La ecuación de Schrödinger predice la cuantización de la Energía

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\,\Psi(x) = E\,\Psi(x) \qquad (1)$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\Big(U(x) - E\Big)\Psi(x) \qquad (2)$$

✓ La ecuación (2) es análoga a la ecuación clásica del oscilador armónico simple en 1D

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x \qquad (3).$$

✓ Así como la función $x = x(t)$ y su segunda derivada $\frac{d^2x(t)}{dt^2}$ dependen una de la otra como se observa en la ecuación (3),

la función de onda $\Psi = \Psi(x)$ y su segunda derivada $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$ dependen una de la otra como se observa en la ecuación (2).

✓ Así como la ecuación (3) "impone" una relación entre $x(t)$ y $\frac{d^2x(t)}{dt^2}$ la cual determina el comportamiento general de x en función de t,

la ecuación (2) "impone" una relación entre $\Psi(x)$ y $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$ la cual determina el comportamiento general de Ψ en función de x.

✓ Así como especificando, en la ecuación (3), el valor de x y su primera derivada $\frac{dx}{dt}$ (velocidad) en un instante particular (inicial) t_0, se puede entonces determinar un comportamiento particular de x en función de t,

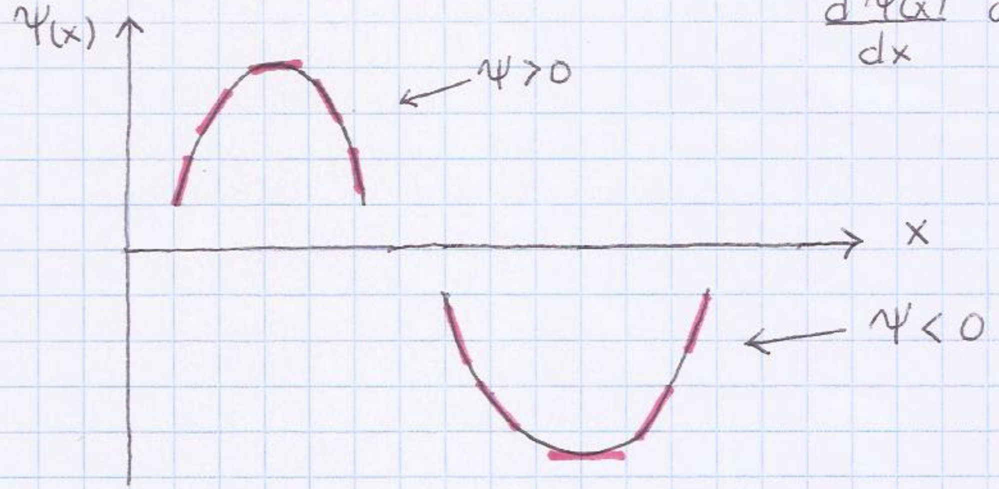
especificando, en la ecuación (2), el valor de Ψ y su primera derivada $\frac{d\Psi}{dx}$ en un instante particular (inicial), se puede determinar un comportamiento particular de Ψ en función de x.

✓ La ecuación (2) es interesante porque si $E > V(x)$, los signos de $\Psi(x)$ y $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$ son distintos y

si $E < V(x)$, los signos de $\Psi(x)$ y $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$ son iguales.

✓ Si $E > V(x)$, cuando $\Psi(x) > 0$, $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} < 0$ (Concavidad hacia abajo, $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ disminuye),

