

Tema 3. Teoría ondulatoria de Schrödinger

Fernando de León Pérez
fdlp@unizar.es

Departamento de Física de la Materia Condensada

15 de septiembre de 2026



Bibliografía

Quantum mechanics, Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë,
Volumen I, Capítulo I.

Complementos imprescindibles:

- G_I . Paquete de onda gaussiano unidimensional: dispersión del paquete de ondas.
- H_I . Estados estacionarios de una partícula en potenciales cuadrados unidimensionales.
- J_I . Comportamiento de un paquete de onda en un escalón de potencial.

Anexos (Vol II):

- I. Series de Fourier y transformadas de Fourier.
- II. La función delta de Dirac.



Tema 3. Teoría ondulatoria de Schrödinger

- 1 Introducción
- 2 Ecuación de Schrödinger
- 3 Paquete de onda
 - Definición
 - Perfil del paquete de onda en $t = 0$
 - Evolución temporal de un paquete de onda libre
- 4 Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 5 Potencial escalar independiente del tiempo
 - Solución de la ecuación de Schrödinger
 - Ecuación de continuidad
 - Potencial rectangular unidimensional
 - Relación entre los problemas 1D y 3D



Introducción

- En este curso estudiaremos la mecánica cuántica no relativista de una partícula.
- Ley de conservación de la materia: Las partículas que consideraremos, como el electrón, no pueden ser creadas ni destruidas.
- Los efectos relativistas de creación y aniquilación de partículas no serán tratados en este curso.
- Tampoco estudiaremos los fotones.
- En este tema introduciremos ideas básicas sobre la física cuántica de una partícula.
- La presentación rigurosa del formalismo matemático y su aplicación a la formulación axiomática de la mecánica cuántica se pospone a los temas 4 y 5.



Introducción

- El estado clásico de una partícula está determinado por seis parámetros, las tres componentes del vector de posición y las tres componentes de la velocidad, que varían en el tiempo.
- El estado cuántico de la partícula está determinado por la función de onda $\psi(\vec{r}, t)$ que depende de infinitos parámetros (su valor en todos los puntos del espacio).
- No emplearemos las trayectorias clásicas de una partícula determinadas por las condiciones iniciales. La partícula clásica solo puede pasar por una rendija en el experimento de Young de la doble rendija.
- Estudiaremos la propagación de $\psi(\vec{r}, t)$ en el tiempo. $\psi(\vec{r}, t)$ pasa por ambas rendijas simultáneamente.

Tema 3. Teoría ondulatoria de Schrödinger

- 1 Introducción
- 2 Ecuación de Schrödinger
- 3 Paquete de onda
 - Definición
 - Perfil del paquete de onda en $t = 0$
 - Evolución temporal de un paquete de onda libre
- 4 Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 5 Potencial escalar independiente del tiempo
 - Solución de la ecuación de Schrödinger
 - Ecuación de continuidad
 - Potencial rectangular unidimensional
 - Relación entre los problemas 1D y 3D



Ecuación de Schrödinger

- La ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m que se mueve bajo la acción de un potencial V ,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi,$$

donde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$$

es el operador hamiltoniano, es la ecuación de onda (ecuación de movimiento) que describe la evolución de la función de onda $\psi(\vec{r}, t)$.



Ecuación de Schrödinger

- La función de onda $\psi(\vec{r}, t)$ caracteriza el estado cuántico de una partícula.
- La ecuación de Schrödinger es lineal y homogénea.
- Esto nos permite emplear el principio de superposición: si $\psi_1(\vec{r}, t)$ y $\psi_2(\vec{r}, t)$ son dos soluciones de la ecuación de Schrödinger, su combinación lineal,

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1\psi_1(\vec{r}, t) + c_2\psi_2(\vec{r}, t),$$

donde c_1 y c_2 son dos constantes en general complejas, también es solución de la misma ecuación.

- $\psi(\vec{r}, t)$ contiene toda la información que podemos conocer sobre la partícula.
- $\psi(\vec{r}, t)$ se interpreta como la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula en el entorno de $\vec{r}$ en el instante t .



Ecuación de Schrödinger

- La probabilidad infinitesimal de que una partícula se encuentre en el volumen infinitesimal $d^3r = dx dy dz$ situado en el punto $\vec{r}$ en el instante de tiempo t es

$$d\mathcal{P}(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r,$$

donde $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ es una densidad de probabilidad.

- La probabilidad total de encontrar la partícula en cualquier punto del espacio en un instante de tiempo t ,

$$\int d\mathcal{P}(\vec{r}, t) = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

(condición de normalización de $\psi(\vec{r}, t)$).

- En este caso decimos que $\psi(\vec{r}, t)$ es de *cuadrado integrable*: la integral anterior es finita.



Ecuación de Schrödinger

Principio de descomposición espectral:

- El resultado que se obtiene al medir una magnitud física pertenece a un conjunto de autovalores $\{a\}$.
- A cada autovalor se asocia una autofunción $\psi_a(\vec{r})$.
- Si el estado de la partícula en el instante t_0 de la medición es $\psi(\vec{r}, t_0) = \psi_a(\vec{r})$, el resultado de la misma siempre será a .
- En el caso general, se desarrolla $\psi(\vec{r}, t_0)$ en las autofunciones $\psi_a(\vec{r})$,

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \sum_a c_a \psi_a(\vec{r}).$$

- La probabilidad de medir el autovalor a en el estado $\psi(\vec{r}, t_0)$ es

$$\mathcal{P}_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2}.$$



Ecuación de Schrödinger

Principio de descomposición espectral:

- La suma $\sum_a |c_a|^2$ en el denominador de $\mathcal{P}_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2}$ garantiza que

$$\sum_a \mathcal{P}_a = 1.$$

- Si el resultado de la medición es a , la función de onda de la partícula inmediatamente después de la medición se transforma bruscamente a

$$\psi'(\vec{r}, t_0) = \psi_a(\vec{r}).$$



Tema 3. Teoría ondulatoria de Schrödinger

- 1 Introducción
- 2 Ecuación de Schrödinger
- 3 Paquete de onda
 - Definición
 - Perfil del paquete de onda en $t = 0$
 - Evolución temporal de un paquete de onda libre
- 4 Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 5 Potencial escalar independiente del tiempo
 - Solución de la ecuación de Schrödinger
 - Ecuación de continuidad
 - Potencial rectangular unidimensional
 - Relación entre los problemas 1D y 3D



Definición

Caso de una partícula libre

- La ecuación de Schrödinger para una partícula libre de masa m que se mueve en el espacio 3D es (Tema 2)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t).$$

- La función de onda,

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}-Et}{\hbar}} = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)},$$

donde $E = \hbar\omega$ y $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, es solución de la ecuación de Schrödinger.

- Si sustituimos $\psi(\vec{r}, t)$ en la ecuación de Schrödinger, obtenemos la relación de dispersión,

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{o} \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m},$$

$$\text{con } k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}.$$



Definición

Caso de una partícula libre

- Como la densidad de probabilidad de la onda plana, $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2$, es uniforme en todo el espacio, $\psi(\vec{r}, t)$ no es de cuadrado integrable ($\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ diverge) y no puede representar un estado físico (como ocurre para una onda plana en óptica).
- De acuerdo al principio de superposición, cualquier combinación de ondas planas que satisfagan la relación de dispersión también es solución de la ecuación de Schrödinger.
- Paquete de onda 3D: se define mediante la siguiente superposición de infinitas ondas planas,

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) e^{i[\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(k)t]} d^3k,$$

donde $g(\vec{k})$ es una función compleja, diferenciable dentro de la integral, y $d^3k = dk_x dk_y dk_z$.



