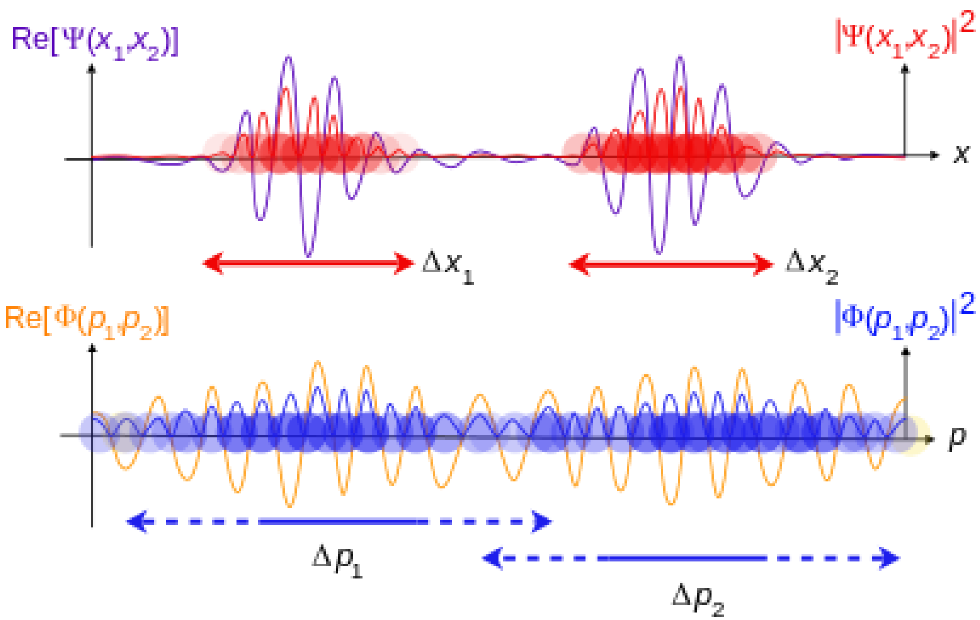
Universidad Nacional de Río Negro
Física Moderna A - 2017

- **Unidad** 03 – Principios de la MC
- **Clase** U03C04
- **Fecha** 02 Mayo 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.***

El gato de Schrödinger y el rol del observador

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.

P. ej. Onda viajera ≡ partícula libre.

$$\psi = e^{i/\hbar\,(px - Et)}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{i}{\hbar}p\,\psi\right) = \frac{i}{\hbar}p\left(\frac{i}{\hbar}p\,\psi\right) = \frac{i^2}{\hbar^2}p^2\psi = \underline{\frac{-p^2}{\hbar^2}\psi}$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \underline{\frac{-i}{\hbar}E\,\psi}$$

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

$$\frac{\cancel{-}\cancel{\hbar^2}}{2m}\left(\frac{\cancel{-}p^2}{\cancel{\hbar^2}}\right)\psi = \cancel{i}\cancel{\hbar}\left(\frac{\cancel{-i}}{\cancel{\hbar}}\right)E\,\psi$$

$$\frac{p^2}{2m}\psi = E\,\psi \quad\Rightarrow\quad E = p^2/2m.$$

Operadores: reglas de cuantización

- Operador momento: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

- Operador energía total: (*Hamiltoniano*) $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ y $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$

- Operador energía cinética: $K = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

- Operador energía potencial: $\hat{U}$

- Ecuación de Shródinger:

$$\boxed{\begin{gathered} \hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}\right)\Psi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi \end{gathered}}$$

Si U no depende del tiempo....

- Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\boxed{\hat{H}\,\Psi = E\,\Psi \quad \rightarrow \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}\right)\Psi = E\,\Psi}$$

- Las soluciones verifican una ecuación de autoestados

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}\right)\Psi_n = E_n\,\Psi_n$$

- A cada (auto)valor E_n le corresponde un (auto)estado Ψ_n.

