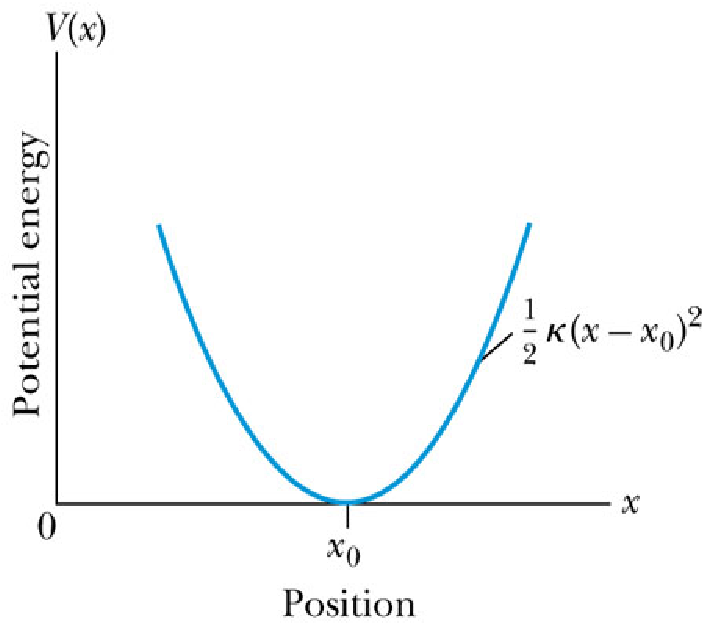
Sistemas Simples

Oscilador armónico



Para un potencial cuadrático:

$$\boxed{V(x) = \tfrac{1}{2}\kappa(x - x_0)^2}$$

Introducir en la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\kappa x^2}{2}\right)\psi = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{m\kappa x^2}{\hbar^2}\right)\psi$$

Oscilador armónico

Soluciones son de la forma

$$\psi_n = H_n(x)e^{-\alpha x^2/2}$$

donde $\boldsymbol{H_n(x)}$ son los **Polinomios de Hermite** de orden n.

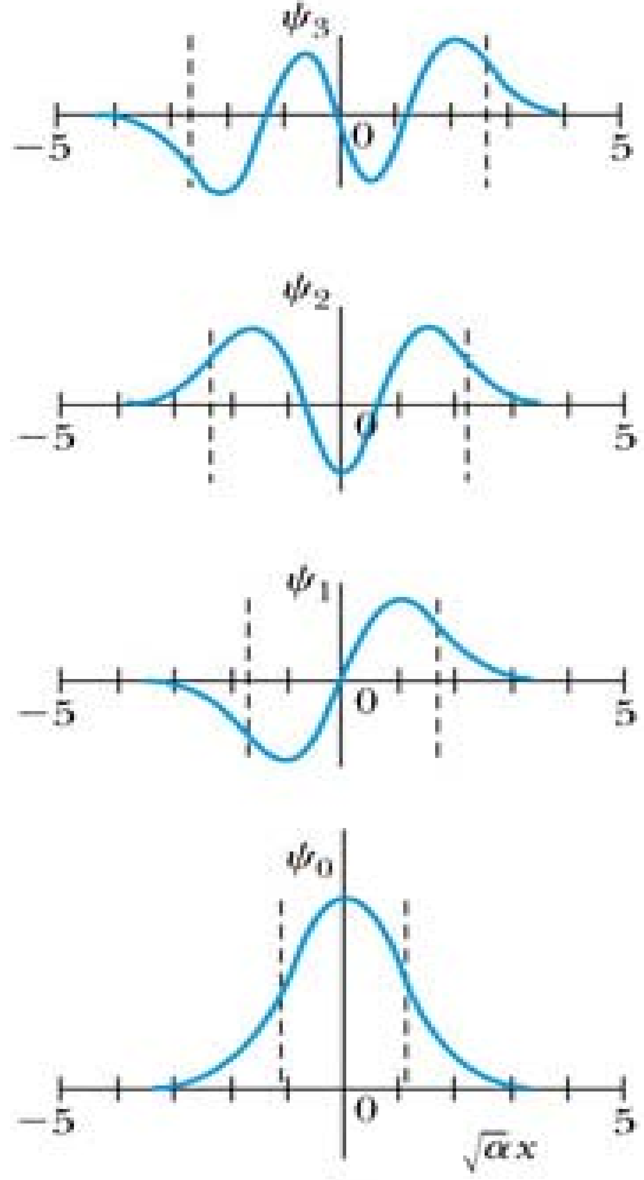
Wave functions

$$\psi_3(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{\alpha}x)(2\alpha x^2 - 3)e^{-\alpha x^2/2}$$

