

República Dominicana

Universidad Tecnológica del Cibao Oriental (UTECO)

Universidad patrimonio de la Comunidad

Facultad de Postgrado y Educación Continuada

Escuela de Postgrado



Trabajo Final para Optar por el Título de
Maestría en Matemáticas

Título

Solución de la Ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno en Coordenadas
Cilíndricas

Sustentado por:

Lic. José Antonio Durán Estévez

Lic. Tomás Reyes

Asesor

MA. Julio Antonio Manzueta

Cotuí, Provincia Sánchez Ramírez

Año académico 2022

Título

**Solución de la Ecuación de Schrödinger para el átomo de
Hidrógeno en Coordenadas Cilíndricas.**

TESIS
Maestría en Matemáticas

**Solución de la Ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno en
Coordenadas Cilíndricas.**

Tesis presentada por:

Lic. José Antonio Durán Estévez

Lic. Tomás Reyes

Para la obtención del grado de Maestría en Matemática

Jurado examinador

MA. Manuel Arismendy Batista Villa _____

MA. Wilson Lucilo Heredia Amparo _____

MA. Maria Eufemia Fernandez Acosta _____

Índice general

Hojas preliminares	V
AGRADECIMIENTOS.....	VI
RESUMEN	X
Simbología utilizada	XI
1. INTRODUCCIÓN.	1
1.1. Introducción.	1
1.2. Antecedentes.	1
1.2.1. Antecedentes históricos.	1
1.2.2. Antecedentes académicos.	2
1.3. Planteamiento del problema.	3
1.4. Objetivos.	4
1.4.1. Objetivo general.	4
1.4.2. Objetivos específicos.	5
1.5. Justificación.	5
1.6. Delimitación.	5
2. REVISIÓN DE LITERATURA.	6
2.1. Introducción.	6
2.2. Marco teórico.	6
2.2.1. El átomo de Hidrógeno	6
2.2.2. Los axiomas de la Mecánica Cuántica	7
2.2.3. Ecuación de Schrödinger para el Ascilador Armónico Isotrópico en coordenadas Cartesianas	7
2.2.4. Postulados de Bohr	8
2.2.5. Niveles de energía del átomo de hidrógeno	9
2.2.6. Operadores de la Mecánica Cuántica	9

2.2.7. Ortogonalidad	10
2.2.8. Funciones de ondas	11
2.2.9. Función de distribución radial	12
2.2.10. Número cuántico de la ecuación Schrödinger	12
2.2.11. Separación de variables	13
2.2.12. Ecuación diferencial parcial (EDP)	13
2.2.13. Ecuación de Schrödinger	13
3. DISEÑO METODOLÓGICO.	16
3.1. Introducción.	16
3.2. Marco metodológico.	16
3.2.1. Método.	16
3.2.2. Diseño.	16
3.2.3. Tipo.	16
3.2.4. Enfoque.	17
3.3. Procedimientos.	17
4. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS	18
4.1. Introducción.	18
4.1.1. Deducción de la ecuación de Schrödinger	18
4.1.2. Deducción del laplaciano en coordenadas cilíndricas	19
4.2. Solución de la ecuación de schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas	20
4.3. Teorema I.	20
5. CONCLUSIONES	24
5.1. Introducción.	24
5.2. Líneas Futuras de Investigación.	24
Referencias bibliográficas	24
ANEXOS: Figuras y Tablas.	28

Agradecimientos.

A Dios: Por darme la fuerza y la voluntad de poder concluir este estudio de investigación para subir otro peldaño más de la escalera que conduce a la cumbre luminosa.

Al asesor: Julio Antonio Manzueta por sus orientaciones en el proceso de investigación.

A mis amigos: José Miguel Sánchez. Por su apoyo como pieza indispensable durante la investigación de este trabajo.

A mis compañeros: Emmanuel Vásquez Otañez y Tomás Reyes que fueron los encargados de que no me rindiera cuando el camino se tornaba dificultoso.

A la UTECO: Por ser una institución educativa comprometida con el avance y la formación integral de sus estudiantes y la promoción del conocimiento científico y tecnológico de la región y el país.

Lic. José Antonio Durán Estévez

DEDICATORIA.

Este trabajo está dedicado con mucho amor a mi familia, muy especial para mis padres: Elsa María Estévez y Félix Durán, mis hijos y esposa; Josmeiry Durán, Jofeli Durán y Fiordaliza Rosario De Durán, a mis hermanos; Dania, Orlando, Orlandito y Eli, y todos mis sobrinos; Dalia, Yaire, Yohleni, Darwin y Samia, Diana, Yonier y Josmeiry. Porque son motivos de que cada día me levante cada vez con más fuerzas a conquistar mis propósitos.

Lic. José Antonio Durán Estévez

Agradecimientos.

A Dios: Por darme la vida y el fortalecimiento para lograr las metas que me he propuesto.

A mis padres. Seferino Ullola y Benita Altagracia Reyes, por darme la fortaleza y el apoyo, en todas las decisiones de mi vida.

A mi esposa: Neris Sánchez, por ser el soporte motivador para seguir escalando un peldaño más en mi vida.

A mis amigos: A todos mis compañeros de estudio, en especial a Emmanuel Vásquez Otañez y a su esposa Ana Felicia, por ser un motor motivador para lograr la meta propuesta.

A mi compadre Bernardo Peña: Por ser un ente incentivador, para alcanzar la meta.

A José Miguel Sánchez: Mi profesor, por darme su apoyo incondicional para la realización de esta maestría.

A la Universidad UTECO: Por ser una casa de estudio para incentivar el conocimiento y la calidad de vida de los estudiantes.

A mi asesor Julio Manzueta: Por ser nuestro facilitador en esta investigación.

Lic. Tomás Reyes

DEDICATORIA.

A mis hijos: Lisbeth, Darwing Tomás, Darlyn Eudy y Darismel Darhiana: por ser un ente de motivación para seguir preparándome, A Wilneris Yisel: por todo su apoyo durante el proceso de preparación y todos mis hermanos: Gregorio, Nuris, Junior, Yulissa, Benita Asunción y Asunción Benita, por darme la fuerza de seguir hacia adelante.

