Valores esperados (Eisberg-Resnick pag. 176)

✓ Consideremos a una partícula y a su función de onda asociada $\Psi(x,t)$.

✓ En una medición de la posición de la partícula, existe una probabilidad de encontrarla entre x y $x+dx$ (en un tiempo particular) si $\Psi(x,t)$ no es cero entre x y $x+dx$.

✓ En general, la función de onda es distinta de cero para un rango de valores de x de modo que al realizar mediciones de la posición de la partícula (en un tiempo particular), no se obtiene un valor definido de x.

✓ La cantidad apropiada para ser determinada es la posición promedio $\bar{x}$ de la partícula en un tiempo particular t.

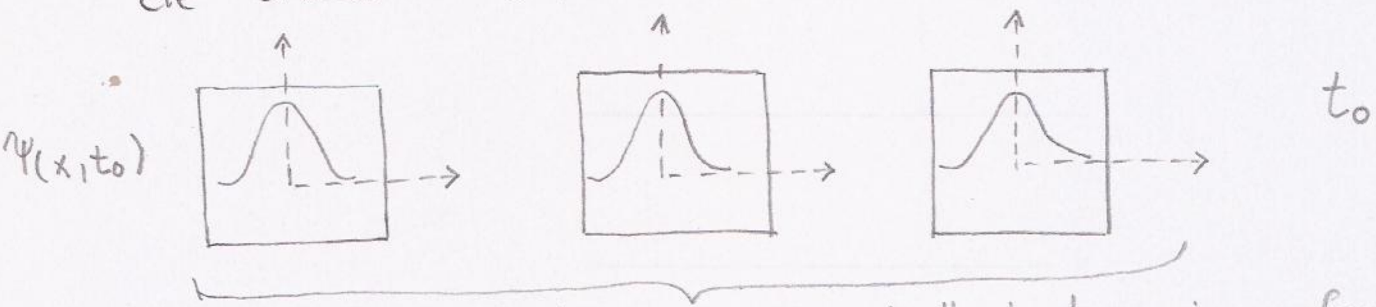
✓ ¿Cómo se puede especificar $\bar{x}$?

- Primero que todo, hay que entender qué significa "hacer una medición de la posición de una partícula en un tiempo t"
- Para determinar una posición $\bar{x}$ (promedio en un tiempo t) de la partícula debemos obtener (experimentalmente) varios valores de la posición de la partícula en un tiempo particular t y luego promediar esos valores (para un tiempo t específico)

- Por lo dicho anteriormente es claro que no podemos medir distintos valores de la posición X de una partícula en un tiempo t específico.

- Lo que se puede hacer (experimentalmente y/o mediante simulaciones) es realizar mediciones sobre muchos sistemas idénticos a la partícula que nos interesa estudiar.

- Cada sistema idéntico es realmente la misma partícula con la misma función de onda $\Psi(x,t)$ y la misma condición inicial en la función de onda $\Psi(x, t_0)$.



Sistemas idénticos "preparados" de la misma forma en el tiempo inicial t_0

- Una vez que se logra (experimentalmente o simulación) tener una cantidad estadisticamente significativa de sistemas idénticos a una particula "preparados" de la misma forma en el tiempo inicial t_0, se deja "correr" el experimento (o simulación) y en un tiempo t posterior se hace una medida de la posición de la partícula (en cada sistema).

- En un caso hipotético en el que en n_1 sistemas se mide un valor de posición x_1, en n_2 sistemas se mide otro valor de posición x_2, y así sucesivamente, el valor promedio $\bar{x}$ vendrá dada (para un tiempo t específico por)

$$\bar{x}(t) = \frac{n_1 x_1(t) + n_2 x_2(t) + \cdots}{n_1 + n_2 + \cdots} \qquad (1)$$

donde $n_1 + n_2 + \cdots = N$ es el número total de sistemas idénticos a la partícula que se estudia en los que se midió la posición de la partícula en el tiempo específico t.

$$\bar{x}(t) = \frac{n_1}{N} x_1(t) + \frac{n_2}{N} x_2(t) + \cdots \qquad (2)$$

- La fracción $\frac{n_1}{N}$, por ejemplo, representa la fracción de sistemas idénticos en los que se midió (en el tiempo t) que la posición de la partícula era x_1.

- Esta fracción entonces representa la probabilidad de que la partícula en estudio tenga una posición x_1 en el tiempo t.

- La misma idea se extiende para el resto de las otras posiciones medidas $x_2, x_3, \ldots\ldots$ en el mismo tiempo t.

$$\bar{x} = \sum_i P_i x_i \qquad (3)$$

En variable continua

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)\, x\, dx \qquad (4)$$

Según Born

$$P(x,t)\, dx = \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (5)$$

$$\Rightarrow \qquad \bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (6)$$

ó (si $\Psi(x,t)$ no está normalizada)

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx} \qquad (7)$$

Ejemplo : Determinar el valor esperado (promedio) de la posición de una partícula que esté sometida a una fuerza de restitución $F = -kx$ (Movimiento armónico simple) si ella se encuentra en el estado base o fundamental (mínima energía).

