

## ELEMENTOS DE MECÁNICA CUÁNTICA (No relativista)

[1.INTRODUCCION:](#)

[2.FUNCION DE ONDA Y SUPERPOSICION](#)

[3.MEDICION E INDETERMINISMO](#)

[4.OPERADORES DE ONDA](#)

[5.ECUACIONES DE ONDA](#)

[6.INTEGRACION DE LAS ECUACIONES DE ONDA](#)

### **1.Introducción:**

La Mecánica Cuántica No Relativista tiene como principales hipótesis definidoras la *cuantización de la partícula material mínima* y el *valor infinito* para la velocidad máxima de propagación de las interacciones.

La primera hipótesis, la cuantización, elimina el determinismo propio de la mecánica clásica. La mecánica cuántica es indeterminista, y la indeterminación se manifiesta esencialmente en la ausencia de trayectoria definida para una partícula sometida a interacciones externas.

La hipótesis cuántica es, pues, la hipótesis que afirma que la cantidad mínima de materia está cuantificada; que existe una partícula material mínima, no siendo posible una porción menor. Toda partícula material, por muy pequeña que fuere, ocupa siempre más de un punto-instante del espacio-tiempo.

Esta hipótesis granular implica que existan valores prohibidos para las medidas cuantitativas de las distribuciones de materia, pues al no existir realmente una fracción de partícula material (ya que está cuantizada) la medida total de la distribución ha de ser múltiplo del cuanto mínimo. Existen, pues, valores prohibidos para la medida de las distribuciones materiales, y, en consecuencia, para la medida de sus magnitudes teóricas (energía, impulso, etc.). Habrá de existir el cuanto mínimo de energía, de impulso, etc., y sus valores para un sistema habrán de ser múltiplos de ese cuanto mínimo.

La cuantización de la materia hace impensable, además, el concepto de trayectoria, que es, por definición, una continuación infinita de punto-instantes del espacio-tiempo. Su existencia está de acuerdo con la hipótesis clásica, pero no con la cuántica. Para una partícula no existirá, pues, trayectoria, en la mecánica cuántica. Por tanto, no se podrá hablar aquí de ecuaciones del movimiento.

Es inmediato que la existencia simultánea de las coordenadas y velocidades generalizadas de una partícula permitirían construir sus ecuaciones de movimiento. Por esto, la no existencia en la mecánica cuántica de trayectoria, ni de estas ecuaciones, hace preciso admitir que las coordenadas y velocidades de una partícula no pueden ser conocidas simultáneamente, a fin de no contradecir la hipótesis cuántica. Este hecho representa también, resumidamente expuesto, el indeterminismo que la cuantización supone en la

construcción de la mecánica.

Al no existir trayectoria, la posición de una partícula en un determinado instante no podrá conocerse exactamente, como ocurría en el caso de la hipótesis clásica. En esta mecánica, sólo aproximadamente se determinará la tal posición, teniéndose que recurrir para ello al concepto de probabilidad.

Pero, aunque no existe la trayectoria, es inmediato que toda partícula tiene energía, momento, posición, etc. Esto es, en la mecánica cuántica toda partícula, o sistema de partículas, ha de poseer unas magnitudes teóricas propias (energía, momento, posición, etc.) cuya expresión matemática mecanocuántica coincidirá con la expresión mecanoclásica en cuanto la hipótesis cuántica sea sustituida por la hipótesis continuista o clásica.

La hipótesis cuántica, establecida en la primera mitad del siglo XX con el objeto de construir una mecánica teórica que fuera capaz de explicar con éxito los descubrimientos que la física de la estructura atómica de la materia había hecho recientemente (descubrimientos de Max Planck, del átomo estable de Rutherford, etc.) se desarrolló en una primera formulación (año 1925) por obra de Erwin Schrödinger y Louis de Broglie. La formulación de Schrödinger-De Broglie fue llamada *Formulación Ondulatoria de la Mecánica*. Asignando a cada partícula una función de onda  $\Psi(q)$ , sería posible describir fenomenológicamente la evolución de la materia.

La mecánica cuántica necesita, para su fundamentación, de la mecánica clásica. Se pretendería definir las magnitudes de la nueva mecánica de modo que al particularizar al continuismo se obtengan las expresiones mecanoclásicas de estas magnitudes. Las definiciones se hacen probabilísticamente, mediante la introducción de una función  $\Psi(q)$  tal que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q)|^2 \cdot dq = 1$$

$$\int_{-\infty}^q |\Psi(q)|^2 \cdot dq = P[q]$$

Siendo  $P[q]$  la probabilidad de localización de la partícula en una determinada región del espacio-tiempo. Llamando  $h$  al cuanto material mínimo, se obtiene en forma sencilla la llamada ecuación de Schrödinger, cuya importancia es comparable a la ecuación de Hamilton-Jacobi mecanoclásica:

$$\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi(q) + (E - U) \cdot \Psi(q) = 0$$

$$\left( \hbar = \frac{h}{2\pi} \right)$$

donde es  $E$ ,  $U$ : energías,  $m$ : masa,  $h$ : constante de Planck

En 1926 se formuló matricialmente la mecánica cuántica no relativista, haciendo desempeñar a matrices de operadores el papel que en la formulación de Schrödinger-De Broglie tenían las funciones de onda. Ésta es la formulación de Heisenberg-Jordan, de la cuál fue comprobada su equivalencia con la anterior formulación, del mismo modo que en la mecánica clásica resultaron equivalentes las formulaciones de Newton, Lagrange y Hamilton. Las representaciones ondulatoria y matricial resultaron ser, pues, equivalentes.

