① ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER (CARGAMIENTO DE PLAUSIBILIDAD).

ONDAS CLÁSICAS

$\Delta x \Delta k \gtrsim 1$

$\Delta t \Delta \nu \gtrsim \frac{1}{2\pi}$

ONDA MATERIA

$\left.\begin{array}{l}\Delta x \Delta p \geq \hbar \\ \Delta t \Delta E \geq \hbar\end{array}\right\}$ RELACIONES DE INCERTIDUMBRE.

⟹ NECESITAMOS UNA DESCRIPCIÓN DE TIPO ONDULATORIO.

VAMOS A NECESITAR UNA ECUACIÓN DE ONDA, A LA QUE PEDIREMOS DOS PROPIEDADES BÁSICAS.

— QUE SEA LINEAL (ESTO PERMITE SUPERPOSICIÓN PARA PRODUCIR EFECTOS DE INTERFERENCIA Y PERMITE LA CONSTRUCCIÓN DE PAQUETES DE ONDA).

— LOS COEFICIENTES QUE APAREZCAN EN NUESTRA ECUACIÓN DEBEN SER SÓLO CONSTANTES COMO $\hbar$, CARGA, MASA, ETC Y NO PARÁMETROS ASOCIADOS A UNA CLASE PARTICULAR DE MOVIMIENTO (MOMENTUM, ENERGÍA, FRECUENCIA, ETC). ESTO ÚLTIMO ES PARA DEJAR ABIERTA LA POSIBILIDAD DE SUPERPONER SOLUCIONES CON DIFERENTES VALORES DE ESTOS PARÁMETROS.

Prueba 1:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \gamma \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Obs: $p = \hbar k$ | $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$E = \hbar \omega$ | $\omega = 2\pi\nu$

γ ES EL CUADRADO DE LA VELOCIDAD DE LA ONDA.

$$\gamma = \frac{\omega^2}{k^2} = \frac{E^2}{p^2} = \frac{p^2}{4m} \longrightarrow$$

EL PARÁMETRO DEPENDE DE p

⟹ LA ECUACIÓN NO NOS SIRVE.

Prueba 2

CONSIDEREMOS:

$$\psi(x,t) \approx e^{i(kx-\omega t)}$$

$\frac{d}{dt} \longrightarrow$ baja un ω

$\frac{d}{dx} \longrightarrow$ baja un k

• USANDO: $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \longrightarrow E = \frac{p^2}{2m}$ (PARTÍCULA LIBRE)

LO ANTERIOR NOS SUGIERE

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \gamma \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \\ \text{LUEGO: } \gamma &= \frac{i\omega}{k^2} = \frac{i\hbar E}{p^2} = \frac{i\hbar}{2m} \end{aligned}\right\} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

EN 3D TENDRÍAMOS.

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

SI COMPARAMOS CON $E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$, LO ANTERIOR NOS SUGIERE QUE AL MENOS PARA PARTÍCULAS LIBRES.

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \wedge \quad \vec{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla$$

• ¿Y SI NO TENEMOS PARTÍCULAS LIBRES?

$$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r},t) \quad \text{PLAUSIBILIDAD} \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + V(\vec{r},t)\psi}$$

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER.

NOTA: PRIMERO SE PRUEBA CON UN $V(\vec{r},t) = V_0$: cte Y SE VE LA MISMA ESTRUCTURA QUE EN EL CASO LIBRE, Y LUEGO VIENE EL SALTO.

(*) LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$$ (ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER)

DONDE: $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

ojo: $$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \wedge \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

si $\hat{H} = \hat{H}(\vec{r},\vec{p})$ NO DEPENDE EXPLÍCITAMENTE DEL TIEMPO ES POSIBLE USAR

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t)$$

lo que conduce a

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = cte = E$$

$$\Rightarrow \hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$ (ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER INDEPENDIENTE DEL TIEMPO).

FINALMENTE:

$$\psi_m(\vec{r},t) = \psi_m(\vec{r})\exp\left[-\frac{iE_m t}{\hbar}\right]$$

con la condición de normalización.

$$\int \psi_m^*(\vec{r},t)\psi_m(\vec{r},t)\,dV = \int \psi_m^*(\vec{r})\psi_m(\vec{r})\,dV = 1$$

(•) LA CONSERVACIÓN DEL NÚMERO DE PARTÍCULAS EN MECÁNICA CUÁNTICA.

DE LA ELECTRODINÁMICA SE SABE QUE:

$$\frac{\partial \rho_E}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j}_E = 0$$

DONDE ρ_E ES LA DENSIDAD DE CARGA Y $\vec{j}_E$ LA DENSIDAD DE CORRIENTE. ESTA ECUACIÓN ES LA LEY DE CONSERVACIÓN DE LA CARGA ELÉCTRICA.

Ahora intentemos algo similar para el número de partículas en una región.

$$\rho_E \longrightarrow W = \psi^* \psi \quad \text{(densidad de probabilidad)}$$

$$\vec{j}_E \longrightarrow \vec{j} \quad \text{(densidad de corriente de partículas).}$$

Para este fin consideremos:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \quad \wedge \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \psi^*$$

Multiplicando la primera por ψ^* y la segunda por ψ y sumándolas se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{i}{\hbar}(\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H} \psi^*) = 0$$

Si el potencial es independiente de la velocidad y real se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi) = 0$$

Si en el paréntesis del segundo término insertamos un cero $(0 = \nabla\psi\nabla\psi^* - \nabla\psi\nabla\psi^*)$

$$\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi = \psi \nabla^2 \psi^* + \nabla\psi \nabla\psi^* - \nabla\psi\nabla\psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi$$
$$= \nabla(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

Así se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) + \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0$$

Esta ecuación tiene forma de ecuación de continuidad.

Esta ecuación tiene forma de corriente de partículas
definimos la densidad de corriente

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

Usando la ley de Gauss

$$\int_V \nabla \cdot \vec{j}\, dV = \oint_S \vec{j} \cdot \hat{n}\, ds$$

CONDUCE A:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \psi^* \psi \, dV + \int_S j_M \, dS = 0$$

$\Rightarrow$ EL FLUJO DE PARTÍCULAS A TRAVÉS DE UNA SUPERFICIE DE UNA REGIÓN ES EQUIVALENTE A LA VARIACIÓN DE LA DENSIDAD DE PARTÍCULAS DENTRO DE LA REGIÓN.

- PROPIEDADES DE LOS ESTADOS ESTACIONARIOS.

$$\psi^*_M(\vec{r},t)\,\psi_M(\vec{r},t) = \psi^*_M(\vec{r})\,\psi_M(\vec{r}) \Rightarrow W(x,t) = W(x)$$ (DENSIDAD DE PROBABILIDAD CONSTANTE.)

POR OTRO LADO, LA CORRIENTE, COMO EL ∇ NO AFECTA EL FACTOR TEMPORAL, CONDUCE A:

$$\vec{j}_M(\vec{r},t) = \vec{j}_M(\vec{r})$$ $\Leftarrow$ LA CORRIENTE PARA ESTADOS ESTACIONARIOS TAMBIÉN ES CONSTANTE.