Definición

Caso de una partícula libre

- Es posible demostrar que cualquier solución de cuadrado integrable se puede desarrollar como un paquete de onda (mostraremos a continuación cómo elegir la función $g(\vec{k})$ adecuada).
- Por lo tanto, $\psi(\vec{r}, t)$ sí representa el estado físico de la partícula.
- De modo que, aunque una onda plana no es de cuadrado integrable, la combinación lineal adecuada de infinitas ondas planas sí lo es.
- Esta propiedad nos permite realizar cálculos más sencillos con ondas planas y, al finalizar los cálculos, construir un paquete de onda si necesitamos una función de cuadrado integrable.



Definición

Caso de una partícula libre

- Por comodidad, emplearemos a continuación un paquete de onda 1D que se propaga paralelo al eje X ,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk.$$

- La función de onda en el instante $t = 0$ es igual a

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk,$$

lo que nos permite identificar a $g(k)$ como la transformada de Fourier de $\psi(x, 0)$,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx.$$



Definición

Paquete de onda en el caso general

- Como las funciones $\psi(x, 0)$ y $g(k)$ no dependen de $\omega(k)$, su validez no se limita al caso de una partícula libre.
- La función de onda en $t = 0$ de una partícula que se mueve bajo la acción de un potencial V también puede ser desarrollada como

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk,$$

donde $g(k)$ es su transformada de Fourier,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx.$$

- Si conocemos $\omega(k)$ para un caso concreto, podemos construir $\psi(x, t)$ a partir de $\psi(x, 0)$:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk.$$



Definición

Paquete de onda en el caso general

- Ahora empleamos las variables ω y $\vec{k}$ para obtener expresiones más simples. Luego usaremos E y $\vec{p}$. En función de estas variables, el paquete de onda en $t = 0$ se define como:

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \bar{\psi}(\vec{p}, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3 p.$$

Su transformada de Fourier es

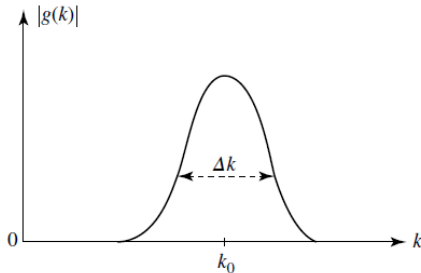
$$\bar{\psi}(\vec{p}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d^3 r.$$

- Más adelante desarrollaremos la idea de que existen dos espacios alternativos en $\vec{r}$ y $\vec{p}$ con respectivas densidades de probabilidades $|\psi(\vec{r}, 0)|^2$ y $|\bar{\psi}(\vec{p}, 0)|^2$.



Perfil del paquete de onda en $t = 0$ Perfil del paquete de onda en $t = 0$

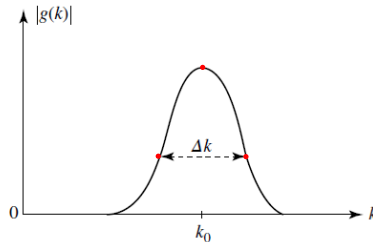
Supongamos que el perfil de $g(k)$, la transformada de $\psi(x, 0)$, es como el mostrado en la figura, con un pico bien definido en $k = k_0$ y una anchura Δk , que puede ser, por ejemplo, la anchura a la mitad de la altura (FWHM, por sus siglas en inglés):



Ejemplo 1: Superposición de tres ondas planas

Ejemplo 1: Entre las infinitas ondas que se superponen, escojamos únicamente aquellas tres, cuyos vectores de onda se marcan con puntos rojos en la figura, para entender cuantitativamente el comportamiento de $\psi(x, 0)$.

- Los vectores de onda toman los valores: $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$, k_0 y $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$.
- Las amplitudes de las ondas son proporcionales a $\frac{1}{2}$, 1 y $\frac{1}{2}$.



Perfil del paquete de onda en $t = 0$

Ejemplo 1: Superposición de tres ondas planas

- $\psi(x, 0)$ es igual a la suma de las tres ondas

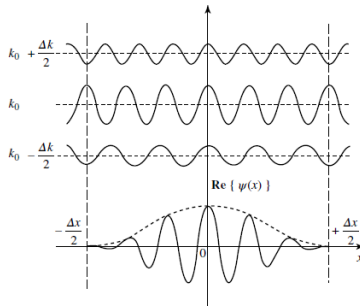
$$\begin{aligned}\psi(x, 0) &= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{ik_0x} + \frac{e^{i(k_0 - \frac{\Delta k}{2})x}}{2} + \frac{e^{i(k_0 + \frac{\Delta k}{2})x}}{2} \right] \\ &= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right) \right].\end{aligned}$$



Perfil del paquete de onda en $t = 0$

Ejemplo 1: Superposición de tres ondas planas

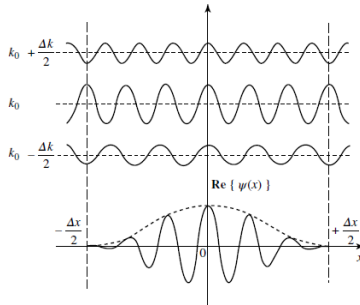
- En $x = 0$, las tres ondas están en fase, interfieren constructivamente y dan lugar a un máximo de la onda resultante.



Perfil del paquete de onda en $t = 0$

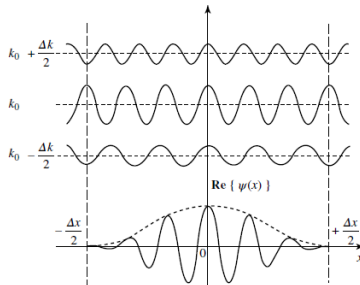
Ejemplo 1: Superposición de tres ondas planas

- Al alejarnos de $x = 0$, aumenta la diferencia de fase entre las ondas, que comienzan a interferir destructivamente, disminuyendo la amplitud de la onda resultante.
- En los puntos que denotamos como $x = \pm \frac{\Delta x}{2}$, la diferencia de fase $\pm \frac{\Delta k}{2} \frac{\Delta x}{2} = \pm \pi$ y la amplitud de la onda se anula totalmente.



Ejemplo 1: Superposición de tres ondas planas

- La relación $\Delta x \Delta k = 4\pi$ indica que Δx es inversamente proporcional a Δk . Si disminuimos Δk aumentará la extensión Δx del paquete de onda y viceversa.
- Los máximos secundarios que se observan en la figura se deben a que hemos sumado un número pequeño de ondas. Cuando superponemos infinitas ondas, se obtiene un único máximo principal.



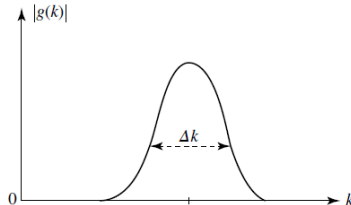
Ejemplo 2: Paquete de onda gaussiano

Ejemplo 2: $g(k)$ puede ser una función gaussiana,

$$g(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2},$$

donde a tiene dimensión de longitud. El coeficiente que multiplica a la función garantiza que tanto $g(k)$ como $\psi(x, 0)$ estén normalizadas. El FWHM es $\Delta k = \frac{4\sqrt{\ln 2}}{a}$.

En este ejemplo emplearemos los resultados del cálculo de algunas integrales que son parte del problema propuesto 8.



Ejemplo 2: Paquete de onda gaussiano

- Si sustituimos la función gaussiana $g(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{a}{2}(k-k_0)^2}$ en $\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk$, obtenemos una expresión analítica para $\psi(x, 0)$,

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{a^2}},$$

que también es una función gaussiana, centrada en $x = 0$ y con FWHM $\Delta x = 2\sqrt{\ln 2}a$.

- Al comparar las anchuras características de $\psi(x, 0)$ y $g(k)$,

$$\Delta x = 2\sqrt{\ln 2}a,$$

$$\Delta k = \frac{4\sqrt{\ln 2}}{a},$$

comprobamos que son inversamente proporcionales.



