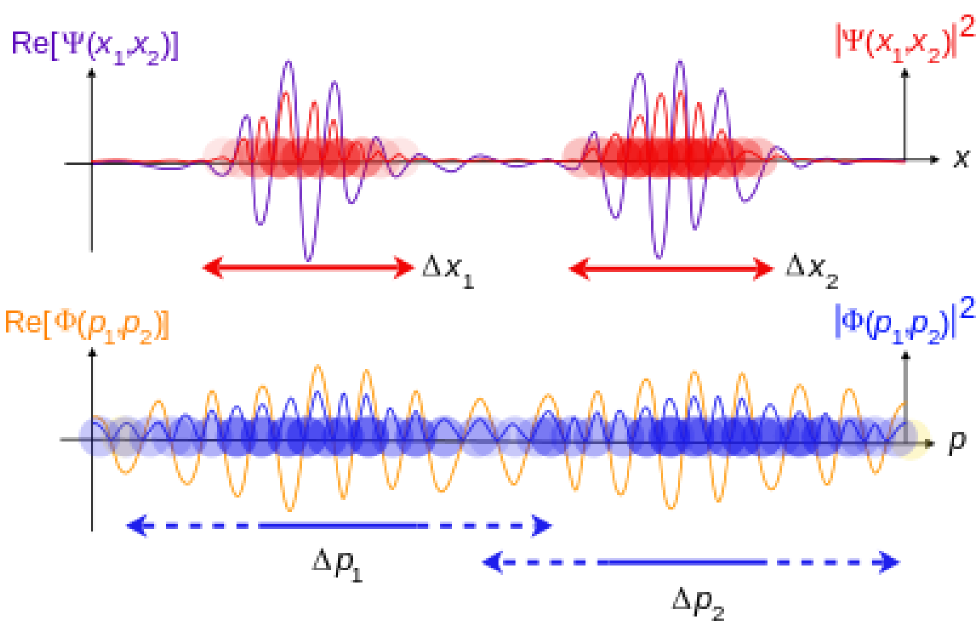
- **Unidad** 03 – Principios de la MC
- **Clase** U03C05
- **Fecha** 04 Mayo 2017
- **Cont** Incertidumbre y Copenhague
- **Cátedra** Asorey
- **Web**

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.***

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 Shrödinger:

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

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.

Partícula libre

- Solución para partícula libre → onda plana

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

- Su cantidad de movimiento y energía...

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

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

- ... 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,

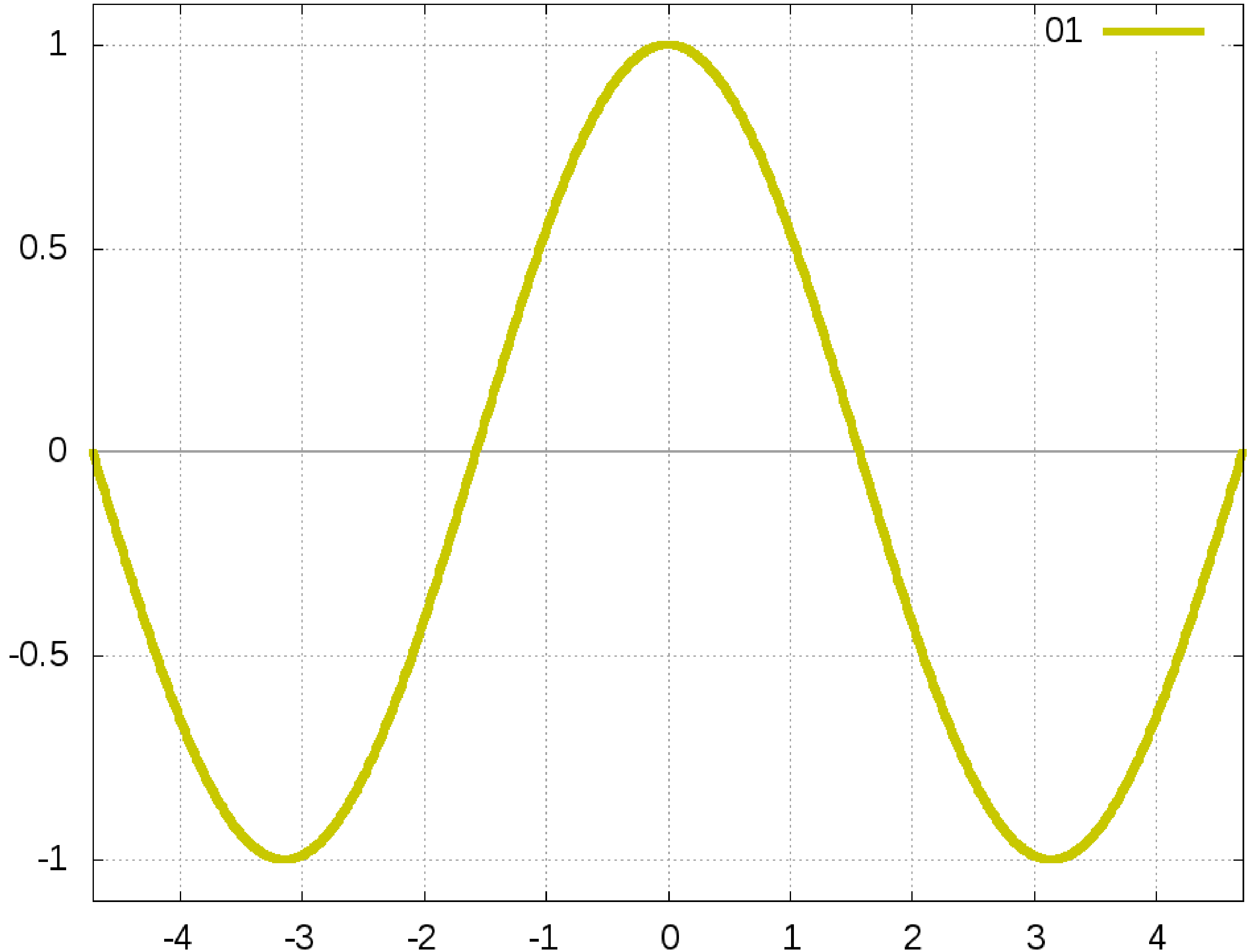
$$\Psi(x,t)=\sum_{j=1}^{n} a_j \Psi_j \quad \text{también lo es.}$$

