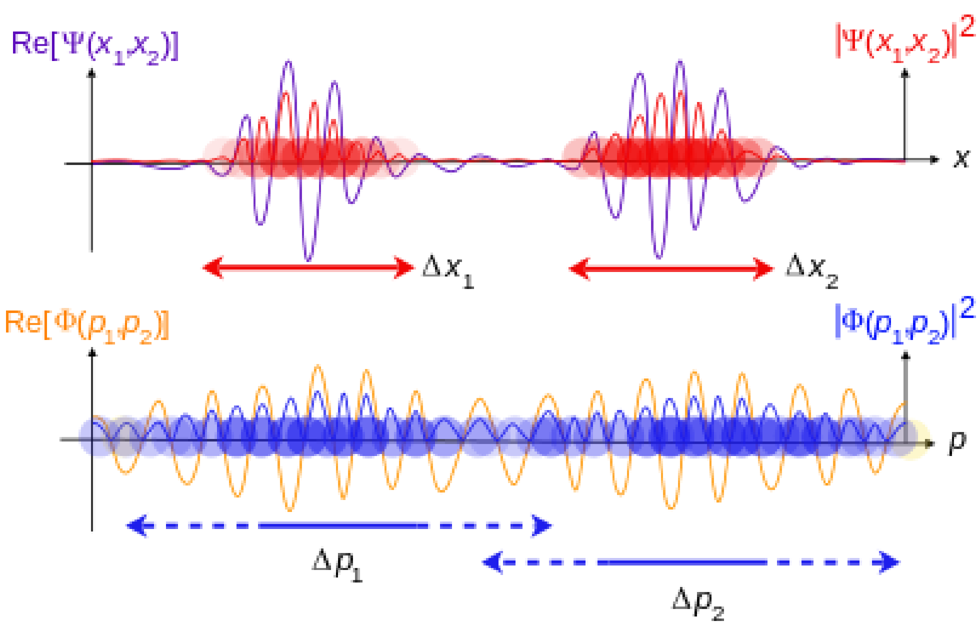
Universidad Nacional de Río Negro
Física Moderna A - 2017

- **Unidad** 03 – Principios de la MC
- **Clase** U03C03
- **Fecha** 27 Abril 2017
- **Cont** Ecuación de Schrödinger
- **Cátedra** Asorey
- **Web**

https://github.com/asoreyh/unrn-moderna-a

"*Los átomos se comportan como átomos, nada más*".
John Gribbin

Unidad 3: Los postulados de la mec. Cuántica
Jueves 06 de abril al Jueves 27 de abril



- **Los postulados de la mecánica cuántica y la función de onda. Reglas de cuantización. La ecuación de Schrödinger. Operadores. Valores de expectación. Interpretación de la mecánica cuántica.** Heisenberg y el principio de incertidumbre. Partícula en una caja.
- *Apéndice matemático: ecuaciones diferenciales simples.*

- **Una onda** es una **perturbación que se propaga en el espaciotiempo**

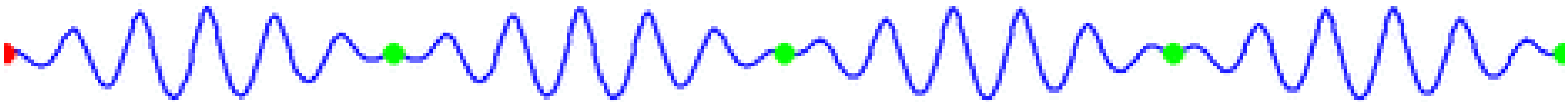
Interferencia

- Dos o más ondas coinciden en la misma región del espacio al mismo tiempo
- La función de onda resultante es la suma de las ondas que interfieren:

$$\boxed{\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 + \cdots + \Psi_n \equiv \sum_{i=1}^{n} \Psi_i}$$

- Ejemplos:
  - Interferencia constructiva, interferencia destructiva,
  - batidos, ondas estacionarias