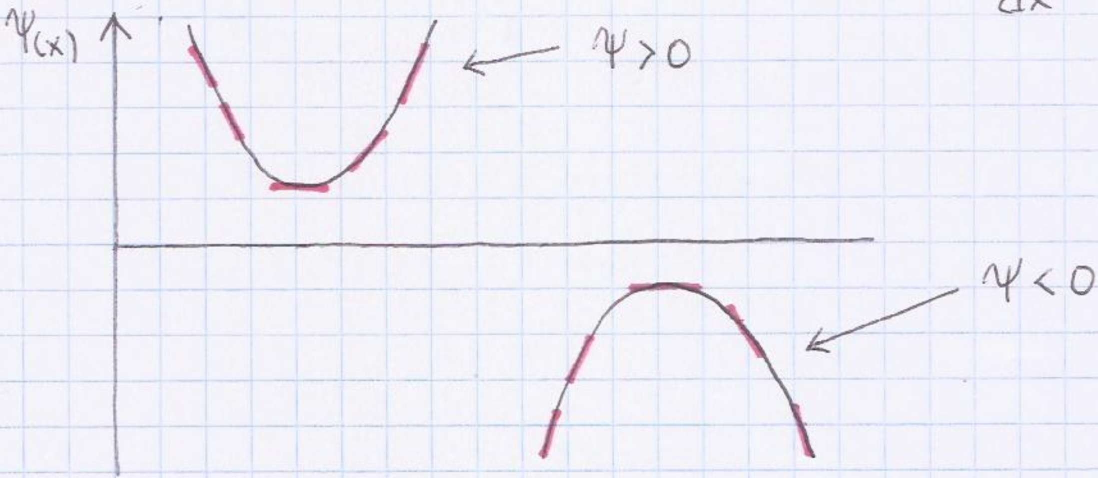
cuando $\Psi(x) < 0$, $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} > 0$ (Concavidad hacia arriba, $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ aumenta)

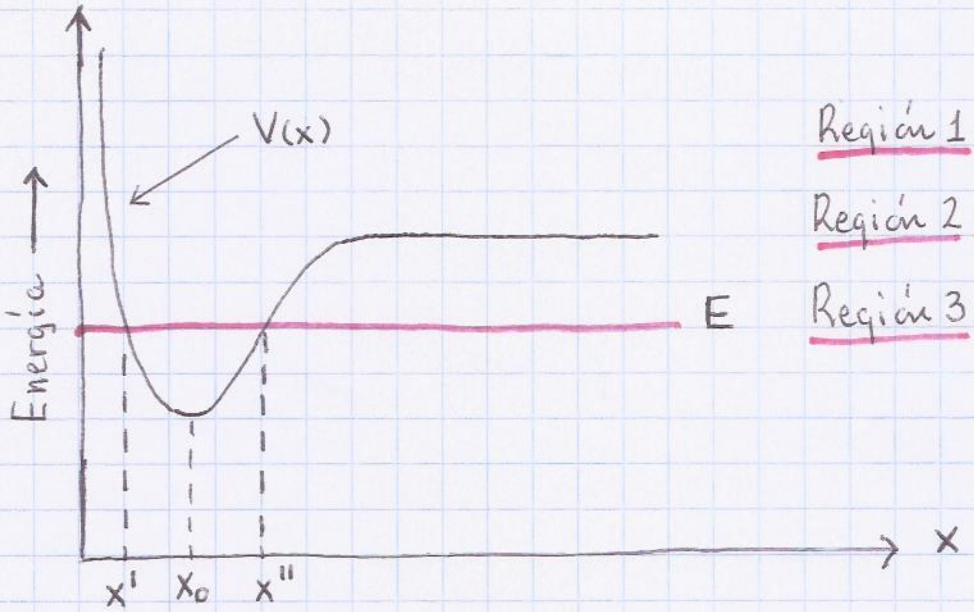


En una región donde $E > V(x)$ la función tiende a ser oscilatoria porque los signos de $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}$, es decir, las concavidades hacen que la función de onda $\Psi(x)$ tienda siempre a pasar (a volver, a retornar) al valor $\Psi(x) = 0$.

Si $E < V(x)$, Cuando $\psi(x) > 0$, $\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} > 0$ (Concavidad hacia arriba, $\dfrac{d\psi}{dx}$ aumenta

cuando $\psi(x) < 0$, $\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} < 0$ (Concavidad hacia abajo, $\dfrac{d\psi}{dx}$ disminuye