Lic. Tomás Reyes

RESUMEN

La presente investigación sustentada por los licenciados José Antonio Duran y Tomas Reyes, asesorada por el MA. Julio Antonio Manzueta, tiene como título “Solución de la Ecuación de Schrödinger para el Átomo de Hidrógeno en Coordenadas Cilíndricas. Tiene como objetivo general deducir la Solución de la Ecuación de Schrödinger para el Átomo de Hidrógeno en Coordenadas Cilíndricas y como objetivos específicos; a) deducir el operador laplaciano en coordenadas cilíndricas, b) presentar algunas funciones de ondas para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas, c) deducir la solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrogeno en coordenadas cilíndricas en variables separables. Se presentan algunas teorías relacionada con el átomo de hidrógeno, postulados de Bohr, niveles de energía del átomo de hidrógeno, operadores de la mecánica cuántica, ecuación de Schrödinger. Coordenadas cilíndricas, funciones de ondas, ortogonalidad, función de distribución radial, número cuántico de la ecuación de Schrödinger.

Además, se efectuó un diseño no experimental, método deductivo y un enfoque cualitativo por lo tanto es de tipo documental.

Por otro lado, se pudo deducir el operador laplaciano en coordenadas cilíndricas, se presentan algunas funciones de ondas para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas, y por último no se pudo deducir la solución de la ecuación de Schrödinger en coordenadas cilíndricas para variables separables.

Descripción de símbolos matemáticos.

En este apartado se describen las simbologías matemáticas utilizadas en este trabajo de investigación, a los fines de facilitar la lectura y comprensión de la misma.

Simbología	Significado
$\int$	Integral
$\mathbb{N}$	Conjunto de los números naturales excluyendo al cero.
$\mathbb{N}_0$	Conjunto de los números naturales incluyendo el cero.
$\mathbb{R}$	Conjunto de números reales.
$\mathbb{C}$	Conjunto de números complejos.
$\neq$	No es igual.
$\in$	Pertenece a.
$\emptyset$	Conjunto vacío.
$\cap$	Intersección.
$\cup$	Unión.
$\frac{dy}{dx}$	Derivada.
$y = \phi(x)$	Función de x .
$Z = F(x, y)$	Función de dos variable.
$\frac{\partial z}{\partial x}$	Derivada parciales.
$W_e - W_x = x, t$	Derivada parcial parabolica.
$\leq$	(Menor que o igual a).
$\geq$	(Mayor que o igual a).
$>$	Menor que.
$<$	Mayor que.
$ x $	Valor absoluto.
$\lim_{i \rightarrow \infty} x_i$	Límite de la sucesión x_i cuando i tiende al infinito positivo.

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN.

1.1. Introducción.

En este capítulo se presenta los principales aspectos en los cuales se fundamenta la presente investigación, como son: antecedentes históricos, antecedentes académicos, objetivo general, objetivos específicos, justificación, planteamiento del problema, las preguntas de investigación y delimitación.

1.2. Antecedentes.

1.2.1. Antecedentes históricos.

Sepúlvera (2003) [4], la ecuación de schrodinger permite concluir de una partícula libre (no sometida a fuerzas) puede tener cualquier momento lineal y en consecuencia cualquier energía. Sin embargo, cuando se estudian momentos limitados de una región definida del espacio, a causas de sus integraciones, aparece un hecho notable: no todas las energías son posibles para la partícula o sistema. Este es el caso para un electrón en un átomo en campo magnético.

Helge (2007) [12] En 1925, mientras trabajaba en la teoría de los gases, Schrödinger estudió el trabajo de un físico francés relativamente desconocido, Louis de Broglie, quien sugirió en su tesis de 1924 una profunda dualidad entre materia y onda.

Ramos L., M. (2003) [11], en 1926 Erwin schrodinger dio otra construcción diferente de la mecánica cuántica basada en la idea de Broglie de asociarle una onda a una partícula. Las funciones de onda deben satisfacer la ecuación de schrodinger. Como se trata de una ecuación diferencial lineal, el conjunto de soluciones forma un espacio vectorial sobre los complejos.

Kaku (2014)[9], también en 1925, Schrodinger propuso su famosa ecuación ondulatoria, que lleva su nombre y es una de las mas importantes de la historia. su repercusivo fue inmediata y supuso la razón por la que recibió el premio nobel 1933. la ecuación de schrodinger describía con precisión el comportamiento ondulatorios de los electrones. y se aplicaba al átomo de hidrógeno explicaba sus extrañas propiedades. milagrosamente, también podía aplicarse a cualquier otro átomo para explicar las características de la tabla periódica de los elementos.

Helge (2007) [12], desde el verano de 1925 a la primevera de 1926, las publicaciones sobre mecánica se dispararon; al principio, su número se duplicaba cada dos meses. Entre julio de 1925 y marzo de 1927, se enviaron a las revistas científicas más de 200 artículos sobre la nueva teoría; el tiempo que mediaba entre la recepción de un manuscrito por los editores y la aparición impresa era a menudo muy corto: sirva como ilustración el artículo de Dirac sobre el espectro del hidrógeno que se recibió en los *Proceedings of the Royal Society* el 22 de enero de 1926 y se publicó el 1 de marzo de ese año.

Ariso (2013) [3], finalmente, la formalización matemática de Schrödinger partía del principio de continuidad y del principio de mínima acción para desembocar en una ecuación de onda que regía la evolución de una función continua estacionaria explicando las discontinuidades cuánticas.

1.2.2. Antecedentes académicos.

Torres, Héctor et. al, (2000) [20], presenta la ecuación no lineal de schrodinger para una fibra optica cuyo nucleo es quitar, dispersivo y tiene comportamiento no lineal. El efecto de la quiralidad se manifiesta sobre los términos asociados a las pérdidas de la fibra y sobre el coeficiente no lineal.

Silvana P., Torroba y Patricia (2013) [23], en la segunda jornada de investigación y transferencia para su estudio titulado “solución para el estudio fundamental de la ecuación de Schrödinger en un campo de fuerza centrales” Que a partir de la conexión Fisher-Schrödinger se obtuvo una solución para las autofunciones correspondiente al estado fundamental de la ecuación radial del átomo de hidrógeno. Considerado que, a pesar de la necesidad de recurrir al conocimiento previo relacionado con la posición de los orbitales del electrón, estamos frente a una poderosa herramienta para abordar situaciones no-simétricas.

