

Docente: M. Sc. Karen López

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE HONDURAS



IPAC 2023

Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados

Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados

Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Principio de Complementariedad



[Las propiedades ondulatorias de las partículas]

Se debe a **Louis de Broglie** el postulado que así como la luz tiene una naturaleza dual, todas las partículas conocidas en la naturaleza también deberían exhibir ese comportamiento.

Según de Broglie, las partículas tienen una longitud de onda característica, λ , dada por:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mu} \quad (1)$$

donde p es el momento lineal, m su masa y u su rapidez.



[Las propiedades ondulatorias de las partículas]

Las partículas también respetan la relación de energía de Einstein: $E = hf$; así, las partículas reciben una frecuencia, f , en función de su energía total, E .

$$f = \frac{E}{h} \quad (2)$$

Para asimilar la conjunción de propiedades corpusculares y ondulatorias es necesario el **principio de complementariedad**:

Los modelos de ondas y partículas sobre materia y radiaciones se complementan entre sí.



[El experimento de Davisson-Germer]

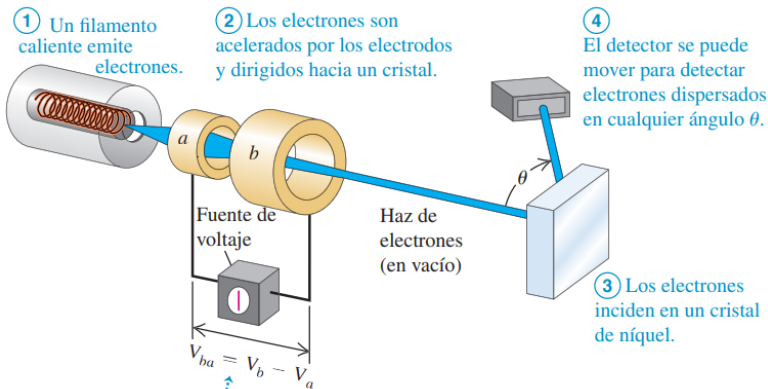
Las ideas de de Broglie se mantuvieron como una mera especulación hasta que **C. J. Davisson** y **L. H. Germer** observaron el fenómeno de difracción en electrones.



Figura: Fotografía de Davisson y Germer



[El experimento de Davisson-Germer]



$V_{ba} > 0$, por lo que los electrones se aceleran al pasar a a b .

Figura: Diagrama de un aparato similar al utilizado en el experimento de Davisson y Germer.

[El experimento de Davisson-Germer]

Davisson y Germer notaron que los electrones dispersados por estructuras cristalinas presentaban **picos de intensidad** máxima y mínima en ángulos de incidencia específicos.

Tales picos se deben a **interferencias constructivas** de los electrones, tal como se observaría en ondas.

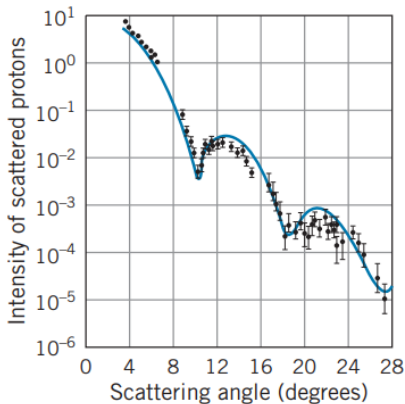


Figura: Intensidad de protones dispersados en función del ángulo de dispersión.



[El experimento de la doble rendija]

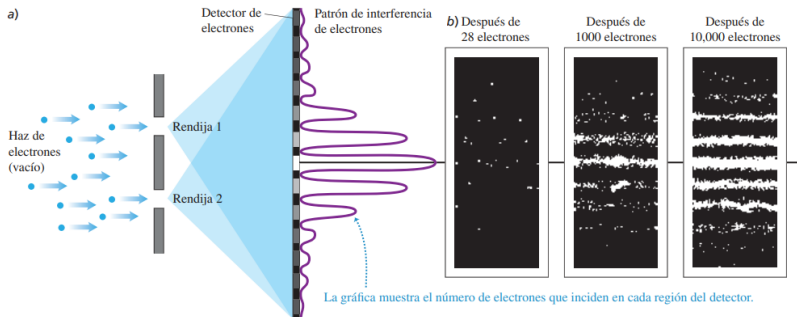


Figura: Representación gráfica del experimento de la doble rendija.

Este experimento mostró que los electrones pueden interferir consigo mismos al atravesar una lámina con dos rendijas.



[Ondas de De Broglie en el mundo macroscópico]

Posteriormente, la difracción en partículas fue observada en múltiples escenarios con partículas más masivas como átomos de helio e hidrógeno.

Para objetos cotidianos, las longitudes de onda de de Broglie son considerablemente pequeñas, lo que implica que las propiedades ondulatorias de estos objetos no son detectables para nuestros instrumentos de medición.