Imagine el siguiente operador:

$$\hat{G} = \frac{d^2}{dx^2}$$

y sea $\psi = e^{2x}$ un autofunción. Encontrar el autovalor correspondiente. $\Rightarrow$

$$\hat{G}\,\psi_n = g_n\,\psi_n$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} e^{2x} = \frac{d}{dx}\left(2e^{2x}\right) = 2\left(2e^{2x}\right) = 4e^{2x}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} e^{2x} = 4e^{2x}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = 4\psi \Rightarrow \hat{G}$$

$$\Rightarrow g = 4.$$

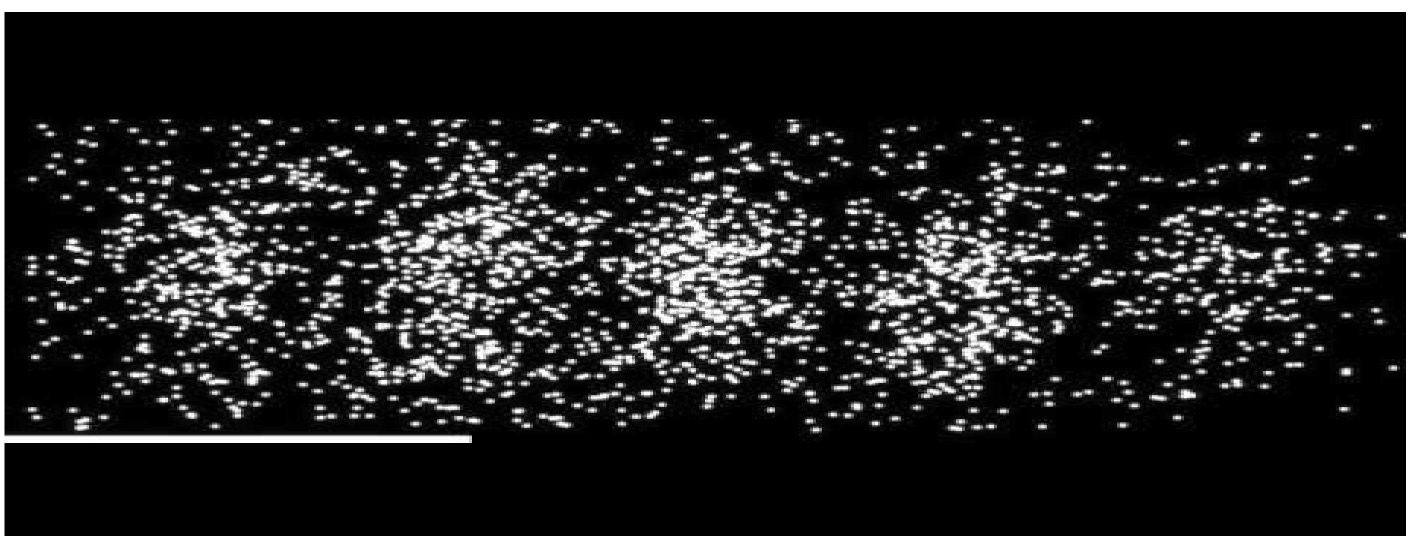
El principio de superposición

- La ecuación de Schrödinger ES una ecuación de onda
- **Verifica el principio de superposición:**

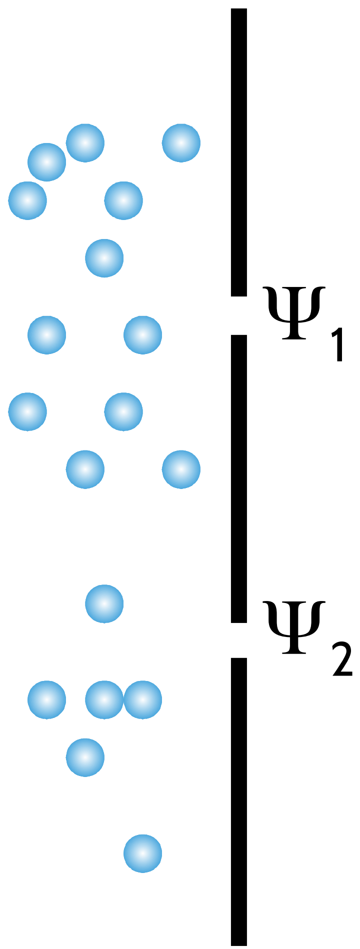
Sí Ψ_1 y Ψ_2 son funciones de onda,

$\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$ también lo es.

- Y por lo tanto ¡**existe la interferencia cuántica**!