Región 1: $x < x'$ $\quad E < V(x)$

Región 2: $x' < x < x''$ $\quad E > V(x)$

Región 3: $x > x''$ $\quad E < V(x)$

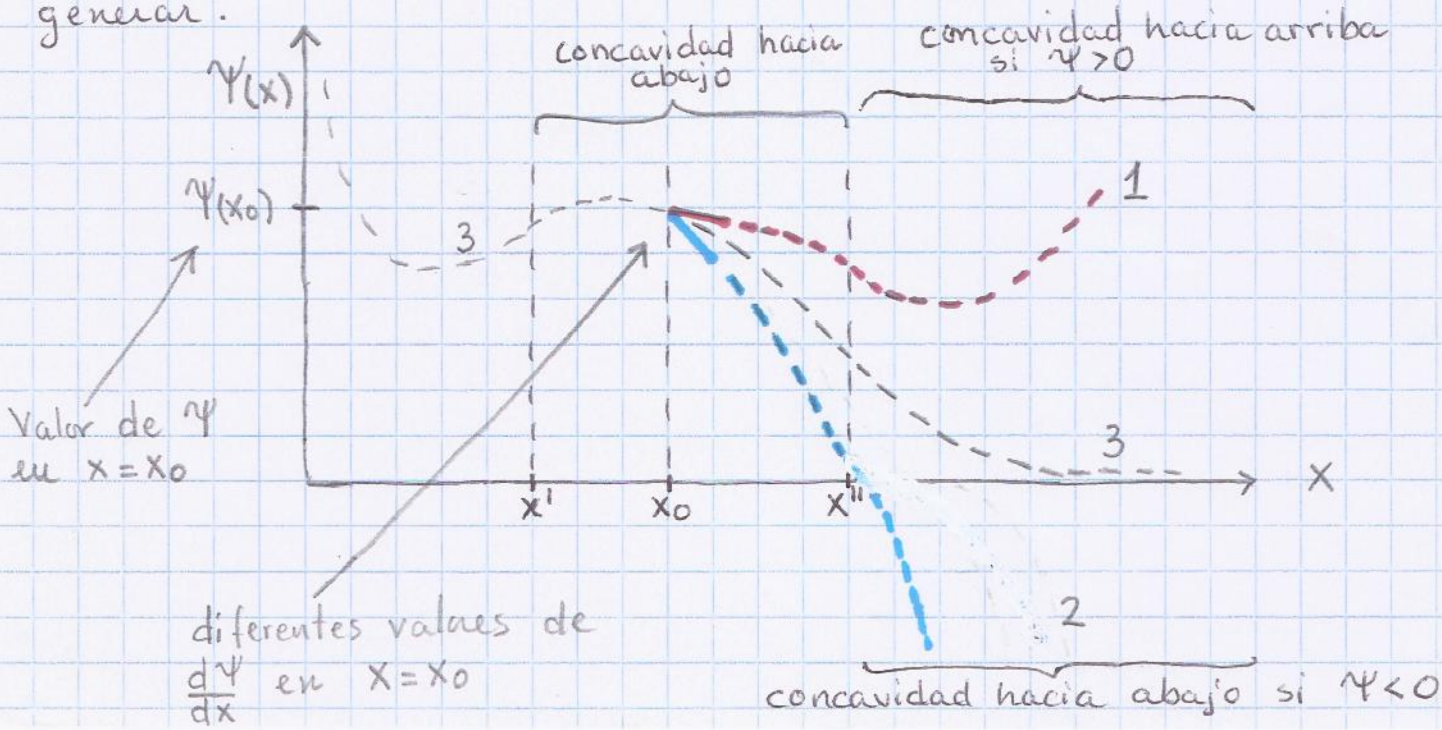
✓ En la región 2 $(x' < x < x'')$, $E > V(x)$ y se espera que la función de onda Ψ oscile.

Escojamos un valor de Ψ y un valor de $\frac{d\Psi}{dx}$ en el punto $x = x_0$. Supongamos que el valor de $\Psi > 0$ y el de $\frac{d\Psi}{dx} < 0$

Lo que se desea es generar los valores de Ψ y $\frac{d\Psi}{dx}$ para otros valores de x a ambos lados de $x = x_0$.

Leer pag. 197 - 198

✓ En la Fig. 5.14 (Eisberg - Resnick, pag. 198) se muestran tres opciones de curvas $\Psi(x)$ vs x que se pueden generar.



