Ecuación de Shrödinger

U T N F R C

- **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

Índice

1. Forma de estado estacionario

1.1. Desarrollo

En muchas situaciones, la energía potencial de una partícula no depende explícitamente del tiempo; las fuerzas que actúan sobre ella, y por lo tanto U, varían solo con la posición de la partícula. Cuando esto es cierto, la ecuación de Schrödinger puede simplificarse eliminando toda referencia a t. Comenzamos observando que la función de onda unidimensional de una partícula no restringida puede escribirse como:

$$\Psi = Ae^{-j\cdot(\hbar^{-1})\cdot(Et-px)}$$
$$\Psi = Ae^{-jEt\cdot\hbar^{-1}} \cdot e^{jpx\cdot\hbar^{-1}}$$
$$\Psi = \psi(x)e^{-jEt/\hbar}$$

Donde Ψ es el producto de una función dependiente del tiempo $e^{-jEt\cdot\hbar^{-1}}$ y de una función dependiente de la posición ψ. Si sustituimos Ψ en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, obtenemos:

$$E\cdot\psi e^{-tjE\cdot\hbar^{-1}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot e^{-tjE\cdot\hbar^{-1}}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\cdot\psi e^{-tjE\cdot\hbar^{-1}} \quad (1)$$

Si despejamos $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$, obtenemos:

$$E\cdot\psi - U\cdot\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$
$$(E-U)\psi\cdot\frac{2m}{\hbar^2} = -\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$
$$(E-U)\psi\cdot\frac{2m}{\hbar^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula no restringida en una sola dimención. La solución de esta ecuación es una función de onda ψ que depende solo de la posición y que satisface la condición de que la energía total de la partícula es igual a la suma de su energía cinética y su energía potencial. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es una ecuación diferencial de segundo orden que puede resolverse para obtener la función de onda ψ.

Una propiedad importante de la ecuación de estado estacionario de Schrödinger es que, si tiene una o más soluciones para un sistema dado, cada una de estas funciones de onda corresponde a un valor específico de la energía E. Así, la cuantización de la energía aparece en la mecánica ondulatoria como un elemento natural de la teoría, y la cuantización de la energía en el mundo físico se revela como un fenómeno universal característico de todos los sistemas estables.

2. Valores propios y Funciones propias

Los valores E_n para los cuales la ecuación de Schrödinger tiene soluciones no triviales se llaman valores propios de la ecuación. Las funciones de onda correspondientes a estos valores propios se llaman funciones propias. Por ejemplo los valores propios para los niveles de energía discreta del átomo de hidrógeno son:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2}$$

Donde n es un número entero positivo y m_e es la masa del electrón.

Una variable dinámica G puede no estar cuantizada. En este caso, las mediciones de G realizadas en varios sistemas idénticos no producirán un resultado único, sino una dispersión de valores cuyo promedio es el valor esperado.La condición para que una cierta variable dinámica G esté restringida a los valores discretos G_n,en otras palabras, que G esté cuantizada,es que las funciones de onda ψ_n del sistema sean tales que

Ecuaciones de valores propios

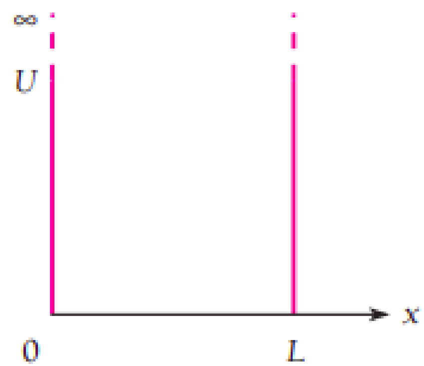
$$\hat{G}\psi_n = G_n\psi_n$$

3. Partícula en una caja

3.1. Pozo de potencial infinito

Como las condiciones limites y la normalización determinan las funciones de onda.

Para resolver la ecuación de Schrödinger, incluso en su estado estacionario, es necesario conocer las condiciones de contorno. En el caso de una partícula en una caja, la condición de contorno es que la función de onda debe ser cero en los extremos de la caja.



$Figura1$

El movimiento de la partícula está restringido a la región $0 \leq x \leq L$ por paredes infinitamente altas (U infinita). Una partícula no pierde energía al chocar con una pared infinitamente alta, por lo que la energía potencial de la partícula es infinita en los extremos de la caja, mientras U es constante, diremos que $U = 0$ en el interior de la caja para conveniencia.Por que la partícula no puede tener una cantidad de energía potencial infinita, esta misma no puede existir fuera de la caja, por lo tanto $\psi = 0$ para $x \leq 0$ y $x \geq L$, lo que tenemos que hacer es encontrar la función de onda ψ para $0 < x < L$.

