

Comentario sobre $\Psi(x,t)$, ecuación 1,
documento Teoría de Schrödinger

1

✓ Como la función de onda puede ser en general una función imaginaria, la ecuación 1 puede escribirse como

$$\Psi(x,t) = \sum_k A_k \cos(kx - \omega t) + i \sum_k B_k \sin(kx - \omega t) \quad (1)$$

$$\text{Ya que } \cos(kx - \omega t) = \frac{e^{i(kx - \omega t)} + e^{-i(kx - \omega t)}}{2} \quad (2)$$

$$\sin(kx - \omega t) = \frac{e^{i(kx - \omega t)} - e^{-i(kx - \omega t)}}{2i} \quad (3)$$

$$\Psi(x,t) = \sum_k A_k \left(\frac{e^{i(kx - \omega t)} + e^{-i(kx - \omega t)}}{2} \right) + i \sum_k B_k \left(\frac{e^{i(kx - \omega t)} - e^{-i(kx - \omega t)}}{2i} \right)$$

$$\Psi(x,t) = \sum_k \left(\frac{A_k + B_k}{2} \right) e^{i(kx - \omega t)} + \left(\frac{A_k - B_k}{2} \right) e^{-i(kx - \omega t)} \quad (4)$$

$\Psi(x,t)$ es una superposición de funciones del tipo $e^{\pm i(kx - \omega t)}$. La ecuación (14) del documento

"Teoría de Schrödinger" es una prueba de que las funciones $e^{\pm i(kx - \omega t)}$ son solución de la ecuación de Schrödinger para el caso de partícula libre.

Por otro lado, para las ondas materiales se cumple el principio de superposición que dice que si dos funciones Ψ_1 y Ψ_2 son soluciones de la ecuación de Schrödinger, entonces su suma $\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$ también es solución de la ecuación de Schrödinger.

Prueba : Si Ψ_1 es solución de la ec. de Schrödinger

$$\text{se cumple que } i\hbar \frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t) \Psi_1(x,t) \quad (5)$$

Si Ψ_2 es solución también, se tiene

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t) \Psi_2(x,t) \quad (6)$$

Multiplicando la ecuación (5) por a_1 , multiplicando la ecuación (6) por a_2 y sumando miembro a miembro las ecuaciones resultantes

$$a_1 \left(i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} \right) + a_2 \left(i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \right) = a_1 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + U \Psi_1 \right) + a_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + U \Psi_2 \right)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2) + U (a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U \Psi \quad (7) \quad 3$$

- ✓ Queda demostrado entonces que la superposición de Ψ_1 y Ψ_2 , esto es, $\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$ es también una solución de la ecuación de Schrödinger.
- ✓ De esta forma se prueba que la ecuación (1) representa una solución de la ecuación de Schrödinger cuando U es constante.
- ✓ El postulado de Schrödinger consiste en decir que la ecuación $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ se cumple también cuando U es variable en x y t ($U = U(x, t)$) y, como se ha dicho, esto debe ser probado por la consistencia que haya entre las predicciones del postulado y los resultados experimentales.
- ✓ Ya que la ecuación de Schrödinger es consistente con la ecuación clásica de la energía $E = \frac{p^2}{2m} + U$, es válida solamente para partículas no relativistas.

Ejemplo

4

La función de onda para el estado de menor energía de una partícula de masa m sobre la que actúa una fuerza de restitución $F = -kx$ (y por lo tanto $U(x) = \frac{1}{2} kx^2$) puede expresarse como

$$\Psi(x,t) = A e^{-\left(\sqrt{km}/2\hbar\right)x^2} e^{-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}t} \quad (8)$$

a) Verificar que esta expresión es una solución de la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}\Psi(x,t) \quad (9)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -2x \frac{\sqrt{km}}{2\hbar} \Psi(x,t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -2 \frac{\sqrt{km}}{2\hbar} \Psi(x,t) - 2x \frac{\sqrt{km}}{2\hbar} \left(-2x \frac{\sqrt{km}}{2\hbar} \Psi(x,t)\right) \quad (10)$$