Sánchez (2018) [22], llegó a la conclusión que se puede separar la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas parabólicas, esferoidales prolatas oblatas, a través del operador laplaciano en estas coordenadas. Además, con relación a los niveles de energía del átomo de hidrógeno, se pudo obtener los mismos valores a los de referencia en coordenadas esféricas, tanto para las coordenadas parabólicas como las esferoidales prolatas y oblatas.

En Monegro (2021) [19], presenta el operador Laplaciano en coordenadas esferoidales oblatas. Además, se pudo separar la ecuación de schrondiger para una partícula en un campo coulambiano en coordenadas esferoidales oblatas, a través del operador Laplaciano en estas coordenadas. Por ultimo, se determinaron las funciones de onda de la ecuación de schrondiger para una partícula en un campo coulombiano en las mismas coordenadas.

1.3. Planteamiento del problema.

Fue en 1926 cuando el científico Erwin Schrödinger planteó la ecuación de ondas que lleva su mismo nombre, como un avance de muchísima importancia en la mecánica cuántica. Schrödinger desarrolló su ideal ecuación motivado por el modelo atómico de Bohr en 1913, el cual requirió ser estudiado y analizado posteriormente

de una manera mucho más profunda, para poder ser utilizado en átomo de hidrogeno de forma más general.

Es interesante saber, que la ecuación Schrödinger del hidrógeno es separable, por lo que se procede a analizar las ecuaciones separables que dependen en gran parte, de las restricciones de la función de onda. Tomando en consideración que la ecuación radial existe, proporcionando el número principal, únicamente cuando está condicionado a valores enteros.

Se propone resolver la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas.

A partir de lo anterior sugen las interrogantes;

¿Cuál es la forma del operador Laplaciano en coordenadas cilíndricas?

¿Qué forma tiene la función de onda para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas?

¿Cuál es la limitación de solución de la ecuación de schrondiger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas?

1.4. Objetivos.

1.4.1. Objetivo general.

Deducir la solución de la ecuación de schröndiger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas.

1.4.2. Objetivos específicos.

1. Deducir el operador laplaciano en coordenadas cilíndricas.
2. Presentar algunas funciones de ondas para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas.
3. Deducir la solución de la ecuación de schrodinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas para variables separables

1.5. Justificación.

Sao y Isaac (2018). La ecuación de Schrodinger tuvo un importante papel en el desarrollo de la ciencia en general, esto debido a las variadas soluciones que tiene; así como lo fue, para el átomo de hidrógeno y la obtención de la configuración electrónica, el cual es un concepto muy importante en la química. Hoy en día, el problema fundamental de la mecánica cuántica sigue siendo el encontrar soluciones para esta ecuación.

De igual modo, el presente estudio de investigación se fundamenta en encontrar la solución de la ecuación de schrodinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas. Así, aportar una solución, deducción o análisis de esta ecuación en coordenadas cilíndricas, y que este trabajo sea útil como fuente para otros investigadores.

1.6. Delimitación.

Este trabajo de investigación pertenece al grupo de estudio de ecuaciones diferenciales. Y se apoya en el manejo teórico de la mecánica cuántica, se limita al estudio teórico, pues no se lleva a cabo practica alguna, experimentación ni simulaciones

CAPÍTULO II

REVISIÓN DE LITERATURA.

2.1. Introducción.

2.2. Marco teórico.

Los conceptos que se describen a continuación son: El átomo de hidrógeno , postulado de Bohr, niveles de energía del átomo de hidrogeno, operadores de la mecánica cuántica, ecuación de schrödinger, coordenadas cilíndricas, funciones de ondas, ortogonalidad, función de distribución radial, número cuántico de la ecuación de schrödinger, deducción de la ecuación de schrödinger. Los cuales sirven de soporte teórico para la presente investigación

2.2.1. El átomo de Hidrógeno

Definición 2.1 : El átomo de Hidrógeno, Álvarez (2015) [1] Es el átomo más simple que existe y el único que admite una solución analítica exacta desde el punto de vista de la mecánica cuántica. El átomo de hidrógeno, es conocido también como átomo Monoelectrónico, debido a que está formado por un protón que se encuentra en el núcleo del átomo y que contiene más del 99.945 por ciento de la masa del átomo, y un solo electrón unas 1836 veces menos masivo que el protón que "orbita" alrededor de dicho núcleo (aunque también pueden existir átomos de hidrógeno con núcleos formados por un protón y 1 o 2 neutrones más, llamados deuterio y tritio, respectivamente).

Una analogía pedagógica del átomo de hidrógeno con un Sistema Solar, donde el sol sería el único Núcleo atómico y tiene la mayor cantidad de masa concretamente es el 99.86 por ciento del sistema solar y en su órbita tuviera un solo planeta (Electrón) que conformaría el resto de la masa del Sistema (átomo de protio (^1H)). Esto hace del hidrógeno el más simple de todos los elementos de la tabla periódica de los elementos.

El modelo cuántico que explica satisfactoriamente el átomo de hidrógeno, se obtiene aplicando la ecuación de Schrödinger a un problema de una partícula en tres dimensiones dentro de un campo electrostático. En ese modelo el electrón queda descrito por una función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger tridimensional, con un potencial de Coulomb que viene dado por:

$$V(r) = -k \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

2.2.2. Los axiomas de la Mecánica Cuántica

Álvarez (2015) [1] Los principales axiomas o postulados de la Mecánica Cuántica se pueden resumir en los siguientes:

Cualquier magnitud física se describe a través de un operador “hermético” $\hat{A}$ definido sobre un espacio de Hilbert H , cuyos vectores ψ definen los posibles estados del sistema físico.

Los valores $f(a')$ que puede tomar una magnitud física son aquellos que corresponden al espectro del operador lineal hermético $\hat{A}$ que caracteriza dicha magnitud.

El valor esperado de una magnitud física x cualquiera de un sistema en el estado ψ , es $\langle \psi | x \psi \rangle$, donde $\langle . | . \rangle$ representa el producto escalar en el espacio de Hilbert. 4. La función de onda ψ del sistema está gobernada por la ecuación de Schrödinger, $H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ donde H es el operador de Hamilton del sistema.