Ejemplo 2: Paquete de onda gaussiano

- Para calcular de forma rigurosa el ancho de las densidades de probabilidad $|\psi(x, 0)|^2$ y $|g(k)|^2$ emplearemos, en lugar del FWHM, la desviación cuadrática media (lo explicaremos mejor en el tema 5),

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2},$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} = \frac{1}{a}.$$

que depende de los valores esperados de x , x^2 , k y k^2 :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, 0)|^2 dx = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{a^2}{4},$$

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} k |g(k)|^2 dk = k_0, \quad \langle k^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} k^2 |g(k)|^2 dk = \frac{1}{a^2} + k_0^2,$$

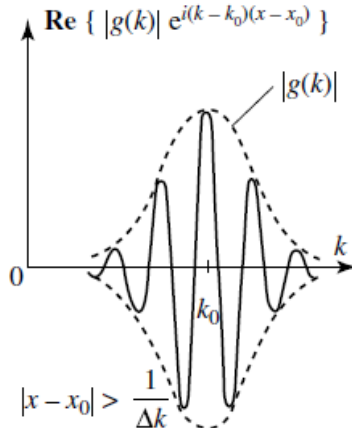
donde hemos usado que $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk = 1$.



Perfil del paquete de onda en $t = 0$

Centro del paquete de onda en $t = 0$

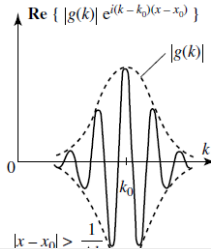
La parte real de la función a integrar para posiciones x alejadas de x_0 .



Perfil del paquete de onda en $t = 0$

Centro del paquete de onda en $t = 0$

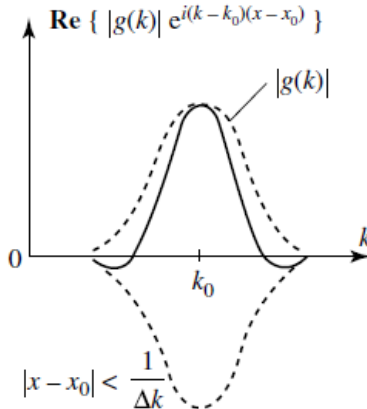
- Cuando $|x - x_0| > \frac{1}{\Delta k}$, la función de k a integrar oscila muchas veces en el intervalo Δk .
- Las contribuciones a la integral de los tramos positivos y negativos de la función oscilante se cancelan entre sí y el resultado de la integral resulta despreciablemente pequeño.
- Esto es consecuencia de la interferencia destructiva de las ondas superpuestas debido a la rápida variación de sus respectivas fases.



Perfil del paquete de onda en $t = 0$

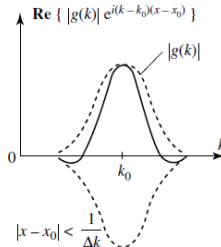
Centro del paquete de onda en $t = 0$

La parte real de la función a integrar para posiciones x cercanas a x_0 .



Perfil del paquete de onda en $t = 0$ Centro del paquete de onda en $t = 0$

- Cuando $|x - x_0| < \frac{1}{\Delta k}$, la función de k a integrar prácticamente no oscila en el intervalo Δk .
- Las ondas superpuestas están prácticamente en fase y su interferencia es constructiva.
- De modo que la mayor contribución a la integral proviene del entorno del punto x_0 , donde se obtiene un máximo local que podemos asociar con el centro del paquete.



Centro del paquete de onda en $t = 0$

- Por lo tanto, la posición inicial del centro del paquete de onda se encuentra en

$$x_0 = - \left. \frac{d\alpha}{dk} \right|_{k=k_0}.$$

- Por ejemplo, para la función gaussiana estudiada antes,

$$g(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2},$$

$g(k)$ es real, $\alpha(k) = 0$ y el centro del paquete de onda se encuentra en $x_0 = 0$, como comprobamos en los cálculos previos.

- Las propiedades discutidas fundamentan el *método de la fase estacionaria*, que nos permite obtener la posición del centro del paquete de forma inmediata.



Evolución temporal de un paquete de onda libre

Estudiaremos ahora la evolución temporal del paquete de onda 1D,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk.$$

para el caso concreto de una partícula libre, cuya relación de dispersión es

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

Velocidad de fase

- Podemos evaluar la propagación de una onda plana $e^{i(kx - \omega t)}$ a lo largo del eje x mediante los frentes de onda donde la fase $\alpha_t = kx - \omega t$ se mantiene constante.
- A partir de la condición de que la derivada de α_t se anula,

$$\frac{d\alpha_t}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0,$$

deducimos que la velocidad de fase es

$$v_f(k) = \frac{\omega}{k}.$$

- Debido a la relación de dispersión lineal de la luz en el vacío, $\omega = ck$, su velocidad de fase es constante, $v_f = c$.
- A los medios con v_f constante se les denomina no dispersivos.

Evolución temporal de un paquete de onda libre

Velocidad de fase

- En los materiales dispersivos, como los metales, tanto su índice de refracción, n , como v_f dependen de k ,

$$v_f(k) = \frac{c}{n(k)}.$$

- La relación de dispersión cuadrática de una partícula libre, $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$, determina que su comportamiento sea dispersivo con una v_f lineal,

$$v_f(k) = \frac{\hbar k}{m}.$$

- Por lo tanto, las ondas planas que constituyen el paquete de onda se propagan con diferente velocidad de fase.
- Comprobaremos que el centro del paquete no se mueve con la velocidad de fase media, $\frac{\hbar k_0}{2m}$, como podría esperarse.



Velocidad de grupo

Emplearemos el método de la fase estacionaria para estudiar el movimiento del centro del paquete de onda.

- La fase total en el argumento de la integral,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)| e^{i[kx + \alpha(k) - \omega(k)t]} dk,$$

ahora es $\alpha_t(k) = kx + \alpha(k) - \omega(k)t$.

- De la condición de que su derivada respecto a k se anula en $k = k_0$,

$$\left. \frac{d\alpha_t(k)}{dk} \right|_{k=k_0} = x + \left. \frac{d\alpha(k)}{dk} \right|_{k=k_0} - \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} t = 0,$$

podemos determinar la posición del centro del paquete de onda como función del tiempo,

$$x_c(t) = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} t - \left. \frac{d\alpha(k)}{dk} \right|_{k=k_0} = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} t + x_0.$$



Velocidad de grupo

- Derivando respecto al tiempo $x_c(t)$ obtenemos la así llamada velocidad de grupo

$$v_g(k_0) = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0},$$

que es la velocidad con que se mueve el centro del paquete de onda.

- Al derivar la relación de dispersión de la partícula libre, $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, obtenemos que la velocidad de grupo del paquete de onda libre,

$$v_g(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m},$$

es el doble de la velocidad de fase media $v_f = \frac{\hbar k_0}{2m}$ y coincide con la velocidad de una partícula clásica con momento lineal $p_0 = \hbar k_0$.



Velocidad de grupo

- El centro de un paquete de onda libre se mueve con velocidad

$$v_g(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}.$$

- ¿Podemos afirmar que este paquete de onda se mueve como una partícula libre?
- Mostraremos a continuación que no.
- En el tema 5 completaremos la información cuando estudiemos el teorema de Ehrenfest.

Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

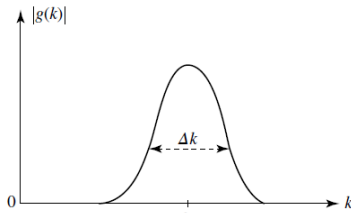
Ejemplo 2': Retomemos el ejemplo del paquete de onda gaussiano con

$$g(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}.$$

Es posible calcular de forma analítica la función de onda para cualquier t ,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i[kx - \omega(k)t]} dk,$$

donde $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Este cálculo es parte del problema propuesto 8.



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- El resultado del cálculo de la integral es

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\left(k_0 x - \frac{\hbar k_0^2}{2m} t - \theta\right)}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}},$$

con $\tan 2\theta = \frac{2\hbar t}{ma^2}$.

