



## Ecuación de Schrödinger

■ **Autores:**

- Valentino Rao - Leg. 402308
- Ignacio Ismael Perea - Leg. 406265
- Manuel Leon Parfait - Leg. 406599
- Gonzalo Filsinger - Leg. 400460
- Agustín Coronel - Leg. 402010
- Santiago Pannunzio - Leg. 402350
- Marcos Raúl Gatica - Leg. 402006

■ **Curso:** 2R1.

■ **Asignatura:** Física electrónica.

■ **Institución:** Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional de Córdoba



U  
T  
N  
  
F  
R  
C



## Índice

<b>1. INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
1.1. Función de onda . . . . .	1
1.2. La normalización . . . . .	1
1.3. Funciones de onda "bien comportadas" . . . . .	1
1.4. La interpretación probabilística . . . . .	1
<b>2. LA ECUACIÓN DE ONDA CLÁSICA</b>	<b>1</b>
<b>3. ECUACIÓN SCHRÖDINGER: DEPENDIENTE DEL TIEMPO</b>	<b>1</b>
3.1. Expresión de la función de onda para una partícula libre . . . . .	1
3.2. Derivada segunda de $\Psi$ con respecto a $x$ . . . . .	2
3.3. Derivada de $\Psi$ con respecto a $t$ . . . . .	2
3.4. Relación entre la energía total $E$ , cinética y potencial $U$ . . . . .	2
3.5. Resultado final: Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión . . . . .	2
3.6. Ejemplo: electrón confinado en una caja . . . . .	2

# 1. INTRODUCCIÓN

## 1.1. Función de onda

En la mecánica cuántica, la función de onda  $\Psi$  describe el estado de una partícula en un sistema. Por sí misma,  $\Psi$  no tiene un significado físico directo, sin embargo, sirve para representar la densidad de probabilidad de encontrar una partícula en un lugar y momento dado (magnitud instantánea):

$$|\Psi|^2$$

Para una función de onda compleja, la densidad de probabilidad se calcula como:

$$|\Psi|^2 = (\Psi^*)(\Psi)$$

Siendo  $\Psi^*$  el complejo conjugado de  $\Psi$ . Lo que esta operación asegura que la densidad de probabilidad sea positivo y real (para que físicamente tenga significado).

La función de onda,  $\Psi$ , es una función compleja y se expresa:

$$\begin{aligned}\Psi &= A + Bi \\ \Psi^* &= A - Bi \quad (\text{El complejo conjugado})\end{aligned}$$

Siendo A y B números reales.

Por lo tanto, una vez presentadas las funciones, es posible describir la densidad de onda compleja como:

$$|\Psi|^2 = (\Psi^*)(\Psi) = A^2 + B^2$$

## 1.2. La normalización

Existen ciertas condiciones para que una función de onda represente de manera adecuada el estado de una partícula, siendo una de ellas que la densidad de probabilidad debe ser normalizable.

Normalizar  $|\Psi|^2$  significa que debe ser integrable en todo el espacio y converger en un valor finito. Físicamente se puede interpretar que ese valor representa un lugar determinado en el espacio donde existe la partícula. La normalización es igual a:

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

La ecuación hace referencia a la probabilidad total de encontrar la partícula en algún lugar del espacio equivale a 1. Si la función de onda compleja cumple la integral, cumple la normalización. También es posible multiplicar una constante a la función para cumplir a normalización en caso de no poder.

## 1.3. Funciones de onda "bien comportadas"

Para que una función de onda  $\Psi$  sea válida en un sistema cuántico, debe:

- Ser continua y de valor único en cada punto del espacio, ya que la probabilidad de encontrar una partícula en algún lugar específico debe ser un solo valor.

- Sus derivadas parciales, llámese:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \frac{\partial \Psi}{\partial z}$$

deben ser continuas y converger en un solo valor para cada punto en el espacio. Esto permite asegurar que no existan discontinuidades abruptas en la función de onda.

- $\Psi$  debe ser normalizable; tiende a 0 cuando  $(x; y; z) \rightarrow \infty$ .