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

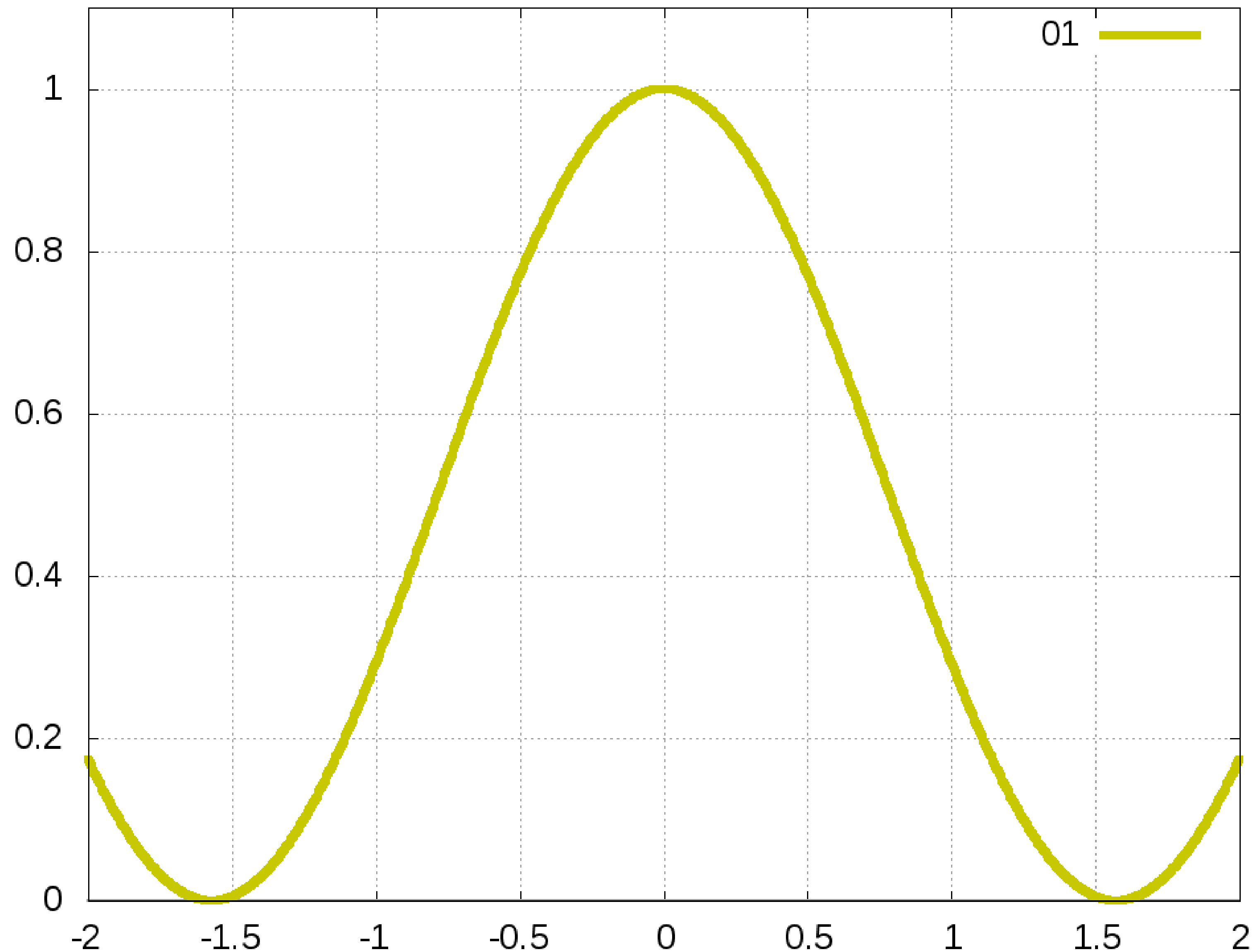
$$\Psi(x,t)=\sum_{j=1}^{n} a_j e^{\left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(p_j x - E_j t\right)} \quad \rightarrow \quad p=\sum_{j=1}^{n} a_j p_j \Psi_j \rightarrow ??$$

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

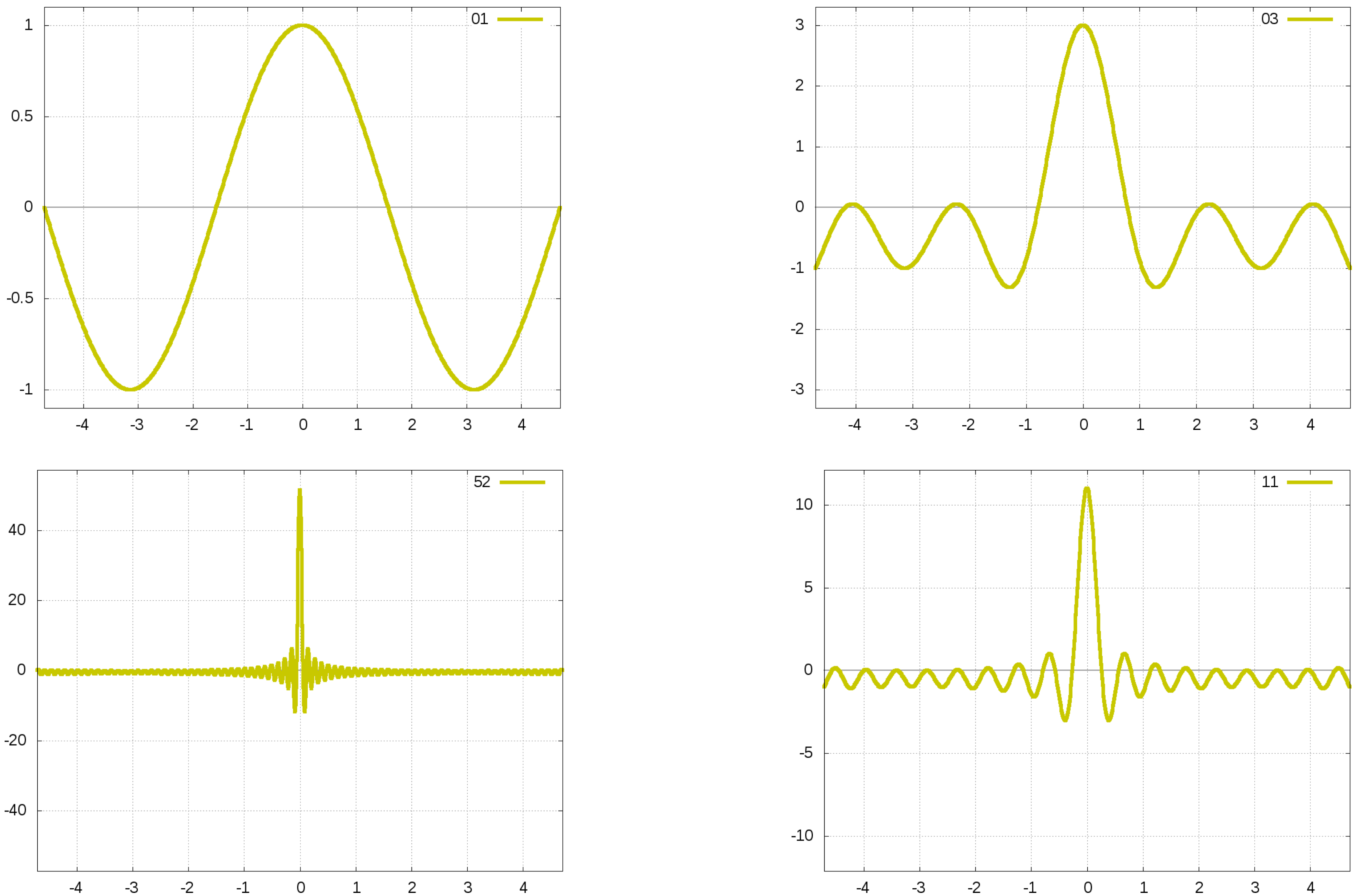
Paquete de ondas



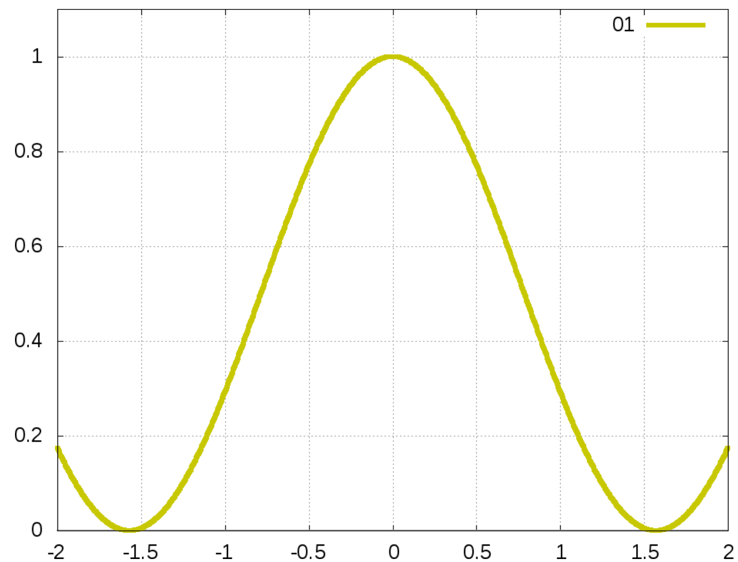
Probabilidad, módulo cuadrado (sin normalizar)