Hay que recordar que todas las curvas anteriores ψ vs x fueron generadas para un $U = U(x)$ y un valor de E.

Si no es posible encontrar una eigenfunción o autofunción $\psi(x)$ que se comporte bien, hay que repetir el procedimiento para otro valor de energía E.

En general existirán un número de valores "permitidos" de la energía total $E_1, E_2, E_3, \ldots$ para los cuales la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene soluciones aceptables (que se computan bien) $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots$

Ver Fig. 5.15 (Eisberg-Resnick, pag. 199): Formas de eigenfunciones aceptables correspondientes a los tres estados de menor energía (permitida) para una energía potencial con un mínimo.

$\psi_1(x), \psi_2(x)$ y $\psi_3(x)$

En esta figura, el "punto generador" del cual parte la generación de las curvas, es el $x = x_0$. Se ha supuesto que en los tres casos, la función de onda en $x = x_0$, es decir, $\psi(x_0)$ tiene el mismo valor

De la figura se observa que la pendiente $\frac{d\psi_2}{dx}$ cambia más rápido que la $\frac{d\psi_1}{dx}$ en $x = x_0$

$$\Rightarrow \quad \left| \frac{d^2\psi_2}{dx^2} \right| > \left| \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right| \qquad (4)$$

Por (2) y (4)

$$\left| U(x) - E_2 \right| > \left| U(x) - E_1 \right| \qquad (5)$$

Como para $x = x_0$ $\quad E > U(x) \Rightarrow \quad E_2 - U(x) > E_1 - U(x)$

$\Rightarrow E_2 > E_1$. Analogamente $E_3 > E_2$

✓ La diferencia entre la energía E_2 y la energía E_1 se debe a la diferencia entre las magnitudes de las derivadas segundas $\frac{d^2\Psi}{dx^2}$ asociadas a las correspondientes funciones Ψ_2 y Ψ_1.

✓ Es claro (viendo la figura) que la diferencia entre las derivadas segundas mencionadas anteriormente no es una cantidad infinitesimal, indicando ésto que los valores de E_1 y E_2 están bien separados.

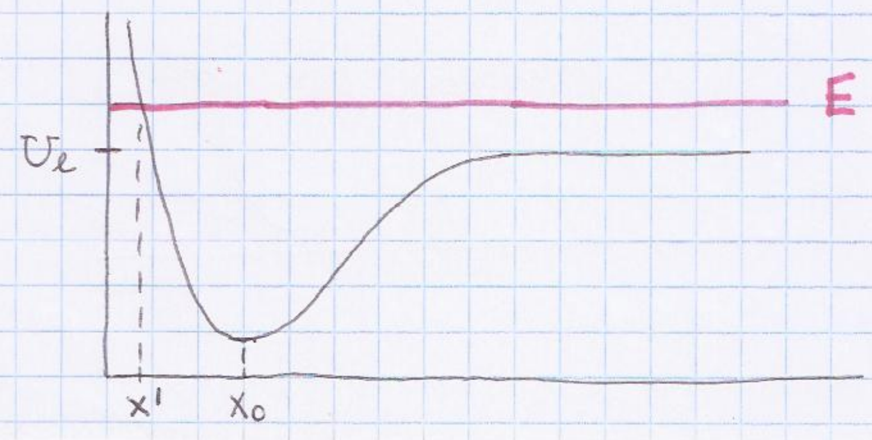
Lo mismo ocurre para todos los otros valores de energía que se obtengan.

=> Para una partícula que se mueve con una energía potencial $U = U(x)$ (independiente del tiempo) solamente existen soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo si la energía de la partícula está cuantizada, esto es, restringida a un conjunto discreto de energías $E_1, E_2, E_3, \ldots$

✓ La afirmación anterior es solamente válida si existe una relación entre $U(x)$ y E tal que existen las tres regiones (región 1, región 2 y región 3) definidas en la página 4 de este documento.

$$\begin{cases} \text{Región 1}: & x < x' & E < V(x) \\ \text{Región 2}: & x' < x < x'' & E > V(x) \\ \text{Región 3}: & x > x'' & E < V(x) \end{cases}$$