2.2.3. Ecuación de Schrödinger para el Ascilador Armónico Isotrópico en coordenadas Cartesianas

Toribio (2015) [21]

$$\nabla^2 \psi + [\lambda - ((a_x \cdot x)^2 + (a_y \cdot y)^2 + (a_z \cdot z)^2)] = 0$$

Se obtuvo la separación de las variables al deducir las siguientes ecuaciones dife-

renciales ordinarias:

$$\begin{cases} \frac{d^2 X}{dx^2} + (\lambda_x - a_x^2 \cdot x^2)X(x) = 0. \\ \frac{d^2 Y}{dy^2} + (\lambda_y - a_y^2 \cdot y^2)Y(y) = 0. \\ \frac{d^2 Z}{dz^2} + (\lambda_z - a_z^2 \cdot z^2)Z(z) = 0. \end{cases}$$

2.2.4. Postulados de Bohr

Martínez (2003) [7] En 1913, Niels Bohr desarrolló su célebre modelo atómico de acuerdo a tres postulados fundamentales.

Primer postulado: de la infinidad de orbitas con radios diferentes que permite la mecánica clásica, el electrón solo puede moverse en aquellas en las que el momento angular L es un múltiplo entero de la contante de Planck dividida por $\frac{2}{\pi}i$. Es decir:

$$L = mvr = nh \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Donde $h = \frac{h}{2\pi}$

Segundo postulado: contrariamente a las predicciones de la teoría electrónica clásica, un electrón se mueve en una órbita permitida sin radiar energías electromagnéticas. De esta manera su energía total permanece constante.

Tercer postulado: la emisión de energía electromagnética se produce cuando un electrón que se encuentra en una órbita de energía E_i , cambia su movimiento hasta moverse en una órbita de menor energía E_f , la frecuencia y la radiación emitida es igual a la diferencia de energía de las orbitas ($E_i - E_f$) dividida por la constante de Planck h :

$$V = \frac{(E_i - E_f)}{h}$$

2.2.5. Niveles de energía del átomo de hidrógeno

Morcillo (2019) [8] Los niveles de energía de un átomo confinado son diferentes de los niveles del átomo libre. Este trabajo estudia la evolución temporal de un átomo de hidrógeno confinado por una barrera esférica e infinita de potencial cuando desaparece el confinamiento.

Morcillo (2019) [8] considera que el cambio del sistema se produce en un tiempo muy pequeño en comparación con la escala de tiempo asociada a la dinámica del sistema, por lo que usamos la aproximación repentina para el análisis de la situación y calculamos las probabilidades de ionización del átomo de hidrógeno partiendo de distintas situaciones de confinamiento. Analizando la distribución de probabilidad de ionización en función de la energía para distintos estados de partida del átomo confinado, observamos en cada caso un máximo principal para un valor de energía similar al del estado de partida, así como una serie de máximos secundarios incluso para grandes valores de energía.

2.2.6. Operadores de la Mecánica Cuántica

Las siguientes definiciones: operadores de mecánica cuántica, ecuación de Schrödinger, coordenadas cilíndricas, ortogonales y deducción de la ecuación de Schrödinger. fueron tomada de Sánchez (2018)[22]

Definición 2.2 : Un operador $\hat{O}$ Es un objeto que transforma a una función, g , en otra, h ,

$$\hat{O}g = h.$$

Al aplicar derivada una función, $f(g)$, resulta una función, $f'(h)$, en mucho caso diferente. En ese caso se le puede asignar un operador al procedimiento de la derivación.

Para una partícula

$$\text{Hamiltoniano} \quad -\hat{H} = \frac{h^2 \nabla^2 + V(x)}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2}$$

$$\text{Coordenada} \quad \hat{q} = q$$

$$\text{Momento lineal} \quad \hat{p}_q = \frac{i}{h} \frac{\partial}{\partial q} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$$

$$\text{Momento lineal cuadrado} \quad \hat{p}_q^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2}$$

$$\text{Potencial} \quad \hat{v} = V(x)$$

$$\text{Energía cinética} \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Para varias partículas:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(x_1, \dots, z_n)$$

2.2.7. Ortogonalidad

Definición 2.3 : Ortogonalidad se dice que un elemento x de un espacio de producto interno es ortogonal a un elemento $y \in X$ si:

$$\langle x, y \rangle = 0$$

Además, un producto interno y las normas correspondientes satisfacen las siguientes desigualdades:

1. **Desigualdad de Schwartz:** Donde el signo de igualdad se cumple si y solo si x, y es un conjunto linealmente dependiente.

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\|$$

2. **Desigualdad triangular:** Además, decimos que un subconjunto $S \subset X$ es ortonormal si, para cada $x, y \in S$,

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

$$\langle x, y \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } x = y \\ 0 & \text{si } x \neq y \end{cases} \quad (2.1)$$

2.2.8. Funciones de ondas

Teijon (1996) [24] Basándose en la hipótesis de Louis de Broglie y considerando que el movimiento del electrón es análogo a un sistema de ondas estacionaria, Schrödinger llegó por intuición a la siguiente ecuación de onda para el átomo es:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

Donde Ψ , llamada función de onda, es función de las coordenadas cartesianas x, y, z ; es la energía total del electrón y V la energía potencial.

Esta ecuación es puramente teórica y debe su validez a que su resultado y conclusiones coinciden plenamente con hechos probados experimentalmente. Resolviendo la ecuación de Schrödinger obtuvo valores de E que estaban plenamente de acuerdo con los obtenidos experimentalmente.

La función $\Psi(x, y, z)$ que se obtiene en la ecuación de onda representa la amplitud de la onda asociada al electrón en su movimiento, y $\Psi^2(x, y, z)$ representa la intensidad de onda y la probabilidad de encontrar el electrón en un punto es decir:

$$\Psi^2 dx dy dz = \Psi^2 dv$$

Además, las funciones de onda de Schrödinger pertenecen al espacio de Hilbert L^2 , el espacio de las funciones de cuadrado integrable. Un operador $\tilde{A}$ se dice hermítico si $\langle \alpha | \tilde{A} b \rangle = \langle \alpha \tilde{A} | b \rangle$. Una propiedad fundamental de estos operadores hermítico, es que para ellos existe una base ortonormal de autovectores y además los correspondientes autovalores son reales. En especial esta última propiedad es decisiva a la hora de identificar los operadores con las magnitudes físicas medibles, que son cantidades reales.

Es decir, la Matemática de la Mecánica Cuántica, es la matemática de los operadores en los espacios de Hilbert. Parte de esta teoría era conocida a principios del siglo XX, pero gran parte de la misma se desarrolló en Gotinga impulsada por David Hilbert pero fundamentalmente desarrollada por John Von Neumann cuya obra quedaría plasmada en el magnífico libro Fundamentos Matemáticos de la Mecánica

Cuántica publicado en 1932.

