

Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma de Madrid
Trabajo de Fin de Grado en Matemáticas

Física y matemáticas de la ecuación de Schrödinger

Silvia Rodriguez de Munck



Fecha:5 de junio de 2017
Curso académico 2016-2017

Director del trabajo:
Fernando Chamizo

Abstract:

On this work, we are going to study the Schrödinger's equation, which is one of the fundamental principles of quantum physics and studies the wave behavior of the particles in function of the position and time. Its 1D version is $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi$ where is very important the $|\Psi|^2$, because Ψ is normalized, it gives the probability density of detecting the particle at a given location. This discovery is part of the Copenhagen's interpretation.

To find solutions of the equation, we can use the method of separation of variables, which would give to us a formula for this equation independent of time $\Delta\Psi(x) + \frac{2m}{\hbar}(E - V(x))\Psi(x) = 0$ which can be very useful for the study of particular cases. As for the finite potential well that is based on the capacity of the particles "to cross" a barrier without having "enough" energy although it does so with an infinitesimal probability. This minimum probability of crossing walls is called tunnel effect, and has practical uses as for the microscopy of tunnel effect.

Other case studied is the one of the harmonic oscillator, similar to the simple harmonic oscillator of classical physics and very important on the quantum field theory, the present theory to explain elementary particles.

Our last objective is to solve the Schrodinger's equation for the hydrogen atom electron in which an electric force is exerted between proton and electron. We will use the spherical harmonics, the eigenfunctions of the Laplace-Beltrami operator on the sphere to get his wave functions, which give a meaning to the orbitals.

Introducción:

Hasta finales del siglo XIX se pensaba que la física clásica podía resolver cualquier problema, pero fue entonces cuando varios resultados experimentales revolucionaron el mundo de la física al comenzar a ver similitudes entre el comportamiento de las ondas y las partículas.

Las primeras sospechas de esta relación se produjeron al estudiar el espectro de luz emitido por el cuerpo negro, ya que no se conseguía dar una explicación para toda la gama de frecuencias si se basaban en los conceptos de la física clásica. Fue Max Planck quien consiguió aproximarse más a una solución de esto dando comienzo a las primeras ideas de la física cuántica: parte de la energía de la luz podía intercambiarse con la materia, es decir la luz debía “tener algo de materia” y solo se puede emitir una cantidad múltiplo de h , ahora llamada constante de Plank, de lo que surge la cuantización de la energía de toda oscilación.

Otro de los motivos fue el efecto fotoeléctrico, cuyo experimento consistió en emitir rayos de luz contra metal lo que les llevó a ver que este emitía electrones, que de nuevo solo se podía explicar si la luz toma algunas propiedades de la materia. Esto llevó a Einstein a postular que la energía de las oscilaciones de la luz están cuantizadas, y llamar fotones a estas unidades discretas.

También tenemos el efecto Compton que surgió al proyectar un haz de luz con longitud de onda λ en un electrón y ver que este se dispersaba cambiando su longitud a $\lambda + \Delta\lambda$, es decir aumenta la longitud de onda, por lo que se dispersa con menor energía.

En estos descubrimientos también se dio el caso contrario, es decir, las partículas se comportaban en algunos aspectos como ondas, y eso fue teorizado por Louis Broglie en 1923, comparando el momento y el vector de posición de un fotón con el de las partículas por lo que se comenzó a hablar de ondas de materia.

Como podemos ver hay fenómenos en los que diríamos que las partículas son ondas pero otros en los que diríamos que las ondas son partículas, en esto consiste la dualidad onda-corpúsculo.

Así en física cuántica, a diferencia de en la clásica no todo se puede medir con unas medidas exactas, y en esto se inspiró Werner Heisenberg en 1927 para llegar al principio de incertidumbre.

Esta fue la base para que Schrödinger llegara a la función de onda $\Psi(x, t)$ de una partícula dando su amplitud en función de la posición y el tiempo y no su intensidad que coincide con la densidad de probabilidad de esta y de la que ya hablaremos a lo largo de las siguientes secciones.

Todo ello culminó en la llamada interpretación de Copenhague, formulada por el físico Niels Bohr en 1927 y en la que contribuyeron notablemente otros físicos como Max Born y Werner Heisenberg. Esta consta de varios resultados importantes como el colapso de la función de onda y el principio de incertidumbre, de los que hablaré brevemente a continuación.

Como ya veremos mas adelante una onda Ψ se puede escribir como una superposición de ondas Ψ_n con energía E_n e intensidad c_n a grosso modo el colapso de función de onda nos dice que en el momento que medimos la energía de una de estas ondas solo podremos medirla para un E_n concreto de un Ψ_n con una probabilidad c_n ya que la onda colapsará en ella inmediatamente tras la medición.

Esto mismo pasaría al medir el momento y la posición lo que nos hace imposible conocer ambos valores en el mismo tiempo y esto se conoce como el principio de la incertidumbre.

Índice

1. Orígenes de la ecuación de Schrödinger.	1
2. Conservación de la probabilidad y otras propiedades.	5
3. La partícula libre.	8
4. Pozo de potencial finito.	13
5. El oscilador armónico	20
6. Armónicos esféricos.	25
7. El átomo de hidrógeno.	28

1. Orígenes de la ecuación de Schrödinger.

A principios del siglo XX hubo un cambio en la visión de las partículas, estas, que siempre se habían visto como algo fijo empezaron a verse como ondas muy concentradas en el espacio, tanto que no podemos percibir su movimiento. La ecuación de Schrödinger es uno de los principios fundamentales de esta “nueva física”, pero para llegar a ella debemos partir de algunos conceptos más básicos.

Como los experimentos llevaron a que las partículas tienen un comportamiento ondulatorio empezaremos su estudio partiendo de la onda básica en una dimensión, $\varphi = e^{i(px-Et)/\hbar}$, siendo x espacio, t tiempo, $\hbar = h/2\pi$ la constante de Planck normalizada, p el momento lineal y E la energía. Como podemos observar esta ecuación junta dos fórmulas importantes en la física $p = h/\lambda$ (λ longitud de onda), que dio Broglie y que ya comentaré mas tarde, y $E = h\nu$ (ν frecuencia) a la que se llegó observando que cuando una onda electromagnética incide sobre un electrón cambia su energía proporcionalmente a la frecuencia.

La ecuación de ondas asociada a cada partícula será $\Psi = \Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar}$ que es superposición de ondas básicas que cumplirán la conservación de la energía $E = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V$ (V energía potencial). Así llegó a la ecuación [Sch26]:

$$(1) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad \text{en una dimension espacial}$$

que la cumple toda onda básica, así que, al ser lineal, una combinación de ellas también la cumplirá. Para ver que lo cumple vamos a derivar $\Psi(x, t)$:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2}mv^2 + V \right)$$

si metemos estos en la ecuación nos queda:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} = -\frac{m^2 v^2}{\hbar^2}$$

que es realmente el valor de $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$, por lo que cumple lo que queríamos.

En 3 dimensiones sería:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi$$

Una observación importante es que lo que realmente nos importa estudiar es $|\Psi|^2$, esto es porque esta relacionado con la probabilidad de detectar una onda en un punto. Y esto tiene dos consecuencias que nos interesan. La primera, no importa que la ecuación tenga valores complejos, y la segunda, dos ondas con $F = -\nabla V = -\nabla(V + cte)$ se comportan de la misma manera ya que $|\Psi|^2$ sera el mismo.

Vamos a ver la construcción de una función de ondas Ψ de una partícula de masa m sobre la que no actúan fuerzas en $x \in [0, 1]$ y hay paredes infranqueables en 0 y 1. Al no haber fuerzas actuando sobre la partícula toda la energía será cinética y la velocidad será constante, solo cambiara el sentido de la energía al chocar con 0 y 1 donde $\Psi(0, t) = \Psi(1, t) = 0$. Cada energía fijada tendrá dos posibles momentos $p_E = \sqrt{2mE}$ y $-p_E$ y una ecuación de onda asociada, superposición de ondas básicas $Ae^{i(p_Ex - Et)/\hbar} + Be^{i(-p_Ex - Et)/\hbar}$ que tendrán que cumplir las condiciones iniciales, por ello nos queda $A = -B$, $p_n = n\pi\hbar$, $E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m} \forall n \in \mathbb{N}$.

Ahora la ecuación de la partícula que como ya sabemos es superposición de ondas será $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(t)$. Siendo $\Psi_n(t) = \frac{1}{2}(e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar} - e^{i(-p_n x - E_n t)/\hbar}) = i\sqrt{2} \sin(\pi n x) e^{-iE_n t/\hbar}$ la asociado a cada energía que cumple la ecuación de Schrödinger siendo $V = 0$. Como podemos ver, a diferencia del mundo clásico, las energías recorren un conjunto discreto de valores.

Vamos a continuar con el ejemplo comparándolo un poco con el álgebra lineal. Ψ que es una combinación lineal de los Ψ_n podemos verlo como el espacio generado por estos.

Sabemos que para que n vectores formen una base ortonormal deben cumplir dos propiedades respecto al producto escalar: $\langle \vec{a}_n, \vec{a}_m \rangle = 0$ si $n \neq m$ y $\langle \vec{a}_n, \vec{a}_n \rangle = 1$, siendo el producto escalar $\langle a, b \rangle = \sum_{i=1}^n a_i b_i$. Si tenemos una base de este tipo, podemos escribir cualquier vector \vec{v} como $\vec{v} = \sum \lambda_n \vec{a}_n$ donde $\lambda_n = \langle a_n, \vec{v} \rangle$.

Esto lo podemos extender a funciones, donde el producto escalar será $\langle f|g \rangle = \int_0^1 \bar{f}g$, y cumplirá las mismas propiedades. Por lo tanto con este producto tenemos que los Ψ_n forman una base ortonormal. Respecto a esta base $\Psi = (c_1, c_2, \dots)$ y $\langle \Psi, \Psi \rangle = \int_0^1 |\Psi|^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$, que no depende del tiempo.

Aplicando lo que hemos visto antes $c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle$ y como los c_n no dependen del tiempo lo podemos calcular con un t fijo, por ejemplo $t = 0$ que nos facilitara los cálculos. Así tenemos, con $\Psi(x, 0) = i\sqrt{2} \sin(\pi n x)$:

$$(2) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(t) \quad \text{con} \quad c_n = -i\sqrt{2} \int_0^1 \psi_0(s) \sin(\pi n x) dx \quad \text{y} \quad \psi_0 = \Psi(x, 0)$$

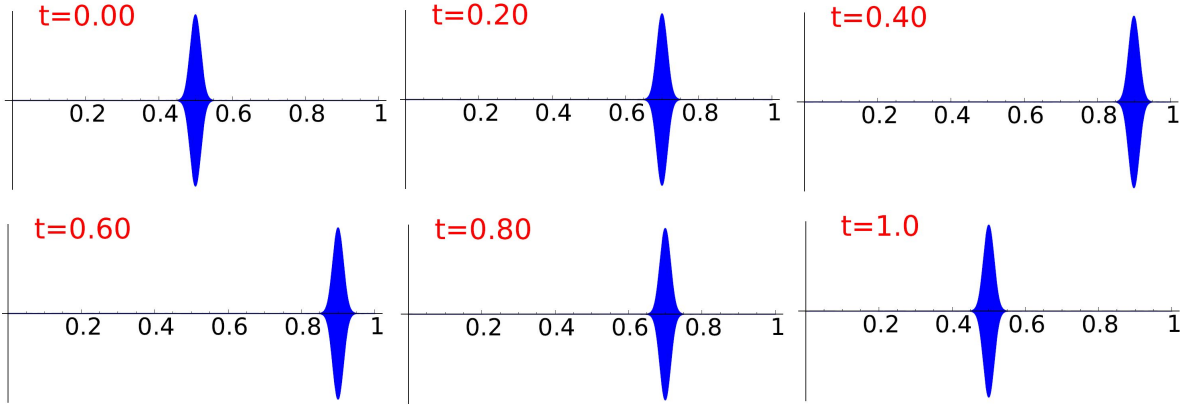
por lo que dada la onda inicial podemos hallar la función de onda en cualquier tiempo.