El lado derecho de la ecuación de Schrödinger es

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\sqrt{km}}{\hbar} + x^2 \frac{km}{\hbar^2}\right) \Psi + \frac{1}{2} kx^2 \Psi \\ &= \left(+\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\sqrt{km}}{\hbar} - \frac{1}{2} kx^2\right) \Psi + \frac{1}{2} kx^2 \Psi \\ &= \left(+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}\hbar\right) \Psi \quad (11) \end{aligned}$$

El lado izquierdo es

5

$$i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = i\hbar \left(-\frac{i}{2} \sqrt{\frac{k}{m}}\right) \psi$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\delta\psi}{\delta t} = +\left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \hbar\right) \psi \quad (12)$$

Como (11) y (12) son iguales, entonces queda verificada la ecuación (8) como solución de la ecuación de Schrödinger.

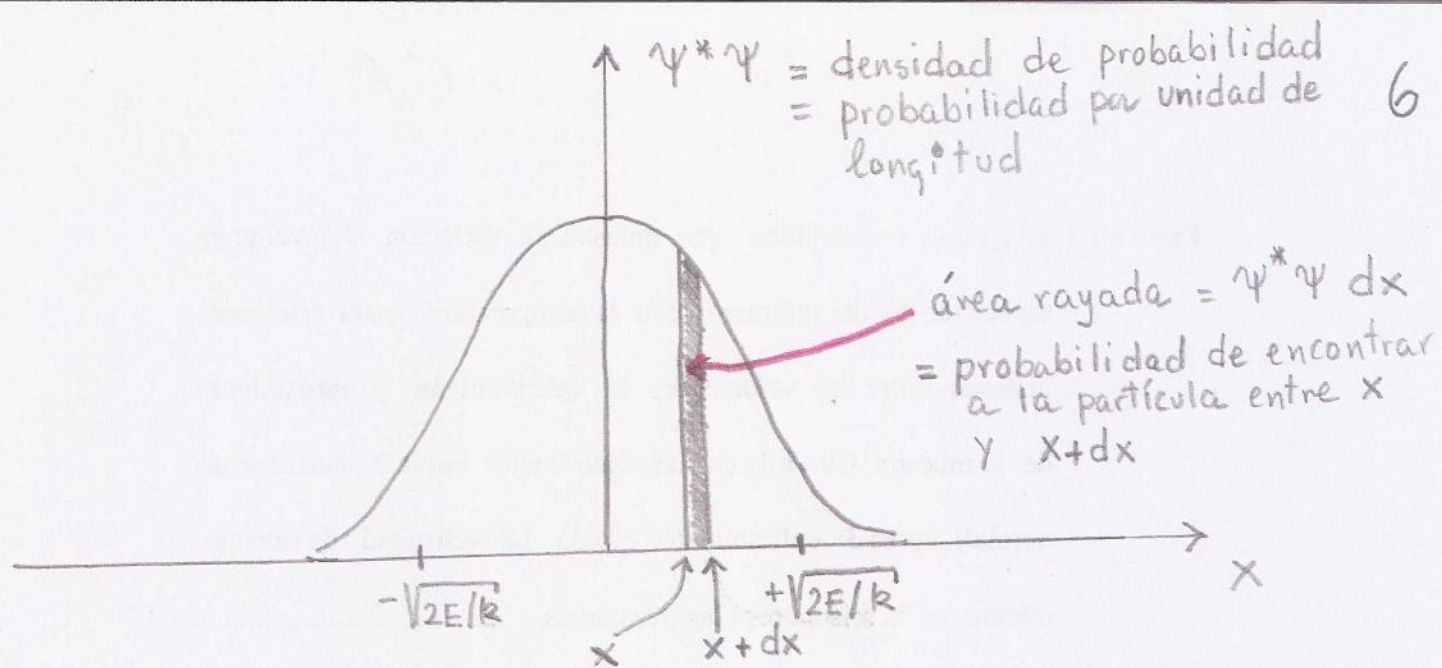
b) Evaluar la densidad de probabilidad para una partícula de masa m sometida a un potencial (Energía potencial) de tipo armónico simple

