21 agosto 2023

Ecuación de Schrödinger

Un paso vital de la discretización de la interacción radiación-materia lo da en 1913 Bohr cuando plantea su modelo atómico

(i) Los electrones solo están en órbitas estables particulares

(ii) Dichas órbitas son aquellas en que el electrón tiene un momento angular dado por un múltiplo entero de $\hbar$

(iii) Los electrones solo emiten radiación cuando cambian de una órbita a otra.

La segunda aportación relevante la hace Compton en 1923 al notar que en la colisión de dos corpúsculos las frecuencias de ambos cambian según el ángulo de dispersión.

de Broglie defiende que la idea corpuscular y ondulatoria deben coexistir.

Schödinger plantea que el frente de una onda codifica la velocidad de fase de la onda, así pues tenemos que

$$\boxed{v_f = E/2m(E-\underbrace{V}_{\text{potencial}})^{1/2}} \tag{1.1}$$

como $E-V=\frac{p^2}{2m} \Rightarrow p=(2m[E-V])^{1/2}$. Por lo que la hipótesis de de Broglie puede ser reescrita como

$$\lambda = h/[2m(E-V)]^{1/2} \tag{1.2}$$

Así pues, como $v_f=\nu\lambda$ (por mecánica ondulatoria) al sustituir (1.2) tenemos

$$v_f=\frac{E}{p}=\frac{E}{h}\lambda \tag{1.3}$$

Pensando que estamos trabajando con una onda, Schrödinger piensa usar v_f en la ec. de onda

$$\nabla^2\Psi-\frac{\partial_t^2\Psi}{v_f^2}=0 \tag{2.1}$$

cuya solución temporal, argumenta, es de la forma

$$\Psi(x,t)=\psi(x)e^{-i\omega t}=\psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \tag{2.2}$$

Sustituyendo (1.1) y (2.2) en (2.1) se sigue que

$$\nabla^2\Psi(x,t)-\left(\frac{h}{E\lambda}\right)^2\partial_t^2\Psi(x,t)=0$$

$$\Rightarrow \nabla^2\psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}-\left(\frac{h}{E\lambda}\right)^2\partial_t^2\left(\psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right)=0$$

$$\Rightarrow \nabla^2\psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}-\left(\frac{h}{E\lambda}\right)^2\psi(x)\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\partial_t\left(e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right)=0$$

$$\Rightarrow \nabla^2\psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}-\left(\frac{h}{E\lambda}\right)^2\psi(x)\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}=0$$

$$\Rightarrow \nabla^2\psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}-\left(\frac{h}{E\lambda}\right)^2\psi(x)\left(-\frac{1}{\hbar^2}E^2\right)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}=0$$

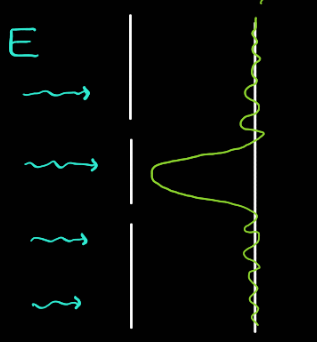
$$\Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=E\psi} \tag{3}$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Resultando entonces con que $E\Psi=i\hbar\partial_t\Psi$ se cumple y por lo tanto

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(x)\Psi=i\hbar\partial_t\Psi \tag{4}$$

¡Ojo! note que (4) no es relativista pues el tiempo está como una parcial a primer orden y la componente temporal en segundo orden.



descrita por la densidad de probabilidad

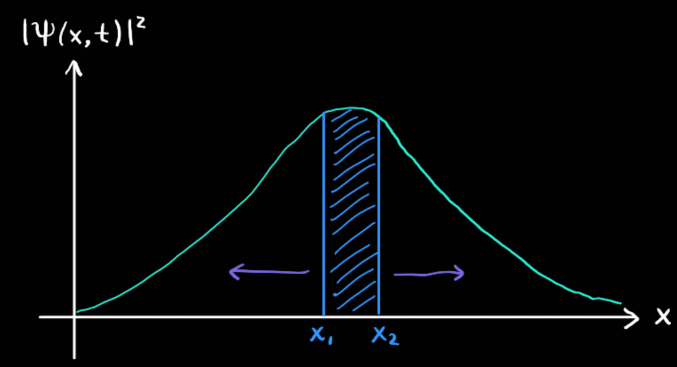
$$\rho(x,t)=|\Psi|^2$$

mientras que la probabilidad es

$$P=\int_A^B|\Psi|^2dx=1$$

22 agosto 23

Dada (4) tenemos que si la evolución de la ec. de Schrödinger debe conservar la probabilidad $\forall$ tiempo t. Si no lo fuera así estaríamos diciendo que hay partículas que entran y salen de su existencia



$$\partial_t \left(\int_M |\psi|^2 dx \right) = 0$$

sale de (4)

$$\Rightarrow \int_M \left[\partial_t \psi \psi^* + \psi \partial_t \psi^* \right] dx$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \int_M \left[\partial_x^2 \psi \psi^* - \psi \partial_x^2 \psi^* \right] dx + \frac{-i}{\hbar} \int_M (V - V^*) \psi \psi^* dx \qquad (5.1)$$

Recordando la integración por partes

$$\int_M \partial_x \underbrace{(\partial_x \psi)}_{V} \underbrace{\psi^*}_{U} dx = \int_M \partial_x V U \, dx$$

$$= -\int_M V \partial_x U \, dx + VU|_{\delta M}$$

$$= -\int_M \partial_x \psi \, \partial_x \psi^* dx + (\partial_x \psi) \psi^* |_{\delta M}$$

de lo cual, (5.1) es

$$\frac{i\hbar}{2m} \int_M \left[\cancelto{0}{-\partial_x \psi \, \partial_x \psi^* + \partial_x \psi \, \partial_x \psi^*} \right] dx + \overbrace{\frac{i\hbar}{2m} \left[(\partial_x \psi) \psi^* - \psi \partial_x \psi^* \right]_{\delta M}}^{J_x} \qquad (5.2)$$

$d\vec{n} \perp \delta M$

$$= J_x |_{\delta M}$$

corriente de probabilidad

¿esto es un flujo? ... de esto obtenemos la ecuación de continuidad de la corriente de probabilidad

$$\boxed{\frac{d}{dt} \int_M \rho(x,t) \, dx = \int_{\delta M} \vec{J} \cdot d\vec{n}}$$ versión integral

$$\boxed{\partial_t \rho(x,t) = \nabla \cdot \vec{J}}$$

Hablando entonces de probabilidades, ¿cómo recuperamos la física que conocemos?

¿qué tan probable que la partícula esté en x? $\rho(x)$ entonces $\int \rho(x) x \, dx = \langle x \rangle$ es el promedio de encontrar el valor de x

Análogamente, si fuera el de x^2 tendríamos

$$\langle x^2 \rangle = \int \rho(x) x^2 dx$$