[Principio de incertidumbre de Heisenberg]

Debido al principio de complementariedad no podemos usar ambos modelos para describir el comportamiento de un sistema cuántico. Como consecuencia inmediata tenemos el **principio de incertidumbre de Heisenberg**.

Werner Heisenberg propuso que en general no podemos conocer con precisión arbitraria la posición y el momento lineal de una partícula al mismo tiempo, lo que se expresa matemáticamente como:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \quad (3)$$

Este principio es aplicable a varios pares de observables, como la energía y el tiempo.



Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados

Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Función de estado y la ecuación de Schrödinger



En la mecánica clásica, el comportamiento de una onda está totalmente descrito por la función de onda $y(x, t)$. De manera análoga, la **la función de estado**, $\Psi(\tilde{\mathbf{r}}, t)$ ¹, contiene toda la información sobre una partícula en mecánica cuántica.

La función de estado depende de las coordenadas espaciales y del tiempo. Pero cuando escribimos psi minúscula, ψ , nos referiremos a la función de onda sobre las coordenadas espaciales, nada más.



¹ $\tilde{\mathbf{r}}$ es un vector posición de las coordenadas x, y, z

[Ondas mecánicas vs Ondas corpusculares]

La ecuación de ondas para una onda en una cuerda es:

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\nu^2} \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} \quad (4)$$

Sus soluciones deben satisfacer las siguientes relaciones:

$$\omega = \nu k \quad (5)$$

$$\nu = \lambda f \quad (6)$$

Donde ω es la frecuencia angular $2\pi f$, k es el número de onda, f es su frecuencia, λ es su longitud de onda y ν es su rapidez de propagación.



[Ondas mecánicas vs Ondas corpusculares]

La ecuación 5 no se cumple para ondas corpusculares. Este detalle impone una estructura diferente para la ecuación de ondas corpusculares y sus soluciones:

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

Las soluciones para la ecuación 7 deben satisfacer la siguiente relación:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (8)$$

Donde \hbar es la constante de Planck reducida, y m es la masa de la partícula.



La ecuación 7

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

Recibe el nombre de **Ecuación de Schrödinger** unidimensional de una partícula libre. Esto es, aplica para una partícula que se mueve en una dimensión sin la influencia de fuerzas externas.

Hay que notar que la función de estado es en general compleja.



Figura: Retrato de Erwin Schrödinger



[La ecuación de Schrödinger con energía potencial]

Para partículas sujetas a la acción de fuerzas externas con un potencial conocido, podemos modelar la dinámica del sistema con una ecuación de Schrödinger unidimensional modificada:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (9)$$

Donde $U(x)$ es una función de potencial independiente del tiempo. Para el caso tridimensional, basta con reemplazar x por \vec{r} .



Para una partícula libre en una dimensión, la función de estado $\Psi(x, t)$ que satisface la ecuación 7 viene en forma de una onda sinusoidal

$$\Psi(x, t) = A [\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)], \quad (10)$$

Donde A es una constante adecuada.

La longitud de onda de la partícula es $\lambda = 2\pi/|k|$. El signo de k determina el sentido de la trayectoria de la partícula; $k < 0$ implica que la partícula va en la dirección de $-\hat{x}$, un $k > 0$ indica que la partícula viaja en el sentido \hat{x} .



Una función de onda de la forma $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-Et/\hbar}$ describe a un *cuanto* en un estado energético $E = \hbar\omega = \hbar k^2/(2m)$ específico. Si $U(x) \neq 0$ estas funciones **no satisfacen a la ecuación de Schrödinger**.

En tanto que estas funciones describen estados cuánticos para valores específicos de energía, se les llaman *estados estacionarios*. Para estos estados la ecuación de Schrödinger se convierte independiente del tiempo y es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (11)$$



A la expresión

$$\boxed{e^{-iE_k t/\hbar}} \quad (12)$$

Suele llamársela *el propagador*. La idea tras el nombre es que al multiplicarlo por las soluciones de 11, $\psi(x)$, asocia al estado estacionario con un valor de E_k que lo describe.

Los valores de E_k provienen de la resolución de 11 para una función potencial $U(x)$ dada.



Para que exista una solución $\psi(x)$ para la ecuación 11 se precisan de dos condiciones:

1. La función $\psi(x)$ debe ser continua en la región del espacio donde $U(x)$ está definida. Si x representa la ubicación donde la partícula puede existir, entonces $\psi(x)$ debe ser continua sobre esos valores.
2. La función $d\psi/dx$ debe ser continua en el mismo intervalo.

Estas condiciones reciben el nombre de *condiciones de frontera*.