2.2.9. Función de distribución radial

Definición 2.4 : Función de distribución radial, Peter (2006)[10] La función de distribución radial, p , esta estrechamente relacionada con la función de onda $\psi = RY$ y está dada por

$$p(r) = r^2 R(r)^2$$

Para los orbitales, esta ecuación resulta ser:

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi(r)^2$$

y es la forma que se utiliza normalmente, sin embargo, se aplica solo a los orbitales mientras, que la ecuación se aplica a cualquier tipo de orbital. La función de distribución radial tiene un significado muy especial: indica la probabilidad de que un electrón se encuentre en un radio particular independientemente de la dirección. Específicamente, la probabilidad de que el electrón se encuentre en cualquier sitio en una fina capa de radio r y en espesor δr está dada por $p(r)\delta r$.

2.2.10. Número cuántico de la ecuación Schrödinger

Según Daniel (2004) [6] El número cuántico principal (n) puedes tener valores enteros 1, 2, 3... el valer de (n) determina la energía de un orbital. También se relaciona con la distancia promedio de un electrón al núcleo en un orbital. A mayor valor de n , mayor es la distancia de un electrón en el orbital con respecto al núcleo (y menos estable) es el orbital.

El número cuántico de momento angular (ℓ), indica la forma de los orbitales. Para un valor de n , ℓ tiene todos los valores enteros posibles de 0 a $(n - 1)$. Si $n = 1$ hay solo un valor de ℓ que es 0. Si $n = 2$, hay dos valores de ℓ , 0 y 1. si n es 3. Hay 3 valores 0, 1 y 2. El valor de ℓ en general se designa por las letras $s, p, d...$

ver anexo 2.1

Si $\ell = 0$, se tiene un orbital s , si $\ell = 1$ se tiene un orbital p y así sucesivamente. La secuencia s, p, d, f, g, h tiene un origen histórico, las líneas del espacio observadas eran agudas, algunas eran muy fuertes, principales y algunas eran dispersas, sin embargo, después de la letra d siguen un orden alfabético.

Un conjunto de orbitales en el mismo valor de n recibe de capa o nivel. Orbitales con el mismo valor de n y ℓ se llaman subcapas. El nivel $n = 2$ está compuesto por dos subcapas $2s$ y $2p$. El número cuántico magnético, describe la orientación del orbital en el espacio. Dentro de una subcapa, el valor de m depende del valor del número ℓ .

2.2.11. Separación de variables

Erich (2005) [14]. Si una ecuación en derivadas parciales, con dos o más variables independientes puede reducirse a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, una por cada variable la ecuación se dice separable. Cuyas ecuaciones son entonces producto de las soluciones de las ecuaciones ordinarias.

2.2.12. Ecuación diferencial parcial (EDP)

Definición 2.5 : La ecuación diferencial parcial (EDP), Serrano, C. C., et. al, (2008) [13] Esta ecuación diferencial contiene derivadas parciales de una o más variables dependientes, respecto a dos o mas variables independientes. Según el orden, se clasifican en ecuaciones diferenciales de primer, segundo y tercer orden, según sea la mayor derivada que aparezca en la expresión. Según el grado se clasifican en lineales (EDL) y no lineales (EDNL), siempre y cuando la ecuación diferencial este dada en forma de polinomio.

2.2.13. Ecuación de Schrödinger

Es una ecuación diferencial en derivadas parciales en el espacio y en el tiempo y lo mismo que las leyes del movimiento de newton, carece de deducción, como en las leyes de newton. Descansa en su acuerdo con la experiencia, en una dimensión.

$$\frac{-h}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) = E.\psi(x, t)$$

Se proseguirá a presentar algunas formas en que se ha planteado y analizado la ecuación de Schrödinger en los sistemas de coordenadas. .

En una partícula libre está planteada del siguiente modo:

$$\left(\frac{h^2}{m}\right) \Delta\psi + E.\psi = 0$$

Para un oscilador, se plantea así:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2} \left(E - \frac{1}{2}m.w^2x^2\right) \psi = 0.$$

Representación en Coordenadas polares:

$$\frac{-h^2}{2\mu} \frac{1}{r^2 \sin\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Planteamiento en la dinámica de un sistema, que en el caso unidimensional:

$$H \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) = ih \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t).$$

Para el átomo de hidrógeno, en coordenadas cartesianas:

$$\frac{-h^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{r} \psi(x, y, z) = E.\psi(x, y, z)$$

Para coordenadas esféricas, para el átomo de hidrógeno, independiente del tiempo es:

$$\frac{-h^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r, \theta, \varphi) + V(r, \theta, \varphi).\psi(r, \theta, \varphi) = E.\psi(r, \theta, \varphi)$$

También

$$\left\{ \frac{-1}{2} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] + V(r) - E \right\} \psi(nlm)(r, \theta, \phi) =$$

Para una partícula en un campo de coulomb atractivo.

$$U = \frac{-1}{r} = \frac{-2}{\xi + \eta}$$

Se plantea

$$\frac{4}{\xi + \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\xi \eta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + 2 \left(E + \frac{2}{\xi + \eta} \right) \psi = 0.$$

Ecuación de Schrödinger, en ausencia de campos externos, en coordenadas parabólicas.

$$\frac{-h^2}{2m} \left\{ 2 \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} \right) + 2 \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{d}{d\eta} \right) + \frac{\xi + \eta}{2\xi\eta} \frac{d^2}{d\phi^2} \right\} - \left(\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} + e.F \frac{1}{4} (\xi^2 - \eta^2) - E \frac{1}{2} (\xi - \eta) \right)$$

Las ecuaciones de Schrödinger temporal y no temporal respectivamente son:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{-h^2}{2m} \right) \nabla^2 \psi + U(x, y, z) \psi.$$

$$\left(\frac{-h^2}{2m} \right) \nabla^2 \psi + [E - U(x, y, z)] \psi = 0.$$

En el dominio $0 < x < a$ de un pozo de potencial ($U(x) = 0$), se plantea la ecuación de Schrödinger:

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

Y en la región exterior al pozo de potencial:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0$$

CAPÍTULO III

DISEÑO METODOLÓGICO.