Velocidad de grupo y velocidad de fase

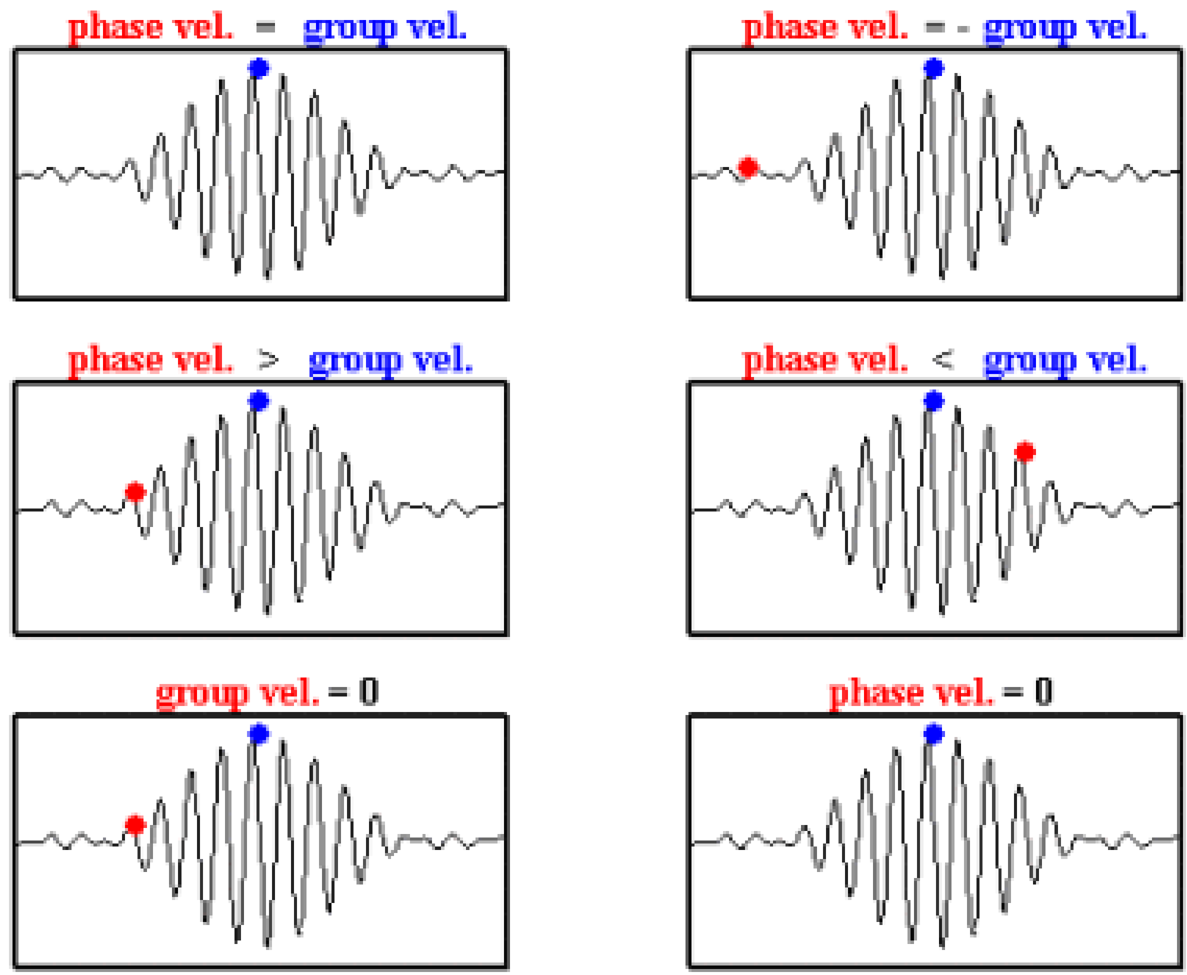


- velocidad de fase

$$\boxed{v_p = \frac{\omega}{k}}$$

- velocidad de grupo

$$\boxed{v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}}$$



La función de onda en cuántica: propiedades

- 1) La función de onda es una función compleja

$$\Psi(\mathbf{r},t):\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{C},\ \Psi(\mathbf{r},t)=a(\mathbf{r},t)+i\,b(\mathbf{r},t)$$
$$a=\Re(\Psi)\ \text{ y }\ b=\Im(\Psi)$$

- Por definición, el conjugado de una función compleja es:

$$\Psi^{*}(\mathbf{r},t):\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{C},\ \Psi(\mathbf{r},t)=a(\mathbf{r},t)-i\,b(\mathbf{r},t)$$

- Y entonces:

$$\Psi\,\Psi^{*}=(a+i\,b)(a-i\,b)=a^{2}+b^{2}=\Psi^{*}\,\Psi\equiv|\Psi^{2}|$$
$$|\Psi^{2}|:\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{R}\text{, es real}$$

La función de onda en cuántica: propiedades

- 1) La función de onda **es una función compleja**
- 2) La función de onda y su primera deriva **son continuas**
- 3) La función de onda **es de cuadrado integrable** (L^2)...

$$\Psi \in L^2 \Longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(\Psi^2\right)\right| dV = c, \quad c \in \mathbb{R}, \text{ y } \; 0 < \left|\left(c\right)\right| < \infty$$