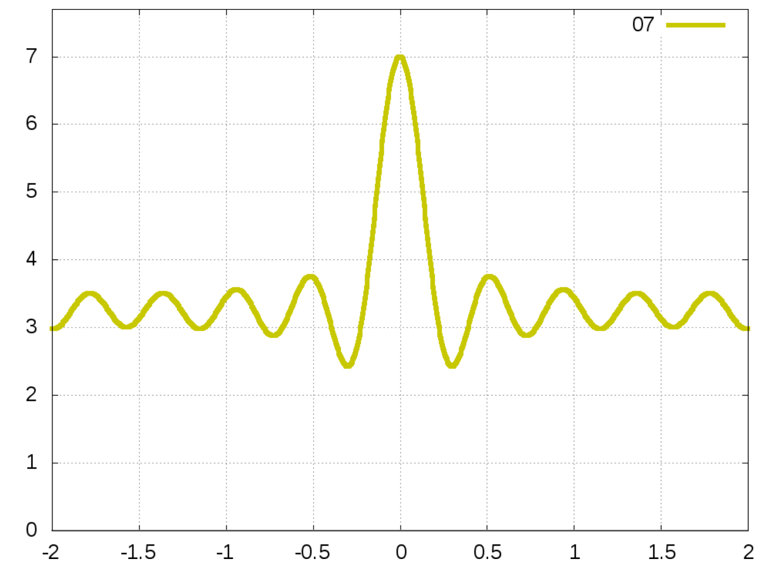


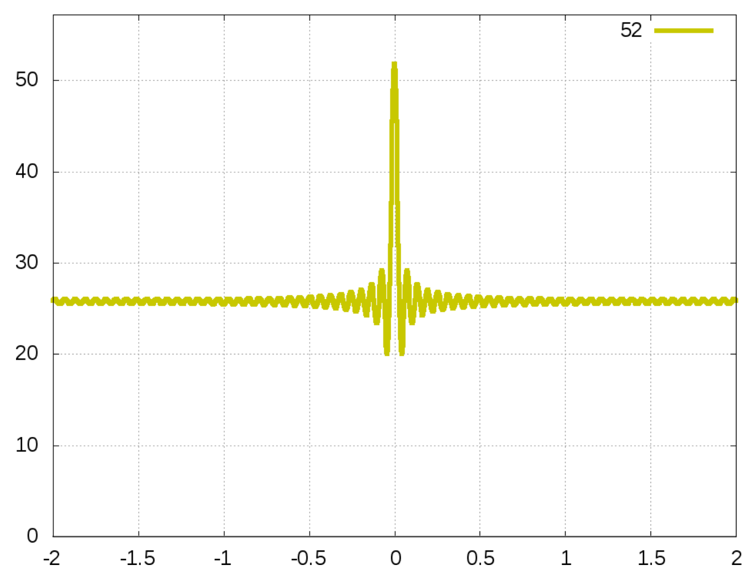
Al aumentar el número de ondas, se localiza

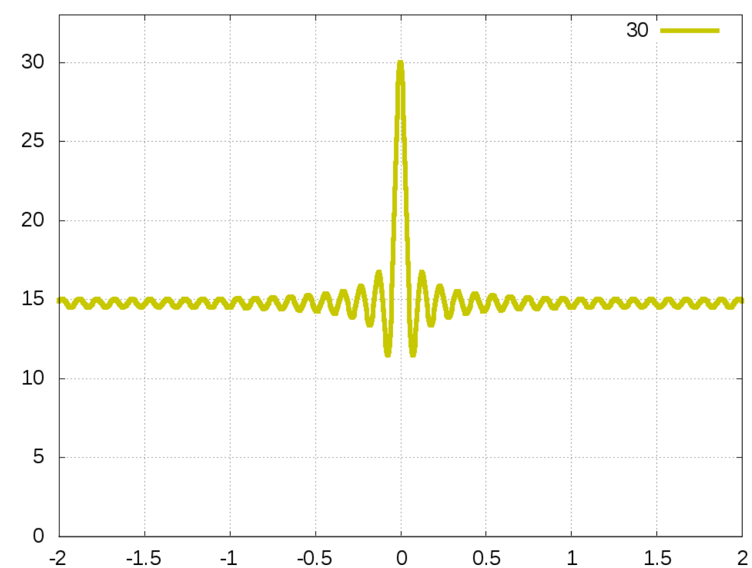


Probabilidad, módulo cuadrado (sin normalizar)