- La densidad de probabilidad correspondiente es

$$|\psi(x, t)|^2 = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/2}} e^{-2a^2 \frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}}.$$

Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- La densidad de probabilidad correspondiente es

$$|\psi(x, t)|^2 = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/2}} e^{-2a^2 \frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}}.$$

- La posición del pico donde está centrada la gaussiana se determina de la condición,

$$x - \frac{\hbar k_0}{m} t = \text{cte.}$$

- Derivando esta expresión respecto a t , obtenemos que la velocidad de propagación del pico,

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{\hbar k_0}{m},$$

que coincide con la velocidad de grupo calculada antes.



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- La densidad de probabilidad correspondiente es

$$|\psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} e^{-2a^2 \frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}}$$

- El ancho de la gaussiana está determinado por la desviación cuadrática media. Si para la gaussiana en $t = 0$, $|\psi(x, 0)|^2 \sim e^{-\frac{x^2}{a^2}}$, obtuvimos $\Delta x = \frac{a}{2}$, ahora obtendremos el ancho dependiente del tiempo,

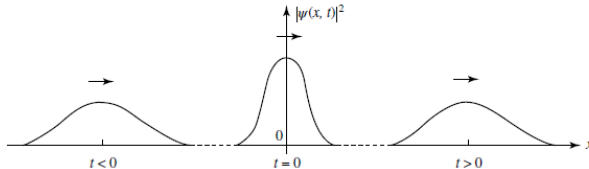
$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}.$$

- La altura máxima de la gaussiana varía t de forma inversa a $\Delta x(t)$,

$$h(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{a \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}}.$$

Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

A partir de las ecuaciones anteriores para $|\psi(x, t)|^2$ podemos deducir que:



- El pico se mueve con la velocidad de grupo $v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$.
- De $t = -\infty$ a $t = 0$, su anchura disminuye y su altura aumenta (mostraremos a continuación que el área total permanece constante).
- De $t = 0$ a $t = +\infty$, su anchura aumenta y su altura disminuye.
- Un paquete de ancho y altura variable no puede representar el movimiento de una partícula puntual.

Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

Analicemos ahora la evolución de la transformada de Fourier (TF) en el tiempo:

- A partir de la expresión que define el paquete de onda,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k, t) e^{ikx} dk,$$

usando la definición de TF y sin hacer ningún cálculo, podemos decir que la TF varía en tiempo como

$$g(k, t) = g(k) e^{-i\omega(k)t}.$$

- Por lo tanto, su norma al cuadrado es independiente del tiempo,

$$|g(k, t)|^2 = |g(k)|^2.$$

Un comportamiento muy diferente al de $|\psi(x, t)|^2$.



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- Como consecuencia de la igualdad $|g(k, t)|^2 = |g(k)|^2$, la condición de normalización para $g(k, t)$ es independiente del tiempo,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |g(k, t)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk = 1.$$

- Si aplicamos la identidad de Parseval (propiedad de la TF que se explica en el anexo I del libro de Cohen-Tannoudji *et al.*), obtenemos que la condición de normalización de $\psi(x, t)$ tampoco depende del tiempo (el área total permanece constante),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k, t)|^2 dk = 1.$$

Esta es una propiedad general de $\psi(x, t)$ (tema 5).



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- La igualdad $|g(k, t)|^2 = |g(k)|^2$, también determina que $\langle k \rangle$, $\langle k^2 \rangle$ y el ancho en k del paquete de onda, Δk , son independientes de t .

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} k |g(k, t)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} k |g(k)|^2 dk = k_0,$$

$$\langle k^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} k^2 |g(k, t)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} k^2 |g(k)|^2 dk = \frac{1}{a^2} + k_0^2,$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} = \frac{1}{a}.$$

- El producto de los anchos de $|\psi(k, t)|^2$ y $|g(k, t)|^2$ varía en el tiempo como

$$\Delta x(t) \Delta k = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \geq \frac{1}{2}.$$



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- El producto de los anchos, $\Delta x(t)\Delta k = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \geq \frac{1}{2}$, tiene un límite inferior para $t = 0$ igual a $\frac{1}{2}$, que ya habíamos obtenido en el apartado anterior.
- Al vector de onda k está asociado el momento lineal $p = \hbar k$ con valor medio $\langle p \rangle = \hbar k_0$ y ancho del paquete correspondiente $\Delta p = \frac{\hbar}{a}$. El producto de los anchos $\Delta x(t)$ y Δp es,

$$\Delta x(t)\Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

- En el tema 5 mostraremos que $\langle p \rangle = \hbar k_0$ y $\Delta p = \frac{\hbar}{a}$ son independientes de t porque p es una constante del movimiento para una partícula libre (como es de esperar porque nada hace variar el momento lineal de la partícula).



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- Si definimos la velocidad media del paquete como $\langle v \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} = \frac{\hbar k_0}{m}$, obtenemos la ya conocida velocidad de grupo.
- El ancho correspondiente es $\Delta v = \frac{\hbar}{ma}$
- Si suponemos que un conjunto de partículas clásicas posee una dispersión de velocidades igual a $\Delta v = \frac{\hbar}{ma}$ en $x = 0$ y a $t = 0$, al cabo de un tiempo t su dispersión *clásica* de posiciones será

$$\delta x_{cl} = \Delta v |t| = \frac{\hbar}{ma} |t|.$$

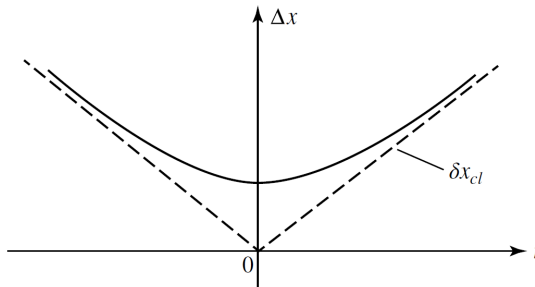
Definimos una magnitud positiva por conveniencia.

Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

Comparamos la variación del ancho del paquete en función del tiempo,

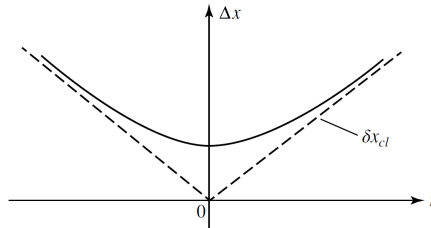
$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}, \text{ con la dispersión lineal de partículas clásicas,}$$

$$\delta x_{cl} = \frac{\hbar}{ma} |t|:$$



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- La rama de la hipérbola correspondiente a $\Delta x(t)$ tiende asintóticamente a la línea recta δx_{cl} .
- La diferencia entre $\Delta x(t)$ y δx_{cl} aumenta cuando $t \rightarrow 0$.
- El valor mínimo en $t = 0$ se debe a que $\Delta x(0) = \frac{\hbar}{2\Delta p}$, donde Δp permanece constante.



Ejemplo 2': Paquete de onda gaussiano

- Es posible construir paquetes de onda con ondas clásicas. Su comportamiento es similar al descrito en este apartado. Las diferencias provienen de la relación de dispersión de cada onda.
- En el siguiente apartado profundizaremos en las consecuencias de este comportamiento para la descripción cuántica de una partícula libre.

Tema 3. Teoría ondulatoria de Schrödinger

- 1 Introducción
- 2 Ecuación de Schrödinger
- 3 Paquete de onda
 - Definición
 - Perfil del paquete de onda en $t = 0$
 - Evolución temporal de un paquete de onda libre
- 4 Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 5 Potencial escalar independiente del tiempo
 - Solución de la ecuación de Schrödinger
 - Ecuación de continuidad
 - Potencial rectangular unidimensional
 - Relación entre los problemas 1D y 3D



Principio de incertidumbre de Heisenberg

- La desigualdad,

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2},$$

que hemos obtenido para el caso particular de un paquete gaussiano libre, es una propiedad general de la Mecánica Cuántica.

- Se denomina principio de incertidumbre de Heisenberg o principio de Heisenberg.
- Discutiremos algunas consecuencias físicas de este principio a continuación, limitándonos al caso de un sistema unidimensional.
- En el tema 5 derivaremos este principio de forma rigurosa.