A continuación veremos la relación entre el mundo clásico y el cuántico, para ello daremos las condiciones iniciales necesarias para que se comporten de manera parecida.

Si quisiéramos que esta ecuación (2) nos de un resultado parecido al que tendríamos si tuviéramos una partícula en $x = 1/2$ $\Psi(x, t) \approx \psi_0(x)$ lo intentamos usando una onda inicial ψ_0 picuda suave, ya que para n grande el integrando oscila mucho y para c_n con n pequeño $e^{-iE_n t/\hbar}$ no oscila hasta que t es del orden de $m\hbar^{-1}$.

Lo siguiente que debemos pensar es que necesitamos para que los p_n se parezcan a los de una partícula en $x = 1/2$ masa 1 y velocidad 1 tendrá un momento lineal $p = 1$, y vemos que necesitamos $n\pi \approx \hbar^{-1}$. Para dar c_n podemos coger cualquier función $c_n = \Phi((n\pi - \hbar^{-1})/K)$ con Φ que decae fuera del origen. En este caso vamos a coger $c_n = e^{-((n\pi - \hbar^{-1})/100)^2}$ sustituyendo en (1) y cambiando $t = t + 1/2$ para que empiece en $x = 1/2$ nos da:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n\pi - \hbar^{-1})^2/10^4} \Psi_n(x, t + 1/2) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n\pi - \hbar^{-1})^2/10^4 - in^2\pi^2\hbar/4} \Psi_n(x, t)$$



Como se puede ver se comporta de manera similar a la partícula clásica, rebotando en la pared y volviendo al punto de partida en un segundo. Respecto a la mancha que se ve en vez de verse un punto se debe a que la partícula a la vez esta oscilando a gran velocidad.

Esto no es casualidad, lo que pasa es que los dos momentos p_n y $-p_n$ de Ψ_n hacen que la onda con el paso del tiempo se descomponga en dos partes, pero en nuestro caso una de ellas choca con $x = 0$ rebotando y así se vuelven a juntar y no vemos ninguna separación. Para ello hemos cogido c_n que se anulase en todo punto menos en cierto intervalo y hemos utilizado que la suma de $\sin(n\pi x)$ para N términos nos da un abultamiento

de anchura proporcional a N^{-1} que no depende de los N términos elegidos, estos solo influirán en la cantidad de oscilaciones.

Este caso particular para $m = 1$ y $v = 1$ lo podemos extender para cualquier partícula de masa m y velocidad v_0 partiendo de la misma idea, querremos $p_n \approx mv_0$ por lo que $c_n = \Phi\left(\frac{n\pi\hbar - mv_0}{K\hbar}\right)$ que decaiga fuera del origen y cambiando $t = t + t_0$ tal que $x_0 = v_0 t_0$. La ecuación general para esto será:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi\left(\frac{n\pi\hbar - mv_0}{K\hbar}\right) e^{-in^2\pi^2\hbar x_0/2mv_0} \Psi_n(x, t)$$

Otra manera de llegar a la ecuación algo mas similar a la de Schrödinger es partiendo de la ecuación de ondas $u_{tt} = v_p^2 u_{xx}$ con $v_p = \nu/k$

Not	Significado
ν	frecuencia
T	periodo(ν^{-1})
k	número de ondas
λ	longitud de onda(k^{-1})
v_p	velocidad de fase(ν/k)

En los albores de la física cuántica se modificó la interpretación electrodinámica de los átomos, ya que Bohr afirmó que el momento angular de los electrones al multiplicarlo por $2\pi/h$ siempre da un entero, así que el cambio de energía que debe haber para que un electrón pase de una órbita a otra debe ser lo suficientemente grande para que este producto llegue al siguiente entero.

Hay varios experimentos que motivaron a la física cuántica, como el efecto fotoeléctrico cuya solución fue que la luz esta compuesta por partículas sin masa y cada una tiene energía $E = h\nu$. Pero la hipótesis que triunfó fue la de Broglie que asoció una partícula en movimiento con momento lineal p con una longitud de onda: $\lambda = \frac{h}{p}$. Esto también se cumple para radiaciones electromagnéticas en la que $p = E/c$ $p = h\nu/v_p = h/\lambda$, por lo que esta en concordancia con la mecánica clásica. Esta fórmula junto a la de la ecuación de ondas tuvieron un importante papel en la construcción de la ecuación de Schrödinger que no se basa en principios fundamentales anteriores.

Sea $\Psi = \Psi(x, t)$ igual que en la anterior explicación la función de onda asociada a una partícula esperamos que sean superposiciones de ondas monocromáticas en frecuencia, por lo tanto que sean de la forma $\Psi(x, t) = \Phi(x)e(-\nu t)$, y se puede suponer que satisface la

ecuación de ondas:

$$\Psi_{tt} = v_p^2 \Psi_{xx} \implies \Phi'' + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \Phi \stackrel{p^2=(E-V(x))2m}{=} \Phi'' + \frac{8\pi^2}{h^2} m(E - V(x))\Phi = 0$$

$$\begin{cases} \Phi''(x) = \Psi_{xx} e(\nu t) \\ \Psi_t = -2\pi i E h^{-1} \Psi \\ \Phi = \Psi e(\nu t) \end{cases} \implies \frac{i\hbar}{2\pi} \Psi_t = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Psi_{xx} + V\Psi$$

Y así se llega de nuevo a la ecuación de Schrödinger.

2. Conservación de la probabilidad y otras propiedades.

Ya dada la ecuación de Schrödinger

$$(3) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi,$$

aun no se sabía lo que representaba Ψ exactamente, fue poco mas tarde cuando se vio su relación con la probabilidad. Como ya mencioné anteriormente lo que nos interesa es $|\Psi|^2$, esto es debido a que es lo que realmente podemos medir y que si tenemos Ψ normalizada es la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en un sitio determinado, es decir la probabilidad de que esté en $A \subset \mathbb{R}^3$ es $\int_A |\Psi|^2$. Este descubrimiento fue de gran importancia en el avance de la mecánica cuántica y parte de la interpretación de Copenhage.

Por ejemplo la probabilidad de hallar el electrón del átomo de hidrógeno en el estado fundamental, que tiene función de onda $\Psi(x, t) = \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-a\sqrt{x^2+y^2+z^2+ibt}}$, a distancia mayor que $10a^{-1}$ será:

$$\int_{10a^{-1}}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{a^3}{\pi} e^{-2ar} r^2 \sin(\sigma) d\sigma d\varphi dr = 4a^3 \int_{10a^{-1}}^{\infty} e^{-2ar} r^2 dr = 221e^{-20} = 4,5514 \cdot 10^{-7}$$

que es casi 0, esta probabilidad es la de encontrarlo 10 veces mas lejos de la posición en la que se debería encontrar según el modelo de Bohr.

Ahora podríamos plantearnos, si hemos normalizado Ψ en el instante inicial, ¿seguirá normalizado para todo t ? O lo que es lo mismo, ¿seguirá siendo una función de probabilidad? Esto sí es así:

Teorema 2.1. *Para toda Ψ solución de (3) $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x}$ no depende de t .*

Demostración. Suponemos que Ψ y sus derivadas parciales tienden a cero suficientemente rápido para que haya convergencia.

- Primero vamos a ver que :

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial(\Psi\bar{\Psi})}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{\Psi}\Delta\Psi - \Psi\Delta\bar{\Psi}) \\
\Leftrightarrow i\hbar\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\bar{\Psi} + \frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial t}\Psi\right) &\stackrel{(*)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{\Psi}\Delta\Psi - \Psi\Delta\bar{\Psi}) \\
(*)i\hbar\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial t} &= -i\hbar\overline{\frac{\partial\Psi}{\partial t}} = +\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\Psi} - V\bar{\Psi}
\end{aligned}$$

- Ahora dada la función vectorial $\vec{J} = \frac{\hbar i}{2m}(\bar{\Psi}\nabla\Psi - \Psi\nabla\bar{\Psi})$ podemos ver que todas sus coordenadas son reales, que es equivalente a ver que las de $\bar{\Psi}\nabla\Psi - \Psi\nabla\bar{\Psi}$ son imaginarias, y lo serán ya que es un complejo menos su conjugado.

Veamos que $\frac{\partial(\Psi\bar{\Psi})}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{J}$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \vec{J} &= \frac{\hbar i}{2m}(\nabla\bar{\Psi} \cdot \nabla\Psi + \bar{\Psi}\Delta\Psi - \nabla\Psi \cdot \nabla\bar{\Psi} - \Psi\Delta\bar{\Psi}) \\
\frac{\partial(\Psi\bar{\Psi})}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{i2m}(\bar{\Psi}\Delta\Psi - \Psi\Delta\bar{\Psi})
\end{aligned}$$

- Habiendo demostrado esto podemos integrar en la igualdad y aplicar el teorema de divergencia:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial(\Psi\bar{\Psi})}{\partial t} dx &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial|\Psi(x,t)|^2}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x,t)|^2 dx = \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot \vec{J} dx = \int_{\emptyset} \vec{J}\vec{n} dx = 0
\end{aligned}$$

Como la derivada respecto de t da 0 la función es constante en t , es decir, como queríamos demostrar no depende de t .

□

Un método muy utilizado para resolver EDP's es el de separación de variables, que consiste en buscar soluciones de la forma $X(x)T(t)$ y obtener el resto de soluciones como combinaciones de las de esta forma. Se usa por ejemplo para resolver la ecuación del calor y la de ondas. En la del calor si tenemos una barra de longitud L que sabemos que tiene en el tiempo inicial $u(0,t) = f(x)$ y queremos saber su temperatura en otro momento, podemos llegar medio la ley de enfriamiento de Newton a la ecuación $u_t - u_{xx} = 0$ $x \in (0, L)$ $u(0,t) = u(L,t) = 0$ y resolviéndola mediante separación de variables obtendremos que la solución es de la forma $\sum a_k e^{-(k\pi/L)^2 t} \sin((k\pi/L)x)$. Y la de ondas tiene forma $u_{tt} - u_{xx} = 0$ con condiciones

iniciales $u(x, 0) = f(x)$ $u_t(x, 0) = g(x)$ $u(0, t) = u(L, t)$ y tendría una solución de la forma $u(x, t) = \sum \left(A_k \cos(k\pi t/L) \sin(k\pi x/L) + B_k \sin(k\pi t/L) \cos(k\pi x/L) \right)$. A cada uno de estos sumandos se les llama soluciones estacionarias.