Se llama *estado ligado* a aquel estado energético del sistema caracterizado por un valor de E_n menor que el del potencial U_0 que restringe al sistema. En un pozo infinito todos los estados de energía son ligados. En un pozo finito, la partícula puede dejar de estar ligada si E_n supera al potencial U_0 .

En el interior del pozo, la energía del sistema es

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (13)$$

Donde $n \in \mathbb{N}$ y L es el ancho de la caja.



Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados

Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Probabilidad y Normalización



[Interpretación estadística de la función de estado]

En la difracción e interferencia de ondas electromagnéticas sucede que la **probabilidad** de que un fotón choque alrededor de un punto en una pantalla será directamente proporcional al cuadrado de la magnitud del campo eléctrico asociado.

El cuadrado del valor absoluto de la función de estado, $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$, da la probabilidad de encontrar a la partícula en el punto \vec{r} .



[Normalización de la función de estado]

La interpretación probabilista de la función de estado se debe a **Max Born**.

Esta forma de ver la función de estado requiere que **la integral de dicha sea exactamente 1 sobre todo el rango de \vec{r} .**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1 \quad (14)$$

Al procedimiento en 14 se le llama *normalización*.



Figura: Retrato de Max Born.



[La función de estado y el principio de incertidumbre]

La función de onda en 1D puede reescribirse a la forma

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (15)$$

Usando la *fórmula de Euler*². Al evaluar la densidad de probabilidad de esta partícula tenemos:

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= \Psi \cdot \Psi^* \\ &= \left(Ae^{i(kx - \omega t)} \right) \cdot \left(A^* e^{-i(kx - \omega t)} \right) \\ &= |A|^2 e^{i(kx - \omega t) - i(kx - \omega t)} \\ &= |A|^2 \end{aligned}$$

Aquí usamos el operador $*$ como el *conjugado* de un número complejo: $(a + bi)^* = a - bi$.



² $e^{i\pm\theta} = \cos(\theta) \pm i\sin(\theta)$

[La función de estado y el principio de incertidumbre]

Dado que $|\Psi|^2 = |A|^2$, concluimos que es imposible determinar la posición exacta de la partícula; ya que la probabilidad de encontrarla en algún punto x_0 es exactamente la misma para cualquier otro punto x . ¡La partícula podría estar en cualquier sitio!

Esto se anticipaba, pues esta función de estado satisface la condición de la ecuación 8, en la que el momento lineal está bien definido, i.e., $\Delta p_x = 0$.

El principio de incertidumbre de Heisenberg implica que si $\Delta p_x = 0$ entonces $\Delta x \rightarrow \infty$.



Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados

Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Operadores y Valores Esperados



[Observables y Operadores]

Un **observable** es cualquier propiedad que pueda medirse de una **partícula**. Posición, energía y cantidad de movimiento son ejemplos de observables. A cada observable le corresponde una representación matemática llamada operador.

Un **operador** es una función que toma un objeto y lo convierte en otro. La derivada d/dt es un operador, así como la integral \int .

Observable	Símbolo	Operador
Posición	x	x
Momento	p	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
Energía Potencial	U	$U(x)$
Energía Cinética	K	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
Hamiltoniano	H	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$
Energía total	E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Cuadro: Observables comunes y sus operadores



Un **valor esperado** es una media ponderada y **nos dicta un valor medio para el espectro de valores posibles de un operador.**

Sea x el operador de posición. Entonces el valor esperado de x está dado por:

$$\langle x \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx \quad (16)$$

Para una función del operador x , $f(x)$, el valor esperado es:

$$\langle f \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* f(x) \psi dx \quad (17)$$



[Valor esperado del momento]

Para el momento lineal, $-i\hbar\partial/\partial x$, el valor esperado está dado por:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \quad (18)$$

Para la energía cinética, tenemos que $K = p^2/(2m)$, por lo tanto, su valor esperado viene dado por:

$$\langle K \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx \quad (19)$$

Para la energía total, tenemos que $\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle U \rangle$:

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi dx$$



La **incertidumbre** es una medida de **qué tan vaga es nuestra observación de una cantidad física**. Para un observable Q , su incertidumbre está dada por:

$$\Delta Q = \sqrt{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2} \quad (21)$$

Este valor coincide con el concepto de **desviación estándar**.

Cuando $\Delta Q = 0$ decimos que la observable es nítida.



Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados

Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Aplicaciones



Cuando un átomo es excitado, sus electrones alcanzan mayores niveles energéticos. Para volver a la estabilidad, el átomo debe eyectar esa energía de vuelta a su entorno en forma de fotones, así los electrones retornan a su estado fundamental.

Estos fotones se caracterizan por una cierta longitud de onda, la cual provee de un color a la luz emitida. Dependiendo del nivel energético desde donde el electrón emite al fotón, la longitud de onda va a ser diferente.

