# ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

# FUNCIÓN DE ONDA Ψ

Debe ser normalizada

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dV = 1$$

Probabilidad en una dimensión

$$P_{x_1 < x < x_2} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 \, dx$$

$$Y = F(t \mp \frac{x}{u})$$

$$Y = Ae^{-i\omega(t - \frac{x}{u})}$$

# LA ECUACIÓN DE ONDA CLÁSICA

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

Describe la propagación de una onda "y" en dirección "x" a una velocidad $\vec{u}$.

# ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: DEPENDIENTE DEL TIEMPO

$\partial\Psi/\partial t = -(iE/\hbar)\,\Psi$

$i\hbar\,\partial\Psi/\partial t = E\Psi$

$$\Psi = Ae^{-j\omega\left(t-\frac{x}{u}\right)}$$

$\partial\Psi/\partial x = -(ip/\hbar)\,\Psi$

$\partial 2\Psi/\partial x2 = -p\char`^2/\hbar\char`^2\,\Psi$

$$\omega = 2\pi v$$

$$u = \lambda v$$

$$\mathrm{E} = hv = 2\pi\hbar v$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

$$\Psi = Ae^{-\left(\frac{j}{\hbar}\right)(Et-px)}$$

# ECUACIÓN DE SHRÖDINGER DEPENDIENTE DEL TIEMPO EN UNA DIMENSIÓN

$$\Psi = Ae^{-\left(\frac{j}{\hbar}\right)(Et-px)}$$

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

Se deriva dos veces sobre la posición y una vez en tiempo

$$\partial 2\Psi/\partial x2 = -\, p^{\wedge}2/\hbar^{\wedge}2\ \Psi$$

$$E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + U_{(x;t)}\Psi$$

Se plantea la energía total de la partícula y se multiplica por Psi

$$i\hbar\ \partial\Psi/\partial t = E\Psi$$

$$\boxed{j\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 x^2} + U\Psi}$$

# Ecuación de Schrödinger:
# Forma de estado estable

$$\Psi = Ae^{-j(\hbar^{-1})(Et-px)}$$

$$\Psi = \psi(x)e^{-\frac{jEt}{\hbar}}$$

$$j\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 x^2} + U\Psi$$

$$E\psi e^{-\left(\frac{jE}{\hbar}\right)t} = \frac{-\hbar^2}{2m}e^{-\left(\frac{jE}{\hbar}\right)t} * \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi e^{-\left(\frac{jE}{\hbar t}\right)}$$

Despejamos $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$

$$(E-U)\psi\frac{2m}{\hbar^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$$

Si E es cuantizable, el sistema es estable

# Valores Propios y Funciones Propias

Son soluciones no triviales y las funciones de onda correspondiente a estos valores se llaman funciones propias.

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

Valores propios para los niveles de energía discreta del átomo de hidrógeno.

**Ecuación de valores propios:**

$$\hat{G}\psi_n = G_n \psi_n$$

# PARTÍCULA EN UNA CAJA

Se interpreta como una onda estacionaria

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Energía total de la partícula dentro de la caja

$$E = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \qquad n = 1, 2, 3 \;\ldots$$

# EJEMPLO: ELECTRÓN CONFINADO EN UNA CAJA

6. Interpretación de los niveles energéticos:

E1 = 38eV

E2 = 4,38eV = 152eV

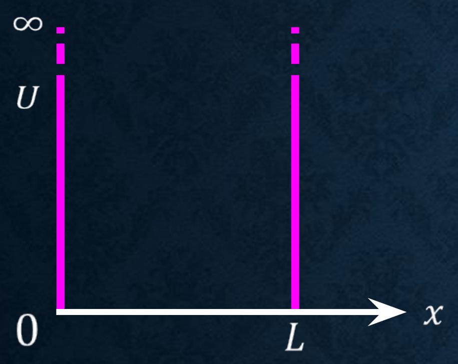
E3 = 9,38eV = 342eV

E4 = 16,38eV = 608eV

El electrón en sistemas confinados solo puede existir para ciertos estados energéticos discretos.

Que pasa con la v? y en objetos grandes?

# Partícula en una Caja:




Condición para resolver la ecuación de onda de Schrödinger:

La función de onda debe ser 0 en los extremos de la caja.

- La energía potencial U será igual a 0 en el interior de la caja.
- $\psi = 0$ fuera de la caja, para $x \leq 0$ y $x \geq L$

Entonces al ser U = 0 la ecuación queda:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0$$

Para resolver suponemos que $\psi = e^{rx}$ r = cte.

Entonces su derivada segunda respecto de x es:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = r^2 e^{rx}$$

Sustituimos y operamos algebraicamente despejando r.

$$r = \pm j * \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}$$

Reemplazamos en la ecuación principal, operamos y obtenemos.

$$\psi(x) = (C_1 + C_2) * \cos(\dots) + j(C_1 - C_2) * \sin(\dots)$$

Como C1 y C2 son constantes entonces decimos que j(C1-C2)= A, y (C1 + C2) = B.

$$\psi(x) = B * \cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x) + A * \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x)$$

Aplicando las condiciones límites mencionadas anteriormente obtenemos:

$$\psi(x) = A * \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x)$$

En x = L va a ser 0 para todos los valores de $E_n$

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Reemplazamos E

$$\psi(x) = A * \sin(\frac{n\pi}{L} x)$$

Obtenemos la función propia para los valores $E_n$

$$\psi_n(x) = A * \sin(\frac{n\pi}{L} x)$$

Ahora debemos calcular $|\psi|^2$ sobre un espacio finito $0 \leq x \leq L$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx$$