Podemos ver que si $X(x)T(t)$ es solución de (3) entonces $\frac{T'(t)}{T(t)}$ es una constante:

$$\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{\Delta X(x)}{X(x)} \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{V}{\hbar} = \lambda$$

Ahora resolviendo esta ecuación:

$$\int \frac{dT}{T} = \int iK dt \rightarrow \log T = \lambda t \rightarrow T(t) = e^{\lambda t}$$

Esta constante tiene que ser imaginaria pura para que $T(t)$ este acotada, por lo tanto $T(t) = e^{iKt}$. Si encontramos una solución de este tipo entonces $\overline{X}(x)T(t)$ también es solución.

Sustituyendo $e^{iKt}X(x)$ en la ecuación tenemos:

$$-K\hbar e^{iKt}X = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{iKt}\Delta X + V e^{iKt}X$$

Si $X(x)$ es solución, entonces su conjugada, $\overline{X}(x)$, también lo será.

Estas dos soluciones generan el mismo subespacio vectorial (sobre \mathbb{C}) que $X_1(x)T(t)$ y $X_2(x)T(t)$ siendo $X_1 = X + \overline{X}$ y $X_2 = i(X - \overline{X})$, ya que son linealmente independientes y tenemos la matriz de cambio de base: $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}$. Como X_1 y X_2 son reales podemos suponer que $X(x)$ será siempre una función real.

Ya teniendo lo que sería la solución de la ecuación es más lógico llamar a la K como $-E/\hbar$ ya que $-\hbar K$ es la energía, y a la $X(\vec{x})$ como $\psi(\vec{x})$ ya que es la parte espacial de la función de ondas. Con esta notación las soluciones de (3) son:

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\vec{x}) \quad \text{con} \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\vec{x}))\psi = 0$$

Llegando así a esta última:

$$i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t} \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(x)T(t) + V(x)T(t)\psi(x) \rightarrow E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(x)\psi(x)$$

$$\Delta\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0 \quad \text{llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo}$$

Que a veces se escribe como $H\psi = E\psi$ con $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$.

Las energías que hacen posible esta igualdad a veces tienen un número discreto de valores, por ejemplo si tenemos ψ 1-periódica se puede escribir como $\sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}}$. Para una partícula de masa m y con potencial $V = 0$, tendremos:

$$\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi^2 \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}} |\vec{n}|^2 = E \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}}.$$

Podemos ver que esta partícula puede tener energía $E = 40\pi^2 \hbar^2$ y no $14\pi^2 \hbar^2$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}} |\vec{n}|^2 &= 20 \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}} \rightarrow a_{\vec{n}} |\vec{n}|^2 = 20 a_{\vec{n}} \\ \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}} |\vec{n}|^2 &= 7 \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i \vec{n} \cdot \vec{x}} \rightarrow a_{\vec{n}} |\vec{n}|^2 \neq 7 a_{\vec{n}} \end{aligned}$$

Como 7 no se puede descomponer como suma de tres cuadrados no se puede dar esa energía, sin embargo $20 = 0^2 + 2^2 + 4^2$ por lo que se dará por ejemplo cuando $a_{\vec{n}} = 0 \forall \vec{n} \neq (0, 2, 4)$.

Normalmente la ecuación de Schrödinger está en tres dimensiones, pero a veces para simplificar y otras porque las simetrías nos lo permiten, trabajamos con la ecuación en el caso unidimensional. Pero no todo lo que se cumple para una dimensión se cumple para más, ahora vamos a ver un teorema que solo es válido para una dimensión. Tenemos:

$$\psi = \psi(x) \quad \text{que satisface} \quad \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0$$

Teorema 2.2. *Dado un E , si existe una solución ψ no idénticamente nula con $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \psi'(x) = 0$, entonces todas las soluciones con esta propiedad se diferencian en múltiplos por una constante.*

Demostración. Si tenemos dos soluciones ψ_1 y ψ_2 que no sean 0 en todo punto con una energía fijada $(\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2')' = \psi_2 \psi_1'' - \psi_1 \psi_2'' = \psi_2 \psi_1 \left(-\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right) = 0$. Por lo que $\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2'$ es constante.

Si estas soluciones cumplen que $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_i = 0$ y $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_i'' = 0$ entonces $(\log |\psi_1 / \psi_2|)' = \frac{\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2'}{\psi_1 \psi_2} = 0$ ya que si $\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2'$ fuese distinto de 0 su límite cuando $x \rightarrow \infty$ sería distinto de 0 y esto no puede ser por la hipótesis de la que hemos partido.

Si tenemos que la derivada es 0 entonces $\log |\frac{\psi_1}{\psi_2}| = c \Rightarrow \frac{\psi_1}{\psi_2} = k$. Como las soluciones del teorema cumplen estas hipótesis entonces siempre serán múltiplos unas de otras. \square

3. La partícula libre.

En esta sección vamos a tratar la ecuación de Schrödinger de una partícula libre en una dimensión, es decir, aquella que tiene $V = 0$. Como ya hemos visto su ecuación es

de la forma:

$$i\Psi_t = -\frac{\hbar}{2m}\Psi_{xx} \quad \text{con} \quad \Psi(x, 0) = f(x)$$

Proposición 3.1. *La solución de la ecuación anterior viene dada por*

$$(4) \quad \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi) e\left(-\frac{\hbar\pi\xi^2}{m}t + x\xi\right) d\xi$$

y por

$$(5) \quad \Psi(x, t) = (1 - i)\sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x - y) e\left(\frac{my^2}{4\pi\hbar t}\right) dy.$$

Para llegar a estas ecuaciones primero vamos a demostrar (4) y después pasaremos de (4) a (5).

Demostración. Dada Φ una función tal que:

$$\widehat{\Phi}(\xi) = \Psi(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) e^{-2\pi i x \xi} dx$$

se tiene

$$\Phi(x) = \widehat{\Psi}(-x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\xi) e^{2\pi i x \xi} d\xi$$

Usamos $\widehat{f^k}(\xi) = (2\pi i \xi)^{-k} \widehat{f^k}(\xi)$, propiedad de la transformada de Fourier, tenemos $\widehat{\Psi_{xx}}(x) = (2\pi x i)^2 \widehat{\Psi}(x) = (2\pi x i)^2 \Phi(-x)$ y $\widehat{\Psi}_t = \Phi_t$ sustituyendo nos queda:

$$i\Phi_t = +\frac{2\pi^2\hbar}{m}x^2\Phi \quad \text{con} \quad \Phi(x, 0) = \widehat{f}(-x)$$

Resolviendo la EDO en la variable t:

$$\begin{aligned} i\frac{d\Phi}{dt} = \frac{2\pi^2\hbar}{m}x^2\Phi &\implies \int_{-\infty}^{\infty} i\frac{d\Phi}{\Phi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\pi^2\hbar x^2}{m} dt \implies \\ \log(\Phi) - \log(\Phi_0) = \frac{2\pi^2\hbar x^2}{im}(t - t_0) &\implies \Phi = \widehat{f}(-x) e\left(-\frac{\pi\hbar x^2}{m}t\right) \end{aligned}$$

Ahora sabemos que

$$\Psi(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) e^{-2\pi i x \xi} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(-x) e\left(-\frac{\pi\hbar x^2}{m}t\right) e(-x\xi) dx$$

Haciendo el cambio x por $-x$ tenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(x) e(-\frac{\pi \hbar x^2}{m} t) e(x\xi) dx$$

Y esta es la misma ecuación que (4).

Ahora que hemos demostrado la primera parte de la proposición pasemos a demostrar (5). Para ello voy a utilizar la convolución de la transformada de Fourier que cumple $\widehat{f * g} = \widehat{f} \widehat{g}$ y la transformada de Fourier de una gaussiana:

$$(6) \quad f(x) = e^{-ax^2} \implies \widehat{f}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{\pi^2 \xi^2}{a}} \quad \text{para } a > 0$$

que demostraré mas tarde.

Podemos suponer que $\widehat{f} e(-\frac{\pi \hbar \xi^2}{m} t) = \widehat{f} \widehat{g}$. Así que vamos a buscar g teniendo en cuenta que esa función se asemeja a la transformada de una gaussiana.

$$\begin{aligned} \widehat{g}(\xi) &= e^{-\frac{2\pi^2 \hbar \xi^2 i}{m} t} = c \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\frac{\pi^2 \xi^2}{a}} \implies \frac{1}{a} = \frac{2\hbar t i}{m} \quad c = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m}{2\hbar i t} x^2} e^{-2\pi i \xi x} dx &\stackrel{(6)}{=} \sqrt{\frac{\pi 2\hbar i}{m}} e^{-\frac{2\pi^2 \hbar \xi^2 i}{m} t} = \sqrt{\frac{\pi 2\hbar i}{m}} e\left(-\frac{\pi \hbar \xi^2}{m} t\right) \\ \implies g(x) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar t i}} e\left(\frac{m x^2}{4\pi t}\right) \end{aligned}$$

Con esto concluimos:

$$\Psi = f * g = \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar t i}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y) e\left(\frac{m x^2}{4\pi t}\right) dy = (1-i) \sqrt{\frac{m}{4\pi \hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y) e\left(\frac{m x^2}{4\pi t}\right) dy$$

□

Ahora vamos a demostrar (6).

Demostración. Esta prueba va a tener 3 partes:

- Dado $y(x) = \left(\int_0^x e^{-t^2} dt\right)^2 + \int_0^1 (1+t^2)^{-1} e^{-x^2(1+t^2)} dt$ vamos a ver que $y' = 0$ y con eso a concluir que $I := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$.

$$\begin{aligned}
y'(x) &= 2\left(\int_0^x e^{-t^2} dt\right)\left(\int_0^x e^{-t^2} dt\right)' + \int_0^1 e^{-x^2(1+t^2)}(-2x) dt \\
&= 2\int_0^x e^{-t^2} e^{-x^2} dt + \int_0^1 e^{-x^2(1+t^2)}(-2x) dt \quad \text{cambio } t = \frac{t}{x} \\
&= \int_0^1 2x(e^{-x^2(1+t^2)} - e^{-x^2(1+t^2)}) dt = 0
\end{aligned}$$

Como es 0 $\forall x$ la función es constante:

$$\begin{cases}
y(0) = \int_0^1 \frac{1}{1+t^2} dt = \arctan 1 = \frac{\pi}{4} \\
y(\infty) = \left(\int_0^\infty e^{-t^2} dt\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right)^2 \\
\implies I = \sqrt{\pi}
\end{cases}$$

- $f(x) = e^{-ax^2}$, $y(\xi) = \widehat{f}(\xi)$ satisface la EDO

$$\begin{cases}
y' + 2\pi^2 a^{-1} \xi y = 0, \\
y(0) = I/\sqrt{a}.
\end{cases}$$

Primera condición:

$$\begin{aligned}
y(\xi) &= \widehat{f}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{-2\pi\xi xi} dx \implies \\
y'(\xi) &= -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2} e^{-2\pi\xi xi} dx = -\frac{2\pi^2 \xi}{a} y(\xi)
\end{aligned}$$

Segunda condición: sustituimos en $\xi = 0$

$$y(0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \quad \text{cambio } ax^2 = y^2 \implies y(0) = I \frac{1}{a}$$

- Por último como $f(x)$ satisface la EDO vamos a resolverla:

$$\begin{aligned}
\frac{dy}{d\xi} &= -2\pi^2 a^{-1} \xi y \implies \int \frac{dy}{y} = \int -2\pi^2 a^{-1} \xi d\xi \implies \\
\log(y) - \log(y_0) &= -\pi^2 a^{-1} \xi^2 \implies y(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\pi^2 a^{-1} \xi^2}
\end{aligned}$$

□

Otro dato a destacar de la ecuación (4) es que es coherente con la mecánica clásica y lo veremos a continuación. Para estudiar esta coherencia vamos a comenzar con un ejemplo que nos facilitara los cálculos y más tarde veremos un caso mas general.