Suma de probabilidades



- Si la rendija 2 está cerrada: $P_1 = \left|\left(\Psi_1^2\right)\right| = \Psi_1^* \Psi_1$
- Y ¿si fuera la 1? $P_2 = \left|\left(\Psi_2^2\right)\right| = \Psi_2^* \Psi_2$
- Y ¿si estuvieran ambas abiertas?

$$P_{1,2} = P_1 + P_2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1$$

$$P_{12} = |\Psi^2| = \Psi^* \Psi = (\Psi_1 + \Psi_2)^* (\Psi_1 + \Psi_2)$$

$$= (\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2)$$

$$= \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2$$

$$= |\Psi_1^2| + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1 + |\Psi_2|^2$$

$$\Rightarrow P_{12} = P_1 + P_2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1$$

Partícula libre de masa m, solución completa

- Empezamos con la ecuación de Schrödinger

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{U}\right)\Psi=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi}$$

- comprendemos la física del problema: **Partícula libre**
  - **El potencial no depende del tiempo**
  - → podemos usar la ec. de Schrödinger indep. del tiempo:

$$\boxed{\hat{H}\Psi=E\Psi\ ,\ \mathrm{y}\qquad \Psi(x,t)=\psi(x)\varphi(t),\quad \varphi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

  - Y de hecho, ***U(x) = 0***, entonces

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi=E\Psi}$$

Partícula libre de masa m, solución completa

Método 1. Reales.

Ec. de schrödinger independiente del tiempo $\Rightarrow U(x)=0 \Rightarrow$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = E\psi$$

Reordenamos:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right)\psi$$

Ec. Diferencial Ordinaria (EDO) de 2º orden. Estructura

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -d\psi$$

donde d es una constante y es negativa.

Propuesta ψ es una ~~[illegible]~~ trigonométrica:

$$\frac{\partial}{\partial x}\sin cx = c\cos cx \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\underbrace{\sin(cx)}_{f(x)} = -c^2\underbrace{\sin(cx)}_{f(x)}$$

ó $$\frac{\partial}{\partial x}\cos cx = c(-\sin cx) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\underbrace{\cos(cx)}_{f(x)} = -c^2\underbrace{\cos(cx)}_{f(x)}$$

Ambos son solución $\Rightarrow$ ¿Cuál usamos? $\rightarrow$ AMBAS.

Partícula libre de masa m, solución completa

Probaremos.

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i/\hbar\, Et}$$

y $\psi(x) = A \sin(ax) + B\cos(bx)$

i) si $A=0 \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -a^2\psi$

si $B=0 \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -b^2\psi$

y como por Schrödinger

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$\Rightarrow a^2 = b^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow a = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

y recordando $E = p^2/2m$ y $p = \hbar k \Rightarrow$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow a = \sqrt{\frac{\cancel{2mE}}{\cancel{\hbar^2}} \cdot \frac{\cancel{\hbar^2} k^2}{\cancel{2m}}} = \sqrt{k^2} = k = \boxed{\frac{p}{\hbar} = a}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x) = A\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right) + B\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)}$$

Partícula libre de masa m, solución completa

Método 2 - Complejos.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = \left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\Psi \quad y \Rightarrow \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -d\,\Psi$$

Propuesta: Ψ es una fción compleja exponencial. $\Rightarrow$.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} e^{icx}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(ic\,e^{icx}\right) = i^2c^2 e^{icx} = -c^2 e^{icx}$$

Luego: $c^2 = d \Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = c^2 \Rightarrow c = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow c = p/\hbar$

$\Rightarrow$ Solución espacial:

$$\Psi(x) = A\, e^{i/\hbar\, px}$$

y dado que $\varphi(t) = e^{-i/\hbar\, Et}$

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

$\rightarrow +x$ $\quad \leftarrow -x$

$$\Rightarrow \boxed{\Psi(x,t) = A\, e^{i/\hbar\,(px - Et)}} \rightarrow \Psi(x,t) = A e^{i/\hbar\,(px-Et)} + B e^{-i/\hbar\,(px+Et)}$$

Ambas soluciones son equivalentes por Id. de Euler

Partícula libre

- Solución para partícula libre → onda plana

$$\Psi(x,t)=A\,e^{(i/\hbar)(px-Et)}=\underbrace{A\,e^{(i/\hbar)px}}_{\psi(x)}\,\underbrace{e^{-(i/\hbar)Et}}_{\varphi(t)}$$

- Su cantidad de movimiento y energía...

$$\hat{p}\,\Psi(x,t)=p\,\Psi \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi=(-i\hbar)\left(\frac{i}{\hbar}\right)p\,\Psi=\mathbf{p}\,\Psi$$

$$\hat{H}\,\Psi(x,t)=E\,\Psi \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=(i\hbar)\left(-\frac{i}{\hbar}\right)E\,\Psi=\mathbf{E}\,\Psi$$

- ... están perfectamente definidas, pero desconozco completamente su posición a cualquier tiempo (x,t)