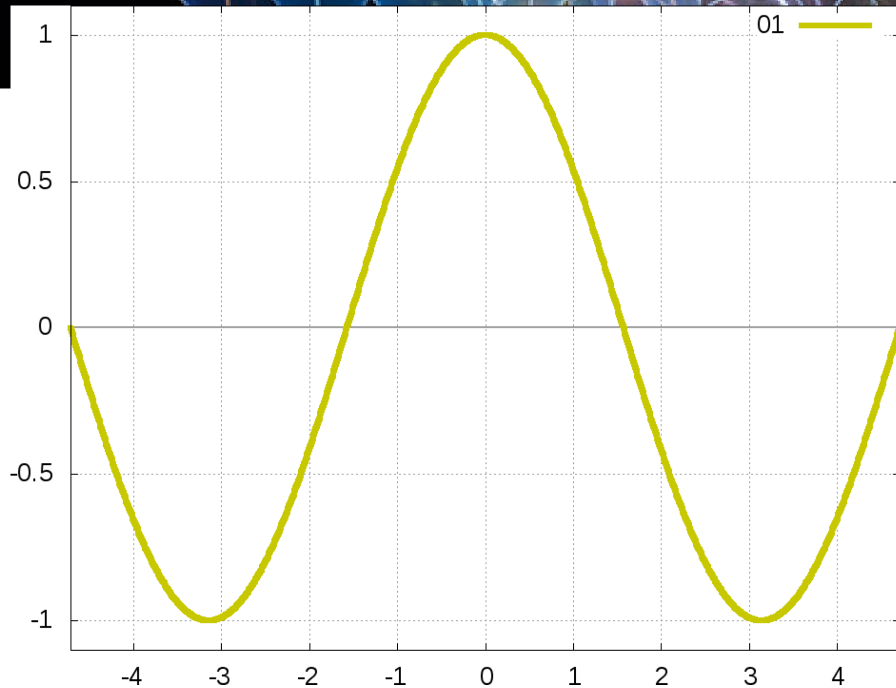




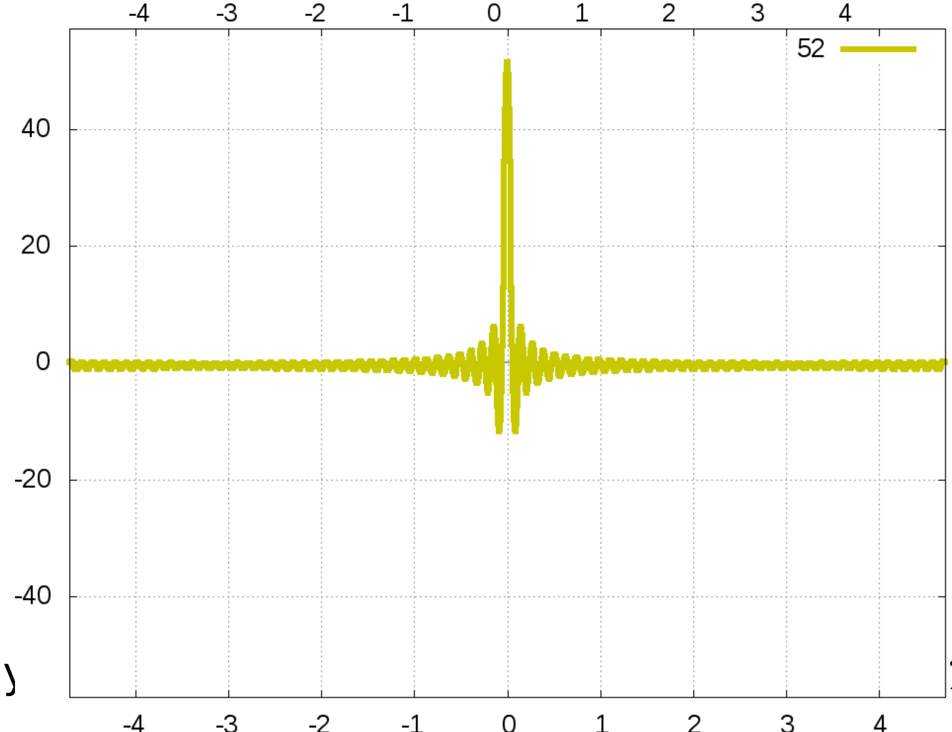




Al aumentar el número de ondas, se localiza



- 1 onda, conozco p, desconozco x



- 52 ondas, mejora mi conocimiento de x, empeora p

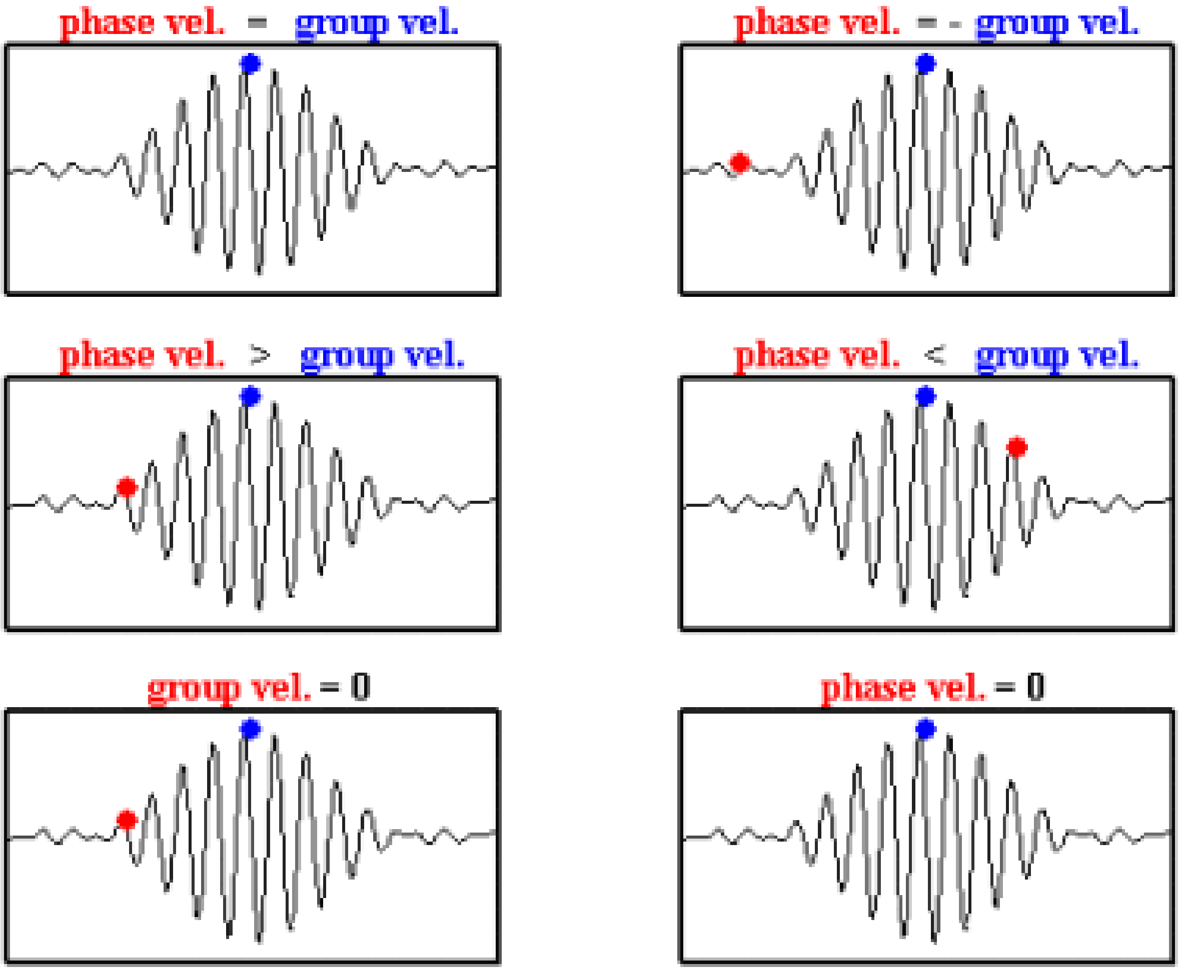
Velocidad de grupo y velocidad de fase

- velocidad de fase

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

- velocidad de grupo

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



No podemos conocerlo todo....

- El **principio de incertidumbre** (Heisenberg, 1927) establece un **límite fundamental a la precisión** con las que se puede **medir ciertos pares de propiedades físicas** de un sistema (***variables complementarias***)
- **La medición de una magnitud perturba al sistema** de tal manera que **resulta imposible medir todas ellas en forma simultánea y con resolución infinita**. Puede verse:

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta E \, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