La función de ondas de una partícula en el origen debe cumplir que su medida de probabilidad en $t = 0$, $|f|^2 dx$, tenga casi toda su masa cerca del origen, esto quiere decir que la probabilidad de encontrar la partícula en un punto será mayor cuanto más cerca esté ese punto del origen. Tomamos $|f(x)| = Ce^{-\frac{x^2}{a^2}}$ $a > 0$ y C que cumpla $\|f\|_2 = 1$. Si tenemos una velocidad inicial v_0 por la relación $\lambda = h/p$ el numero de ondas será $mv_0/2\pi\hbar$.

Una función que cumple estas condiciones es:

$$f(x) = \Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{a^2}} e\left(\frac{mv_0}{2\pi\hbar} x\right)$$

Realizando varios cálculos y aplicando (4) tenemos :

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{mv_0}{2\pi\hbar} & \beta &= \frac{\pi\hbar t}{m} \\ \widehat{f}(\xi) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{a^2}} e(\alpha x) e(-x\xi) dx \implies \\ \widehat{f}(\xi + \alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{a^2}} e(-x\xi) dx \stackrel{(6)}{=} (2\pi a^2)^{1/4} e^{-\pi^2 a^2 \xi^2} \\ &\stackrel{(4)}{\implies} \Phi(x, t) = (2\pi a^2)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi^2 a^2 \xi^2} e(\beta(\xi + \alpha)^2 + x(\xi + \alpha)) d\xi \\ &= (2\pi a^2)^{1/4} e(\alpha x - \beta \alpha^2) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\pi^2 a^2 + 2\pi i \beta)\xi^2} e(\xi(x - 2\alpha\beta)) d\xi \stackrel{(6)}{=} \\ &= (2\pi)^{1/4} e(\alpha x - \beta \alpha^2) \sqrt{\frac{a}{\pi a^2 + 2i\beta}} e^{-\pi(x-2\alpha\beta)^2/(\pi a^2 + 2i\beta)}. \end{aligned}$$

Calculando la densidad de probabilidad y sustituyendo por α y β tenemos :

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{a\sqrt{2}}{\sqrt{\pi a^4 + 4\pi\hbar^2 t^2 m^{-2}}} e^{\frac{-2a^2}{\pi a^4 + 4\hbar^2 t^2 m^{-2}}(x-v_0 t)^2}$$

esta ecuación para tiempos suficientemente pequeños, como \hbar también es muy pequeño, podemos acotarla por:

$$|\Psi(x, t)|^2 \approx \frac{(2/\pi)^{1/2}}{a} e^{-2(x-v_0 t)^2/a^2}$$

que se mueve con velocidad $v_0 t$, es decir, en línea recta.

Pasemos al caso más general, para poder acotar una cantidad mas amplia de funciones usaré la aproximación de fase estacionaria que da una buena aproximación para una integral oscilatoria:

$$(7) \quad \int_{-\infty}^{\infty} A(x)e^{2\pi i\lambda P(x)} dx \sim \frac{A(x_0)}{\sqrt{\pm\lambda P''(x_0)}} e^{2\pi i(\lambda P(x_0)\pm 1/8)}$$

donde A es una función “buena” que decae en el infinito, P es un polinomio de segundo grado, x_0 el valor para el que $P'(x_0) = 0$ y \pm es el signo de $P'' = P''(x_0)$. La aproximación es buena cuando $\lambda \rightarrow +\infty$, ya que el error está acotado por $C\lambda^{-3/2}$, con C constante para A y P fijados.

Esto nos servirá para poder aproximar funciones de onda de la partícula libre que tengan dato inicial de la forma $\Psi(x, 0) = B(x)e^{imv_0x/\hbar}$ con $B(x)$ concentrada alrededor del origen. Por (5) tenemos que :

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= (1 - i)\sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x - y)e\left(\frac{my^2}{4\pi\hbar t}\right) dy = (1 - i)\sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y)e\left(\frac{m(x - y)^2}{4\pi\hbar t}\right) dy \\ &= (1 - i)\sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} B(y)e^{imv_0y/\hbar}e\left(\frac{m(x - y)^2}{4\pi\hbar t}\right) dy \end{aligned}$$

Comparandolo con (7) tenemos $\lambda = 1/\hbar$, $P(y) = \frac{m(x-y)^2+2v_0ty}{4\pi t}$, y_0 tal que $P'(y_0) = 0$ es $y_0 = x - v_0t$ y $P''(y) > 0$, con esto tenemos

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= (1 - i)\sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} B(y)e^{-2\pi P(y)/\hbar} dy \approx (1 - i)\sqrt{\frac{m}{4\pi\hbar t}} \frac{B(x - v_0t)}{\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}} e^{2\pi i(\frac{m}{\hbar 4\pi}(2v_0x - v_0^2t) + \frac{1}{8})} \\ \implies |\Psi(x, t)|^2 &\approx |B(x - v_0t)|^2 \end{aligned}$$

Por lo que $\Psi(x, t)$ también se mueve con velocidad v_0t .

4. Pozo de potencial finito.

Desde el punto de vista de la física clásica es lógico pensar que si quieres que un objeto supere un muro de cierta altura y la energía que eres capaz de transmitir al objeto es menor que la “necesaria” para ello, no podremos hacerlo. Aunque parezca un poco extraño, en la mecánica cuántica sí se puede hacer, pero con una probabilidad infinitesimal en el mundo macroscópico.

Vamos a estudiar varios ejemplos de ello, siempre con la ecuación independiente del tiempo:

$$(8) \quad \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

y suponiendo ψ' continua y derivable a trozos.

Nuestro objetivo final es llegar al pozo de potencial finito:

$$(9) \quad V = V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [-1/2, 1/2], \\ V_0 & \text{si } x \notin [-1/2, 1/2] \end{cases}$$

en la clásica si una partícula tiene energía $E < V_0$ en $[-1/2, 1/2]$ nunca podrá salir de este intervalo.

En los dos primeros ejemplos que vamos a ver una de las paredes se ha “movido” hacia el infinito y es imposible normalizar $\int |\psi|^2 = 1$, lo que nos impide normalizar $\int |\Psi|^2 = 1$, por ello vamos a suponer $|\psi|$ acotada.

El primer caso que vamos a estudiar tiene potencial:

$$V_1(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{con} \quad 0 < E < V_0$$

Si calculamos las soluciones de (8) para este potencial tenemos:

Para $x < 0$ tenemos que resolver la EDO:

$$\psi(x)'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0 \Rightarrow \lambda^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

Para $x > 0$ ahora resolvemos:

$$\begin{aligned} \psi(x)'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) = 0 &\Rightarrow \lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) = 0 \\ \Rightarrow \lambda = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} &\Rightarrow \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \end{aligned}$$

De aquí sacamos que las soluciones son:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \begin{cases} Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x < 0 \\ ae^\kappa + be^{-\kappa x} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{para que este acotado} \\ \psi(x) &= \begin{cases} Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x < 0 \\ be^{-\kappa x} & \text{si } x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Esto puede interpretarse como que la partícula penetra en $x > 0$ hasta $x \approx \hbar/\sqrt{m(V - E)}$ ya que es mas o menos en este punto a partir del cual la función decae a 0.

Hemos supuesto ψ y ψ' continuas y para que esto suceda en el 0 deben cumplir esta relación:

$$\begin{cases} A + B = 0 \\ iAq - iBq = -b\kappa \end{cases} \implies \begin{cases} iq(A - B) = -(A + B)\kappa \\ A(iq + \kappa) = B(iq - \kappa) \end{cases} \implies \frac{A}{B} = -\frac{\kappa - iq}{\kappa + iq}$$

Con lo que vemos $|A/B|^2 = 1$ ya que tenemos el modulo de una función entre su conjugado y eso siempre da 1. Llamamos a $|A/B|^2$ coeficiente de reflexión y es interpretado como el porcentaje de partículas que rebotan en la pared. En este caso, que dé 1 lo interpretamos como que todas las partículas que van hacia la derecha, a pesar de que en un principio llegan a traspasar en cierta medida la pared, acaban rebotando.

Este coeficiente no siempre tiene porque ser 1, puede haber algún potencial para el que sea menor, es decir, para el que no todas las partículas rebotan. Y este es el caso de nuestro siguiente ejemplo, en el que esto sucederá gracias a que tendrá una pared muy estrecha.

Tendrá potencial:

$$V_2(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x \in [0, \epsilon] \\ 0 & \text{si } x \notin [0, \epsilon] \end{cases} \quad \text{con} \quad 0 < E < V_0$$

Volvemos a calcular las soluciones de (8) de la misma manera que en el primer ejemplo y obtenemos:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x < 0 \\ ae^{\kappa x} + be^{-\kappa x} & \text{si } 0 < x < \epsilon \\ Ce^{iqx} + De^{-iqx} & \text{si } x > \epsilon \end{cases}$$

En este caso $a \neq 0$ ya que no lo necesita para estar acotada la solución y tendremos los mismos valores para κ y q .

Estudiemos ahora el coeficiente de reflexión. Es necesario considerar $D = 0$ para que no haya partículas que lleguen a $x < 0$ desde el otro lado del muro. También podemos ver que si $D = 0$ entonces $C \neq 0$ para que las soluciones sean distintas de 0 continuas y con derivada continua. Para verlo vamos a suponer que $C = 0$:

$$\begin{cases} ae^{\kappa\epsilon} + be^{-\kappa\epsilon} = Ce^{iq\epsilon} = 0 & \implies ae^{\kappa\epsilon} = -be^{-\kappa\epsilon} & \implies a = b = 0 \\ \kappa ae^{\kappa\epsilon} - \kappa be^{-\kappa\epsilon} = iqCe^{iq\epsilon} = 0 & \implies 2\kappa ae^{\kappa\epsilon} = 0 & \\ \begin{cases} A + B = a + b = 0 & \implies A = -B \\ iqA - iqB = a\kappa - b\kappa & \implies iqA + iqA = 0 \end{cases} & \implies A = B = 0 \end{cases}$$

Es complicado sacar una fórmula general donde se vea que $|B/A|^2 < 1$ pero podemos verlo para el caso concreto de un electrón que salta una medida comparable al tamaño

de un átomo con la mitad de energía de la de ionización. Este tendrá: $m = 9'1094$, $E = V_0/2 = 10^{-18}$, $\epsilon = 10^{-10}$. Realizando varios cálculos y sustituyendo los datos podemos llegar a un sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{cases} A + B = a + b \\ i(A - B) = (a - b) \\ 3'59a(i - 1) = 0'278b(-1 - i) \end{cases} \Rightarrow \text{resolvemos este sistema suponiendo } b = 0$$

Tenemos $A = \frac{967}{1795}(1 + i)$ $B = \frac{829}{1795}(1 - i)$ y si hacemos $|A/B|^2 = 828^2/967^2 < 1$.