En el caso de que la línea que representa la energía E está por arriba de U_e, no existe x'' y solo existen dos regiones



Región 1:
$x < x'$ $E < V(x)$

Región 2:

$x > x'$ $E > V(x)$

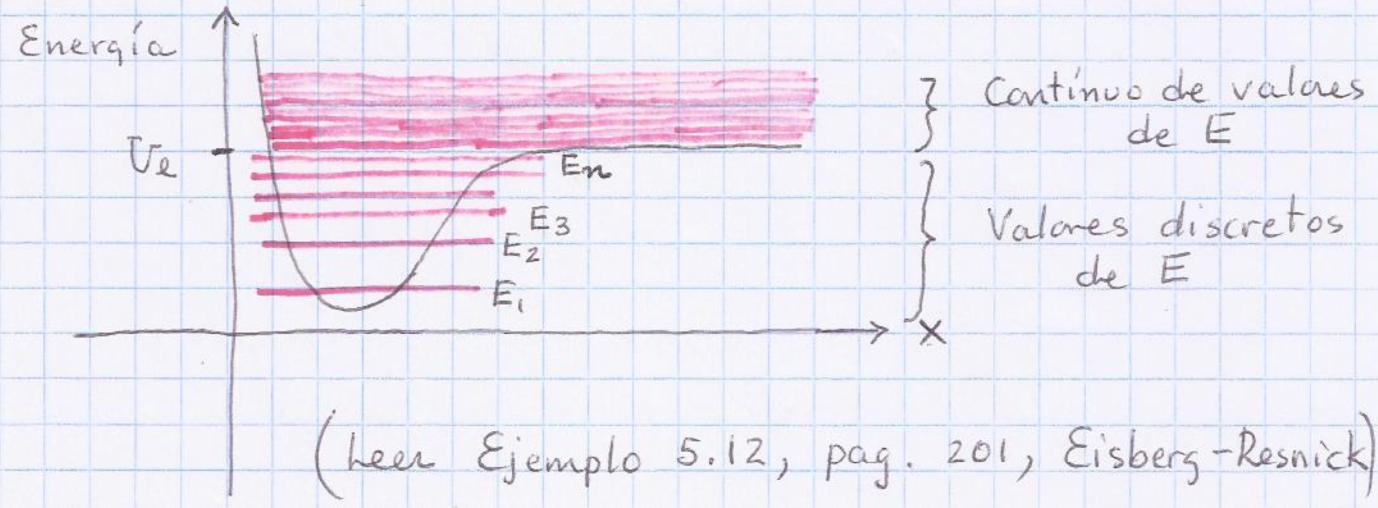
✓ En la región 2, la función de onda es oscilatoria y siempre va a tender a ser igual a cero, como mencionamos anteriormente en este documento para el caso $E > V(x)$.

✓ Por otro lado sabemos que dado cualquier valor de $E > U_e$ que usemos en la ecuación de Schrödinger independiente de t para una energía potencial $U = U(x)$, siempre vamos a poder generar una curva Ψ vs x aceptable para valores pequeños de x si se hace una selección adecuada de Ψ y $\frac{d\Psi}{dx}$ en el punto generador $x = x_0$. Esto implica que los valores de E "permitidos" en la ecuación de Schrödinger independiente de t forman un conjunto de valores continuo por arriba de $E = U_e$.

✓ La conclusión de esta sección 5.7 del Eisberg-Resnick es la siguiente:

- Cuando la relación entre la energía total E de una partícula y su energía potencial U es tal que clásicamente la partícula debería estar ligada a una región limitada del espacio (Región 2: $x' < x < x''$ con $E > (x)$) debido a que la energía potencial es mayor que la energía E fuera de dicha región (Región 1: $x < x'$ y Región 3: $x > x''$ con $E < U(x)$ en ambas regiones), entonces la Teoría de Schrödinger predice que la energía total E está cuantizada.

- Cuando la relación entre E y U es tal que la partícula no está ligada (clásicamente) en una región limitada, entonces la teoría predice que E puede tener cualquier valor.



(Leer Ejemplo 5.12, pag. 201, Eisberg-Resnick)