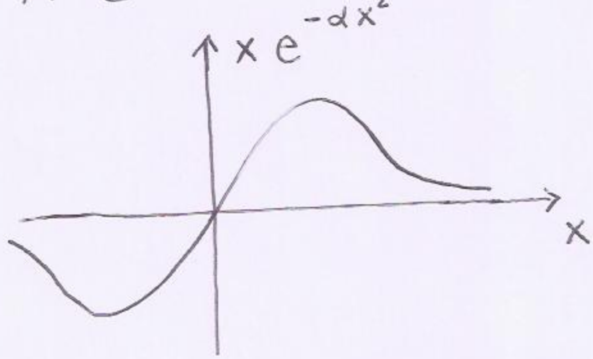
$$\Psi(x,t) = A\, e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2}\, e^{-(i/2)\sqrt{k/m}\,t} \qquad (8)$$

$$\text{con} \quad A = \frac{(km)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}} \qquad (9)$$

$$(6) \Rightarrow \bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} A^*\, e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2}\, e^{+(i/2)\sqrt{k/m}\,t} \times A\, e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2}\, e^{-(i/2)\sqrt{k/m}\,t}$$

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



$$\bar{x} = 0 \qquad (9)$$

Se puede calcular el valor esperado de cualquier función $f(x,t)$

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, f(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (10)$$

por ejemplo el valor esperado de la energía potencial $U = U(x,t)$ de una partícula

$$\overline{U}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, U(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (11)$$

Valor esperado del momento lineal P

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, p\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (12)$$

En mecánica cuántica, al contrario de lo que pasa en mecánica clásica, el principio de incertidumbre establece que no es posible escribir el momento lineal p como una función de x, ya que p y x no pueden conocerse simultáneamente con completa precisión. Hay que encontrar otra forma de manejar el integrando de la ecuación (12).

Consideremos la función de onda asociada a una partícula libre ($V(x,t)$ = constante) :

$$\Psi_{(x,t)} = A e^{i(kx-\omega t)} \qquad (13)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = ik\, \Psi(x,t) = i \frac{2\pi}{\lambda} \Psi(x,t) = i \frac{2\pi}{h/p} \Psi(x,t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i \frac{p}{\hbar} \Psi(x,t) \Rightarrow p\Psi(x,t) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x,t) \quad (1$$

✓ El resultado de la ec. (13) indica que donde tengamos $p\,\Psi(x,t)$, podemos reemplazarlo por la acción del operador $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ sobre la función de onda $\Psi(x,t)$.

✓ De esta forma la ecuación (12) puede escribirse como

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, p\, \Psi(x,t)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x,t)\, dx$$

$$\Rightarrow \bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\, dx \qquad (14)$$

(Leer pag. 181, Eisberg - Resnick)

Valor esperado de la energía E

Una vez más usamos $\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)}$ (15)

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i\omega\, \Psi(x,t) = -i(2\pi\nu)\, \Psi(x,t) = -i\left(2\pi \frac{E}{h}\right) \Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\, \Psi(x,t) \Rightarrow E\,\Psi(x,t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi(x,t) \qquad (16)$$

Como el valor esperado de E es

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, E\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (17)$$

entonces (16) en (17):

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi(x,t)\, dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}\, dx \qquad (17)$$

Otra forma para determinar $\bar{E}$ es darse cuenta que la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t)\, \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \qquad (18)$$

implica que, considerando la ecuación (16)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t)\, \Psi(x,t) = E\, \Psi(x,t) \qquad (19)$$

y sustituyendo (19) en (17)

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t)\,\Psi(x,t) \right] dx \qquad (20)$$

que tambien puede escribirse en términos del operados $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t)$ como

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t) \right) \Psi(x,t)\, dx \qquad (21)$$

Valor esperado de cualquier cantidad dinámica $f(x,p,t)$

$$\overline{f(x,p,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, f(x,p,t)\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (22)$$

Usar la asociación $p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (23)

Por ejemplo si $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ (Oscilador armónico simple) (24)

entonces la función f que hay que usar en (22) es $f(x,p,t) = E(x,p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2$ (25)

Haciendo la asociación $p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (26)

tenemos que

$$f(x,p,t) = E(x,p) = \frac{1}{2m} pp + \frac{1}{2} kx^2$$

$$= \frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{1}{2}kx^2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2 \qquad (27)$$

Reemplazando (27) en (22):

$$\overline{f(x,p,t)} = \overline{E(x,p)} = \bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x,t)\, dx$$

$$\Rightarrow \bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\,\psi(x,t)\right] dx \qquad (28)$$

La ecuación (28) tiene la misma forma que la (21).

Otra asociación que puede ser importante es

$$E \longleftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$