3.1. Introducción.

A continuación se presentan los aspectos metodológicos que posibilitaran la realización exitosa y efectiva de este estudio, ellos son, el diseño, tipo, método, enfoque y procedimiento de investigación.

3.2. Marco metodológico.

3.2.1. Método.

El método utilizado en la realización de la presente investigación es deductivo, el cual según (Bernal, 2010). “consiste en tomar conclusiones generales para obtener explicaciones particulares. El método se inicia con el análisis de los postulados, teoremas, leyes, principios, etcétera, de aplicación universal y de comprobada validez, para aplicarlos a soluciones o hechos particulares.

3.2.2. Diseño.

El diseño empleado en el presente trabajo de investigación, es no experimental pues, “se realiza sin manipular deliberadamente variables” (Hernández, et. al, 2014)

3.2.3. Tipo.

Es de tipo documental. Ya que, según Bernal, (2010), “la investigación documental consiste en un análisis de la información escrita sobre un determinado tema, con el propósito de establecer relaciones, diferencias, etapas, posturas o estado actual del conocimiento respecto al tema objeto de estudio”.

3.2.4. Enfoque.

La investigación presenta un enfoque cualitativo, puesto que en la misma tiene como objetivo general deducir, explicar y verificar la solución de la ecuación de schrodinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas. Según Katayama (2014) [16] el enfoque cualitativo se entiende al "procedimiento metodológico que utiliza palabras, textos, discursos dibujos, gráficos e imágenes' la investigación cualitativa estudia diferentes objetos para comprender la vida social del sujeto a través de los significados desarrollados por éste".

3.3. Procedimientos.

En esta parte se hace una descripción de los diferentes momentos del proceso de investigación, los cuales fueron supervisado continuamente por el asesor, de modo que:

1. Se realizó la solicitud de aprobación de esta temática investigativa.
2. Se ejecutó una amplia consulta bibliográfica sobre los aspectos básicos de mecánica cuántica, derivadas parciales y variables separables.
3. Se sometió la propuesta de anteproyecto a la Facultad de Postgrado y Educación Continuada, con el propósito de evaluar la relevancia y/o pertinencia de la misma.
4. Se procedió a aplicar las definiciones del marco teórico para fundamentar los resultados planteados en el capítulo IV, finalmente se planteó la deducción de la solución de la ecuación de schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas para variables separables.

CAPÍTULO IV

PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

4.1. Introducción.

Tomando en cuenta el objetivo general de esta investigación, es deducir, explicar y verificar la solución de la ecuación de schrodinger, para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas, después de buscar una serie de documentos que traten sobre el mismo se detallan los resultados logrados.

4.1.1. Deducción de la ecuación de Schrödinger

Número cuántico de la ecuación Schrödinger, es simplemente un postulado descubierto. Sin embargo, existe un razonamiento simple que permite dar con la forma de la ecuación, el cual es el siguiente: Si tenemos una partícula libre y le asociamos cierta onda plana, entonces:

$$\Psi(x, t) = Ce^{i(kx - wt)}, k = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

Según De Broglie $p = 2\pi h/\lambda$, de donde, $k = p/h$ y usando la fórmula de Planck $\omega = Eh$

$$\Psi(x, t) = Ce^{\frac{i}{h}(px - Et)}$$

Así que,

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{-p^2}{h^2} \psi(x, t), \text{ de donde } p^2 = -\frac{h^2}{\psi(x, t)} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2},$$

pero,

$$E = \frac{p^2}{2m} \implies E = \frac{-h^2}{2m\psi(x, t)} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \text{ o } \frac{-h^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \cdot \psi(x, t)$$

En el caso de una partícula ligada mediante un potencial $V(x)$, tenemos:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x); \quad E = \frac{-h^2}{2m\psi(x, t)} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x),$$

O de manera equivalente,

$$\frac{-h^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \cdot \psi(x, t) = E \cdot \psi(x, t)$$

4.1.2. Deducción del laplaciano en coordenadas cilíndricas

las familias de superficies coordenadas son: ver figura 1

1. Cilindros circulares rectos que tienen el eje z como eje común.

$$p = (x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}} = \text{constante.}$$

2. Planos medios a través del eje z $\phi = \tan^{-1} \frac{y}{x} = \text{constante}$

3. Planos paralelos al plano $x, y, z = \text{constante.}$

Además, los límites en p, ϕ y z son:

$$-\infty < p < \infty, 0 \leq \phi \leq 2\pi, -\infty \leq z \leq \infty.$$

De la figura se pueden obtener las siguientes relaciones de transformación:

$$x = p \cos \phi$$

$$y = p \sin \phi$$

$$z = z$$

De donde, el vector de posición es:

$$\vec{r} = p \cos \phi \hat{i} + p \sin \phi \hat{j} + z \hat{k}$$

Donde p es la distancia perpendicular desde el eje z y se conserva r para la distancia desde el origen. Los factores de escala son:

$$h_1 = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial p} \right\|, \quad h_2 = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \phi} \right\|, \quad h_3 = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial z} \right\|$$

Así que, si derivando parcialmente el vector de posición, se sigue: $\frac{\partial \vec{r}}{\partial p} = \cos \phi \hat{i} + \sin \phi \hat{j}$
 $\frac{\partial \vec{r}}{\partial \phi} = -p \sin \phi \hat{i} + p \cos \phi \hat{j}$ $\frac{\partial \vec{r}}{\partial z} = \hat{k}$

De donde, los factores de escala en coordenadas cilíndricas son:

$$h_1 = h_p = \sqrt{(\cos\varphi)^2 + (\cos\varphi)^2} = 1.$$

$$h_2 = h_\varphi = \sqrt{(\cos\varphi)^2 + (\cos\varphi)^2} = p.$$

$$h_3 = h_z = 1.$$

El elemento de longitud se define como:

$$dl^2 = h_1^2(dp)^2 + h_2^2(d\varphi)^2 + h_3^2(dz)^2$$

Sustituyendo, se plantea:

$$dl^2 = (dp)^2 + p^2(d\varphi)^2 + (dz)^2$$

Mientras que, el elemento de volumen es:

$$dV = h_1 h_2 h_3 dq_1 dq_2 dq_3$$

Así que, para el laplaciano en coordenadas cilíndricas, se sigue:

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial\psi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial\psi}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial\psi}{\partial q_3} \right) \right] \quad 2,1$$

Sustituyendo.

