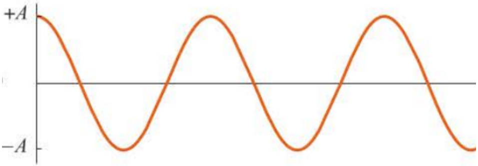
La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo I

La ecuación de onda más simple es la que gobierna la propagación de una onda armónica a lo largo de un hilo estirado



- El desplazamiento vertical Ψ del hilo en la posición x y el tiempo t viene dado por:

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{sen}k(x - vt)$$

- La curva se repite cada longitud de onda $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, que con la frecuencia angular de la onda $\omega = kv = \frac{2\pi v}{\lambda}$ y como $\omega = 2\pi\nu$ podemos obtener la importante relación $\nu = \frac{v}{\lambda}$ entre la velocidad de propagación, la longitud de onda y la frecuencia.

- De esta forma podemos describir el movimiento de la onda por la ecuación:

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{sen}\omega\left(\frac{x}{v} - t\right)$$

- Esta no es la solución más general posible que se puede obtener derivando la solución anterior con respecto a x y t dos veces:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{A\omega^2}{v^2}\mathrm{sen}\omega\left(\frac{x}{v} - t\right)$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -A\omega^2\mathrm{sen}\omega\left(\frac{x}{v} - t\right)$$

- Combinando las dos ecuaciones anteriores veremos en la siguiente página la ecuación de ondas de un hilo estirado

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo II

- Ecuación de ondas del hilo estirado:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

- Estamos interesados en las soluciones en las que v no depende del tiempo: $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot f(t)$ donde hemos factorizado la función de onda Ψ,
- introduciendo la separación de variables en la ecuación de ondas obtenemos:

$$\frac{v^2}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{f(t)} \frac{d^2 f(t)}{dt^2}$$

- como el primer miembro sólo depende de la posición y el segundo sólo del tiempo esto sólo es posible si ambos son iguales a una constante que llamamos $-\omega^2$, luego:

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = -\omega^2 f(t)$$

- y la ecuación que describe la amplitud espacial de la onda como función de la posición:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-\omega^2}{v^2} \psi(x)$$

- La energía de la partícula es la suma:

$$E = \frac{1}{2} m v^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

- despejando:

$$p = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

- Schrödinger utilizó la ecuación de De Broglie obteniendo:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m[E - V(X)]}}$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo III

- El término ω^2/v^2 puede reescribirse en términos de λ teniendo en cuenta que $\omega = 2\pi\nu = 2\pi v/\lambda$, luego:

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{4\pi^2\nu^2}{v^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2}$$

- Sustituyendo este resultado en la ecuación de onda se obtiene:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

que es la famosa *Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo* para una partícula en una dimensión, que generalmente se presenta reescrita en la forma:

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

Que puede extenderse fácilmente a tres

- dimensiones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

donde $\vec{r} = (x, y, z)$ es el vector de posición de la partícula en tres dimensiones y el "operador de Laplace" ∇^2 se expresa, en coordenadas cartesianas por:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

que puede utilizarse también para problemas de dos partículas si se sustituye la masa m por la masa reducida (μ) del sistema

- En general, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se expresa:

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

donde $\widehat{H}$ representa el Hamiltoniano del sistema

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo I

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es un postulado de la Mecánica Cuántica. Schrödinger obtuvo esta ecuación a partir de la anterior con argumentos razonables.

- La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula en tres dimensiones es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

  donde $V(\vec{r},t)$ es una función real que representa la energía potencial del sistema

- o, en términos del Hamiltoniano:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \widehat{H}\Psi(\vec{r},t)$$

  La ecuación anterior es la ecuación de movimiento de la mecánica ondulatoria (ley dinámica). Dicha ecuación no tiene en cuenta efectos relativistas o de spin.

- En el caso de sistemas conservativos en los que el potencial no depende del tiempo, $V(\vec{r})$, podemos usar esta ecuación para obtener la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r}) \cdot f(t)$, entonces:

$$\psi(\vec{r}) i\hbar \frac{df(t)}{dt} = f(t)\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})$$

- o reordenando variables:

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})$$

- el lado izquierdo es sólo función del tiempo y el derecho sólo de la posición $\vec{r}$, luego ambos son iguales a una constante E (el lado derecho sugiere energía), entonces podemos extraer dos

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo II

- ecuaciones diferenciales:

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

- la segunda de ellas es la ya obtenida ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La primera tiene como solución:

$$f(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

donde E es un número real.

- Las soluciones $f(t)$ son oscilatorias: $e^{-iEt/\hbar} = \cos(Et/\hbar) - i\mathrm{sen}(Et/\hbar)$, por tanto:

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

- Entonces la función de onda total $\Psi(\vec{r},t)$ difiere de $\psi(\vec{r})$ sólo por un factor de fase.
- Importantes consecuencias:

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\cdot\Psi(\vec{r},t)$$

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = e^{iEt/\hbar}\psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$$

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$$

- debido a la relación anterior las funciones de onda $\Psi(\vec{r},t)$ se denominan estados estacionarios.
- La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es el análogo mecano-cuántico de la segunda ley de Newton aunque sin el determinismo de esta última debido al principio de incertidumbre de Heisenberg.

La función de onda y su interpretación

Ilustraremos la interpretación de la función de onda con el sistema más simple, se trata de una partícula de masa m que se mueve libremente (sin potencial externo o constante) en una dimensión. En este caso sólo tenemos energía cinética $E = T = p_x^2/2m$. Buscamos soluciones del tipo $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$ ya que el potencial no depende del tiempo.

- Tenemos que obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger para estados estacionarios

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

- para ello definimos la constante $k^2 = 2mE/\hbar^2$ de forma que la ecuación de Schrödinger se puede escribir:

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

- que es una ecuación diferencial homogénea de segundo orden y con coeficiente constante con solución:
  $\psi(x) = A\cos(kx) + B\mathrm{sen}(kx)$
  que se puede escribir usando Euler:

- $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\mathrm{sen}\theta$, como:
  $\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$
  donde C y D son constantes que dependen de las condiciones iniciales

- De la expresión de la energía y de k^2 obtenemos: $p_x = +k\hbar$ o $p_x = -k\hbar$ para las soluciones con $D = 0$ y $C = 0$, respectivamente. Esto significa que con $D = 0$, la solución $\psi(x) = Ce^{ikx}$ corresponde a una partícula moviéndose en x positivo, mientras que $C = 0$, la solución $\psi(x) = De^{-ikx}$ es cuando la partícula se mueve en x negativo.

- La energía de una partícula libre **no** está cuantizada y tenemos un espectro continuo de valores de E.

- Max Born (1926) postuló que $|\Psi(x,t)|^2$ representa **la densidad de probabilidad** de encontrar a la partícula en un lugar del espacio.