La longitud de onda entonces asocia a los niveles energéticos permitidos en los estados excitados del átomo. Estos, a su vez, son característicos para cada átomo. El resultado es un **espectro de emisión**.



[Los espectros atómicos II]

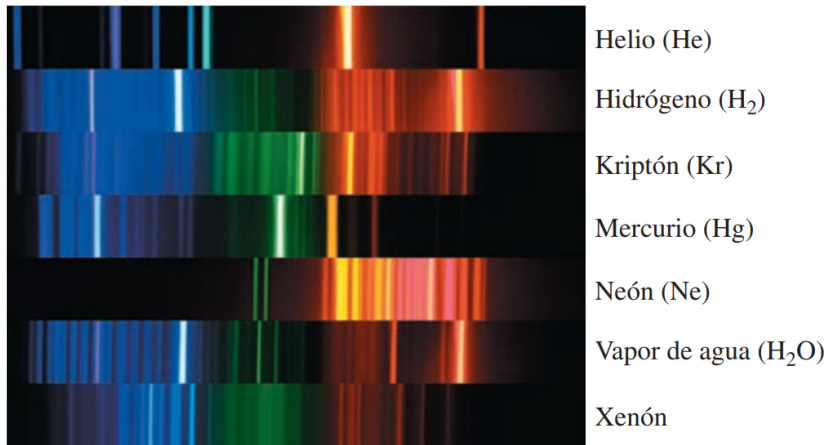


Figura: Espectros de emisión para diferentes sustancias atómicas y moleculares



A veces nos interesa saber qué energías son absorbidas por una sustancia. Cuando una sustancia está fría e interactúa con la luz, ciertas longitudes de onda serán absorbidas por la sustancia. En un espectógrafo, la fuente luminosa mostrará un espectro con espacios vacíos.

Las longitudes de onda absorbidas por el material coinciden con las de los fotones que emite de vuelta al entorno cuando alcanza su estado fundamental después de la excitación.

La longitud de onda **absorbida** es, entonces, característica para cada átomo. El resultado es un **espectro de absorción**.



[Los espectros atómicos IV]

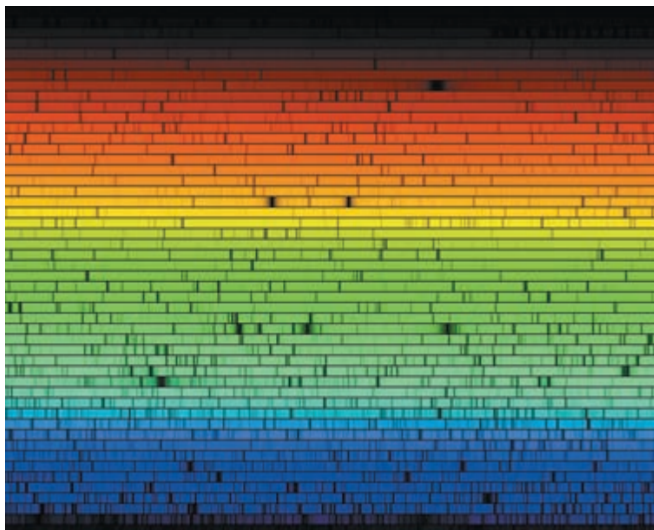


Figura: Espectros de absorción del Sol. Las líneas negras corresponden a la absorción de luz por los gases que le rodean.



Es una fuente de luz coherente y monocromática por resultado de la emisión de muchos átomos en un gas. Láser es un acrónimo para *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*. Los átomos emiten fotones de forma espontánea cuando pasan de un estado excitado a su estado fundamental.

La **emisión estimulada** consiste en hacer incidir un fotón en un átomo ya excitado, de manera que el átomo experimente resonancia. Como resultado, **el átomo emite dos fotones en fase y con la misma polarización**. De ahí, que la luz emitida ha sido amplificada.

Para un flujo continuo de luz, se precisa que el número de átomos excitados supere a los no excitados. El proceso se conoce como **inversión de población**. En este escenario, la tasa de emisión del gas excede a la de absorción.



Principio de Complementariedad

Función de estado y la ecuación de Schrödinger

Probabilidad y Normalización

Operadores y valores esperados





Aplicaciones

Fuentes Bibliografía



Fuentes Bibliográficas



-  R. A. Serway, C. J. Moses, C. A. Moyer, and M. Villavicencio, *Física Moderna*. México: Cengage Learning, 3era ed., 2006.
-  R. A. Serway and J. W. Jewett Jr., *Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics*. Boston, MA: Cengage Learning, 9na ed., 2014.
-  H. D. Young and R. A. Freedman, *Física Universitaria con Física Moderna*. México: Pearson Educación, 14va ed., 2018.
-  K. S. Krane, *Modern Physics*. EEUU: John Wiley & Sons, Inc., 3era ed., 2012.