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{p} \left[\frac{\partial}{\partial p} \left(p \frac{\partial\psi}{\partial p} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{p} \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(p \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) \right] \quad 2,2$$

Simplificando.

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial p^2} + \frac{1}{p^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \quad 2,3$$

4.2. Solución de la ecuación de schrödinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas

4.3. Teorema I.

La ecuación de schrodinger para el átomo de hidrógeno en coordenadas cilíndricas, no es de variables separables.

$$\frac{-h^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) = E \cdot \psi(x, t)$$

Demostración. Se escribe la ecuación de schrödinger tridimensional:

$$\frac{-h^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + [V(r) - E] \psi(r) = 0$$

De modo que:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - V] \psi = 0 \quad (4.1)$$

Por definición **2.1**:

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$$

Donde:

ϵ_0 es la permisividad del espacio.

r_1 es la distancia entre el núcleo y el electrón

Como se trata de coordenadas cilindricas entonces:

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2}$$

$$r = (\varphi^2 + Z^2)^{1/2}$$

Por tanto la ecuación 4.1 se transforma en:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}}] \psi = 0$$

Sea:

$$\epsilon^2 = \frac{8\pi^2 \cdot m \cdot E}{h^2} \quad (\text{Radio de Bohr})$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} + \epsilon^2 \psi + \frac{\partial \pi m^2 \epsilon^2}{\epsilon_0 h^2} \cdot \frac{1}{(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}} \cdot \psi = 0$$

Sea; $a_0 = \frac{\pi \cdot m \cdot \epsilon^2}{\epsilon_0 h^2}$; Entonces

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z} + \epsilon^2 \psi + \frac{2a_0}{(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}} \cdot \psi = 0 \quad (4.2)$$

Sea $\psi(P, \varphi, Z) = f_1(P) \cdot f_2(\varphi) \cdot (Z)$ una solución de la ecuación (4.2).

Sustituyendo se tiene que:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} [2f_1(\varphi) \cdot f_2(\varphi) \cdot f_3(Z)] + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} [2f_1(\varphi) \cdot f_2(\varphi) \cdot f_3(Z)] + \frac{\partial}{\partial Z} [\partial f_1(\varphi) \cdot f_2(\varphi) \cdot f_3(Z)] + \epsilon^2 f_1 \cdot f_2 \cdot f_3 + \frac{2a_0}{(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}} \cdot f_1 \cdot f_2 \cdot f_3 = 0$$

Se puede escribir así;

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} [f_2(\varphi) \cdot f_3(Z) \cdot \frac{\partial f_1(\varphi)}{\partial \varphi}] + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} [f_1(\varphi) \cdot f_3(Z) \cdot \frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi}] + \frac{\partial}{\partial \varphi} [f_1(\varphi) \cdot f_2(\varphi) \cdot \partial f_3(Z)] + \epsilon^2 f_1 \cdot f_2 \cdot f_3 + \frac{2a_0}{(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}} \cdot f_1 \cdot f_2 \cdot f_3 = 0$$

Multiplicando por $\frac{1}{f_1 \cdot f_2 \cdot f_3}$, se tiene que:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{1}{f_1(\varphi)} \cdot \frac{\partial f_1(\varphi)}{\partial \varphi} \right] + \frac{1}{\varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{1}{f_2(\varphi)} \cdot \frac{\partial f_2(\varphi)}{\partial \varphi} \right] + \frac{\partial}{\partial Z} \left[\frac{1}{f_3(Z)} \cdot \frac{\partial f_3(Z)}{\partial Z} \right] + \epsilon^2 + \frac{2a_0}{(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}} = 0$$

De donde:

$$\frac{1}{f_3(Z)} \cdot \frac{d^2 f_3(Z)}{dZ^2} = \frac{1}{f_2(p)} \cdot \frac{d^2 f_1(\varphi)}{d^2} - \frac{1}{f_2 \varphi} \cdot \frac{1}{f_2} \frac{d^2 f_2(\varphi)}{d\varphi^2} - \epsilon^2 - \frac{\partial m}{f_2(\varphi^2 + Z^2)^{1/2}} = 0$$

$$Asi \quad que \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{f_3} \cdot \frac{d^2 f_3}{dZ^2} = -m^2 \\ \frac{1}{f_1} \frac{d^2 f_1}{d\varphi^2} + \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{1}{f_2} \frac{d^2 f_2}{f_2 d\varphi^2} + \varepsilon^2 + \frac{2a_0}{f_2(\varphi+Z^2)^{1/2}} = m \end{array} \right. \quad (4.3)$$

Para la ecuación (4.3):

$$\frac{d^3 f_3}{dZ^2} = -m^2 f_3(Z)$$

Por la ecuación auxiliar se tiene:

$$F_3(Z) = C_1 \cdot e^{imz} + C_2 e^{-imz} \text{ tal que, } m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Normalizada la función se tiene:

$$\int_0^{2\pi} C \cdot e^{imz} \cdot C e^{-imz} dz \rightarrow \int_0^{2\pi} C^2 dz \rightarrow C^2(2Z) = 1$$

$$\text{De donde: } C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\text{Por lo tanto la función de ondas es: } F_3(Z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{imz}; \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

Como la radicación no es distributiva respecto a la suma, la ecuación (4.4) no puede reducirse a un conjunto de ecuaciones ordinarias una por cada variable, por tanto, la ecuación 4.4 no es variable separable.

■

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES

5.1. Introducción.

Al realizar la investigación “solución de la ecuación de schrodinger para el átomo de hidrógenos en coordenadas cilíndricas”, se llega a las siguientes conclusiones:

Con relación al primer objetivo que es deducir el operador laplaciano en coordenadas cilíndricas, se pudo alcanzar, pues el mismo se dedujo tal como fue planteado, de igual modo se logró el segundo objetivo, que es presentar algunas funciones de ondas para el átomo de hidrogeno en coordenadas cilíndricas y por último el tercer objetivo que es deducir la solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrogeno en coordenadas cilíndricas para variables separables no se pudo deducir porque aparece un radical donde la operación de la cantidad sub-radical es una suma y esta no es distributiva con respecto a la misma, por ende no se encontró para variables separables, así queda de mostrado el teorema 1 que es “ la Solución de la ecuación de schrodindiger para el átomo de hidrogeno en coordenadas cilíndricas, no es de variables separables.

