transformaciones lineales.

**Definición :** un espacio vectorial  $V$  sobre un campo  $K$ , es un grupo aditivo conmutativo  $V$ , para el cual la multiplicación por un escalar está definido de forma tal que :

- 1.- Existe un elemento único  $cy$  en  $V$  para todo  $y \in V$  y todo  $c$  en el campo  $K$
- 2.- Para todo  $y$  en  $V$ , el elemento  $(-1)y$  es tal que  $y + (-1)y = \underline{0}$  donde  $\underline{0}$  es llamado el elemento idéntico aditivo del grupo, o más comunmente llamado el vector cero de  $V$
- 3.-  $c(\underline{u} + \underline{v}) = c\underline{u} + c\underline{v}$  para todo  $\underline{u}$  y  $\underline{v}$  en  $V$  y  $c$  en  $K$
- 4.-  $(a + b)\underline{v} = a\underline{v} + b\underline{v}$  para  $\underline{v}$  en  $V$  y  $a$  y  $b$  en  $K$
- 5.-  $(ab)\underline{v} = a(b\underline{v})$  para  $\underline{v}$  en  $V$  y  $a$  y  $b$  en  $K$
- 6.-  $1(\underline{v}) = \underline{v}$  para todo  $\underline{v}$  en  $V$

A los elementos de  $V$  se les llama vectores y a los elementos de  $K$  escalares.

Sí  $K = \mathbb{R}$  donde  $\mathbb{R}$  es el campo de los números reales,  $V$  es llamado un espacio vectorial real.

Sí  $K = \mathbb{C}$  donde  $\mathbb{C}$  es el campo de los números complejos,  $V$  es llamado un espacio vectorial complejo.

**Definición :** dados  $V$  y  $V'$  como dos espacios vectoriales sobre un campo  $K$ . Una transformación lineal, o mapeo lineal, u operador lineal de  $V$  dentro de  $V'$ , es un mapeo

$$\underline{T} : \underline{V} \rightarrow \underline{V}' \quad \text{tal que :}$$

- 1.- A cualquier elemento  $\underline{u}$  en  $V$ , se asocia un elemento único  $\underline{u}'$  en  $V'$  tal que  $\underline{u}' = \underline{T}(\underline{u})$
- 2.- Para cualquier  $\underline{u} \in V$  y  $c \in K$ 

$$\underline{T}(c\underline{u}) = c\underline{T}(\underline{u})$$
- 3.- Para cualesquier  $\underline{u}_1, \underline{u}_2 \in V$ ,  $\underline{T}(\underline{u}_1 + \underline{u}_2) = \underline{T}(\underline{u}_1) + \underline{T}(\underline{u}_2)$

Esto quiere decir que una transformación lineal, es un mapeo de

un espacio vectorial dentro de otro tal que la imagen de la suma de los vectores, es igual a la suma de las imágenes de cada vector, y la imagen de un múltiplo de un vector, es igual al múltiplo de la imagen del vector.

Se aplicarán ahora los conceptos anteriores a la ecuación

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

La función  $\phi(x)$  puede considerarse como elemento de un espacio vectorial  $\Phi(x)$ , que es generado por el conjunto de soluciones independientes  $\{\phi_i(x)\}$  de la ecuación.

Puesto que el parámetro  $\frac{-\hbar^2}{2m}$ , y el potencial  $V(x)$  son valores

escalares reales siempre, podemos denominarlos  $c_1$  y  $c_2$  respectivamente, por tanto la ecuación (1) es:

$$c_1 \nabla^2 \phi(x) + c_2 \phi(x) = E \phi(x) \quad \dots(2)$$

Luego la ecuación (2) se puede escribir

$$c_1 \nabla^2 \phi(x) + c_2 \phi(x) = [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi(x)$$

Definimos la transformación  $L$  por

$$L \phi(x) \equiv [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi(x)$$

Donde  $L$  es un operador lineal como se demuestra a continuación:

1).- Si  $L \phi_1 = u_1$ ,  $u_1$  es un elemento único.

Sea entonces  $L \phi_1(x) = [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi_1(x) = u_1$

y  $L \phi_2(x) = [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi_2(x) = u_2$

donde  $\phi_i(x)$  es la misma función para los dos casos.

Luego

$$u_1 - u_2 = [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi_1(x) - [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi_1(x) = 0$$

Por tanto

$u_1 = u_2$  que demuestra que  $u_1$  es única.

2).-  $L c \phi = c L \phi$ , para  $c \in \mathbb{R}$  y  $\phi$  en  $\Phi$

Luego  $L c \phi = [c_1 \nabla^2 + c_2] c \phi$

$$= [c(c_1 \nabla^2) + c(c_2)] \phi$$

$$\begin{aligned}
 &= c [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi \\
 &= c \underline{L} \phi \equiv \underline{L} c \phi
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 3).- \underline{L}(\phi_1 + \phi_2) &= \{ [c_1 \nabla^2 + c_2] (\phi_1 + \phi_2) \} \\
 &= \{ [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi_1 + [c_1 \nabla^2 + c_2] \phi_2 \} \\
 &= \underline{L} \phi_1 + \underline{L} \phi_2 \equiv \underline{L}(\phi_1 + \phi_2)
 \end{aligned}$$

Concluimos que el operador  $L = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right]$  es lineal, ya que se ha comprobado que cumple con las tres condiciones que definen a un operador lineal.

## Referencias bibliográficas

**Linear Algebra with Differential Equations**

**Bentley Cooke**

**Holt Rinehart.**

**Introducción a la Mecánica Cuántica**

**Luis de La Peña. CECSA**

**Quantum Physics**

**Stephen Gasiorowicz. Wiley Int.**

**Análisis de Fourier**

**Hwei P. Hsu . Fondo Educativo Int.**