La ecuación de Schrödinger para una partícula en una caja es:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

Donde $U = 0$ en el interior de la caja. La solución general de esta ecuación es:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi = 0$$

Para resolver esta ecuación, suponemos que $\psi = e^{r \cdot x}$, donde r es una constante, entonces la derivada segunda de ψ con respecto a x es $\psi = r^2 \cdot e^{r \cdot x}$. Sustituyendo esto en la ecuación anterior, obtenemos:

$$\begin{aligned}
&r^2 \cdot e^{r \cdot x} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot e^{r \cdot x} = 0 \\
&e^{r \cdot x} \cdot (r^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E) = 0 \\
&r^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E = 0 \\
&r^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \\
&r = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E} \\
&r = \pm j \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}
\end{aligned}$$

Entonces, la solución general de la ecuación de Schrödinger para una partícula en una caja es:

$\psi(x) = C_1 \cdot e^{j \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x} + C_2 \cdot e^{-j \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x}$
$\psi(x) = C_1 \cdot \cos(...) + j \cdot \sin(...) + C_2 \cdot \cos(...) - j \cdot \sin(...)$
$\psi(x) = (C_1 + C_2) \cdot \cos(...) + j \cdot (C_1 - C_2) \cdot \sin(...)$
donde $j \cdot (C_1 - C_2)$ es una constante real que llamaremos A, y $(C_1 + C_2)$ es otra constante que llamaremos B

$$\psi(x) = B \cdot \cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) + A \cdot \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x)$$

Las condiciones limites nos dicen que $\psi = 0$ en $x = 0$ y $x = L$. Si $cos(0) = 1$ ese termino no puede describir la función de onda, por lo que $B = 0$. Entonces, la función de onda para una partícula en una caja es:

$$\psi(x) = A \cdot \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) \tag{2}$$

En $x = L$ va a ser 0 para los valores de E_n:

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot L &= n \cdot \pi \\
E &= \frac{n^2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2}{2m \cdot L^2}
\end{aligned}$$

Donde n es un número cuántico, por lo tanto la energía de la partícula en una caja está cuantizada y ademas E_n es un valor propio para cada n, si reemplazamos E en la ecuación (2) obtenemos:

$$\begin{aligned}
\psi &= A \cdot \sin(\sqrt{\frac{2mn^2\pi^{2\hbar^2}}{2mL^2}} : \hbar \cdot x) \\
\psi &= A \cdot \sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x)
\end{aligned}$$

Entonces obtemos la función propia para los valores propios E_n, esta función propia reuna todos los requerimientos necesarios, es decir, tiene un valor finito para cada número cuántico n, es univaluada en x y ψ y $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ son continuas en $x = 0$ y $x = L$.

$$\psi_n = A \cdot sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x) \tag{3}$$

Si calculamos $|\psi_n|^2$ sobre un espacio finito ($0 \leq x \leq L$) obtenemos:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \, dx \\
&\int_0^L |\psi_n|^2 \, dx \\
&\int_0^L A^2 \cdot sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x)dx \\
&A^2 \cdot \int_0^L sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x)dx \\
&A^2 \cdot \int_0^L \frac{1 - cos(2 \cdot \frac{n\pi}{L} \cdot x)}{2} dx \\
&A^2 \cdot \int_0^L \frac{1}{2} - \frac{cos(2 \cdot \frac{n\pi}{L} \cdot x)}{2} dx \\
&\frac{A^2}{2} \cdot \int_0^L 1 - \frac{cos(2 \cdot \frac{n\pi}{L} \cdot x)}{2} dx
\end{aligned}$$

$$\frac{A^2}{2} \cdot \left[x - \frac{L}{2n\pi} \cdot \sin(2 \cdot \frac{2nx}{L} \right]_0^L$$
$$\frac{A^2}{2} \cdot L = \int_0^L |\psi_n|^2 \, dx$$

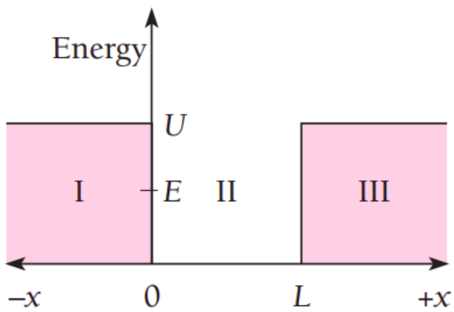
Para normalizar la función de onda, debemos hacer que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \, dx = 1$, por lo que $A^2 \cdot L = 1$, entonces $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Por lo tanto, la función de onda normalizada para una partícula en una caja/ pozo de potencial infinito es con condiciones limites $\psi(0) = \psi(L) = 0$:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x) \tag{4}$$

4. Pozo de potencial finito

4.1. Pozo de potencial finito simétrico

La función de onda transpasa la pared con niveles de energía menores a la energía del pozo.