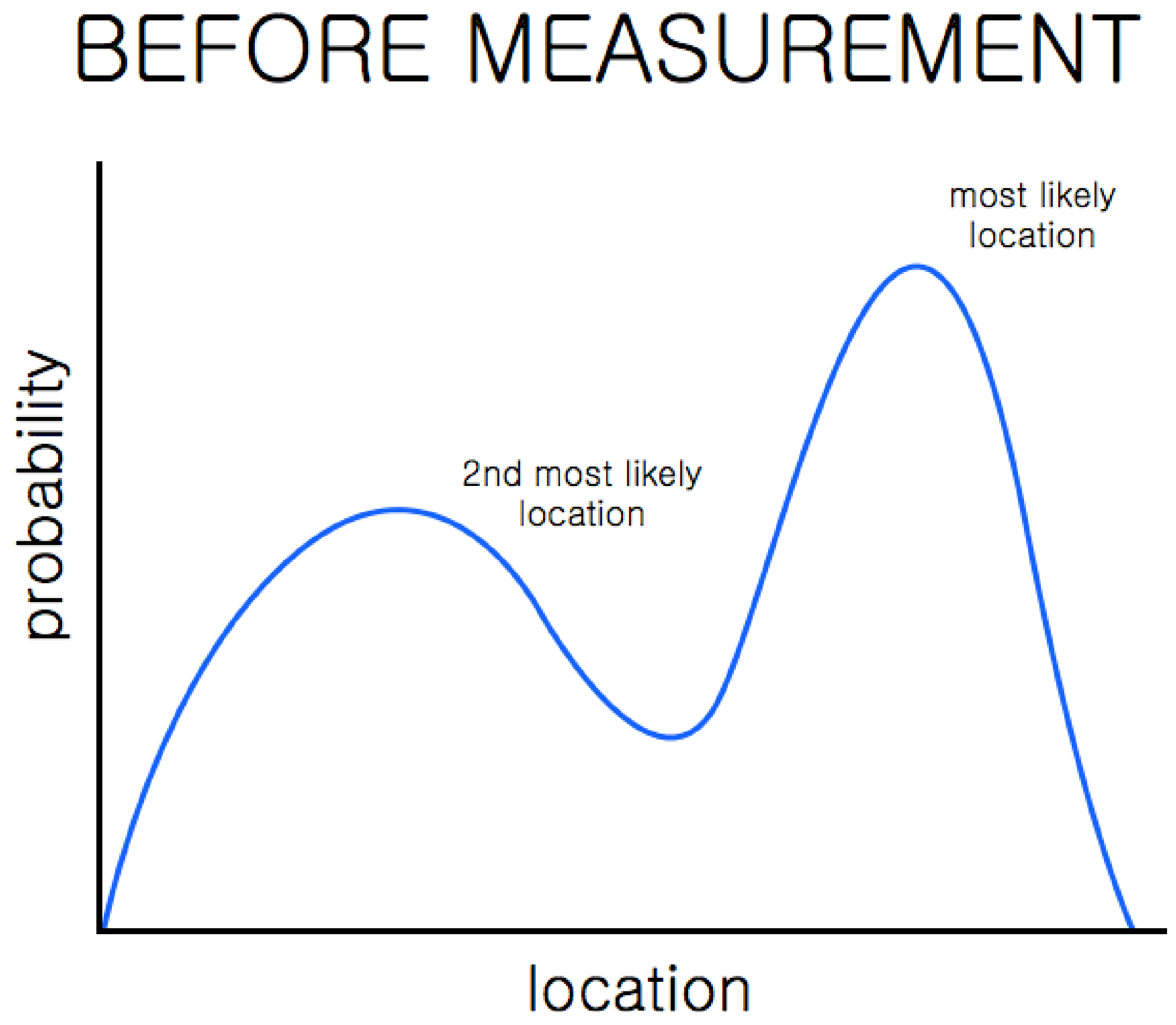
Interpretación de Copenhague (Bohr-Heisenberg)

- **El rol del observador**
  los sistemas físicos no poseen propiedades definidas antes de haber sido medidas.

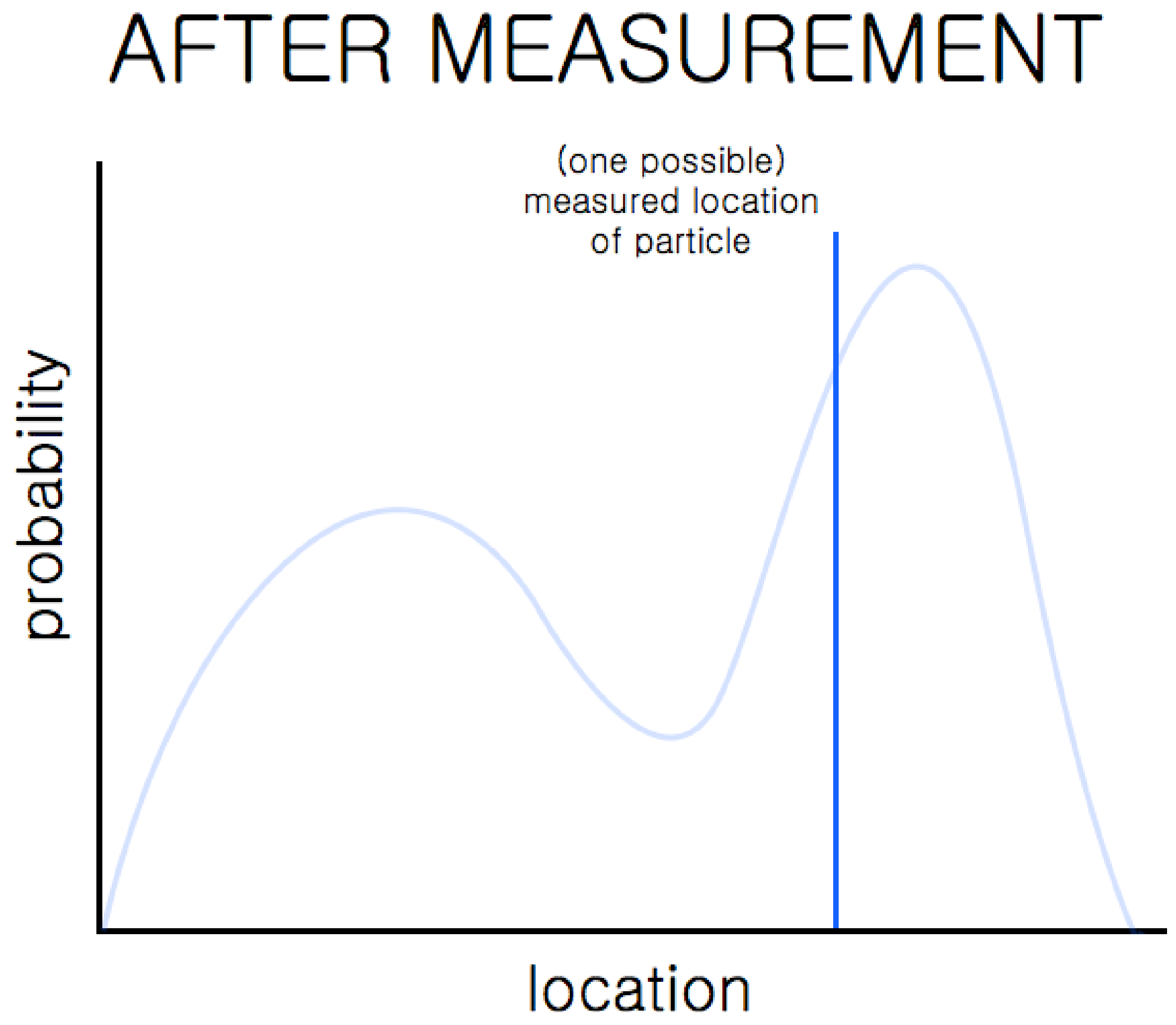
- **Las probabilidades son inherentes a la cuántica**
  la mecánica cuántica sólo puede adelantar las probabilidades de que las mediciones produzcan tales o cuales resultados

- **Colpaso de la función de onda**
  el acto de medir perturba al sistema de forma tal que el conjunto de probabilidades se reduce a un sólo resultado posible: el medido.