$U(x) = \frac{1}{2} kx^2$, cuando ella se encuentra en el estado cuántico de menor energía

$$\psi^* \psi = \left(A^* e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2} e^{-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}t} \right) \left(A e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2} e^{+\frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}t} \right)$$

$$\psi^* \psi = |A|^2 e^{-(\sqrt{km}/\hbar)x^2} \quad (13)$$

✓ La densidad de probabilidad $\psi^* \psi$ no depende del tiempo lo cual es cierto en cualquier caso en el que la partícula asociada con la función de onda ψ permanezca en un solo estado cuántico.



- ✓ La figura indica que la densidad de probabilidad tiene un máximo en $x=0$ lo que quiere decir que la mecánica cuántica predice que es más probable encontrar a la partícula en una distancia infinitesimal dx centrada en el punto de equilibrio del oscilador armónico ($x=0$).
- ✓ De la figura también se observa que la probabilidad para encontrar a la partícula en una distancia dx (entre x y $x+dx$), representada por $\psi^* \psi dx$, decrece muy rápidamente (exponencialmente) a medida que la partícula se aleja (en un sentido u otro) de la posición de equilibrio ($x=0$).
- ✓ Las posiciones $x = \pm \sqrt{2E/k}$ se aclararán luego cuando resolvamos el problema clásicamente.

✓ En mecánica clásica la partícula tiene una energía constante $E = K + U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$ (14), de donde

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - \frac{1}{2}kx^2} \quad (15)$$

✓ Como siempre ocurre en mecánica clásica, si se conoce la fuerza que actúa sobre una partícula como es este caso ($F = -kx$), tanto $p = mv$ como x pueden ser determinadas con total certidumbre.

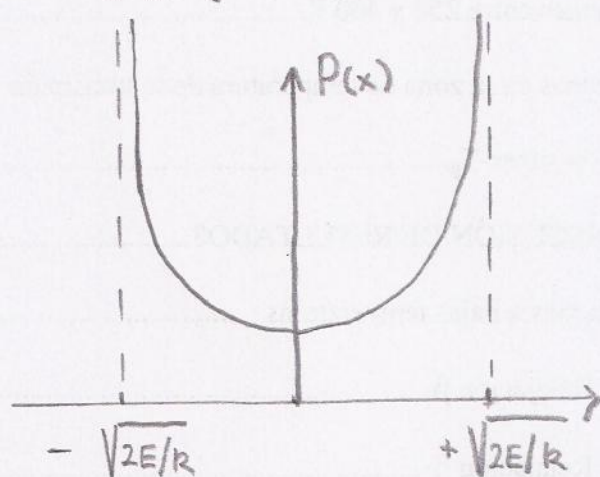
✓ Como se observa en la ecuación (15), la velocidad de la partícula depende de su posición. En este caso, la partícula tiene máxima velocidad en la posición de equilibrio ($x=0$) y mínima velocidad en los extremos del movimiento armónico simple ($x = \pm\sqrt{2E/k}$).

✓ Clásicamente se puede pensar que la probabilidad de encontrar a la partícula entre x y $x+dx$, representada por $P(x)dx$, va a ser mayor en las posiciones x en las que la partícula tenga menor velocidad. Eso hace que la partícula emplee un tiempo mayor en las zonas donde la velocidad es menor. Esto quiere decir que la densidad de probabilidad $P(x)$ debe ser inversamente proporcional a la velocidad, es decir

$$P(x) = \frac{B^2}{v} \quad (16),$$

donde B^2 es una constante adecuada de proporcionalidad.

$$P(x) = \frac{B^2}{\sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - \frac{1}{2} kx^2}} \quad (17)$$



Densidad de
probabilidad
clásica

- ✓ Al contrario de la densidad de probabilidad cuántica $\psi^* \psi$, la densidad de probabilidad clásica $P(x)$ tiene un mínimo en la posición de equilibrio ($x=0$) y crece rápidamente en la proximidad de los extremos del movimiento armónico simple.
- ✓ Al contrario de la predicción cuántica, las mediciones de la localización de la partícula según la mecánica clásica darán valores de x siempre entre los límites $x = -\sqrt{2E/k}$ y $x = \sqrt{2E/k}$. Según la mecánica cuántica, las mediciones de la posición de la partícula

darán valores en general cercanos a $x=0$ y no existen límites en la posición de la partícula.

