

# RESUMEN

1

✓ Un sistema mecánico-cuántico está descrito por una función de energía potencial  $U$  particular.

✓ Si  $U$  es independiente del tiempo,  $U = U(x)$ , la ecuación de Schrödinger  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t) \Psi(x,t) = i \hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$  (1)

conduce a la correspondiente ecuación de Schrödinger independiente de  $t$ :

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

✓ Existen soluciones de la ecuación (2) solamente para ciertos valores de la energía, los cuales se escriben de menor a mayor como

$$E_1, E_2, E_3, \dots, E_n, \dots$$

• A estas energías se les denomina eigenvalores o autovalores asociados a la energía potencial  $U(x)$ .

• Los primeros valores de energía son discretos.

• A menos que  $U$  crezca sin límite tanto para  $x$ 's bajos como para  $x$ 's altos, por arriba de cierta energía, los autovalores están distribuidos de manera continua.

✓ Por cada autovalor (eigenvalor) hay una autofunción (eigenfunción)

$$\Psi_1(x), \Psi_2(x), \Psi_3(x), \dots, \Psi_n(x), \dots$$

que es una solución de la ecuación de Schrödinger independiente de  $t$  para la energía potencial  $U(x)$ .  
→ (ecuación (2))

• Por cada autovalor existe una función de onda correspondiente

$$\Psi_1(x,t), \Psi_2(x,t), \Psi_3(x,t), \dots, \Psi_n(x,t), \dots$$

dada por

$$\Psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar}, \Psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}, \dots, \Psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \dots$$

- ✓ Cada función de onda es una solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación (1)) para la energía potencial  $U(x)$ .
- ✓  $n$  es el número cuántico que se utiliza para etiquetar a un autovalor ( $E_n$ ), a su correspondiente autofunción ( $\Psi_n(x)$ ) y a su función de onda  $\Psi_n(x,t)$ .
- ✓ Una combinación lineal arbitraria de todas las funciones de onda que son soluciones de la ecuación de Schrödinger para una energía potencial  $U(x)$ , esto es

$$\Psi(x,t) = C_1 \Psi_1(x,t) + C_2 \Psi_2(x,t) + \dots + C_n \Psi_n(x,t) + \dots \quad (3)$$

también es solución de la ecuación de Schrödinger.

Esto es así pues la ecuación de Schrödinger (ecuación (1)) es una ecuación diferencial lineal.

- Es importante recalcar que las funciones de onda contenidas en la combinación lineal que se muestra en la ecuación (3), corresponden a valores de energía ( $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ ) distintos y, sin embargo, la combinación lineal de ellas es una solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación (1)).
- Al contrario de lo que hemos dicho aquí en relación a la ecuación de Schrödinger, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, a pesar de también ser lineal, solamente acepta una combinación lineal como solución, si las autofunciones que forman parte de dicha combinación lineal corresponden al mismo valor de energía  $E$ . Esto es así puesto que en la ecuación de Schrödinger independiente de  $t$  (ecuación (2)) la energía  $E$  aparece en forma explícita, cosa que no ocurre en la ecuación de Schrödinger (1).

### Ejemplo 5-13 (Eisberg - Resnick, pag. 204)

- ✓ Cuando una partícula se encuentra en un estado de forma que al medir la energía total de la partícula, se obtiene un solo valor  $E$ , entonces la función de onda viene dada por

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (4)$$

- ✓ • Apartando el hecho de que el átomo de hidrógeno es un sistema 3D, si suponemos que la ecuación (4) representa la función de onda cuando el electrón se encuentra en el estado base del átomo de hidrógeno, entonces la función densidad de probabilidad es

$$\Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \Psi^*(x) \Psi(x) \quad (5)$$

que no depende del tiempo.

- Ya que el electrón puede ser encontrado en cualquier punto del espacio donde la densidad de probabilidad es distinta de cero, entonces puede pensarse en una distribución de carga eléctrica asociada al electrón dada por  $e \Psi^*(x) \Psi(x)$ , donde  $e$  es la magnitud de la carga del electrón.
- Como la distribución de carga  $e \Psi^*(x) \Psi(x)$  no depende del tiempo, desde el punto de la mecánica cuántica, la distribución de carga asociada al electrón es una distribución estática, al igual que en electromagnetismo clásico, no emite radiación. De esta forma, la mecánica cuántica puede resolver la paradoja de la estabilidad del átomo de la teoría cuántica antigua.

✓ Supongamos ahora que se tiene una partícula en una condición tal que una medición de la energía total  $E$  de la partícula puede dar uno de dos autovalores  $E_1$  o  $E_2$ . La función de onda es

$$\Psi(x,t) = C_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + C_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (6)$$

• Un ejemplo de la ecuación (6) es un electrón que está en un estado de excitación cuya energía de enlace es  $E_2$  y puede hacer una transición al estado base cuya energía de enlace es  $E_1$ .

• La densidad de probabilidad es

$$\Psi^*(x,t) \Psi(x,t) = (C_1^* \psi_1^*(x) e^{iE_1 t/\hbar} + C_2^* \psi_2^*(x) e^{iE_2 t/\hbar}) (C_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + C_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}) \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) = & C_1^* C_1 \psi_1^*(x) \psi_1(x) + C_2^* C_2 \psi_2^*(x) \psi_2(x) + \\ & + C_1^* C_2 \psi_1^*(x) \psi_2(x) e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + \\ & + C_2^* C_1 \psi_2^*(x) \psi_1(x) e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \end{aligned} \quad (8)$$

En la ecuación (8), los dos últimos términos son el complejo conjugado uno del otro. Como la suma de un número complejo  $a+ib$  con su complejo conjugado  $a-ib$  es  $2a$ , entonces la ecuación (8) puede escribirse como

$$|\Psi(x,t)|^2 = |C_1 \psi_1(x)|^2 + |C_2 \psi_2(x)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left[ C_1^* \psi_1^*(x) C_2 \psi_2(x) e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} \right] \quad (9)$$

En este caso, la densidad de probabilidad  $|\Psi(x,t)|^2$  y por lo tanto la densidad de carga  $e |\Psi(x,t)|^2$  oscila en el tiempo con una  $\omega = (E_2-E_1)/\hbar$  (10). Como

$$\omega = 2\pi \nu \Rightarrow \nu = \frac{E_2-E_1}{h} \quad (10).$$

$\nu$  es la frecuencia a la que el electromagnetismo clásico predice que la distribución de carga emite radiación

que coincide con la frecuencia del fotón que la teoría de Bohr diría que se emite cuando el electrón efectúa una transición de un estado de energía  $E_2$  a un estado de energía  $E_1$ .

- ✓ Además de predecir correctamente las frecuencias de los fotones emitidos en transiciones atómicas, como se ha visto en este documento, la mecánica cuántica también predice correctamente las probabilidades por unidad de tiempo (por segundo) de que estas transiciones ocurran. Esto se verá en el Cap. 8 del Eisberg-Resnick.

### Problemas sugeridos :

Eisberg-Resnick, Cap. 5, pag. 207

2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 18, 19, 20, 22,  
23, 26, 27, 28, 29, 33, 34, 35