Interpretación de Copenhague (Bohr-Heisenberg)



Interpretación de Copenhague (Bohr-Heisenberg)

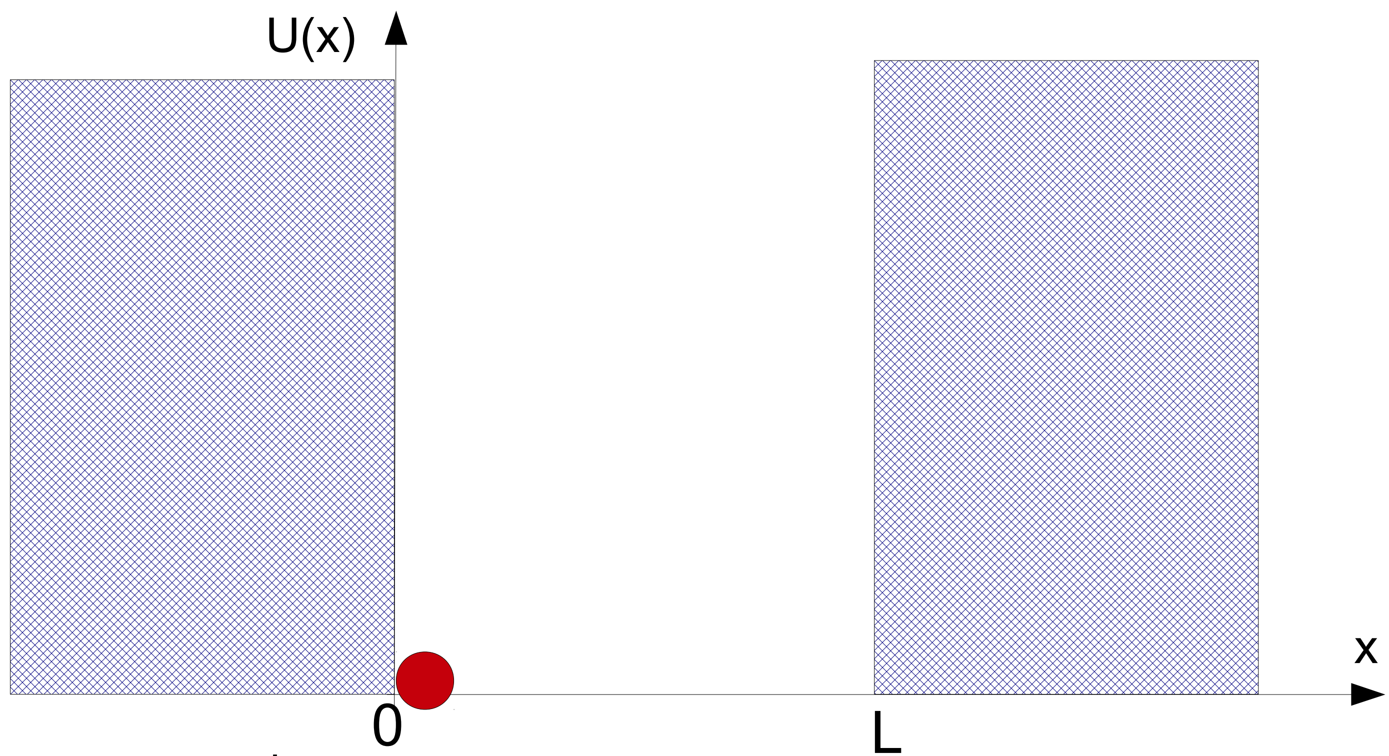


Partícula en una caja

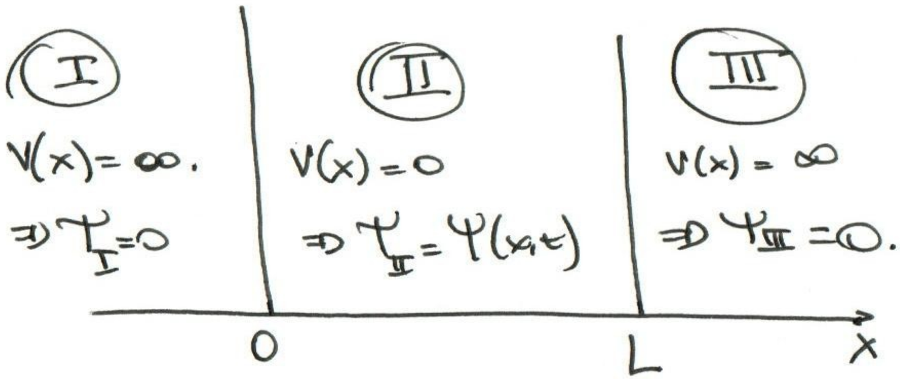
- El potencial es 0 en el interior, infinito en el exterior

$$V(x)=\begin{cases}\infty, \text{ si } x\leqslant 0\\ 0, \text{ si } 0<x<L\\ \infty, \text{ si } x\geqslant L\end{cases}$$

- ¿Cómo sería la función de onda?



El espacio se divide en tres regiones.



En la región I y III la partícula <u>no</u> puede estar

$\Rightarrow \Psi_{I,III}(x,t)=0 \qquad x\leq 0$ y $x\geq L$

¿En II?

Por continuidad, $\Psi_{II}(x=0)=\Psi_I=0$.

y $\Psi_{II}(x=L)=\Psi_{III}=0$.

$\Rightarrow$ la función de onda II se anula en los bordes de la caja

Como $V(x)=0$ en el interior $\rightarrow$ ¡<u>partícula libre</u>!

Partícula en una caja, la solución final

$\Rightarrow \quad \Psi_{II}(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$

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

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

¿Cuanto valen A y B? $\longrightarrow$ Condiciones de Borde

$\psi(x=0) = 0 \quad$ y $\quad \psi(x=L) = 0$

si $x = 0 \Rightarrow \sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right) = 0$ y $\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right) = 1 \Rightarrow$

$B = 0$ y $A \neq 0 \Rightarrow$

$\psi(x) = A\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$

Ahora $\psi(x=L) = 0 \Rightarrow A\sin\left(\frac{p}{\hbar}L\right) = 0$

$\Rightarrow A = 0 \rightarrow \psi_{II}(x) = 0$ NO!

$\Rightarrow \sin\left(\frac{p}{\hbar}L\right) = 0 \Rightarrow \frac{p}{\hbar}L = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

Partícula en una caja, la solución final

⇒ El momento está cuantizado:

$$\frac{p}{\hbar} L = n\pi \Rightarrow \boxed{p_n = \frac{\hbar\pi}{L} n}$$

Y como $E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow E_n = \left(\frac{\hbar\pi}{L} n\right)^2 \frac{1}{2m}$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2L^2 m} n^2 = \frac{h^2}{4\cancel{\pi^2}} \cdot \frac{\cancel{\pi^2}}{2mL^2} n^2$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2}$$ La Energía está cuantizada.

y como $\hat{H}\psi = E\psi$ y E_n son autovalores

⇒ Hay Autofunciones de modo ψ_n:

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{p_n}{\hbar} x\right) \Rightarrow \psi_n = A \sin\left(\frac{\cancel{\hbar}\pi n}{\cancel{\hbar} L} x\right)$$

$$\Rightarrow \psi_n = A \underbrace{\sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)}_{\text{Estados Estacionarios}}.$$