Esta propiedad de “atravesar paredes” sin tener lo que en la física clásica considerarían energía suficiente se llama efecto túnel. En esto se basa nuestro tercer ejemplo, el microscopio de efecto túnel.

El funcionamiento de este microscopio se basa en la propiedad de atravesar barreras utilizándola para medir la distancia a la que se encuentra el electrón. Se aproxima una punta conductora a la superficie que se quiere estudiar y si lo aproximamos lo suficiente a un electrón este saltará, es decir, se creará la imagen de la disposición de estos en función de la corriente que traspase la barrera, y esta dependerá de la distancia de la punta con el electrón.

El mecanismo es válido debido a que los electrones con un potencial $U(z)$ cumplen la ecuación de Schrödinger, fuera de la barrera tienen $E > U(z)$ $\psi_n = \psi_0 e^{\pm i\kappa z}$ con $\kappa = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}$ y dentro $\psi_n = \psi_0 e^{\pm \kappa z}$ con $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$.

Ahora que hemos visto estos ejemplos mas sencillos podemos estudiar el caso ya mencionado del pozo de potencial finito. Todavía con las hipótesis de que ψ esta acotada y es continua con derivada continua.

Si tuviésemos $E \geq V_0$ las paredes se podrían superar igual que en el caso clásico y sus soluciones serían:

$$\begin{cases} ae^{i\kappa x} + be^{-i\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x \in [-1/2, 1/2] \\ ce^{i\kappa x} + de^{-i\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} ; \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

con una distribución de probabilidad degenerada que no podemos normalizar:

$$\begin{aligned} \int |\psi|^2 &= \int_{-\infty}^{-1/2} (a^2 + b^2) + 2ab \cos(2\kappa x) dx + \int_{-1/2}^{1/2} (A^2 + B^2) dx + \\ &+ \int_{1/2}^{\infty} (c^2 + d^2) + 2cd \cos(2\kappa x) dx = \infty \end{aligned}$$

Veamos ahora el caso a $E < V_0$ donde tendremos las soluciones:

$$\begin{cases} ae^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } x \in [-1/2, 1/2] \\ de^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}; \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

que si se pueden normalizar.

$$\begin{aligned} \int |\psi|^2 &\leq \int_{-\infty}^{-1/2} a^2 e^{2\kappa x} dx + \int_{-1/2}^{1/2} A^2 + B^2 dx + \int_{1/2}^{\infty} d^2 e^{-2\kappa x} dx = \\ &\frac{a^2}{2\kappa} e^{-\kappa} + A^2 + B^2 + \frac{d^2}{2\kappa} e^{\kappa} < \infty \end{aligned}$$

Aunque los cálculos los he realizado suponiendo $E > 0$ esto no cambiaría nuestra conclusión ya que la única parte que cambiaría sería $x \in [-1/2, 1/2]$ y seguiría siendo integrar una función continua en un compacto, por lo que seguiría siendo finita.

Como a veces estudiar la solución completa puede ser más complicado que estudiar por separado las soluciones pares de las impares, vamos a ver que esto se puede hacer. Siempre podemos dividir una solución en su parte par $\psi_p = (\psi(x) + \psi(-x))/2$ y su parte impar $\psi_i = (\psi(x) - \psi(-x))/2$, siendo la solución completa la suma de ambas. Dada una solución ψ para E entonces $\psi_p = 0$ o ψ_p también es solución, y lo mismo ocurre con ψ_i .

$$\begin{aligned} (\psi_p + \psi_i)'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))(\psi_p + \psi_i) &= 0 \\ \underbrace{\psi_p'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi_p}_{\text{parte par}} + \underbrace{\psi_i'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\psi_i}_{\text{parte impar}} &= 0 \end{aligned}$$

Para que esto sea 0 tiene que serlo tanto su parte impar como la par, por ello $\psi_p = 0$ es solución y $\psi_i = 0$ es solución.

Continuemos estudiando el intervalo en el que está E , sabemos que $E < V_0$, ahora vamos a llegar a que $E > 0$:

- Si $E = 0$ nuestra solución sería:

$$\begin{cases} ae^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ A + B & \text{si } x \in (-1/2, 1/2) \\ de^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

Primero las soluciones pares: para que sea par $\psi(x) = \psi(-x)$ por lo que $a = d$ y para que su derivada continua tiene que cumplir $\kappa a e^{-\kappa/2} = -\kappa a e^{-\kappa/2} \Rightarrow -\kappa =$

$\kappa \Rightarrow \kappa = 0 \Rightarrow V_0 = 0$, como esto no puede ser no hay soluciones pares.

Veamos si puede haber soluciones impares: para que sea impar tiene que $\psi(x) = -\psi(-x) \Rightarrow a = -d$ para que su derivada sea continua $\kappa a e^{-\kappa/2} = 0 \Rightarrow \kappa = 0$ por lo que no hay soluciones impares. Con esto podemos concluir que no existen soluciones con $E = 0$ que cumplan el resto de las hipótesis.

- Si $E < 0$ tendríamos la solución:

$$\begin{cases} a e^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ A e^{qx} + B e^{-qx} & \text{si } x \in (-1/2, 1/2) \\ d e^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}; \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}$$

Para las soluciones pares $A = B$ y $a = d$, para que sea continua con derivada continua tenemos:

$$\begin{cases} a e^{-\kappa/2} = A(e^{-q/2+e^{q/2}}) \\ \kappa a e^{-\kappa/2} = A(q e^{-q/2} - q e^{q/2}) \end{cases} \Rightarrow \kappa A(e^{-q/2} + e^{q/2}) = A q(e^{q/2} - e^{-q/2})$$

$$\Rightarrow \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} < \sqrt{-2mE} = q \Rightarrow V_0 - E < -E \text{ siendo } V_0 > 0$$

Por lo que no existen soluciones pares.

Para que sean impares $A = -B$ y $a = -d$, para que sea continua y su derivada también:

$$\begin{cases} \kappa a^{-\kappa/2} = A q(e^{q/2} + e^{-q/2}) \\ a e^{-\kappa/2} = A e(e^{-q/2} - e^{q/2}) \end{cases} \Rightarrow A \kappa(e^{-q/2} - e^{q/2}) = A q(e^{q/2} + e^{-q/2})$$

$$\Rightarrow \underbrace{\kappa}_{>0} = -q \underbrace{\frac{e^{q/2} + e^{-q/2}}{e^{q/2} - e^{-q/2}}}_{>0}$$

Por lo que tampoco existen soluciones impares.

Ya podemos confirmar que $0 < E < V_0$ y vamos a estudiar sus valores. Si tenemos ψ una solución par tendremos:

$$\psi(x) = \begin{cases} a e^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ 2A \cos qx & \text{si } x \in (-1/2, 1/2) \\ a e^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \quad \psi'(x) = \begin{cases} \kappa a e^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ 2qA \sin qx & \text{si } x \in (-1/2, 1/2) \\ -\kappa a e^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases}$$

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}; \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

Para que cumpla las hipótesis de continuidad:

$$\begin{cases} ae^{-\kappa/2} = 2A \cos q/2 \\ \kappa ae^{-\kappa/2} = 2Aq \sin q/2 \end{cases} \Rightarrow \kappa \cos q/2 = q \sin q/2 \Rightarrow \sqrt{V_0 - E} = \sqrt{E} \tan \sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}}$$

Si la solución ψ es impar tendremos:

$$\psi(x) = \begin{cases} ae^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ 2Ai \sin qx & \text{si } x \in (-1/2, 1/2) \\ ae^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases} \quad \psi'(x) = \begin{cases} \kappa ae^{\kappa x} & \text{si } x < -1/2 \\ -2iqA \cos qx & \text{si } x \in (-1/2, 1/2) \\ \kappa ae^{-\kappa x} & \text{si } x > 1/2 \end{cases}$$

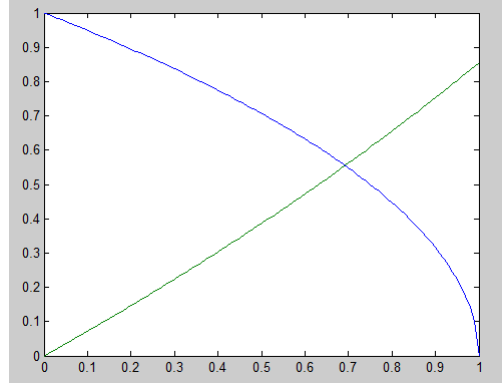
$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}; \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

Para que cumpla las hipótesis de continuidad:

$$\begin{cases} ae^{\kappa/2} = 2iA \sin q/2 \\ \kappa ae^{\kappa/2} = -2iqA \cos q/2 \end{cases} \Rightarrow \kappa \sin q/2 = -q \cos q/2 \Rightarrow \sqrt{V_0 - E} = -\sqrt{E} \cot \sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}}$$

Por ello E solo tiene un número finito de soluciones, para hacernos una idea, las gráficas de $\sqrt{V_0 - E}$ y $\sqrt{E} \tan \sqrt{mE/2\hbar^2}$ sería de esta forma:

Que solo corta una vez, por lo que en ese intervalo solo existirá una solución.



Para finalizar con el estudio del pozo de potencial finito podemos relacionar los niveles de energía con los ya vistos en la sección 1, ya que si $V_0 \rightarrow \infty$ estas paredes se vuelven infranqueables y el conjunto de soluciones de E pasa a ser: $\{(n\pi\hbar)^2/2m : n \in \mathbb{Z}^+\}$ como vemos con estos cálculos:

$$\begin{aligned} \tan x = \infty &\Leftrightarrow x = (k + 1/2)\pi ; \quad \sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}} = (k + 1/2)\pi \Leftrightarrow E = \frac{(k + 1/2)^2 \pi^2 \hbar^2 2}{m} \\ &= \frac{(2k + 1)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m} \quad \text{con } n \text{ impar} \\ \cot x = \infty &\Leftrightarrow x = k\pi ; \quad \sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}} = k\pi \Leftrightarrow E = \frac{k^2 \pi^2 \hbar^2 2}{m} = \frac{(2k\pi\hbar)^2}{2m} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m} \quad \text{con } n \text{ par} \end{aligned}$$

5. El oscilador armónico

En la mecánica clásica uno de los movimientos más sencillos de estudiar con una ecuación diferencial lineal con coeficientes constantes es el del oscilador armónico simple, que consiste en el movimiento provocado por desplazar una masa unida a un resorte fuera de su posición de equilibrio. Para estudiar la ecuación de este movimiento que es $md^2x/dt^2 = -kx$ se estudia primero suponiendo $k/m = 1$ teniendo así $d^2x/dt^2 - x$ cuya solución es $x = \cos t$, con la que se ve que vuelve a alcanzar su punto de equilibrio en $t = \pi/2$. Pasando esto a nuestra primera ecuación llegamos a $x = \cos \omega_0 t$ con $\omega_0^2 = k/m$ por lo que completa un ciclo, una oscilación, cuando $t_0 = 2\pi\sqrt{m/k}$. Aun así esta no es la solución más general ya que solo sirve para una velocidad inicial nula y un desplazamiento inicial de la masa, si tuviéramos velocidad inicial, esta no sería su ecuación de movimiento.

