

## La funció d'ona dependent del temps:

La funció  $\psi(x,y,z)$  en coordenades polars  $\psi(r,\theta,\phi) = R(r).Y(\theta,\phi)$

Per a aïllar l'energia de l'equació d'Schrödinger, cal deduir  $R(r)$  i

$Y(\theta,\phi)$  per separat i llavors multiplicar-ho; obtindrem la suma d'energies en "l'eigenvalue" (altrament dit "valor propi"):

(La "fracció" d'energia corresponent a la translació no la considerem).

$$\left(\frac{m}{2}\right)[\dot{r}^2 + r^2 \cdot \dot{\theta}^2 + r^2 \cdot \sin^2 \theta \cdot \dot{\phi}^2] = E_{total}$$



vibració  $R(r)$  on  $r \neq ctnt$       rotació  $Y(\theta,\phi)$ , que

se dissocia en  $\phi(\theta)$  i  $\Theta(\theta, \phi)$

i on  $r=ctnt$ .

$$\hat{H} \cdot \psi(r, \theta, \phi) = E \cdot \psi(r, \theta, \phi)$$

Primer considerarem que totes 3 variables  $r, \theta, \phi$  són dependents del temps, aleshores  $\psi(t) = r(t) \cdot \theta(t) \cdot \phi(t)$ , llavors

$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(t)}{dt} = \psi(t)E$  ,  $r(t), \theta(t), \phi(t)$ , se deriven per separat i són acumulatives

$$\frac{-\hbar}{i} \dot{r} = E_1 \cdot r \quad \dot{r}^2 = E_1^2 \cdot r^2 \quad \dot{r}^2 = (2/m)^2 \cdot r^2 \cdot \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2$$

$$r(t) = e^{\frac{-i}{\hbar} \cdot t \cdot (2/m)}$$

d'altra banda, tenim  $\frac{-\hbar}{i} \frac{d\theta(t)}{dt} = E_2 \cdot \theta(t)$  ,  $\dot{\theta}^2 = E_2^2 \cdot \theta^2 \cdot \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2$

$$\dot{\theta}^2 = (2/(m \cdot r^2))^2 \cdot \theta^2 \quad \theta(t) = e^{\frac{-i}{\hbar} \cdot t \cdot [2/(m \cdot r^2)]}$$

I finalment  $\frac{-\hbar}{i} \frac{d\phi}{dt} = E_3 \cdot \phi(t)$

$$\dot{\phi}^2 = \left( \frac{2}{m \cdot r^2 \cdot \sin^2 \theta} \right)^2 \cdot \phi^2 \cdot \frac{-\hbar}{i} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \quad \phi(t) = e^{-i \cdot t \cdot \frac{[m \cdot r^2 \cdot \sin^2 \theta]}{\hbar}}$$

Totes les  $\psi$ 's acorden una mateixa energia ( $E_{total} = E_r + E_\theta + E_\phi$ ) provinent d'elles.

No sé si podem afirmar que:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = \dot{r}\theta\phi + r\dot{\theta}\phi + \dot{r}\theta\dot{\phi} + r\dot{\theta}\dot{\phi} + r\theta\dot{\phi} + r\theta\dot{\phi} ?$$

o simplement:  $\frac{d\psi(t)}{dt} = \dot{r}\theta\phi + r\dot{\theta}\phi + r\theta\dot{\phi} ?$ i