Tema 2: Resumen

Ecuación de Schördinger y función de ondas. La magnitud que describe el comportamiento ondulatorio de una partícula de masa m es una función compleja unievaluada $\Psi(\mathbf{x},t)$ que depende de la pocisición $\mathbf{x}$ y del tiempo t. Se le conoce con el nombre de función de ondas. La ecuación que satisface es la ecuación de Schrödinger

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t}(\mathbf{x},t) = -\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\Psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x})\,\Psi(\mathbf{x},t)\,,$$

donde $V(\mathbf{x})$ es la energía potencial de la partícula.

Que la función de ondas describe el comportamiento ondulatorio de la partícula y que satisface la ecuación anterior no se sigue de ningún resultado ni hipótesis clásicos. Se llega a ello usando argumentos de plausibilidad y exigiendo consistencia con la hipótesis de de Broglie. Schrödinger usó la formulación de Hamilton-Jacobi de la Mecácnica clásica para encontrar dichos argumentos y postular su ecuación.

Interpretación probabilística de la función de ondas. La probabilidad de encontrar la partícula en un volumen elemental d^3x en torno al punto $\mathbf{x}$ en un tiempo t es

$$\mathrm{Prob}\,(\mathbf{x},t;d^3x) = \big|\Psi(\mathbf{x},t)\big|^2\,d^3x\,. \tag{1}$$

Para que esta interpretación tenga sentido, la probabilidad de encontrar la partícula en el espacio asequible a la misma debe ser 1, es decir debe verificarse que

$$1 = \int d^3x\ \mathrm{Prob}\,(\mathbf{x},t;d^3x) = \int d^3x\ |\Psi(\mathbf{x},t)|^2\,.$$

Ahora bien, puede ocurrir que

$$\|\Psi\|^2 := \int d^3x\ |\Psi(\mathbf{x},t)|^2 = C \geq 0$$

sea distinta de 1. En este caso, en lugar de Ψ se considera la función de ondas

$$\tilde{\Psi} = \frac{e^{\mathrm{i}\theta}}{\sqrt{C}}\,\Psi \quad \text{con } \theta \text{ real arbitrario}\,. \tag{2}$$

Nótese que, si $\Psi(\mathbf{x},t)$ es solución de la ecuación de Schrödinger, $N\Psi(\mathbf{x},t)$, con N cualquier constante compleja, también lo es. Por tanto, $\tilde{\Psi}$ en (2) satisface la ecuación de Schrödinger y cumple que $\|\tilde{\Psi}\|^2 := 1$.

Ecuación de continuidad. La densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{x},t)|^2$ satisface la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}\ |\Psi|^2 = \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}\,,$$

donde

$$\mathbf{J} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right)$$

es la corriente de probabilidad.

Paquetes de ondas. Son soluciones a la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \int d^3k\,\phi(\mathbf{k})\ e^{\mathrm{i}(\mathbf{kx}-\omega_{\mathbf{k}}t)}\,,\qquad \omega_k = \text{función de }\mathbf{k}\text{, distinta para cada } V(\mathbf{x})\,.$$

Describen combinaciones lineales "continuas" de ondas planas $e^{\mathrm{i}(\mathbf{kx}-\omega_{\mathbf{k}}t)}$, cada una de ellas con amplitud $\Phi(\mathbf{k})$. Se tiene que

$$\|\Psi\|^2 = (2\pi)^3\int d^3k\ |\phi(\mathbf{k})|^2\,.$$

Para la **partícula libre**,

$$V(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{y} \quad \omega_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar k^2}{2m}\,.$$

El **paquete de ondas gaussiano en una dimensión** corresponde a tomar

$$\phi(k) = e^{-\alpha^2(k-k_0)^2}\,,\qquad [\alpha] = L\,.$$

Tras normalizar y efectuar la integral sobre dk se obtiene

$$\Psi(x,t) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\alpha\,\sigma(t)}\right]^{1/2}\exp\left[\mathrm{i}\left(k_0x - \frac{\hbar k_0^2}{2m}\,t\right)\right]\ \exp\left[-\frac{(x-v_0t)^2}{4\alpha^2\sigma(t)}\right].$$

donde

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m}\,,\qquad \sigma(t) := 1 + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m\alpha^2}\,.$$

La densidad de probabilidad resultante es

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\alpha\,|\sigma(t)|}\ \exp\left[-\frac{(x-v_0t)^2}{2\,\alpha^2\,|\sigma(t)|^2}\right],$$

con

$$|\sigma(t)| = \sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^4}}\,.$$

Esta $\rho(x,t)$ es la densidad de probabilidad de una distribución gaussiana con media v_0t y variancia $\alpha|\sigma(t)|$.

Indeterminación en la posición. La idea de localización exacta de una partícula en el espacio carece de sentido. Surge así la idea del valor esperado $\langle x \rangle$, o valor medio, para la posición de la partícula, y la de su incertidumbre Δx. En una dimension, el primero se define como

$$\langle x \rangle := \frac{1}{\|\Psi\|^2} \int dx \; |\Psi(x,t)|^2 \, x \,,$$

y la segunda como la variancia

$$\Delta x = \sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \,,$$

donde

$$\langle x^2 \rangle := \frac{1}{\|\Psi\|^2} \int dx \; |\Psi(x,t)|^2 \, x^2$$

es el valor esperado del cuadrado de la posición. Para funciones de onda normalizadas, $\|\Psi\|^2 = 1$.