$Figura2$

Tenemos un pozo de potencial de altura U_0 y ancho L. Si $E < U$, entonces la ecuación de Schrödinger es:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U) \cdot \psi = 0$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - a^2 \cdot \psi = 0$$

Donde $a = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$, para resolver la ecuación diferencia tenemos que hacer la misma tecnica que en el pozo de potencial infinito, diciendo que:

$$\psi = e^{r \cdot x}$$

Su derivada segunda es

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = r^2 \cdot e^{r \cdot x}$$

Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger obtenemos:

$$r^2 \cdot e^{r \cdot x} - a^2 \cdot e^{r \cdot x} = 0$$
$$e^{r \cdot x} \cdot (r^2 - a^2) = 0$$
$$r^2 - a^2 = 0$$
$$r^2 = a^2$$
$$r = \pm a$$

Entonces, la solución general de la ecuación de Schrödinger para un pozo de potencial finito, en las regiones I y III es:

$$\psi_I = C \cdot e^{a \cdot x} + D \cdot e^{-a \cdot x}$$
$$\psi_{III} = F \cdot e^{a \cdot x} + G \cdot e^{-a \cdot x}$$

Pero las solucines a las ecuación de Schrödinger deben ser finitas para que tengan sentido físico.

ψ_I es la solucion para la región izquierda donde $x < 0$, si en esta region $x \to -\infty$ entonces $e^{-a \cdot x} \to \infty$, entonces D = 0.

Los mismo sucede para ψ_{III}, ya que esta es la solución para la región derecha donde $x > L$, si en esta region $x \to \infty$ entonces $e^{a \cdot x} \to \infty$, entonces F = 0, quedando como solución:

$$\psi_I = C \cdot e^{a \cdot x} \tag{5}$$

$$\psi_{III} = G \cdot e^{-a \cdot x} \tag{6}$$

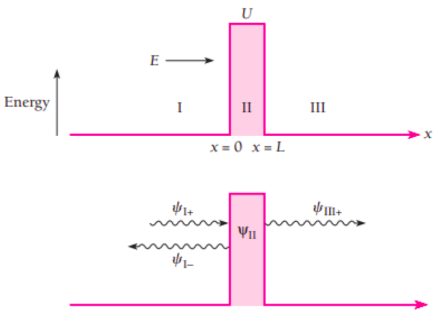
Para la región II, donde $0 < x < L$, la función de onda es ψ_{II} la partícula se encuentra en el pozo de potencial de altura finita, entonces la solucion es la misma a la primera parte del pozo de potencial infinito;

$$\psi_{II} = A \cdot sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) + B \cdot cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) \tag{7}$$

Para un potencial de pozo finito las condiciones limites eran $\psi(0) = \psi(L) = 0$, lo cual eliminaba al termino coseno, pero en este caso las condiciones son distitan, como la función de onda debe ser continua en $x = 0$ y $x = L$, entonces $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ y $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$, por lo tanto, en $x = 0$: la función de onda $\psi_{II} = C$ y en $x = L$: la función de onda $\psi_{II} = G$

5. Efecto Túnel

Una partícula sin la energía sufuciente para superar una barrera de potencial finita, puede atraversarla con el efecto túnel.



$Figura3$

En la figura 2, el pozo de potencial tenia una altura U y una anchura L, pero la anchura de las regiones I y III es infinita, en este caso del efecto túnel, la región II tiene una anchura finita, en el caso del pozo con potencial finito las particulas efectivamente pasaban hacia las regiones I y III pero se quedaban atrapadas ahí.

Ahora vamos a imaginar la situación donde una partícula con energía $E < U$ se encuentra en la región I, donde la barrera es de altura U, cuando la particula choca con esta barrera tiene una psoibiblidad, pequeña pero no nula, de atravesarla y llegar a la región III, mientras más alta y más ancha sea la barrera, menos probable es que la partícula la atraviese.

EL efecto túnel es real, este ocurre por ejemplo con las partícuals alfa, donde una partícula cuya energía es de unos pocos MeV, mientras que el núcleo posee una barrera de potencial de unos 25 MeV, para que esto suceda la partícula tiene que chocar con la barrera aproximadamente 10^{38} veces o más,otr ejemplo son los diodos de tunel, donde la corriente eléctrica pasa a través de la barrera de potencial, en este caso la barrera es de unos pocos eV y la energía de los electrones es de unos pocos meV.

Vamos a considerar el caso de un conjunto idéntico, donde su energía es $E < U$, este conjunto incide desde la izquierda con una función de onda ψ_{+I} donde esta representa al conjunto antes de chocar contra la pared, la función ψ_{-I} a la parte del conjunto que se refleja, la función ψ_{+III} represneta a la parte del conjunto que realizó efecto túnel y logró atravesar la barrera, finalmente la función ψ_{-II} representa a la parte del conjunto que está atrapada dentro de la región II,dodne una parte hará el efecto túnel y la otra se reflejará.

La probabilidad de que una partícula atraviese la barrera de potencial es:

$$T = e^{-2 \cdot a \cdot L \cdot K_2} \tag{8}$$

Donde K_2 es:

$$K_2 = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \tag{9}$$