## 1.4. La interpretación probabilística

Una vez aclarado las condiciones de normalización y de "bien comportada", la probabilidad de encontrar la partícula en una región específica del espacio puede calcularse integrando  $|\Psi|^2$  en dicha región.

Supongamos que una partícula restringida a moverse en la dirección x, la probabilidad de encontrarla entre las posiciones  $x_1$  y  $x_2$  puede ser expresada por:

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi|^2 dx$$

## 2. LA ECUACIÓN DE ONDA CLÁSICA

Una de las bases fundamentales de la mecánica cuántica es la ecuación de Schrödinger, que es análogo a lo que es la segunda ley de Newton en la mecánica clásica.

Newton describe la evolución de un cuerpo en el espacio y el tiempo, mientras que Schrödinger describe la evolución de una función de onda  $\Psi$ , la cual contiene información sobre el estado de una partícula.

$$\text{Ec. Onda clásica:} \quad \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

La ecuación de onda clásica deriva de principios como la segunda ley de Newton para ondas mecánicas y las ecuaciones de Maxwell para las ondas electromagnéticas. Su propósito es describir la propagación de una onda  $y$  en dirección  $x$  a una velocidad  $\vec{u}$ .

## 3. ECUACIÓN SCHRÖDINGER: DEPENDIENTE DEL TIEMPO

La función de onda  $\Psi$  sirve como equivalente cuántico de una variable de onda como  $y$  en el caso de las ondas clásicas. La diferencia significativa es que  $\Psi$  puede ser una cantidad que  $\in \mathbb{C}$  y no representa directamente una magnitud observable. Como se ha mencionado en la introducción, permite conocer la probabilidad de encontrar una partícula en un punto con  $|\Psi|^2$ .

### 3.1. Expresión de la función de onda para una partícula libre

Partiendo de un caso ideal de una partícula libre moviéndose en la dirección  $+x$ , la función de onda se expresa como:

$$\Psi = Ae^{-i\omega(t-x/v)}$$

Esto describe una onda que se propaga libremente. Al reemplazar  $\omega$  y  $v$  por sus respectivas relaciones con la energía  $E$  y el momento  $p$  de la partícula, se obtiene:

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(vt - x\lambda)}$$

La fórmula funciona cuando la partícula no tiene restricciones, pero si la misma está sujeta a un potencial (como un electrón unido a un átomo por el campo eléctrico de su núcleo), hace falta obtener una ecuación diferencial que describa  $\Psi$  para esas circunstancias.

Si se diferencia la expresión  $\Psi$  con respecto a  $x$  y a  $t$ , y se introduce la relación entre la energía total, energía cinética y potencial, se deriva la forma dependiente del tiempo de la ecuación de Schrödinger para una dimensión:

Función de onda de una partícula que se mueve libremente:

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(vt - x/\lambda)}$$

Se reemplaza  $\omega$  por  $2\pi v$  y la velocidad  $v$  en términos de la longitud de onda  $\lambda$ , se obtiene:

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(\frac{vt-x}{\lambda})}$$

Se sabe que:

- La energía total (por Planck)  $E = h\nu = 2\pi\hbar\nu$
- $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$

Usando esas relaciones, se puede expresar  $\Psi$  como:

$$\Psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et - px)}$$

El resultado es la expresión que describe una partícula que se mueve libremente en la dirección  $x$  con energía  $E$  y un momento  $p$ .

### 3.2. Derivada segunda de $\Psi$ con respecto a $x$

Se procede a diferenciar  $\Psi$  dos veces con respecto a  $x$  para obtener una relación entre el momento  $p$  y la función de onda:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -\frac{ip}{\hbar}\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi$$

Se despeja  $p^2\Psi$ :

$$p^2\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

### 3.3. Derivada de $\Psi$ con respecto a $t$

Se hace la diferenciación de la función onda  $\Psi$  con respecto a  $t$ :

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

Se multiplica ambos lados por  $\hbar$  e introduciendo el operador  $i\hbar$  en el primer miembro, se obtiene:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi$$

### 3.4. Relación entre la energía total $E$ , cinética y potencial $U$

Para una partícula a velocidades menores que  $c$ , la energía total  $E$  se expresa como la suma de la energía potencial cinética y potencial:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x;t)$$

