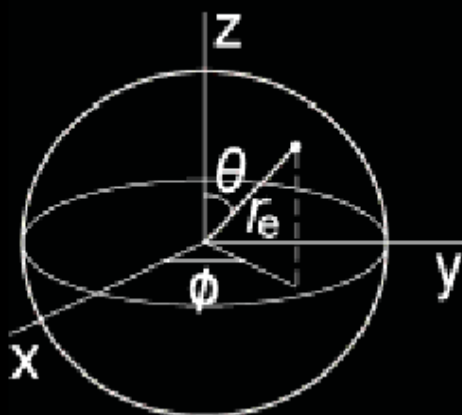


LA PARTÍCULA SOBRE UNA ESFERA



El modelo de una partícula moviéndose en una configuración de esfera perfecta, es decir, a una distancia fija de un centro dado, pero en tres dimensiones, es un caso significativo al problema atómico, donde los electrones se mueven en torno a un núcleo. Es por eso importante obtener la función de onda que describa a este modelo.

Si la posición de una partícula en cualquier lugar del espacio está dada por su vector de posición \vec{r} , entonces la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones se puede escribir como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 \psi(\vec{r}) + \hat{V}_{\vec{r}} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Si la posición de la partícula se expresa en coordenadas esféricas y *si establecemos que la energía potencial sólo depende del radio r* , entonces la ecuación tomaría la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r\theta\phi}^2 \psi(r, \theta, \phi) + \hat{V}_r \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi)$$

Si el laplaciano en esféricas puede escribirse como:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

y la partícula libre en una esfera se sitúa a una distancia constante del centro que tomaremos como unitaria, entonces $r = r_e = 1$.

De esta forma el hamiltoniano queda asociado al operador del momento angular:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\theta, \phi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2I} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \\ &= -\frac{\hat{L}^2}{2I} \end{aligned}$$

donde $I = \mu r^2$ es el momento de inercia. Si ahora sacamos $\sin^2 \theta$ como factor común, el operador cuadrático del momento angular \hat{L}^2 y su componente en la coordenada z se expresan como:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned}$$

Como se vio anteriormente, los operadores \hat{L}^2 y \hat{L}_z conmutan y por lo tanto tienen las mismas funciones propias. Para nuestra componente unitaria y constante de la distancia al núcleo, tales funciones propias se conocen como los **armónicos esféricos** $Y(\theta, \phi)$ y su ecuación de Schrödinger sería, en forma general:

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \frac{2IE \sin^2 \theta}{\hbar^2} Y(\theta, \phi) = 0$$

Si se condiciona a que las variables se separen $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, entonces:

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \Phi + \frac{2IE \sin^2 \theta}{\hbar^2} \Theta \Phi + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \Theta = 0$$

$$\frac{1}{\Theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{2IE \sin^2 \theta}{\hbar^2} = - \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

y por conveniencia, ambos términos que son evidente y completamente independientes, se hacen iguales a un valor m_l^2 .

La primera ecuación resultante es idéntica a la de la partícula sobre un anillo y el valor propio es justamente m_l^2 :

$$- \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = m_l^2 \Phi$$

Teniendo en cuenta la ecuación anterior, la solución de la partícula sobre un anillo y como se sabe que $\Phi(\phi)$ es función propia de la componente del momento angular:

$$\hat{L}_z^2 \Phi = L_z^2 \Phi \Rightarrow \hbar^2 \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = L_z^2 \Phi(\phi) = m_l^2 \hbar^2 \Phi(\phi)$$

Por lo tanto, y con condiciones de contorno tales que $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$ se llega a la función de onda:

$$\Phi_{m_l}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \phi}$$

y los valores propios de la componente del momento angular son discontinuos y enteros:

$$L_{z,m_l} = m_l \hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

La segunda ecuación resultante es:

$$\frac{1}{\Theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{2IE \sin^2 \theta}{\hbar^2} = m_l^2$$

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = \left(m_l^2 - \frac{2IE \sin^2 \theta}{\hbar^2} \right) \Theta$$

que es otra ecuación donde el valor propio del operador diferencial

sobre Θ es $\left(m_l^2 - \frac{2IE \sin^2 \theta}{\hbar^2} \right)$.

La solución de esta ecuación existe cuando se puede hacer:

$$\frac{2IE}{\hbar^2} = l(l+1) \text{ donde } l = 0, 1, 2, \dots \text{ y además } 0 \leq |m| \leq l$$

y está dada por una serie de potencias. Las mismas se denominan **polinomios de Legendre**:

$$\Theta_{l,m_l}(\theta) = \left[\frac{(2l+1)(l-|m_l|)!}{2(l+|m_l|)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta)$$

donde

$$P_l^0(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d \cos \theta^l} (\cos^2 \theta - 1)^l$$

$$P_l^{|m_l|}(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{dx^{|m_l|}} P_l^0(\cos \theta)$$

Consecuentemente, los armónicos esféricos constituyen la función angular total:

$$Y_{l,m_l}(\theta, \phi) = \left[\frac{(2l+1)(l-|m_l|)!}{4\pi(l+|m_l|)!} \right]^{1/2} e^{im\phi} P_l^{|m_l|}(\cos \theta)$$

Los armónicos esféricos son entonces funciones propias tanto de \hat{L}^2 como de \hat{L}_z :

$$\begin{aligned}\hat{L}_z Y_{m_l, l}(\theta, \phi) &= m_l \hbar Y_{m_l, l}(\theta, \phi) \\ \hat{L}^2 Y_{m_l, l}(\theta, \phi) &= l(l+1) \hbar^2 Y_{m_l, l}(\theta, \phi)\end{aligned}$$

Como conclusión podemos afirmar que una partícula que se mueve o rota sobre una esfera, esto es, a una distancia unitaria y constante de un centro, tiene momentos angulares discontinuos y dados por dos números enteros, llamados **números cuánticos** interdependientes.

Los números cuánticos tienen nombres históricos dados por las primeras proposiciones teóricas, anteriores a la mecánica cuántica. Así se llama **número cuántico azimutal** al denominado por l que da valor, sobre todo, al momento angular total de la partícula y que toma valores de 0, 1, 2, ... Se llama **número cuántico magnético** al que da valor a la proyección del momento angular sobre un eje para un momento angular dado m_l y que toma valores 0, $\pm 1, \dots, \pm m_l$.