- ✓ Se espera que la predicción cuántica sea la correcta en lugar de la clásica para el caso del estado más bajo de energía del oscilador armónico porque el cálculo clásico ignora el principio de incertidumbre que gobierna el comportamiento del mundo microscópico y es necesario para obtener cantidades físicas asociadas a estados de bajo número cuántico.
- ✓ El cálculo clásico ignora el principio de incertidumbre al asociar un valor definido de velocidad con un valor definido de posición ($v = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - \frac{1}{2} kx^2 \right)}$)
- ✓ Para estados de energía del oscilador armónico asociados a valores grandes de ^{los} números cuánticos (estados de alta energía), según el Principio de correspondencia, las descripciones cuántica y clásica serán consistentes.

Lectura : pag. 174 - 175 , Eisberg - Resnick

Conclusión importante:

- ✓ El comportamiento de una función de onda en un sistema es predecible en el sentido de que la ecuación de Schrödinger (para un energía potencial dada $V = V(x,t)$) determina exactamente la forma de la función de onda $\Psi(x,t)$ en cualquier tiempo t a partir de la función de onda inicial $\Psi(x,t_0)$.
- ✓ El problema que hay es que no es posible determinar de manera unívoca la función de onda inicial $\Psi(x,t_0)$ a partir de un conjunto inicial de mediciones.
 ¿Por qué? Porque aún conociendo la densidad de probabilidad $\Psi^* \Psi$ inicial a partir de mediciones, el valor o la forma (en función de x para $t=t_0$) de la función de onda está indefinida.
 Varias formas de $\Psi(x,t)$ pueden ser consistentes con $\Psi^* \Psi$.
- ✓ A partir de una de las posibles formas de $\Psi(x,t_0)$ se puede encontrar $\Psi(x,t)$ pero $\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)$ predice solamente las probabilidades relativas de los resultados de las mediciones que se hagan en el tiempo t .

Born dijo : El movimiento de las partículas se realiza conforme a las leyes de la probabilidad, pero la probabilidad misma se propaga (cambia en función de x y t) de acuerdo con la ley de causalidad (conforme a una ecuación diferencial, la ec. de Schrödinger)

Otro Ejemplo :

Normalizar la función de onda del estado base del oscilador armónico. Encontrar la constante A .

$$\Psi(x,t) = A e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2} e^{-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}t} \quad (18)$$

La probabilidad de encontrar a la partícula entre $x = -\infty$ e ∞ , cuando ella se encuentra en el estado base debe ser 1 (Normalización)

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} P(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = 1$$

$$\Rightarrow A^* A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{km}/\hbar)x^2} dx = 1$$

$$\Rightarrow 2A^* A \int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{km}/\hbar)x^2} dx = 1$$

De tablas : $\int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{km}/\hbar)x^2} dx = \frac{(\pi \hbar)^{1/2}}{2(km)^{1/4}}$

$$\Rightarrow 2A^*A \frac{(\pi \hbar)^{1/2}}{2(km)^{1/4}} = 1$$

$$\Rightarrow A^*A = \frac{(km)^{1/4}}{(\pi \hbar)^{1/2}}$$

A puede ser real

$$A^2 = \frac{(km)^{1/4}}{(\pi \hbar)^{1/2}}$$

$$A = \frac{(km)^{1/8}}{(\pi \hbar)^{1/4}}$$

La función de onda normalizada es

$$\Psi(x,t) = \frac{(km)^{1/8}}{(\pi \hbar)^{1/4}} e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2} e^{-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}t} \quad (19)$$