... y por lo tanto **es normalizable**. Entonces debe cumplir:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(\Psi^2\right)\right| dV = 1}$$

donde dV es la integral en volumen. En cartesianas

$$dV = dx\, dy\, dz$$

Postulados de la mecánica cuántica

I. El estado de un sistema está completamente especificado por una función de onda $\Psi(x,y,z,t)$

II. La probabilidad de encontrar a una partícula en un volumen V centrado en la posición (*x,y,z*) a tiempo *t* es

$$\int_V \left|\left(\Psi(x,y,z,t)^2\right)\right| dV \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(\Psi(x,y,z,t)^2\right)\right| dV = 1$$

III. A cada observable clásico (energía *E*, energía cinética *K*, energía potencial *V*, cant. movimiento *p*, cant. mov. Angular *L*,...) le corresponde un operador cuántico:

$$E \rightarrow \hat{H};\ K \rightarrow \hat{K};\ V \rightarrow \hat{V};\ p \rightarrow \hat{p};\ L \rightarrow \hat{L}$$

Postulados de la mecánica cuántica

IV. Para obtener información del sistema, se aplica el operador sobre la función de onda y verifica

$$\hat{A}\Psi_a(x,y,z,t)=a\Psi_a(x,y,z,t)$$ ecuación de autovalores

donde Ψ_a es uno de los posibles estados del sistema, el asociado al autovalor a.

Corolario: cuando se "mide" al estado asociado al autovalor a, la funcion de onda "colapsa" al correspondiente autovector Ψ_a

El gato de Schrödinger y el rol del observador

Ejemplo: partícula en una caja, estados

- Problema conservativo clásico, E = K+V, los operadores:

$$E=K+V \;\rightarrow\; \hat{H}=\hat{K}+\hat{V} \;\Rightarrow\; \hat{H}\Psi=E\Psi$$

H es el operador **Hamiltoniano**.

- Vimos que para una partícula en una caja

$$E_n=K_n+V_n=\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)n^2,\; n=1,2,3,\ldots(\text{y } V_n=0)$$

- Entonces, al "medir" la energía del sistema $\hat{H}\Psi_n=E_n\Psi_n$ si mido, por ejemplo, E_2, el estado del sistema colapsa a Ψ_2.

- Partícula libre: sobre ella no actúa ninguna fuerza
- Proponemos una onda viajera:

$$\Psi(x,t)=A\cos(kx-\omega t)$$

Onda viajera como partícula libre.

$$\Psi(x,t)= \cos(kx-\omega t)$$

Según De Broglie, $\lambda = h/p \Rightarrow$.

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{2\pi}{h}p=\frac{p}{\hbar}\Rightarrow k=\frac{p}{\hbar}$$

y

$$\omega=\frac{\hbar}{\hbar}\omega \Rightarrow \omega=\frac{E}{\hbar}$$

Luego:

$$\Psi(x,t)= \cos\left(\frac{p}{\hbar}x-\frac{E}{\hbar}t\right)$$

$$\Psi(x,t)= \cos\left[\frac{1}{\hbar}(px-Et)\right]$$

Recordando Euler:

$$e^{ix}=\cos x + i \operatorname{sen} x$$

$$e^{-ix}=\cos x - i \operatorname{sen} x$$

Partícula libre

Se puede probar que (hacerlo).

$$\Psi(x,t) = \cos(px - Et)\frac{1}{\hbar} \rightarrow \Psi = e^{i/\hbar\,(px-Et)}$$

$$\Rightarrow \Psi(x,t) = e^{i/\hbar\,(px- \;\; t)}$$

Derivando en x y t:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\, p\, \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}}_{\Psi} \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\, p\, \Psi$$

y

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\, E\, e^{i/\hbar\,(px-Et)} \Rightarrow \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\, E\, \Psi$$

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

$$\Rightarrow \underbrace{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\text{Operador postulado 3}}\Psi = p\,\Psi \quad \Rightarrow \boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$$

Operador Momento

igual para el tiempo:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \Rightarrow \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)}_{\text{operador.}} \Psi = E \Psi$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$ Operador Hamiltoniano (* ojo).

Para una partícula libre $\hat{V} = 0$ y $T = \frac{p^2}{2m}$

$$\Rightarrow \hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow \hat{H} = \frac{(-i\hbar\, \partial/\partial x)^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$ y además $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

⇒ Aplicando sobre una f. de onda Ecuación de Schrödinger

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

Ecuación de Schrödinger

- La ecuación de Schrödinger es válida en general:

$$\boxed{\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)}_{\text{operador}}\Psi(x,t)=\underbrace{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)}_{\text{operador}}\Psi(x,t)}$$

- Los operadores actúan sobre las funciones que están a la derecha. Implican tomar, p.ej., la derivada segunda de la función de onda respecto a la posición dos veces.