Partícula libre, superposición

- Por el principio de superposición, si Ψ_i es solución,

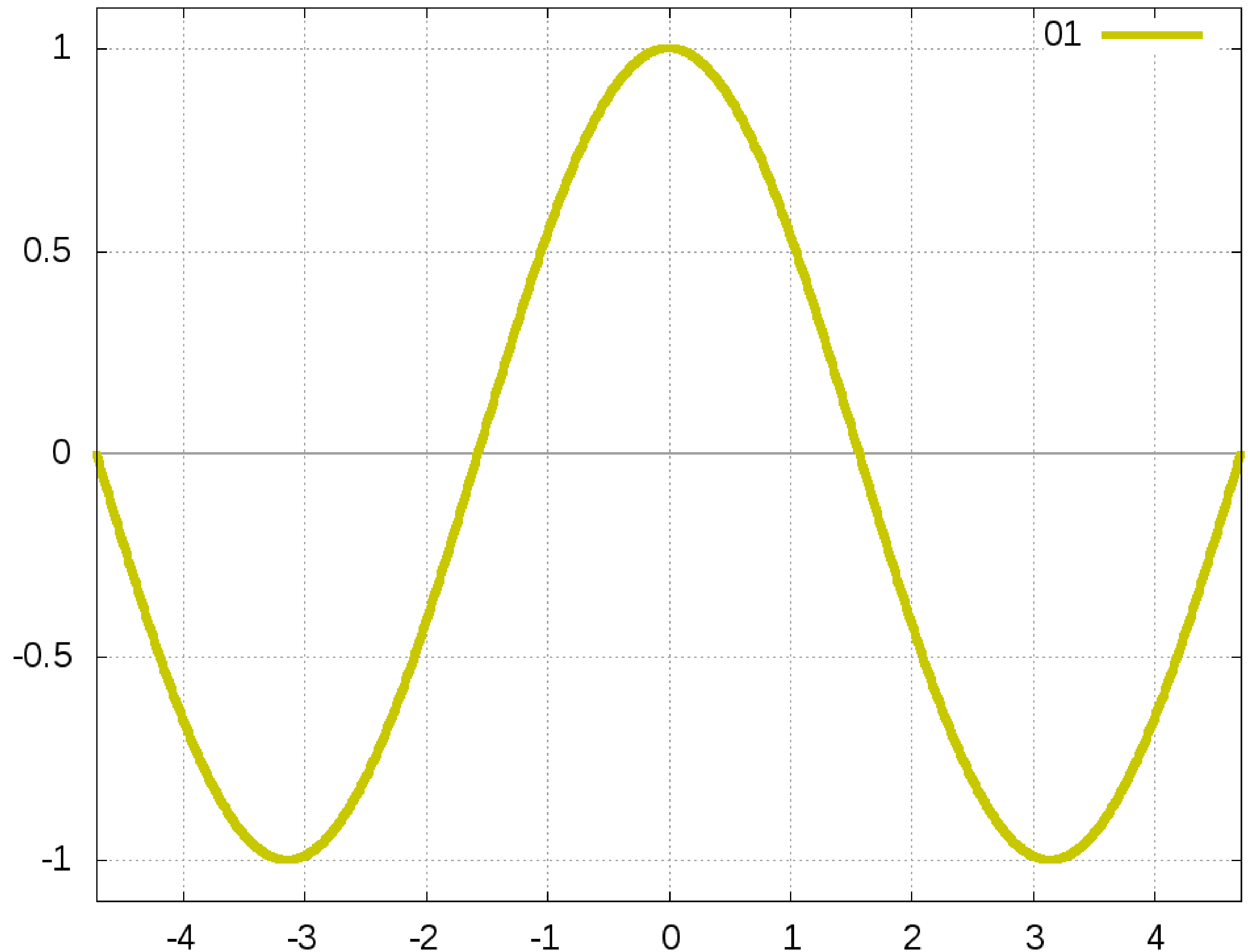
$$\Psi(x,t)=\sum_{j=1}^{n} a_j \Psi_j \quad \text{también lo es.}$$

- Para una partícula libre, tenemos la combinación de varias (hasta infinitas) ondas planas

$$\Psi(x,t)=\sum_{j=1}^{n} a_j e^{\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(p_j x - E_j t\right)} \quad \rightarrow \quad p=\sum_{j=1}^{n} a_j p_j$$

- Los a_j no pueden ser cualquier cosa → ¡**normalización**!

Paquete de ondas



Al aumentar el número de ondas, se localiza