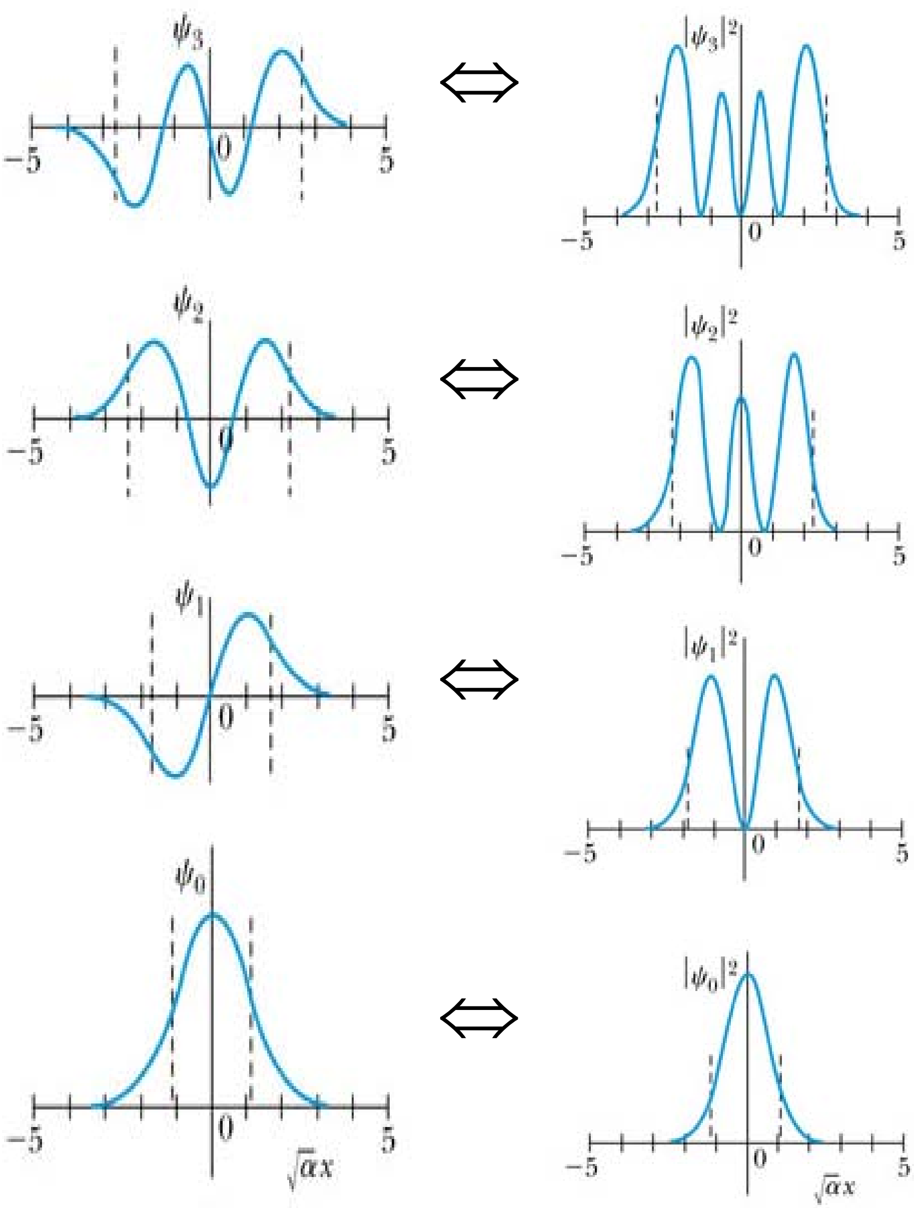
$$\psi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\alpha x^2 - 1)e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2\alpha}\, x e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$