Principio de incertidumbre de Heisenberg

- Escribiremos la expresión que define el paquete de onda en función de p ,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{i\frac{px - Et}{\hbar}} dp,$$

y la transformada de Fourier de $\psi(x, 0)$,

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx.$$



Onda plana

- Comenzaremos considerando que el estado de una partícula está descrito por una onda plana,

$$\psi(x, t) = Ae^{i\frac{p_0x - E_0t}{\hbar}}.$$

- La densidad de probabilidad correspondiente es constante a lo largo de todo el eje X ,

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2.$$

- Esto puede ser interpretado como un paquete de onda de anchura infinita, $\Delta x = \infty$.

Onda plana

- La onda plana $\psi(x, t) = Ae^{i\frac{p_0x - E_0t}{\hbar}}$ tiene una energía E_0 y un momento lineal p_0 bien definidos.
- Se puede obtener una onda plana a partir de la definición de un paquete de onda,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{i\frac{px - Et}{\hbar}} dp,$$

si la TF es una función delta de Dirac (anexo II),

$$\bar{\psi}(p) = \sqrt{2\pi\hbar} A \delta(p - p_0),$$

dado que

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{2\pi\hbar} A \delta(p - p_0) e^{i\frac{px - Et}{\hbar}} dp = Ae^{i\frac{p_0x - E_0(p_0)t}{\hbar}}$$



Onda plana

- Por definición, la delta de Dirac es una función centrada en $p = p_0$ con ancho $\Delta p = 0$.
- Podemos decir entonces que la onda plana $\psi(x, t) = Ae^{i\frac{p_0 x - E_0(p_0)t}{\hbar}}$ representa un estado de la partícula con momento lineal bien definido.
- De acuerdo al principio de descomposición espectral, si medimos el momento lineal en este estado obtendremos siempre el valor p .
- Podemos concluir que, al medir el estado de la partícula representado por una onda plana, obtenemos con total precisión el valor del momento ($\Delta p = 0$), mientras que la imprecisión para medir su coordenada es total: todas las coordenadas tienen la misma densidad de probabilidad ($\Delta x = \infty$),
- Este es un caso límite de la igualdad $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$.

Paquete de onda

- En el paquete de onda,

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp,$$

tenemos una combinación lineal de infinitas ondas planas. Cada onda corresponde a un valor diferente de p .

- En los ejemplos del apartado anterior hemos visto que el paquete de onda está centrado en un punto x_0 y que su densidad de probabilidad $|\psi(x, 0)|^2$ es apreciable solo en determinada región de ancho Δx respecto a x_0 .
- Diremos que la posición x_0 de la partícula se conoce con una incertidumbre Δx .



Paquete de onda

- A partir del análisis en el ejemplo del paquete de onda gaussiano, podemos concluir que $|\bar{\psi}(p)|^2$ es la densidad de probabilidad de que el momento de la partícula tome valores entre p y $p + dp$.
- Las funciones $|\bar{\psi}(p)|^2$ estudiadas en los ejemplos están centradas en un punto p_0 y su valor es apreciable solo en determinada región de ancho Δp respecto a p_0 .
- Podemos decir entonces que el momento lineal del paquete p_0 se conoce con una incertidumbre Δp .

Principio de incertidumbre de Heisenberg

Principio de incertidumbre de Heisenberg:

- Es imposible definir en un instante de tiempo dado tanto la posición de la partícula como su momento lineal con un grado arbitrario de precisión.
- Cuando se alcanza la condición límite entre las incertidumbres Δx y Δp ,

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2},$$

aumentar la precisión en la posición (disminuir Δx) implica que la precisión del momento lineal disminuye (aumenta Δp), y viceversa.



Principio de incertidumbre de Heisenberg

■ La restricción

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2},$$

se debe a que $\hbar$ es diferente de cero.

- Como $\hbar$ es tan pequeña comparada con las escalas macroscópicas, esta limitación no es apreciable para las partículas macroscópicas, que se rigen por la mecánica clásica.
- Este tipo de restricción aparece para otros tipos de ondas. Es posible construir paquetes de ondas EM donde se cumple que $\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$.
- Lo novedoso en Mecánica Cuántica es que una partícula, como el electrón, experimente estas limitaciones en su movimiento, de modo que no podemos conocer con total precisión su trayectoria aunque aumentemos la precisión de la técnicas experimentales.



Tema 3. Teoría ondulatoria de Schrödinger

- 1 Introducción
- 2 Ecuación de Schrödinger
- 3 Paquete de onda
 - Definición
 - Perfil del paquete de onda en $t = 0$
 - Evolución temporal de un paquete de onda libre
- 4 Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 5 Potencial escalar independiente del tiempo
 - Solución de la ecuación de Schrödinger
 - Ecuación de continuidad
 - Potencial rectangular unidimensional
 - Relación entre los problemas 1D y 3D



Potencial escalar independiente del tiempo

- Consideremos una partícula de masa m que se mueve bajo la acción de un potencial independiente del tiempo, $V(\vec{r})$.
- La función de onda de la partícula, $\psi(\vec{r}, t)$, satisface la ecuación de Schrödinger,

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

donde el operador laplaciano es igual a

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

- Resolveremos esta ecuación a continuación para varios casos relevantes.



Estados estacionarios

- Como en la ecuación de Schrödinger,

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

Δ y $V(\vec{r})$ son independientes del tiempo, podemos emplear el método de separación de variables,

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})\chi(t).$$

- Al sustituir en la ecuación de Schrödinger, obtenemos

$$i\hbar \varphi(\vec{r}) \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi(t) \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r})\chi(t),$$



Estados estacionarios

- Tras dividir por $\varphi(\vec{r})\chi(t)$, encontramos que la ecuación diferencial a la izquierda del signo de igualdad solo depende de t , mientras que la ecuación diferencial de la derecha es función de $\vec{r}$:

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} + V(\vec{r}).$$

- Para que se cumpla la igualdad entre estas ecuaciones, ambas deben ser necesariamente iguales a una constante, que (como sabemos del tema 2) es la energía E de la partícula,

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = E.$$

Estados estacionarios

- Escribimos ambas ecuaciones por separado:

$$i\hbar \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = E\chi(t),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}).$$

- La solución de la primera ecuación diferencial se obtiene de forma inmediata por integración directa,

$$\chi(t) = Ae^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

- Incluyendo la constante A en $\varphi(\vec{r})$, podemos escribir la función de onda como

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$



Estados estacionarios

- Decimos que $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ es una *solución estacionaria* de la ecuación de Schrödinger porque su densidad de probabilidad es independiente del tiempo,

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2.$$

- Los estados estacionarios están caracterizados por un valor bien definido de la energía.
- Denominaremos a la segunda ecuación,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}),$$

ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.



Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

- Resolvamos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}),$$

para el caso en que el potencial $V(\vec{r})$ se puede escribir como la suma de tres potenciales que dependen, cada uno, de solo una de las coordenadas cartesianas,

$$V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z).$$

- En este caso, podemos emplear nuevamente el método de separación de variables,

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z).$$



Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

- Sustituimos la solución propuesta, $\varphi(\vec{r}) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$, en la ecuación de Schrödinger y dividimos por $\varphi(\vec{r})$, para obtener

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_x(x)}{dx^2} + V_x(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_y(y)}{dy^2} + V_y(y) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_z(z)}{dz^2} + V_z(z) = E.$$

- Para que la igualdad se cumpla, cada ecuación diferencial independiente debe ser igual a una constante y la suma de las tres constantes debe ser igual a E ,

$$E = E_x + E_y + E_z.$$

Ecuación de Schrödinger 1D con potencial uniforme

- Simplificamos la ecuación anterior,

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0,$$

introduciendo el parámetro

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}.$$

- La solución de esta ecuación es conocida. Debemos considerar dos casos:
 - a) $E > V$, $k \in \mathbb{R}$,
 - b) $E < V$, $k \in \mathbb{C}$.