¿y A? ↳ Normalización

Partícula en una caja, la solución final

Condición de Normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx = 1$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1.$$

$$\Rightarrow A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = 1$$

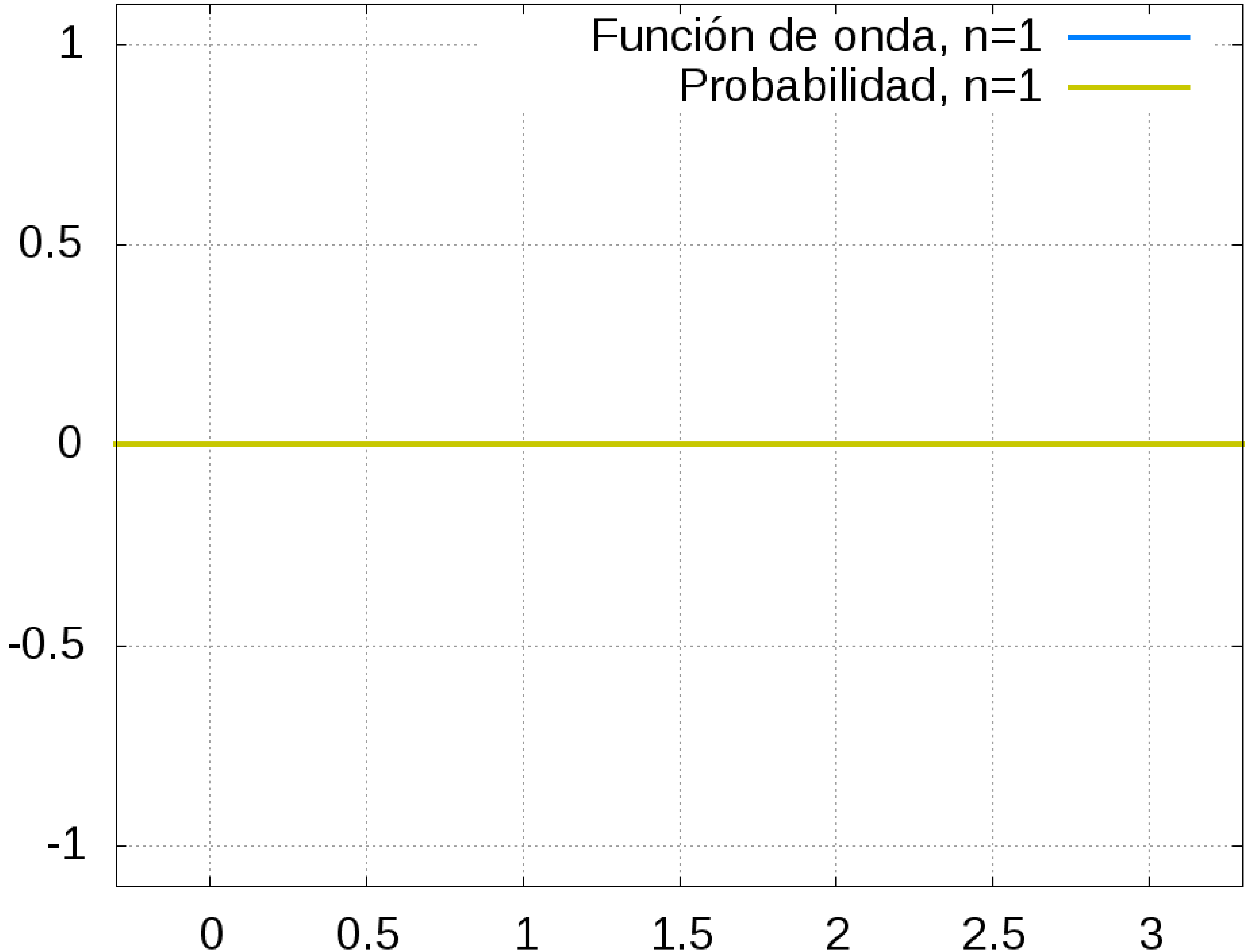
$$\Rightarrow A^2 \underbrace{\int_{0}^{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} dx\right)}_{L/2} dx = 1$$

$$\Rightarrow A^2 \, L/2 = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

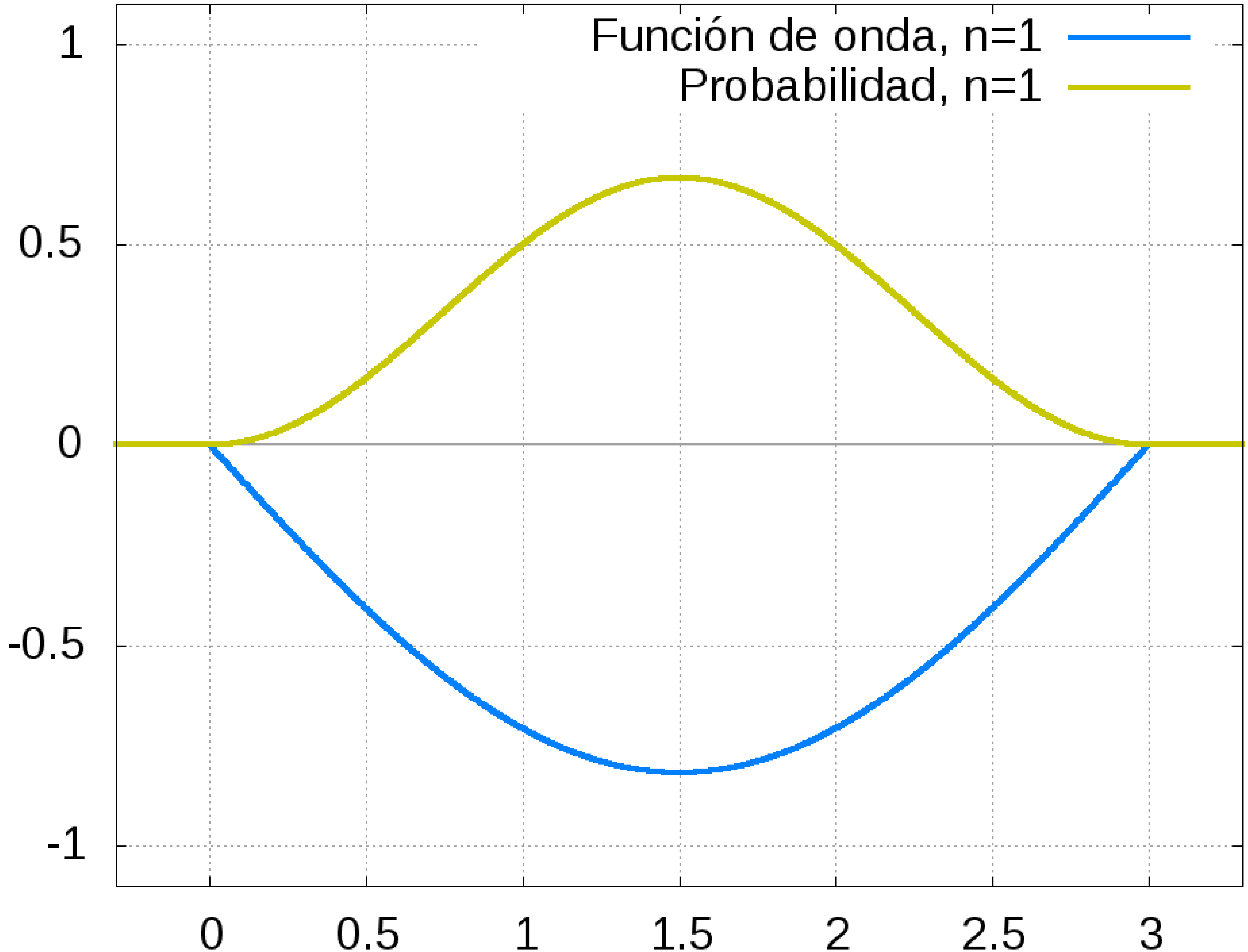
$$\Rightarrow \Psi(x,t) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \varphi(t) & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{si } x \geq L \end{cases}$$

Las Soluciones son modos estacionarios $\boxed{\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}$