Función de Onda **Probabilidad**



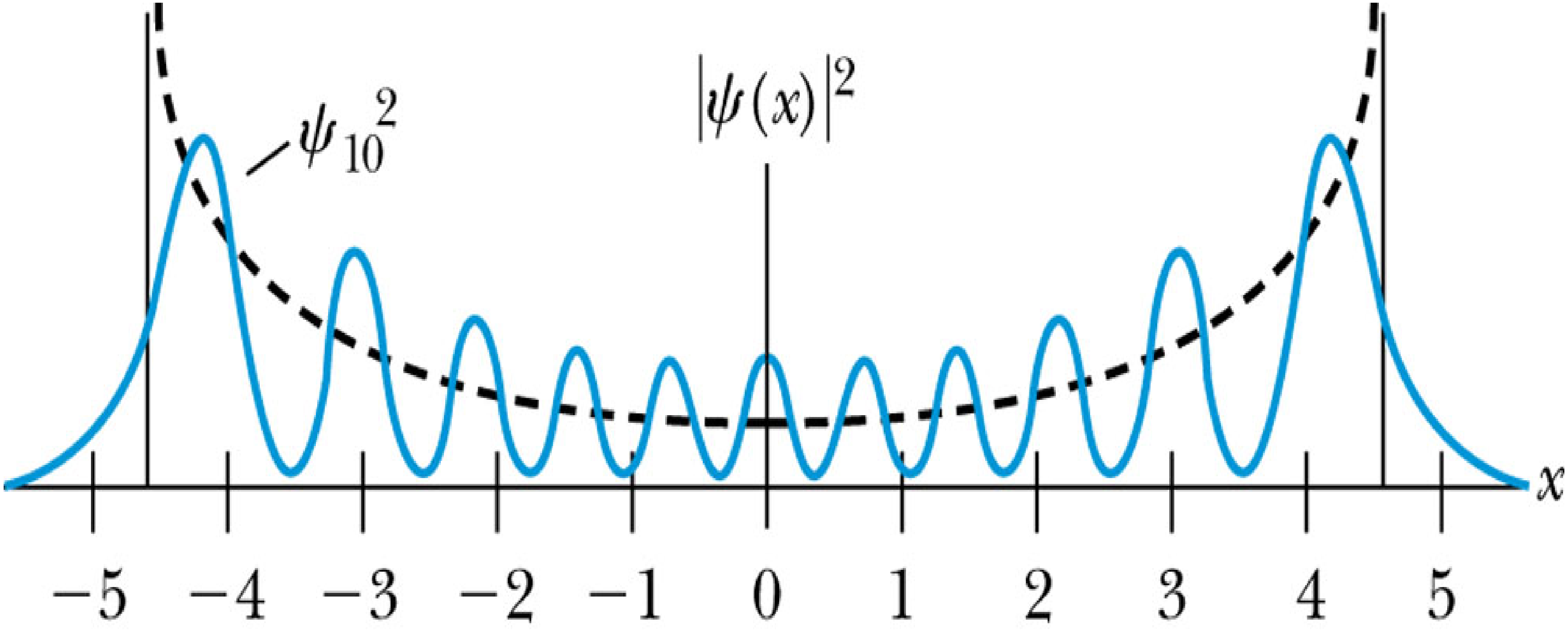
- En un movimiento armónico clásico (péndulo), la probabilidad de encontrar la partícula en los bordes es mayor que en el centro.

- En el oscilador cuántico es todo lo contrario a bajas energías.