Ecuación de Schrödinger 1D con potencial uniforme

- Caso a). $E > V$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)} \in \mathbb{R}$:

La solución de la ecuación de Schrödinger 1D,

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0,$$

es la combinación lineal de dos ondas viajeras,

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}, \\ \psi(x, t) &= Ae^{i(kx - \omega t)} + A'e^{i(-kx - \omega t)},\end{aligned}$$

donde $\omega = \frac{E}{\hbar}$ y $A, A' \in \mathbb{C}$. La onda de amplitud A se propaga en el sentido positivo de x , mientras que la onda de amplitud A' lo hace en el sentido negativo.



Ecuación de Schrödinger 1D con potencial uniforme

- Caso b). $E < V$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)} \in \mathbb{C}$:

Definimos un nuevo parámetro,

$$\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)} \in \mathbb{R},$$

de modo que $k^2 = -\rho^2$ y $k = i\rho$.

Al sustituir $k = i\rho$ en la solución del caso a), obtenemos la nueva solución,

$$\varphi(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x},$$

que consiste en una combinación lineal de una exponencial creciente y otra decreciente, donde $B, B' \in \mathbb{C}$.



Analogía con las ondas electromagnéticas

- Si regresamos a la ecuación de d'Alembert para una onda EM 1D que se propaga en un medio con índice de refracción n ,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{c^2}{n^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2},$$

y sustituimos en ella la solución estacionaria

$$\psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i\omega t},$$

obtenemos la ecuación homogénea,

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{n^2 \omega^2}{c^2} \varphi(x) = 0.$$

- Esta ecuación es análoga a la ecuación de Schrödinger 1D,

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi(x) = 0.$$



Analogía con las ondas electromagnéticas

- Empleando esta analogía matemática podemos igualar los factores,

$$\frac{n^2 \omega^2}{c^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V),$$

y definir un índice de refracción *efectivo* para la partícula,

$$n = \frac{c}{\omega} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)},$$

que facilitará la interpretación de los resultados.

- Para el caso a) $E > V$, $n \in \mathbb{R}$, que corresponde a un medio transparente donde las ondas pueden propagarse: e^{ikx} , e^{-ikx} .
- Para el caso b) $E < V$, $n \in \mathbb{C}$, que corresponde a un medio opaco, como un metal sin absorción ($n = \sqrt{\epsilon} \in \mathbb{C}$, $\epsilon < 0$, $\epsilon \in \mathbb{R}$) donde el perfil es una exponencial creciente o decreciente: $e^{\rho x}$, $e^{-\rho x}$.



Condiciones de frontera

Estudiemos las condiciones de frontera en un punto $x = x_0$ donde el potencial $V(x)$ es discontinuo.

- La función $\varphi(x)$ es continua y diferenciable en $x = x_0$ por ser solución de una ecuación diferencial.
- La primera condición de frontera es la continuidad de $\varphi(x)$ en $x = x_0$,

$$\varphi(x_0^-) = \varphi(x_0^+).$$

- $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}$ es discontinua si $V(x)$ lo es, como se deduce de la propia ecuación diferencial,

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\varphi(x) = 0.$$



Condiciones de frontera

- La condición de frontera para $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ se obtiene integrando la ecuación de Schrödinger en el entorno de x_0 .
- Para ello, escribimos la ecuación diferencial como

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\varphi(x),$$

e integramos entre $x_0 - \epsilon$ y $x_0 + \epsilon$,

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} [V(x) - E]\varphi(x) dx$$

$$\frac{d\varphi(x_0 + \epsilon)}{dx} - \frac{d\varphi(x_0 - \epsilon)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} [V(x) - E]\varphi(x) dx.$$



Condiciones de frontera

- Calculemos ahora el límite $\epsilon \rightarrow 0$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\varphi(x_0 + \epsilon)}{dx} - \frac{d\varphi(x_0 - \epsilon)}{dx} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} [V(x) - E]\varphi(x) dx$$

$$\frac{d\varphi(x_0^+)}{dx} - \frac{d\varphi(x_0^-)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} [V(x) - E]\varphi(x) dx.$$

- Como $\varphi(x)$ es continua en $x = x_0$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} E \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \varphi(x) dx = 0.$$

- Si $V(x)$ está acotado en el entorno de $x = x_0$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} V(x)\varphi(x) dx = 0.$$



Condiciones de frontera

- Por lo tanto, para un potencial acotado, obtenemos la condición de frontera de continuidad de la derivada de $\varphi(x)$,

$$\boxed{\frac{d\varphi(x_0^-)}{dx} = \frac{d\varphi(x_0^+)}{dx}}.$$

- Sin embargo, para un potencial que no esté acotado en el entorno de $x = x_0$, como un potencial tipo delta de Dirac,

$$V = -g_0\delta(x - x_0),$$

donde g_0 es una constante, la derivada de $\varphi(x)$ será discontinua.

- Para este potencial,

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x)\varphi(x)dx = -g_0 \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta(x - x_0)\varphi(x)dx = -g_0\varphi(x_0).$$



Condiciones de frontera

- En el caso del potencial delta de Dirac, la condición de frontera para la derivada de $\varphi(x)$ se transforma a

$$\frac{d\varphi(x_0^+)}{dx} - \frac{d\varphi(x_0^-)}{dx} = -\frac{2m}{\hbar^2} g_0 \varphi(x_0),$$

donde hemos tenido en cuenta la continuidad de la función de onda, $\varphi(x_0) \equiv \varphi(x_0^+) = \varphi(x_0^-)$.

Conservación de la probabilidad

- Hemos visto antes que la probabilidad global de encontrar una partícula en todo el espacio permanece igual a 1 (para estados normalizados) en cualquier instante de tiempo,

$$\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1.$$

- A diferencia de su integral global, la densidad de probabilidad,

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2,$$

puede variar en el tiempo.



Ecuación de continuidad

- Demostraremos que es posible escribir una ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0,$$

que garantiza una conservación local de la probabilidad, y obtendremos una expresión para la densidad de corriente de probabilidad $\vec{J}(\vec{r}, t)$.

- Esta ecuación es análoga a la que encontramos en electromagnetismo.
- Nos limitaremos al caso de una partícula de masa m en un potencial escalar $V(\vec{r}, t)$.

Ecuación de continuidad

Demostración: Comencemos escribiendo la ecuación de Schrödinger y su compleja conjugada, tomando en cuenta que $V(\vec{r}, t) \in \mathbb{R}$,

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

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

Multiplicando la primera ecuación por $\psi^*(\vec{r}, t)$ y la segunda por $-\psi(\vec{r}, t)$, obtenemos

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

$$i\psi(\vec{r}, t) \hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \psi(\vec{r}, t) \Delta \psi^*(\vec{r}, t) - V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t).$$

Sumando ambas ecuaciones: $i\hbar \frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*].$



Ecuación de continuidad

Demostración (continuación): Reescribamos la ecuación obtenida

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*] = 0.$$

Para que esta sea una ecuación de continuidad, el segundo término debe ser igual a $\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t)$. Definamos a $\vec{J}$ como

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

y apliquemos el operador divergencia,

$$\nabla \cdot \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [(\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla \psi) \cdot (\nabla \psi^*) - \psi \nabla^2 \psi^*].$$

Podemos comprobar que

$$\nabla \cdot \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*].$$



Ecuación de continuidad

Demostración (conclusiones): Hemos demostrado que es posible escribir una ecuación de continuidad,

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0,$$

para una partícula de masa m , donde

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

es la densidad de probabilidad y

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{1}{m} \text{Re} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi \right) \right]$$

es la densidad de corriente de probabilidad.



Ecuación de continuidad

Ejemplo 3: Para una onda plana, $\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$, que representa el estado de una partícula libre con energía $\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$, obtenemos la densidad de probabilidad

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2$$

y la densidad de corriente de probabilidad

$$\vec{J} = \frac{1}{m} \text{Re} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \psi \right) \right] = |A|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

En analogía al caso electromagnético, $\vec{J} = \rho \vec{v}_G$, donde $\vec{v}_G = \hbar \vec{k} / m$ es la velocidad de grupo asociada al momento lineal $\hbar \vec{k}$.