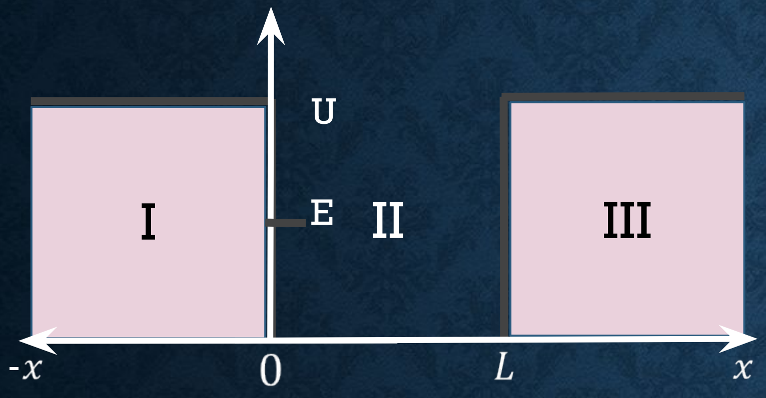
$$\downarrow$$

$$\frac{A^2}{2} L = \int_0^L |\psi|^2 dx$$

Para normalizar la función $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$ entonces $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} * \sin(\frac{n\pi}{L} x)$$

# <u>Pozo de potencial finito:</u>

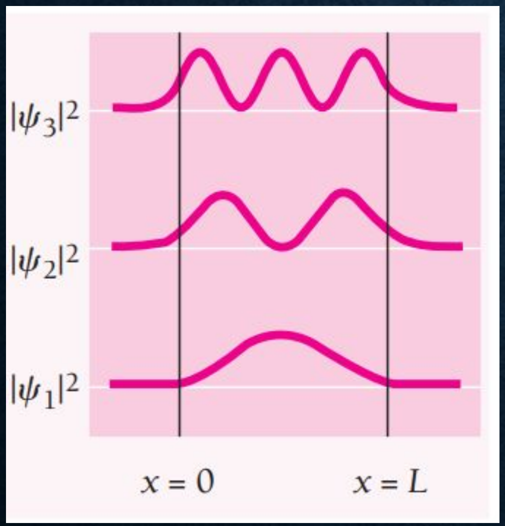



Tenemos un pozo de potencial, de altura U y ancho L. Si E < U, entonces la ecuación de Schrödinger es:

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

$$Remplazamos\ en\ a = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}\ para\ facilitar\ los\ calculos:$$

$$\frac{\partial \psi^2}{\partial^2 x} - a^2\,\psi = 0$$



Usamos el mismo método que aplicamos en pozo de potencial finito:

$$\psi = e^{rx}$$

Entonces su derivada segunda respecto de x es:

$$\frac{\partial \psi^2}{\partial^2 x} = r^2 e^{rx}$$

$luego\ de\ remplazar\ en\ la\ ecuacion\ de$ Schrödinger $operamos\ llegando\ a$:

$$\mathrm{r} = \pm a$$

Entonces la solución general de Schrödinger para un pozo de potencial finito en regiones I y III es:

$$\psi I = C\ e^{a.x} + D\ e^{-ax}$$

$$\psi III = F\ e^{ax} + G\ e^{-ax}$$

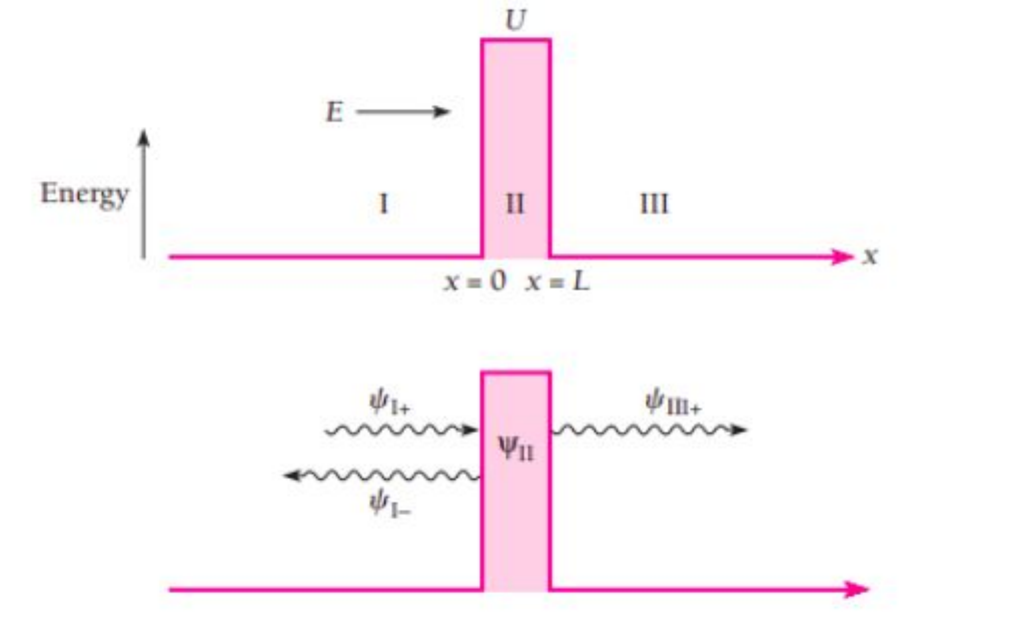
Pero las soluciones de Schrödinger deben ser finitas para que tengan un sentido físico

$$\psi I = C\ e^{a.x} \qquad \psi III = G\ e^{-ax}$$

Para la Región II donde $0 < x < L$ usamos la ecuación que encontramos para la partícula en una caja

$$\psi(x) = B * \cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x) + A * \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x)$$

# Efecto túnel:




Probabilidad que una partícula atraviese la barrera de potencial es:

$$T = e^{-2LK}$$

siendo k:

$$K = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

# MUCHAS GRACIAS