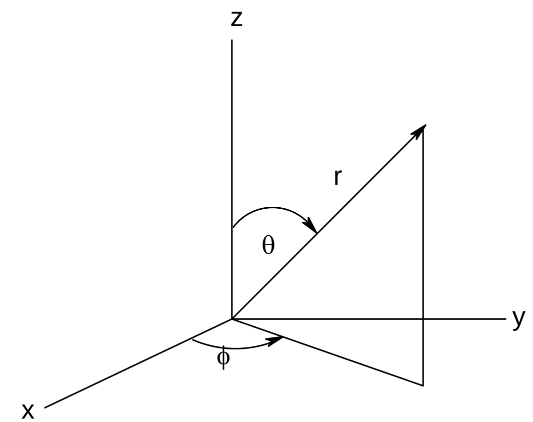
El límite clásico y el Principio de Correspondencia

A medida que aumenta el número cuántico, la mecánica cuántica se va pareciendo al límite clásico.

Mecánica Cuántica $\xrightarrow{n\to\infty}$ Mecánica Clásica



El Átomo de Hidrógeno



Ecuación de Schrödinger

$$\nabla^2\Psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\Psi = 0$$

En coordenadas polares

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial\left[\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right]}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\Psi = 0$$

Solución de la forma $\Psi(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$

Separar variables:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial\left[r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right]}{\partial r} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{e^2}{r}\right]r^2 = -\frac{1}{Y\sin\theta}\frac{\partial\left[\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right]}{\partial\theta} - \frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = l(l+1)$$

Soluciones

$$\boxed{R_{nl}(\rho) = N_{nl}\rho^{l} e^{-\rho/2} L_{n+1}^{2l+1}(\rho)}$$

Con $\rho = \dfrac{2\mu e^2}{n\hbar^2} r$

$L_{n+1}^{2l+1}(\rho)$: **Polinomio Asociado de Laguerre**

$$\boxed{Y_{lm}(\theta,\phi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}}$$

Esférica Armónica

$P_l^{|m|}(\cos\theta)$ **Polinomio Asociado de Legendre**

Energía cuantizada

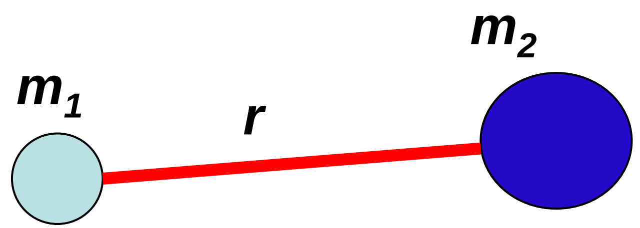
$$\boxed{E_n = \frac{-\mu e^4}{2n^2\hbar^2}}$$

$$\boxed{n = 1,2,3,\ldots \qquad l \le n-1 \qquad -l \le m \le l}$$

Funciones de Onda Normalizadas

n	l	m	$R_{nl}(\rho)$	$Y_{lm}(\theta\phi)$
1	0	0	$2\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\rho}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(2-\rho)e^{-\rho/2}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2	1	1	$\frac{1}{\sqrt{24}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho\, e^{-\rho/2}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\, e^{0\phi}$
2	1	±1	$\frac{1}{24}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho\, e^{-\rho/2}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\, e^{\pm\phi}$
3	0	0	$\frac{2}{81\sqrt{3}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(27-18\rho+2\rho^2)e^{-\rho/3}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
3	1	0	$\frac{1}{81\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}(6\rho-\rho^2)e^{-\rho/3}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\, e^{0i\phi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{30}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^2 e^{-\rho/3}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)e^{0\phi}$

Rotor Rígido



Ecuación de Schrödinger

$$\nabla^2\Psi + \frac{2IE_{Rot}}{\hbar^2}\Psi = 0 \qquad I = \mu r^2$$

$$\frac{1}{r^2\sin\theta}\left\{\frac{\partial\left[\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right]}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right\} + \frac{2IE_{Rot}}{\hbar^2}\Psi = 0$$

Soluciones

Autovalores

$$\boxed{E_J = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)}$$

Autofunciones

$$\Psi_{JM} = \Phi_M(\phi)\Theta_{JM}(\theta)$$

$J = 0,1,2,3,\ldots$ **(no viola principio de incertidumbre)**

Algunas de las primeras funciones

$$\Psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Psi_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$\Psi_{1\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\Psi_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$\Psi_{2\pm1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$\Psi_{2\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$$