En este ejemplo, tanto ρ como $\vec{J}$ son independientes de $\vec{r}$ y t (flujo homogéneo, uniforme y estacionario).

Ecuación de continuidad

Ejemplo 4 a): Para una partícula de energía E en un potencial unidimensional constante, V_0 , la función de onda cuando $E > V_0$ es

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx},$$

con $k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$. La densidad de corriente de probabilidad en este caso es

$$J_x = \frac{1}{m} \text{Re} \left[\varphi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dx} \right) \right] = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} - |A'|^2 \frac{\hbar k}{m}.$$

Interpretación: $J_x = |A|^2 \hbar k / m > 0$ para la onda plana con $p_x = +\hbar k$ y $J_x = -|A'|^2 \hbar k / m < 0$ para la onda que se propaga en sentido opuesto con $p_x = -\hbar k$.

Ecuación de continuidad

Ejemplo 4 b): Si la misma partícula posee una energía $E < V_0$, su función de onda es

$$\varphi(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x},$$

con $\rho = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. La densidad de corriente de probabilidad correspondiente es

$$J_x = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[\varphi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dx} \right) \right] = \frac{i\hbar\rho}{m} (B^* B' - BB'^*) = \frac{2\hbar\rho}{m} \operatorname{Im} [BB'^*].$$

En este caso, no es posible separar la contribución de cada onda y $J_x = 0$ si $B = 0$ o $B' = 0$.

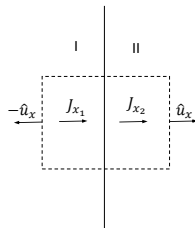
Ecuación de continuidad

En el ejemplo anterior ρ no depende del tiempo. Por lo tanto, $\partial\rho/\partial t = 0$ y la ecuación de continuidad, $\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \vec{J} = 0$, se simplifica a $\nabla \cdot \vec{J} = 0$. Si integramos en un volumen finito V acotado por la superficie S y empleamos el teorema de la divergancia de Gauss-Ostrogradski,

$$\int \int \int_V \nabla \cdot \vec{J} dV = \int \int_S \vec{J} \cdot d\vec{S} = 0.$$

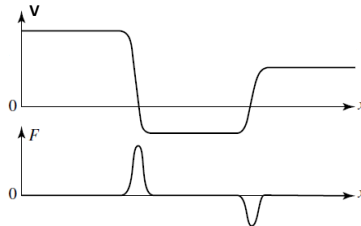
Supongamos que un cilindro de sección transversal A y longitud L atraviesa la frontera de separación de los medios I y II , y que $\vec{J}_1 = J_{x1} \hat{u}_x$, $\vec{J}_2 = J_{x2} \hat{u}_x$, como en el ejemplo 2. Bajo estas condiciones, $\int \int_S \vec{J} \cdot d\vec{S} = J_{x2} A - J_{x1} A = 0$. Es decir, se conserva el flujo de corriente,

$$J_{x1} = J_{x2}.$$



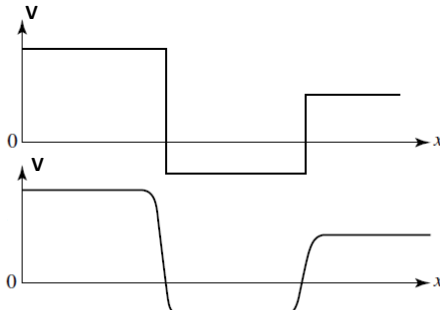
Potencial rectangular unidimensional

- Consideremos un potencial 1D $V(x)$ que es uniforme en determinadas regiones y que varía rápidamente en la vecindad de algunos valores de x , como se muestra en la figura.
- Una partícula clásica se mueve con velocidad constante en las zonas donde el potencial es uniforme y experimenta una fuerza $F = -\frac{dV(x)}{dx}$ en la frontera entre dos regiones donde el potencial varía bruscamente.
- F puede acelerar o frenar a la partícula.



Potencial rectangular unidimensional

- Cuando los intervalos en los que $V(x)$ varía son mucho más pequeños que la longitud de onda y cualquier otra dimensión del sistema, podemos sustituir el potencial real, con esquinas redondeadas, por un potencial rectangular con saltos de potencial abruptos, de modo que el potencial aproximado es discontinuo.



Potencial rectangular unidimensional

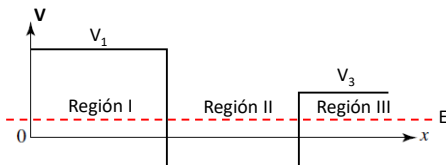
Potencial rectangular unidimensional

- Consideremos el potencial rectangular 1D mostrado en la figura que toma el valor V_1 en la región I, el valor V_2 en la región II y V_3 en la región III.
- Supongamos que una partícula clásica de masa m tiene una energía mecánica E que toma el valor indicado por la línea roja discontinua,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V_i.$$

- En la región II, donde $E > V_2$, la partícula se mueve con velocidad

$$v_2 = \sqrt{\frac{2(E - V_2)}{m}}.$$



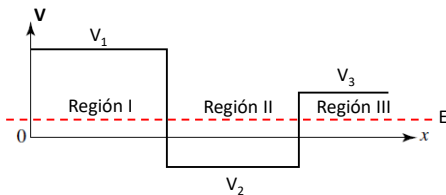
Potencial rectangular unidimensional

- Sin embargo, en la región I, donde $E < V_1$, la partícula clásica no puede penetrar porque su energía cinética sería negativa,

$$\frac{1}{2}mv^2 = E - V_1 < 0,$$

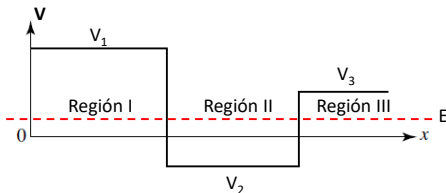
y su velocidad imaginaria.

- Tampoco puede penetrar en la región III, donde $E < V_3$.



Potencial rectangular unidimensional

- La ecuación de Schrödinger, que describe el movimiento de una partícula microscópica, sí tiene soluciones permitidas en las tres regiones.
- En la región I, $\rho_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)} \in \mathbb{R}$, $\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho_1 x} + B_1' e^{-\rho_1 x}$.
- En la región II, $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2)} \in \mathbb{R}$, $\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$.
- En la región III, $\rho_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_3 - E)} \in \mathbb{R}$, $\varphi_3(x) = B_3 e^{\rho_3 x} + B_3' e^{-\rho_3 x}$.
- Analogía óptica: medio transparente entre dos paredes metálicas.

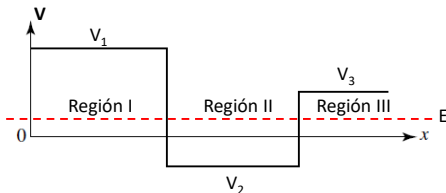


Potencial rectangular unidimensional

- Consideremos el caso en que V_1 se extiende hasta $x = -\infty$ y V_2 , hasta $x = +\infty$.
- En este caso, debemos descartar las soluciones divergentes haciendo $B'_1 = 0$ y $B_3 = 0$,

$$\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho_1 x},$$

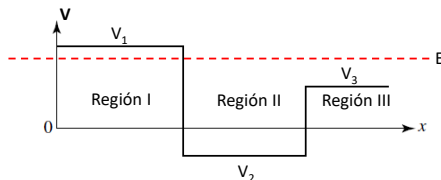
$$\varphi_3(x) = B'_3 e^{-\rho_3 x}$$



Potencial rectangular unidimensional

Potencial rectangular unidimensional

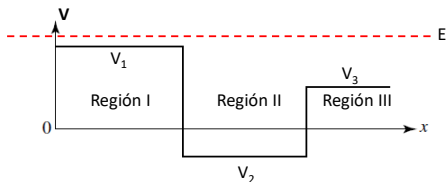
¿Cómo cambian las soluciones si $V_3 < E < V_1$?