Si se multiplica por ambos miembros la función de onda  $\Psi$  se obtiene:

$$E\Psi = \Psi\left(\frac{p^2}{2m} + U(x;t)\right)$$

$$E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + U(x;t)\Psi$$

Ahora se sustituye los valores obtenidos en los pasos anteriores para  $E\Psi$  y  $p^2\Psi$  usando las derivadas de  $\Psi$  con respecto a  $x$  y  $t$ :

- I. De la relación de  $E$  con la derivada temporal de  $\Psi$ , se sustituye  $E\Psi$  por  $i\hbar\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$
- II. De la relación de  $p^2$  con la derivada espacial de  $\Psi$ , se sustituye  $p^2\Psi$  por  $-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$

En resumen, se obtiene:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi$$

### 3.5. Resultado final: Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión

Esta ecuación describe cómo evoluciona la función de onda  $\Psi$  de una partícula en función del tiempo bajo la influencia de un potencial  $U(x;t)$ . Se puede llevar a tres dimensiones  $(x; y; z)$  adicionando las energías cinéticas de cada coordenada:

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

### 3.6. Ejemplo: electrón confinado en una caja

- I. **Planteamiento:** Un electrón se encuentra confinado en una "caja" de tamaño  $L = 0,1nm$ . Se asume que esta caja tiene "paredes" impenetrables, lo que significa que fuera de la caja ( $x < 0$  y  $x > L$ ), la función de onda  $\Psi_x$  es 0, debido a la probabilidad nula de que el electrón exista fuera de este rango.
- II. **Aplicación de la ecuación de Schrödinger:** Para una partícula de masa  $m$  en una dimensión con energía total  $E$ , la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_{(x)}}{dx^2} = E \Psi_{(x)}$$

Dentro de la "caja" (entre  $x = 0$  y  $x = L$ ), la energía potencial  $U$  es cero, por lo que la ecuación se reduce a:

$$\frac{d^2 \Psi_{(x)}}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_{(x)}$$

Se define  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , lo que convierte la ecuación diferencial en:

$$\frac{d^2 \Psi_{(x)}}{dx^2} + k^2 \Psi_{(x)} = 0$$

### III. Solución general de la función de onda:

$$\Psi_{(x)} = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Donde  $A$  y  $B$  son constantes de integración determinadas por las condiciones de frontera.

### IV. Condiciones de frontera:

Dado que la probabilidad de que el electrón esté fuera de la caja es cero, tenemos que:

- En  $x = 0$ :  $\Psi_{(0)} = 0$ , lo que implica que  $B = 0$
- En  $x = L$ :  $\Psi_{(L)} = 0$ , lo que implica que  $A \sin(kL) = 0$

Para satisfacer esta última condición,  $kL$  debe ser un múltiplo entero de  $\pi$ :

$$kL = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{L} \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots$$

### V. Energía cuantizada:

Sustituyendo  $k = \frac{n\pi}{L}$  en la definición de  $k$ , obtenemos los valores de energía permitidos:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Siendo:

- $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
- $\hbar = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{2\pi}$
- $L = 10^{-10} \text{ m}$

La expresión final para la energía queda como:

$$E_n = \frac{(n^2)(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js})^2}{(8)(9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(10^{-10} \text{ m})} \approx 6,10^{-18} n^2 \text{ J}$$

### VI. Interpretación de los niveles energéticos:

Para  $n = 1$ , la energía mínima del electrón es  $E_1 \approx 6,10^{-18} \text{ J}$ , que son aproximadamente  $38 \text{ eV}$ . Los niveles de energía son:

- $E_1 = 38 \text{ eV}$
- $E_2 = 4,38 \text{ eV} = 152 \text{ eV}$
- $E_3 = 9,38 \text{ eV} = 342 \text{ eV}$
- $E_4 = 16,38 \text{ eV} = 608 \text{ eV}$

Estos niveles energéticos cuantizados implican que el electrón en la "caja" solo puede existir para ciertos estados energéticos discretos, en lugar de tener una energía continua. Esta cuantización es característico en sistemas confinados.