5.2. Líneas Futuras de Investigación.

- Separabilidad de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico en coordenadas cilíndricas.
- Separabilidad de la ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo coulombiano en coordenadas cilíndricas.

Bibliografía

- [1] Álvarez N., Renato (2015), *Una introducción a la Mecánica Cuántica para “no iniciados”*. Departamento de Análisis Matemático, Facultad de Matemáticas, Universidad de Sevilla.
- [2] Alavarez, N. (2015), *Cuantificación y valores propios (I) y (II)*. página 118.
- [3] Albert, Arisó (2013), *Nuevas respuestas a viejas preguntas*. La vigencia de Aristóteles en la ciencia contemporánea, Bull. Amer. Math. Soc. página 118.
- [4] Sepúlvera S., Alonso (2003), *Concepto de la física*. Evolución historica, editorial universidad de antioquia pág. 306.
- [5] Lautenscheleguer, Ivan José (2013), *Consideraciones sobre el modelo del átomo de Bohrs* Academia da forsa aérea de pirassununga, centro universitario herminio ometto (uniararas) Lima Perú 79 página.
- [6] L. Daniel (2004), *Bioquímica médica*. Noriega editores; méxico, españa, venezuela y colombia, pag. 12-45.
- [7] Matínez, J. (2003), *Física y química, profesores de enseñanza secundaria*. Volumen II. física II, 1ra edición, en españa, pag. 30-45.
- [8] Morcillo, M. (2019), *Dinámica de un átomo de hidrógeno fuera de confinamiento*. Universidad de córdoba, pag. 30-45.
- [9] Kaku, Michio (2010), *Física de lo imposible*. Publicado por penguin Random House grupo Editorial España.
- [10] Peter W., L. (2006), *Los caminos del descubrimientos involucrado en la transformaciones de fase en fluido*. University of northern colorado, tercera edición, pag. 15.

- [11] Lara R., M. (2003), *La mecánica cuántica en México*. Una visión interdisciplinaria a cien años de su nacimiento, siglo XXI editores argentina, S.A. pág. 34.
- [12] Helge, Kragh. (2007), *Quantum generations. A history of physics in the twentieth century*. Princeton university press, ediciones akal, S.A. pág. 159.
- [13] Serrano, C., et. al, (2008), *Métodos e la solución e ecuaciones diferenciales y aplicaciones*. Instituto tecnológico de celaya, Instituto en el registro público del derecho de autor S.A. pág. 19.
- [14] Stel, Erich (2005), *Matemáticas para las ciencias aplicadas* Editorial reverté, S.A. Bogotá pág. 12.
- [15] Landau y Lifshitz. (1982), *Mecánica Cuántica, Curso abreviado de física teórica* Editorial. Mir. Moscú.
- [16] Katayama, R. J. (2014). *Introducción a la investigación cualitativa*. Lima: Fondo Editorial de la UIGV.
- [17] Kaku, M. (2014), *El futuro de nuestra mente: el reto científico para entender, mejorar y fortalecer nuestra mente* Revista faculta de ingenieria.
- [18] Martinez O., Alfonso (2020), *Eso no estaba en mi libro de Historia de la Física*. Divulgación Científica.
- [19] Monegro, E. (2021), *separabilidad de la ecuación de schrodinger para una partícula en un campo coulombiano en coordenadas esferoidales oblatas* Universidad tecnologica del cibao oriental (UTECO), división de postgrado y educación continua. Pág. 15-30.
- [20] Torres S., Héctor; Zamorano L., Mario y Villarronoel G., C. (2000), *Efecto quiral en la ecuación de Schrodiger para una fibra óptica*. Revista faculta de ingenieria, universidad de Tarapacá en Chile pag. 35-40.

- [21] Toribio M., Juan (2015), *El Oscilador Armónico en Coordenadas Cartesianas, Cilíndricas, Esféricas y Elípticas Cilíndricas. Un enfoque comparativo*. Universidad Autónoma de Santo Domingo. Facultad de Ciencias Escuela de Física, Recinto San Francisco de Macorís Provincia Duarte República Dominicana.
- [22] Sánchez, G. José M. (2018), *Separabilidad de la Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en Coordenadas Parabólicas, esferoidales prolatas y oblatas*. Página.
- [23] Silvana, P. (2013), “*Ansatz para el estudio fundamental de la ecuación de Schrödinger en un campo de fuerza centrales*”. Página.
- [24] Teijon, María J. y García Pérez, José A. (1996), *Teoría y problema*. Editorial tebar flores en madrid, 424 páginas.
- [25] Tipler A, Paul y Mosca, Gene (2005), *Física moderna*. Oakland University Rochester, Michigan Página 271.

ANEXOS: Figuras y Tablas

Anexo I. Presupuesto.

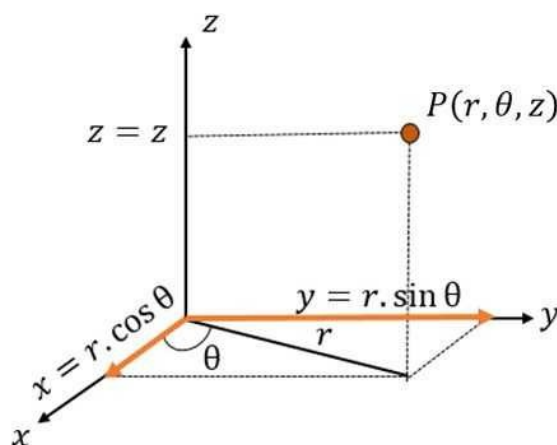
En este apartado se describen un resumen de los recursos económicos invertidos en el proceso de realización de este trabajo de posgrados.

Descripción	Monto
Transporte y viáticos	8,000.00
Fotocopias	1000.00
Materiales e insumos	4,500.00
Imprevistos	5,000.00
Total	17,500.00

Anexo II. Cronograma de trabajo de la investigación.

En este apartado se describen las diferentes etapas del proceso de preparación de esta investigación y sus respectivas fechas de ejecución.

Descripción	Periodos de ejecución.
Solicitud de título.	Noviembre 2021
Aprobación del título.	Diciembre 2021
Elaboración y entrega del anteproyecto.	Marzo 2022
Entrega de anteproyecto corregido.	Septiembre 2022
Elaboración de capítulo IV y V.	Octubre 2022



ℓ	Nombre del orbital.
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g