Potencial rectangular unidimensional

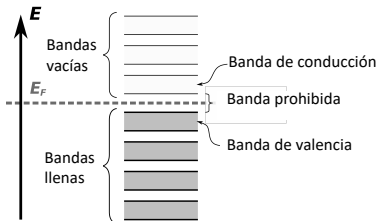
Potencial rectangular unidimensional

¿Cómo cambian las soluciones si $E > V_1$?



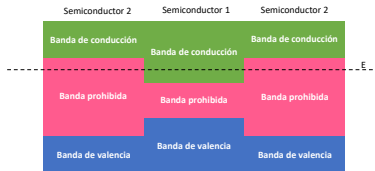
Potencial rectangular unidimensional

- Los potenciales rectangulares se pueden diseñar empleando capas de materiales semiconductores.
- Los electrones en un semiconductor ocupan los niveles de energía en las bandas marcadas en gris.
- Las energías en la banda prohibida no están permitidas a los electrones.
- Los electrones excitados saltan desde la banda de valencia (banda superior ocupada) a los niveles vacíos de la banda de conducción.



Potencial rectangular unidimensional

- El semiconductor 1 en la capa central posee una banda prohibida más estrecha que la del semiconductor 2 en las capas laterales.
- El nivel de energía E (línea negra discontinua) corresponde a la banda de conducción del semiconductor 1 y la banda prohibida del semiconductor 2.
- Un electrón con energía E puede moverse en el semiconductor 1 y no puede penetrar (su función de onda decrece exponencialmente) al semiconductor 2.
- La banda prohibida en el semiconductor 2 produce el efecto de un potencial $V > E$.



Clase de problemas

Para continuar la lectura de este documento, es necesario estudiar antes el documento con los ejercicios resueltos en las clases de problemas de este tema:

- 1 Pozo de potencial infinito.
- 2 Escalón de potencial.
- 3 Pozo de potencial tipo delta de Dirac.
- 4 Pozo de potencial finito.
- 5 Barrera de potencial.



Estados ligados en un pozo de potencial unidimensional

Mostraremos que, si una partícula no puede escapar de un pozo de potencial 1D de forma arbitraria, su espectro de energía es discreto.

Suponemos:

- Un potencial 1D arbitrario, $V(x)$, que tiende a un valor constante V_∞ cuando $x \rightarrow \pm\infty$. Sin perder generalidad, definimos $V_\infty = 0$ como el nivel 0 de $V(x)$.
- $V(x)$ tiene un mínimo local $-V_0$ en el punto x_0 . La partícula no puede escapar al infinito si $-V_0 < E < 0$.
- Por comodidad, $V(x)$ es prácticamente cero fuera del intervalo finito $[x_1, x_2]$.



Estados ligados en un pozo de potencial unidimensional

Bajo las condiciones anteriores, la función de onda se puede escribir de modo general como

$$\varphi(x) = \begin{cases} B_1 e^{\rho x}, & x < x_1, \\ \varphi_2(x), & x_1 \leq x \leq x_2, \\ B_3 e^{\rho x} + B'_3 e^{-\rho x}, & x > x_2, \end{cases}$$

donde $\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

$\varphi_2(x)$ es una solución de la ecuación estacionaria de Schrödinger que satisface las condiciones de frontera en $x = x_1$ y $x = x_2$.

B_3 debe anularse para que $\varphi(x)$ converja cuando $x \rightarrow +\infty$ (y sea de cuadrado integrable).

Estados ligados en un pozo de potencial unidimensional

$$\varphi(x) = \begin{cases} B_1 e^{\rho x}, & x < x_1, \\ \varphi_2(x), & x_1 \leq x \leq x_2, \\ B_3 e^{\rho x} + B'_3 e^{-\rho x}, & x > x_2, \end{cases}$$

Podemos resolver la ecuación de Schrödinger para este caso general y, con ayuda de las condiciones de frontera, despejar B_3 en función del resto de los parámetros que definen el problema (ya empleamos este procedimiento para un pozo de potencial rectangular).

$B_3(E)$ es una función de la energía. Los niveles de energía discretos de la partícula en el pozo de potencial serán las raíces de $B_3(E)$,

$$B_3(E) = 0,$$

donde $-V_0 < E < 0$.

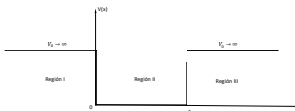


Pozo cuántico

- Hemos aprendido a calcular los niveles de energía de una partícula confinada por el potencial 1D de ancho a

$$V_x(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq \frac{a}{2}, \\ V_0, & |x| > \frac{a}{2}, \end{cases}$$

que impide a la partícula escapar al infinito moviéndose a lo largo del eje X .



- Por ejemplo, en el caso límite $V_0 \rightarrow \infty$, los valores permitidos de la energía son $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2$, a los que corresponden las funciones de onda $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$, con $n = 1, 2, 3, \dots$

Pozo cuántico

- Si la partícula no está confinada en las direcciones Y y Z , puede escapar al infinito propagándose como una onda plana a lo largo de estas direcciones.
- Esta situación corresponde al caso en que el potencial se mantiene constante a lo largo de estas direcciones. Supongamos el caso más simple en que el potencial es cero,

$$V_y(y) = 0, \quad V_z(z) = 0.$$

- La solución de la ecuación de Schrödinger para cada dirección Y o Z es una combinación lineal de ondas planas. Supongamos que las condiciones iniciales determinan que cada onda se mueve en el sentido positivo del eje correspondiente.

Pozo cuántico

- Bajo las condiciones anteriores la función de onda a lo largo de las direcciones Y y Z será

$$\varphi_y(y) = A_y e^{ik_y y}, \quad \varphi_z(z) = A_z e^{ik_z z}.$$

y las energías correspondientes

$$E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m},$$

- La función de onda y la energía total de la partícula (método de separación de variables) es

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}) &= \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z) = A\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right) e^{i(k_y y + k_z z)}, \\ E &= E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2 + \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m}. \end{aligned}$$



Cable cuántico

- Supongamos que la partícula está confinada tanto en la dirección X como en la Y en pozos de potencial de ancho a y b , respectivamente, y se mueve libremente en la dirección Z ,

$$V_x(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq \frac{a}{2}, \\ V_{x0}, & |x| > \frac{a}{2}, \end{cases}, \quad V_y(y) = \begin{cases} 0, & |y| \leq \frac{b}{2}, \\ V_{y0}, & |y| > \frac{b}{2}, \end{cases}, \quad V_z(z) = 0.$$

- Si $V_{x0}, V_{y0} \rightarrow \infty$, la función de onda y la energía total de la partícula es

$$\varphi(\vec{r}) = A \sqrt{\frac{4}{ab}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{b} y\right) e^{ik_z z},$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.$$

- Este sistema se denomina *cable cuántico*.

Punto cuántico

- Finalmente, supongamos que la partícula está confinada en las tres direcciones espaciales X , Y , Z en pozos de potencial de ancho a , b y c ,

$$V_x(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq \frac{a}{2}, \\ V_{x0}, & |x| > \frac{a}{2}, \end{cases}, \quad V_y(y) = \begin{cases} 0, & |y| \leq \frac{b}{2}, \\ V_{y0}, & |y| > \frac{b}{2}, \end{cases}, \quad V_z(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq \frac{c}{2}, \\ V_{z0}, & |z| > \frac{c}{2}. \end{cases}.$$

- Si V_{x0} , V_{y0} , $V_{z0} \rightarrow \infty$, la función de onda y la energía total de la partícula es

$$\varphi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{b}y\right) \sin\left(\frac{\pi l}{c}z\right),$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right).$$

- Este sistema se denomina *punto cuántico* y posee niveles de energía discretos como si fuese un átomo artificial (Premio Nobel de Química, 2023).