Existe un caso análogo a este y lo vamos a estudiar ahora, el del oscilador armónico cuántico, es muy importante en la teoría cuántica de campos que actualmente es la teoría en vigor para explicar las partículas elementales.

Lo estudiaremos siguiendo los pasos realizados en [Fol08]. Para ello tenemos a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$(10) \quad \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0 \quad \text{con} \quad V(x) = \frac{1}{2}\kappa x^2$$

desarrollándolo vemos que:

$$E\psi = \left(-\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}V(x)\psi \right) \frac{\hbar^2}{2m} = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 \right)}_H \psi$$

por lo que es equivalente a $E\psi = H\psi$.

También se puede escribir como:

$$(11) \quad H_0 f = \tilde{E} f \quad \text{con} \quad \begin{cases} H_0 = 1/2(-d^2/dx^2 + x^2) \\ \tilde{E} = E\sqrt{m/\kappa\hbar^2} \quad \text{y} \\ \psi = f(\lambda x) \\ \lambda = (m\kappa/\hbar^2)^{1/4} \end{cases} .$$

Vamos a comprobarlo:

$$\begin{aligned} f(\lambda x)'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} \kappa x^2 \right) f(\lambda x) &= 0 \\ -\frac{\hbar\lambda^2}{2m} \frac{d^2 f(\lambda x)}{d(\lambda x)^2} + \frac{1}{2} \kappa x^2 f(\lambda x) &= E f(\lambda x) \quad \text{cambio } x \rightarrow \lambda x \\ -\frac{\hbar\kappa^{1/2}}{2m^{1/2}} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \left(x^2 \frac{\kappa^{1/2}\hbar}{2m^{1/2}} \right) f(x) &= E f(x) \\ \underbrace{\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right)}_{H_0} f(x) &= E \underbrace{\sqrt{\frac{m}{\kappa\hbar^2}}}_{\tilde{E}} f(x) \end{aligned}$$

Estudiar las soluciones de (10) es equivalente a estudiar las de (11) y para hacerlo definimos el operador A y su adjunto A^\dagger , que están relacionados con la destrucción y creación de partículas, y vemos algunas de sus propiedades.

$$\begin{cases} A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \\ A^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \end{cases}$$

Podemos ver fácilmente:

$$(12) \quad H_0 = AA^\dagger - \frac{1}{2}I = A^\dagger A + \frac{1}{2}I$$

Vamos a demostrar la primera parte de (12):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(x^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) f &= \left(AA^\dagger - \frac{1}{2}I \right) f \\ A \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(x f - \frac{df}{dx} \right) \right) - \frac{1}{2} f &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \left(x f - \frac{d}{dx} f \right) - \frac{1}{2} f \\ &= \frac{1}{2} \left(x^2 f - x \frac{df}{dx} + x \frac{df}{dx} + f \frac{dx}{dx} - \frac{d^2 f}{dx^2} \right) - \frac{1}{2} f = \frac{1}{2} \left(x^2 f - \frac{d^2 f}{dx^2} \right) \end{aligned}$$

Y la segunda parte:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\left(x^2 - \frac{d^2}{dx^2}\right)f &= \left(A^\dagger A + \frac{1}{2}I\right)f \\ A^\dagger\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(xf + \frac{df}{dx}\right)\right) + \frac{1}{2}f &= \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(xf + \frac{df}{dx}\right) + \frac{1}{2}f \\ &= \frac{1}{2}\left(x^2f + x\frac{df}{dx} - x\frac{df}{dx} - f\frac{dx}{dx} - \frac{d^2f}{dx^2}\right) + \frac{1}{2}f = \frac{1}{2}\left(x^2f - \frac{d^2f}{dx^2}\right)\end{aligned}$$

De lo anterior se deduce:

$$(13) \quad [A, A^\dagger] = I$$

porque:

$$\begin{aligned}[A, A^\dagger](f) &= AA^\dagger(f) - A^\dagger A(f) \\ &= \frac{1}{2}\left(x^2f + f - \frac{d^2f}{dx^2}\right) - \frac{1}{2}\left(x^2f - f - \frac{d^2f}{dx^2}\right) = f = If\end{aligned}$$

En general, se cumple:

$$(14) \quad [A, (A^\dagger)^k] = k(A^\dagger)^{k-1}.$$

Primero vamos a estudiar el caso $k = 2$, sabiendo que por (13) $A^\dagger A = AA^\dagger - I$

$$\begin{aligned}[A, (A^\dagger)^2] &= A(A^\dagger)^2 - A^\dagger(A^\dagger A) = A(A^\dagger)^2 - A^\dagger(AA^\dagger - I) = A(A^\dagger)^2 - A^\dagger AA^\dagger + A^\dagger I \\ A(A^\dagger)^2 - (AA^\dagger - I)A^\dagger + A^\dagger I &= 2A^\dagger\end{aligned}$$

Ahora suponemos cierto hasta k y comprobamos que se cumple para $k + 1$, es decir, lo vamos a demostrar por inducción:

$$\begin{aligned}[A, (A^\dagger)^{k+1}] &= A(A^\dagger)^{k+1} - (A^\dagger)^{k+1}A = A(A^\dagger)^{k+1} - A^\dagger(A(A^\dagger)^k - k(A^\dagger)^{k-1}) = \\ A(A^\dagger)^{k+1} - A^\dagger A(A^\dagger)^k + kA^\dagger{}^k &= A(A^\dagger)^{k+1} - (AA^\dagger - I)A^\dagger{}^k + kA^\dagger{}^k = (k + 1)(A^\dagger)^k.\end{aligned}$$

Ya demostradas estas tres propiedades definimos la sucesión de funciones de Hermite normalizadas ϕ_k como:

$$(15) \quad \phi_k = \frac{1}{\sqrt{k!}}(A^\dagger)^k \phi_0 \quad \text{con} \quad \phi_0 = \pi^{-1/4}e^{-x^2/2}$$

que son de la forma un polinomio P_k de grado k , al que se le llama k -ésimo polinomio de Hermite normalizado, por $e^{-x^2/2}$. Por ejemplo

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx}\right) e^{-x^2/2} = \underbrace{\sqrt{2}\pi^{-1/4}x}_{P_1} e^{-x^2/2} \\ \phi_2 &= \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 \left(x - \frac{d}{dx}\right)^2 e^{-x^2/2} = \underbrace{2^{-3/2}\pi^{-1/4}(4x^2 - 2)}_{P_2} e^{-x^2/2}\end{aligned}$$

Si nos fijamos en la paridad de los polinomios tenemos que P_1 es impar y P_2 es par, partiendo de esto y de la forma de recursión $A^\dagger \phi_k = \sqrt{k+1} \phi_{k+1}$, que se demuestra con este sencillo cálculo:

$$(16) \quad A^\dagger \phi_k = \frac{1}{\sqrt{k!}} (A^\dagger)^{k+1} e^{-x^2/2\pi^{-1/4}} = \frac{\sqrt{k+1}}{\sqrt{(k+1)k!}} (A^\dagger)^{k+1} e^{-x^2/2\pi^{-1/4}} = \sqrt{k+1} \phi_k.$$

Podemos llegar a que estos polinomios siempre serán pares o impares, dependiendo de la paridad de k .

Esto es así porque si tenemos ϕ_k para llegar a ϕ_{k+1} multiplicamos por una constante, lo que no cambia la paridad, y aplicamos el operador A^\dagger que transforma polinomios impares en pares y pares en impares:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) P_k e^{-x^2/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x P_k e^{-x^2/2} - \frac{d}{dx} P_k e^{-x^2/2} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x P_k(x) - P'_k(x) + x P_k(x) \right) e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

sabiendo que multiplicar por x y derivar polinomios cambia la paridad tenemos que el operador lo hace partiendo de un polinomio par o uno impar. Aplicando este proceso sucesivamente se cumplirá lo dicho para todos los polinomios.

Es necesario demostrar otras tres propiedades para finalizar con el estudio de las soluciones que estamos buscando para lo que usaremos (14) y $A\phi_0 = 0$, que demostraré más tarde. Estas son:

$$\begin{aligned} (17) \quad A\phi_k &= A \frac{1}{\sqrt{k!}} (A^\dagger)^k \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{k!}} \left([A, (A^\dagger)^k] + (A^\dagger)^k A \right) \phi_0 \\ &= \frac{k}{k!} (A^\dagger)^{k-1} \phi_0 = \frac{k}{k!} (A^\dagger)^{k-2} \phi_1 = \frac{k\sqrt{2}}{k!} (A^\dagger)^{k-3} \phi_2 = \\ &\dots = \frac{k\sqrt{(k-1)!}}{\sqrt{k!}} \phi_{k-1} = \sqrt{k} \phi_{k-1} \end{aligned}$$

$$(18) \quad \begin{aligned} A^\dagger A\phi_k &= A^\dagger \sqrt{k} \phi_{k-1} = (\sqrt{k})^2 \phi_k = k\phi_k \\ AA^\dagger \phi_k &= (I + A^\dagger A)\phi_k = \phi_k + k\phi_k = (1+k)\phi_k \end{aligned}$$

$$(19) \quad H_0 \phi_k = (AA^\dagger - \frac{1}{2}I)\phi_k = (1+k)\phi_k - \frac{1}{2}\phi_k = (k + \frac{1}{2})\phi_k$$

Ya podemos volver a las soluciones de (10), todo lo visto anteriormente nos servirá para concluir que las únicas soluciones son de la forma $\psi(x) = \phi_k((m\kappa)/\hbar^2)^{1/4}x$ o una constante por ϕ_k

Primero comprobamos que es solución para $E = (k + 1/2)\hbar\sqrt{\kappa/m}$ para k un entero no negativo.

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{E} = E\sqrt{\frac{m}{\kappa\hbar^2}} = k + \frac{1}{2} \\ f(\lambda x) = \psi(x) \Rightarrow f(x) = \psi\left(\frac{x}{\lambda}\right) \end{array} \right. \implies H_0 f(x) = H_0 \phi_k(x) \stackrel{(19)}{=} \left(k + \frac{1}{2}\right) \phi_k(x) = \tilde{E} \phi_k$$

Ahora que tenemos una familia de soluciones para (10) podemos preguntarnos si existen soluciones distintas a ϕ_k . Para ver que esto no es posible es necesario demostrar que la familia $\{\phi_k\}_{k=0}^{\infty}$ es una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$.