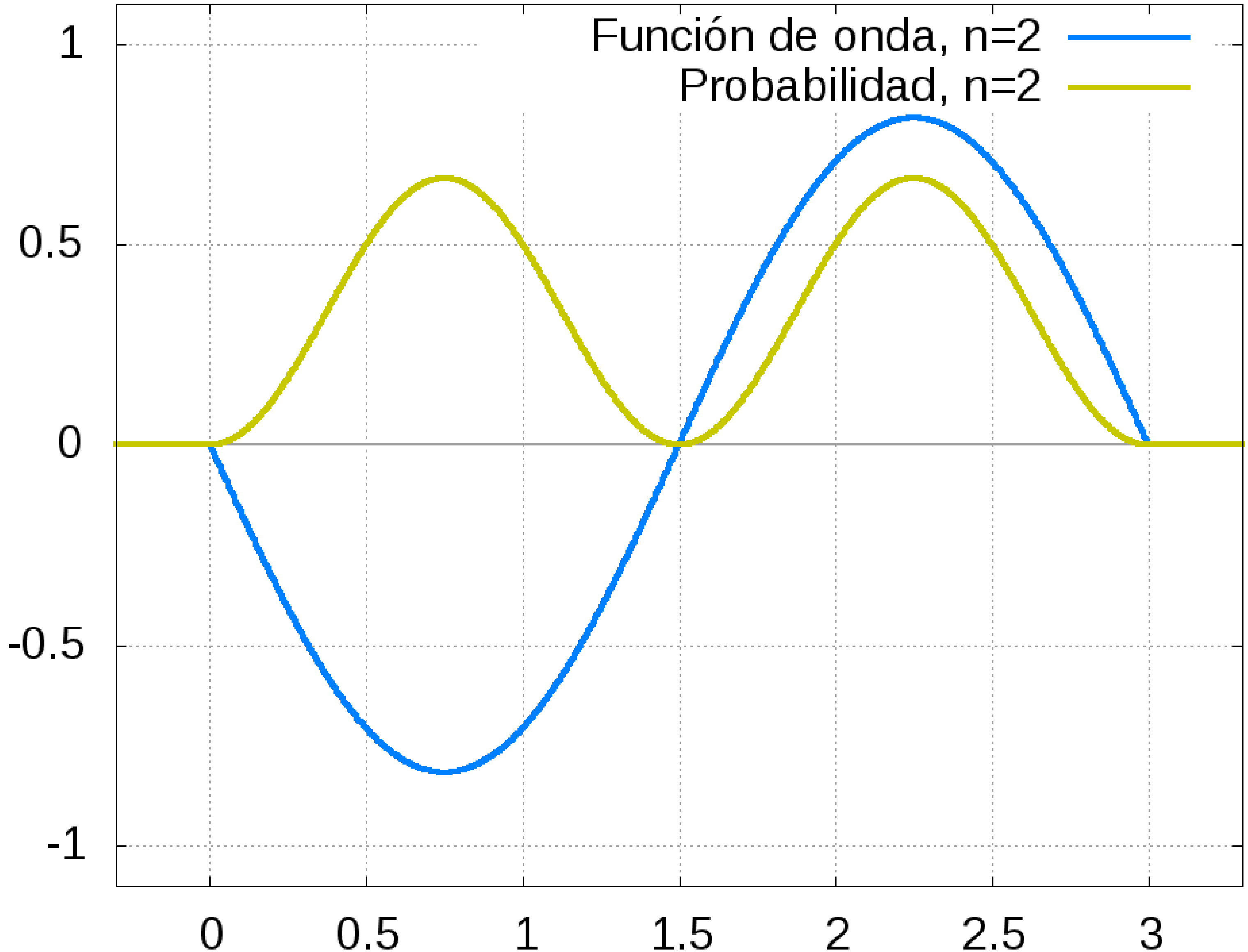
Partícula en una caja, Ψ y $|\Psi^2|$



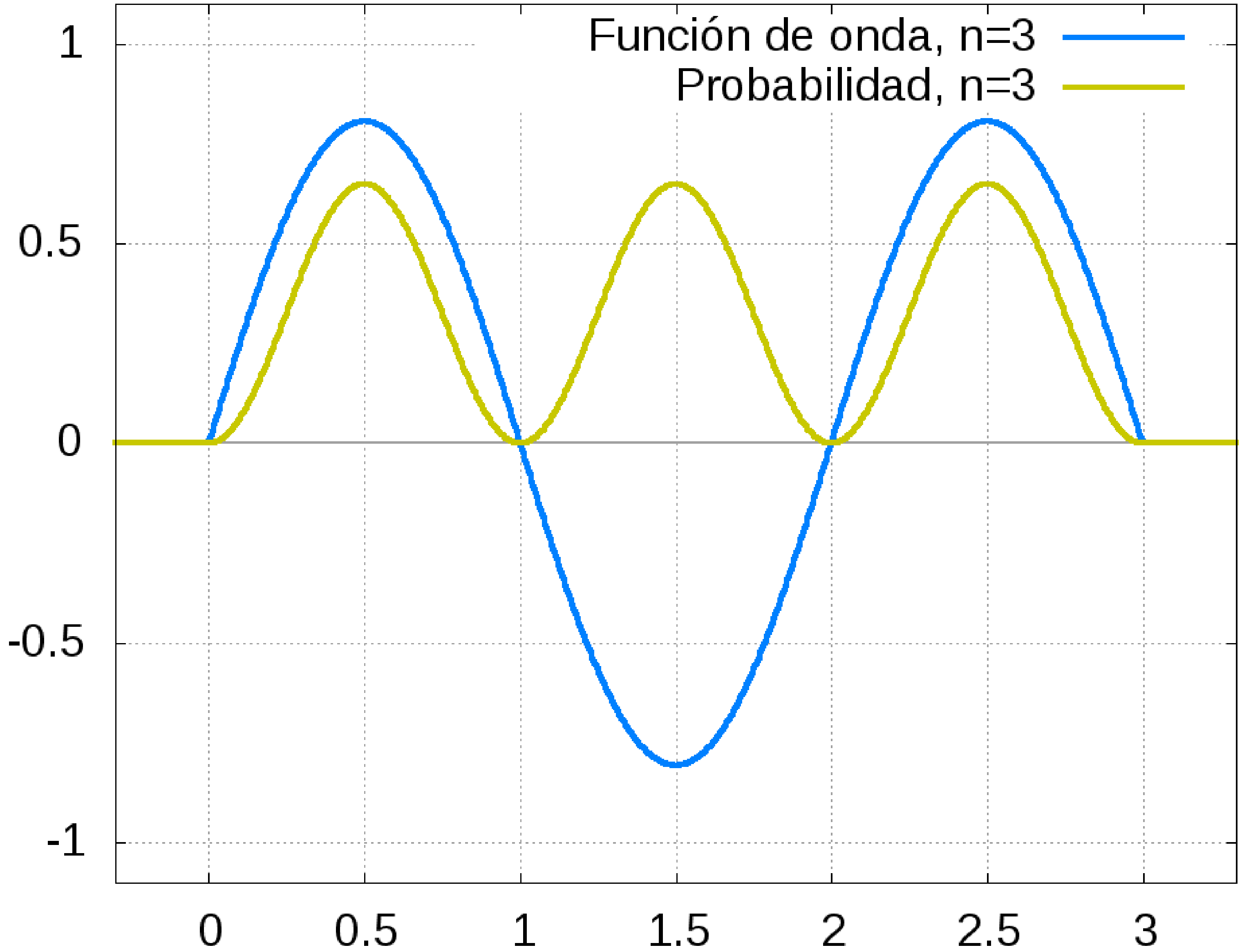
Partícula en una caja, n=1



Partícula en una caja, n=1



Partícula en una caja, n=3



Partícula en una caja, n=4