Para verlo es importante tener en cuenta que $\langle A^\dagger f | g \rangle = \langle f | A g \rangle$. Vamos a empezar demostrando que los $\{\phi_k\}$ son ortonormales. Tenemos que $|\phi_0|_2 = \int \pi^{-2/4} e^{-x^2} = 1$ y que $A\phi_0 = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx}\right) e^{-x^2/2} = 0$ que sera útil en los siguientes pasos. Tenemos que comprobar que $\langle \phi_l | \phi_k \rangle = 0$ si $k \neq l$ y $\langle \phi_k | \phi_k \rangle = 1$.

$$\text{caso } l = 0 \neq k : \langle \phi_0 | \phi_k \rangle = \frac{1}{\sqrt{k!}} \langle \phi_0 | (A^\dagger)^k \phi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{k!}} \langle A\phi_0 | (A^\dagger)^{k-1} \phi_0 \rangle = 0$$

$$\text{caso } l \geq k > 0 : \langle \phi_l | \phi_k \rangle \stackrel{(16)}{=} \frac{1}{\sqrt{kl}} \langle A^\dagger \phi_{l-1} | A^\dagger \phi_{k-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{kl}} \langle \phi_{l-1} | A A^\dagger \phi_{k-1} \rangle$$

$$\stackrel{(18)}{=} \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{l}} \langle \phi_{l-1} | \phi_{k-1} \rangle \text{ repitiendo este proceso se acaba llegando a:}$$

$$\langle \phi_l | \phi_k \rangle = \sqrt{\frac{k!}{l!}} \langle \phi_0 | \phi_{k-l} \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq l \\ 1 & \text{si } k = l \end{cases} \implies \text{es ortonormal}$$

Ahora veamos que es base para $f \in L^2(\mathbb{R})$. Supongamos que existe una $f : \langle \phi_k, f \rangle = 0 \forall k \implies f$ es ortogonal a $p(x)e^{-x^2/2}$ para cualquier polinomio. Si hallamos la transformada de Fourier de $f(x)e^{-x^2/2}$ tenemos

$$\int f(x) e^{i\xi x} e^{-x^2/2} dx = \sum_{k=0}^{\infty} \int f(x) \frac{(i\xi x)^k}{k!} e^{-x^2/2} dx = 0 \quad \text{ya que son ortogonales.}$$

Por lo tanto, podemos concluir que $f(x) = 0$. Queda demostrado que es una base ortonormal.

Volviendo a las soluciones, supongamos que existe una solución distinta a las dadas $\tilde{\phi}$ que podremos escribir como $\tilde{\phi} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \phi_k$ y claramente tendrá que cumplir $H_0 \tilde{\phi} = \tilde{E} \tilde{\phi}$, tendríamos:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k H_0 \phi_k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(k + \frac{1}{2}\right) \phi_k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \tilde{E} \phi_k$$

Como $\tilde{\phi}$ no es múltiplo de ningún ϕ_k tienen que existir por lo menos dos $a_k \neq 0$, pero si esto es así tenemos

$$\left\{ \begin{array}{l} k + \frac{1}{2} = \tilde{E} \\ n + \frac{1}{2} = \tilde{E} \end{array} \right. \Rightarrow k = n \Rightarrow \text{no existen soluciones distintas a un múltiplo de } \phi_k.$$

Por lo tanto se concluye que estas son todas las soluciones.

6. Armónicos esféricos.

Nuestro objetivo final es resolver la ecuación de Schrödinger para el electrón del átomo de hidrógeno para lo que necesitaremos usar los armónicos esféricos que estudiaremos a continuación.

Para ello definimos \mathcal{P} como es espacio de polinomios en x, y, z y vamos a partir de que todas las funciones $f \in L^2(S^2)$ las podemos aproximar por combinaciones de polinomios de esta forma :

$$(20) \quad L^2(S^2) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{E}_l$$

siendo \mathcal{E}_l las restricciones a S^2 de los polinomios $P \in \mathcal{P}$ armónicos y homogéneos de grado l .

Como nos estamos restringiendo a la esfera de radio 1 lo mas conveniente para trabajar con ellos es pasar estos polinomios a coordenadas esféricas. En estas coordenadas el laplaciano es:

$$(21) \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta^* \quad \text{con} \quad \Delta^* = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Δ^* es la parte que no depende del radio y la que nos interesa estudiar, ya que sus autofunciones, $\Delta^* f = \lambda f$, normalizadas como veremos más adelante aparecen al estudiar el átomo de hidrógeno y son las llamadas armónicos esféricos. Vamos a ver dos resultados acerca de estas autofunciones:

Teorema 6.1. *Los únicos autovalores para las autofunciones f , $\Delta^* f = \lambda f$ en S^2 son $\lambda = -l(l+1)$.*

Demostración. Supongamos que tenemos $f \in C^2(S^2)$ que es autofunción. Por (20) sabemos que se puede escribir como $f = \sum_{l=0}^{\infty} e_l$ con $e_l \in \mathcal{E}_l$, es decir $e_l = P_l|_{S^2}$ homogéneo de grado l y armónico, por lo que f también será armónico.

Tenemos entonces, extendiéndolo a la esfera y realizando algún cálculo:

$$\begin{cases} P_l(r, \theta, \varphi) = r^l e_l(\theta, \varphi) \\ f(\theta, \varphi) = \sum e_l(\theta, \varphi) \\ \Delta^* f = \lambda f \\ \Delta P_l = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} l(l+1)e_l(\theta, \varphi) + \Delta^* e_l(\theta, \varphi) = 0 \\ \Delta \sum_l P_l = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \Delta \sum P_l = \sum l(l+1)e_l + \Delta^* \sum e_l = \sum (l(l+1) + \lambda)e_l = 0$$

Como f es suma directa para que esa suma sea 0 todos sus términos deben serlo, es decir $(l_0(l_0+1) + \lambda)e_{l_0} = 0 \forall l_0$, por definición $f \neq 0$ por lo que existe l' tal que $e_{l'} \neq 0$ y $\lambda = -l'(l'+1)$, para que el resto de sumandos sea 0 necesitamos que $e_l = 0$ si $l \neq l'$.

Por lo tanto el autovalor para la autofunción de grado l tiene que ser $\lambda = -l(l+1)$. \square

Partiendo de la base de los polinomios armónicos homogéneos de grado l podemos llegar a una base para las autofunciones.

Teorema 6.2. *Las autofunciones de grado l tendrán para cada l base $\{Y_{lm}\}$ donde*

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \begin{cases} e^{im\varphi} Q(\cos \theta) & \text{si } m \text{ es par,} \\ e^{im\varphi} \sin \theta Q(\cos \theta) & \text{si } m \text{ es impar,} \end{cases} \quad \text{con } -l \leq m \leq l, \quad m \in \mathbb{Z}$$

con Q polinomio de grado l en $\cos \theta$ si m es par y $l-1$ si es impar.

Demostración. \mathcal{E}_l es el subespacio de autofunciones de autovalor $-l(l+1)$ y como son restricción de los polinomios ya nombrados antes con base B_l la base B'_l de las autofunciones será la restricción de B_l .

Cada elemento de B_l será de la forma $\sum_{a,b,c} d_{a,b,c} x^a y^b z^c$ con $a+b+c=l$ que al restringirlo a S^2 y tomar coordenadas esféricas $x = \sin \theta \cos \varphi$, $y = \sin \theta \sin \varphi$, $z = \cos \theta$ quedará:

$$\sum_{a,b,c} d_{a,b,c} \left(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} \right)^a \left(\frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \right)^b \sin^a \theta \sin^b \theta \cos^c \theta = \sum_j k_j e^{im_j \varphi} P(\sin \theta, \sin \theta, \cos \theta)$$

con $P(\sin \theta, \sin \theta, \cos \theta)$ polinomio de grado l y $-l \leq m_j \leq l$.

Por lo que todo elemento de la base será combinación de elementos de la forma $e^{im\varphi} P(\sin \theta, \sin \theta, \cos \theta)$, donde m difiere de la potencia de $\sin \theta$ siempre en un número par, como voy a demostrar ahora.

Si pensamos en $(e^{i\varphi} \pm e^{-i\varphi})^n$ las potencias de e^{im} van disminuyendo de dos en dos empezando por n y acabando por $-n$ debido a que en cada término del binomio cuando el grado de $e^{i\varphi m}$ disminuye en uno el de $e^{-i\varphi m}$ aumenta en uno pero al ser negativo pasa a disminuir en uno, por lo que la multiplicación de ambos disminuye en dos. Volviendo a nuestros elementos de la base si tenemos $\left(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}\right)^a \sin^a \theta \left(\frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}\right)^b \sin^b \theta$ tendremos una suma de $e^{i\varphi m_a} \sin^a \theta e^{i\varphi m_b} \sin^b \theta$ donde $2|a - m_a \wedge 2|b - m_b \Rightarrow 2|a + b - (m_a + m_b)$. Por lo que m se tiene que diferenciar de las potencias de $\sin \theta$ en un número par

Por último nos queda ver que estos se pueden escribir como combinaciones de los Y_{lm} definidos en el teorema.

Que $2|a + b - m$ significa que si m es par $a + b$ es par y si es impar $a + b$ impar. Entonces si tenemos m par tendremos:

$$e^{im\varphi} \sin^{a+b} \theta \cos^c \theta = e^{im\varphi} (1 - \cos^2 \theta)^{(a+b)/2} \cos^c \theta = e^{im\varphi} Q(\cos \theta)$$

Y si m es impar:

$$e^{im\varphi} \sin^{a+b} \theta \cos^c \theta = e^{im\varphi} \sin \theta (1 - \cos^2 \theta)^{(a+b-1)/2} \cos^c \theta = e^{im\varphi} \sin \theta Q(\cos \theta).$$

□

A estos Y_{lm} normalizados de manera que $\int_{S^2} |Y_{lm}|^2 = 1$ se les llama armónicos esféricos y no solo son base de las autofunciones sino que ellos mismos son autofunciones, como se puede ver sustituyendo $f = \sum_{m=-l}^l c_m Y_{lm}$ en $\Delta^* f = -l(l+1)f$ y comparando sus coeficientes de Fourier en φ .

En la siguiente tabla se muestran los armónicos esféricos de grado 0 y 1:

$Y_{00}(\theta, \varphi)$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}$
$Y_{1-1}(\theta, \varphi)$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$
$Y_{10}(\theta, \varphi)$	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$
$Y_{11}(\theta, \varphi)$	$-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$

7. El átomo de hidrógeno.

Todo átomo esta formado por protones y electrones entre los cuales se ejerce una fuerza eléctrica. Un caso particular son los iones que se caracterizan por tener un número distinto de electrones y protones debido a la perdida o ganancia de los primeros. Vamos a estudiar aquellos que tienen un solo electrón y número atómico Z , es decir, con Z protones. Ya que los electrones de estos tienen un comportamiento similar a los del átomo de hidrógeno que tiene un protón y un electrón.

Los electrones de los átomos mencionados tienen asociada una función de ondas normalizada. Antes de dar la forma de estas es conveniente saber que la energía potencial correspondiente es $\frac{Kq_1q_2}{r}$, $r = \|\vec{x}\|$, $q_1 = Ze$ y $q_2 = -e$ las cargas del núcleo $e = 1,6022 \cdot 10^{-19}$ y la constante de Coulomb $K = 8,9876 \cdot 10^9$, todo medido en unidades del sistema internacional (SI).

Con esta información ya se puede dar la ecuación de Schrödinger para iones con un solo electrón:

$$(22) \quad -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi - KZ \frac{e^2}{r} \Psi = E \Psi.$$

Teorema 7.1. *Todas las soluciones de (22) tienen energía $E = E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4 K^2}{2\hbar^2 n^2}$ y son de la forma $\Psi_{nlm} = r^l e^{-a_n r} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ con $0 \leq l < n$ $-l \leq m \leq l$ o combinaciones lineales suyas con n fijo. Donde R_{nl} es un polinomio de grado $n-l-1$, Y_{lm} los armónicos esféricos y $a_n = -\sqrt{E_n m_e / \hbar^2}$.*

Demostración. Podemos ver que la ecuación (22) es equivalente a :

$$(23) \quad -\frac{1}{2} \Delta \Phi - \frac{Z}{r} \Phi = E' \Phi$$

con

$$(24) \quad \Phi(\vec{x}) = \lambda^{3/2} \Psi(\lambda \vec{x}) \quad \lambda = \frac{\hbar^2}{m_e K e^2} \quad \text{y} \quad E' = \frac{\lambda}{K e^2} E$$

Como podemos ver sustituyendo:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \lambda^{7/2} \Delta \Psi(\lambda x) - \frac{Z \lambda^{3/2}}{r} \Psi(\lambda x) &= E' \Psi(\lambda x) \quad \text{llamamos a } \lambda x = y \\ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(y) - \underbrace{\frac{Z}{r \lambda}}_{r' = \|y\|} K e^2 \Psi(y) &= E \Psi(y) \end{aligned}$$

y si una está normalizada la otra también, por ello podemos buscar soluciones de (23) y luego deshacer el cambio (24).

Resolviendo mediante el método de separación de variables tenemos la solución $\Phi(r, \theta, \varphi) = A(r)B(\theta, \varphi)$ con $B(\theta, \varphi)$ autofunción de $\Delta^* = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ como podremos ver a continuación:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\Delta AB &= \left(E' + \frac{Z}{r}\right)B \Rightarrow \\ -\frac{1}{2}\left(\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)AB + \frac{1}{r^2}\Delta^*BA\right) &= E'AB + \frac{Z}{r}AB \\ -\left(\frac{A''}{A} + \frac{2}{r}\frac{A'}{A} + 2\left(E' + \frac{Z}{r}\right)\right)r^2 &= \frac{\Delta^*B}{B} = \lambda \end{aligned}$$

Tenemos que $\Delta^*B = \lambda B$ por lo que ya está demostrado que tiene que ser autofunción, ahora, basándonos en lo estudiado en la sección anterior tenemos que el autovalor es $\lambda = -l(l+1)$ y que B será combinación lineal de armónicos esféricos $\{Y_{lm}\}_{m=-l}^l$, así que podremos suponer que $B = Y_{lm}$. Nos falta conocer $A(r)$ y para ello debemos resolver esta EDO:

$$A'' + \frac{2}{r}A' + 2\left(E' + \frac{Z}{r}\right)A = \frac{l(l+1)}{r^2}A$$

que llamando $f_l(r) = rA(r)$ nos da

$$(25) \quad f_l'' + \frac{2Z}{r}f_l - \frac{l(l+1)}{r^2}f_l - \chi^2 f_l = 0 \quad \chi^2 = -2E'$$

Así que nos basta con hallar una forma general para las soluciones de (25) y esto lo haremos siguiendo [FY09].

Teniendo en cuenta el comportamiento cuando $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$ conviene buscar soluciones de la forma $f_l(r) = r^{l+1}e^{-\chi r}P_l(r)$ siendo $P_l(r)$ una serie de potencias convergente con $P_0 \neq 0$.

Llegamos a la forma de P_l con dos pasos. Primero suponemos que las soluciones son de la forma $f = e^{-\chi r}g$ derivando y sustituyendo tenemos: $g'' + 2\chi g' + \frac{2Z}{r}g - \frac{l(l+1)}{r^2}g = 0$ y ahora buscamos $g = r^{l+1}P_l(r)$ volvemos a derivar y sustituir y concluimos que la serie debe cumplir:

$$P_l'' + \left(\frac{2(l+1)}{r} - 2\chi\right)P_l' + \left(\frac{2Z}{r} - \frac{2\chi(l+1)}{r}\right)P_l = 0.$$

Esto escrito en forma de serie es:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{\infty} p_i [i(i-1)r^{i-2} + 2(l+1)ir^{i-1} - 2i\chi r^{i-1} + (2Z - 2\chi l - 2\chi)r^{i-1}] &= 0 \Rightarrow \\ \sum_{i=0}^{\infty} r^{i-1} p_{i+1} [(i+1)i + 2(l+1)(i+1)] + r^{i-1} [-p_i(2\chi(i+l+1) - 2Z)] &= 0 \end{aligned}$$

Para que se anule la suma necesitamos que se anule cada término por lo que podemos concluir que los coeficientes de la serie serán:

$$(26) \quad p_{i+1} = 2 \frac{\chi(i+l+1) - Z}{(i+1)(i+2l+2)} p_i$$

Podemos ver que para r grande los coeficientes se comportan como

$$p_{i+1} \cong \frac{2\chi}{i+1} \Rightarrow p_i \cong \frac{(2\chi)^i}{i!} \Rightarrow \sum_{i=1}^{\infty} p_i r^i = ce^{2\chi r}$$

por lo que la solución crecería demasiado rápido cuando $r \rightarrow \infty$ $f_l(r) = cr^{l+1}e^{\chi r}$ y no sería de cuadrado integrable.

La solución para que esto no pasase es que algún p_i se anulase ya que así se anularían todos los posteriores. Fijándonos en los coeficientes podemos observar que existen valores para los que la serie se rompe. Estos son los valores que nos interesan. Si tenemos k tal que, $p_k \neq 0$ y $p_{k+1} = 0$ entonces por lo ya dicho $p_{k+i} = 0$ si $i = 1, 2, 3, \dots$. Para tener un primer coeficiente nulo necesitamos que $\chi = \chi_{kl} = \frac{Z}{k+l+1}$ que es equivalente a que la energía tome el valor $E_{kl} = -\frac{Z^2}{2(k+l+1)^2}$.

Si llamamos $n = k + l + 1$ entonces $E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}$ y deshaciendo el cambio (24) nos queda $E_n = -\frac{K^2 e^4 m_e Z^2}{2\hbar^2 n^2}$ con $n = 1, 2, 3, \dots$ y dado n , l puede tomar valores $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

Por ello tenemos que toda solución de (23) se puede poner como:

$$\begin{aligned} \Phi_{nlm} &= BA = r^l e^{-\chi n r} P_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \text{ que deshaciendo el cambio (24) nos queda:} \\ \Psi_{nlm} &= r^l e^{-a_n r} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \text{ con } R_{nl} \text{ un polinomio de grado } n-l-1. \end{aligned}$$

□

El a_n surge al realizar el cambio $a_n = \frac{\chi n}{\lambda}$. A continuación vamos a ver como calcular algunas de estas soluciones.

Primero el caso mas sencillo, Ψ_{100} es decir $n = 1, l = m = 0$ para sustituir en la ecuación debemos tener en cuenta que el valor de $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}$ y R_{nl} es un polinomio de grado 0, por lo tanto es una constante, y como debe estar la solución normalizada la hallaremos en función de ello. Por tanto tenemos $\Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = e^{-r/r_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} C$ y hallamos la C que para que este normalizado debe ser $\frac{2}{r_0^{3/2}}$, ya tenemos $\Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = e^{-r/r_0} (\pi r_0^3)^{-1/2}$. Siendo $r_0 = \lambda_0$ teniendo en cuenta el cambio (24).

Siguiendo el mismo procedimiento llegaríamos a $\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) = C e^{-r/2r_0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta$ solo falta hallar la C mediante $\int |\Psi_{210}|^2 = 1$ con lo que llegamos a $\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) = (32\pi r_0^5)^{-1/2} e^{-r/2r_0} \cos \theta$.

Como ya sabemos la materia emite y absorbe solo ciertas frecuencias específicas que caracterizan a los elementos que la componen. Esto se puede estudiar mediante un método llamado espectroscopía en el que la intensidad de las líneas espectrales depende de la probabilidad de transición de los electrones.

A su vez todo esto, en el caso estudiado tiene que ver con los E_n específicos que hemos visto que puede tener la ecuación de ondas. Esto se debe a que estas son las energías que deben darse a un electrón o que este emitirá para cambiar de orbital, niveles alrededor del núcleo del átomo en los que se pueden encontrar los electrones.

Referencias

- [Apo74] T. M. Apostol. *Mathematical analysis*. Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Mass.-London-Don Mills, Ont., second edition, 1974.
- [Cha13a] F. Chamizo. Aplicaciones del análisis armónico. <http://www.uam.es/fernando.chamizo/libreria/>, 2012/13.
- [Cha13b] F. Chamizo. Consideraciones muy básicas sobre la ecuación de Schrödinger. <http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html>, 2012/13.
- [Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). <http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html>, 2015.
- [DM72] H. Dym and H. P. McKean. *Fourier series and integrals*. Academic Press, New York, 1972. Probability and Mathematical Statistics, No. 14.
- [Eva10] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, second edition, 2010.
- [FLS63] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on physics. Vol. 1: Mainly mechanics, radiation, and heat*. Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1963.
- [Fol08] G. B. Folland. *Quantum field theory*, volume 149 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2008. A tourist guide for mathematicians.
- [FY09] L. D. Faddeev and O. A. Yakubovskii. *Lectures on quantum mechanics for mathematics students*, volume 47 of *Student Mathematical Library*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2009. Translated from the 1980 Russian original by Harold McFaden, With an appendix by Leon Takhtajan.
- [GP78] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica*. Alhambra, Madrid, 1978.
- [Iwa97] H. Iwaniec. *Topics in classical automorphic forms*, volume 17 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1997.
- [Mes62] A. Messiah. *Quantum mechanics. Vol. II*. Translated from the French by J. Potter. North-Holland Publishing Co., Amsterdam; Interscience Publishers, a division of John Wiley & Sons, Inc., New York, 1962.
- [Tao04] T. Tao. Lecture notes 8 for 247B. <http://www.math.ucla.edu/~7Etao/247b.1.07w/notes8.pdf>, 2004.

- [Ros74] S. L. Ross. *Differential equations*. Xerox College Publishing, Lexington, Mass.-Toronto, Ont., second edition, 1974.
- [Rud87] W. Rudin. *Real and complex analysis*. McGraw-Hill Book Co., New York, third edition, 1987.
- [Sch26] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys.Rev.*, 28:1049-1070, Dec 1926.
- [Wik16] Wikipedia. Copenhagen interpretation — wikipedia, the free encyclopedia, 2016. [Online; accessed 28-November-2016].
- [Ynd03] F. J. Ynduráin. *Mecánica cuántica*. Grupo Planeta, 2003.