La mecánica cuántica no relativista era considerada ya en la década de los años 50, un cuerpo cerrado de doctrina. Es decir, que todas las consecuencias lógicas de los postulados definitorios de esta mecánica son capaces de explicar las experiencias físicas que se han realizado en los primeros años del siglo XX en la estructura atómica de la materia.

Pero la otra mecánica cuántica, la mecánica cuántica relativista, esto es, la mecánica cuántica en la que la velocidad máxima de propagación de las interacciones no se considera infinita, sino que coincide con la velocidad de la luz, se considera aún hoy, en los años finales del siglo XX, todavía incompleta. Aún existen hechos físicos en el campo de las partículas subatómicas (elementales) a los que las consecuencias de esta mecánica no han logrado explicar de forma satisfactoria.

## [PRINCIPIO]

### **2.Función de onda y superposición:**

Sea una partícula  $p$ , de coordenadas  $q(t)$ , en movimiento cualquiera por el espacio-tiempo  $M_4$ . Sea  $P_v[q]$  la probabilidad de que en un instante dado,  $t$ , la partícula  $p$  se encuentre situada en el volúmen  $v = \int dx dy dz$ .

Sea, asimismo,

$$|\Psi(q)|^2$$

La densidad volumétrica de probabilidad, o sea:

$$|\Psi(q)|^2 = \frac{d}{dv} P[q]$$

Es decir,

$$P_v[q] = |\Psi(q)|^2 \cdot dv$$

O bien,

$$P_v[q] = \int_v |\Psi(q)|^2 \cdot dv$$

Y cuando v es todo el espacio  $M_3$ , la probabilidad es segura:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q)|^2 \cdot dq = 1$$

Así, pues, en definitiva,

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{M_3}[q] = \int_v |\Psi(q)|^2 \cdot dv \\ 1 = \int_{M_3} |\Psi(q)|^2 \cdot dv \end{array} \right\}$$

Sea S una función real definida de  $M_3$  en  $R$ :

$$S: M_3 \rightarrow R$$

con la condición de que en una variación virtual de las coordenadas de la partícula P, esta función S tome su valor mínimo:

$$\delta S = 0$$

Llamaremos *Acción de la partícula P* a la función S.

La función compleja

$$\Psi(q) = |\Psi(q)| \cdot e^{i \frac{S}{\hbar}}$$

Se denominará en adelante **función de onda** de la partícula P, y las relaciones anteriores se pueden expresar así:

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{M_3}[q] = \int_v \Psi(q) \cdot \Psi^*(q) \cdot dv \\ 1 = \int_{M_3} \Psi(q) \cdot \Psi^*(q) \cdot dv \end{array} \right\}$$

En cada estado k de la evolución mecánica de la partícula p existirá una función  $\Psi_k(q)$  que describe tal estado:

$$\Psi_k(q) = |\Psi_k(q)| \cdot e^{i \frac{S_k}{\hbar}}$$

Suponiendo que en el estado caracterizado por la función de onda  $\psi_1(q)$  se efectúa una medición que conduce con certeza al resultado  $\{1\}$ , y que al hacerlo en el estado caracterizado por  $\psi_2(q)$  conduce al resultado  $\{2\}$ , se admite, entonces, como principio, llamado *Principio de Superposición de Estados*, que toda combinación lineal de las funciones  $\psi_1(q)$  y  $\psi_2(q)$ , esto es, toda función de la forma:

$$\psi(q) = c_1 \cdot \psi_1(q) + c_2 \cdot \psi_2(q), \text{ siendo } c_1, c_2, \text{ constantes reales}$$

representa un estado en el que la misma medición puede conducir al resultado  $\{1\}$  o al resultado  $\{2\}$ .

Además, si se conoce la dependencia temporal de las funciones  $\psi_1$  y  $\psi_2$  respecto del tiempo, o sea,  $\psi_1(q,t)$  y  $\psi_2(q,t)$ , la función

$$\psi(q,t) = c_1 \cdot \psi_1(q,t) + c_2 \cdot \psi_2(q,t), \text{ siendo } c_1, c_2, \text{ constantes reales}$$

conduce a un estado en el que la misma medición puede dar la dependencia temporal del estado  $\{1\}$  o del estado  $\{2\}$ .

Del principio de superposición se sigue inmediatamente que todas las ecuaciones a las cuales satisfacen las funciones de onda deben ser lineales respecto de  $\psi(q)$ .

Consideremos un sistema constituido por dos partes, (a) y (b), y supongamos que su estado se da en forma tal que cada una de las partes viene descrita de manera completa. Cabe afirmar, entonces, que las probabilidades de las coordenadas  $q_1$  de la parte (a) son independientes de las probabilidades de las coordenadas  $q_2$  de la parte (b) y, por ello, la distribución de probabilidades para el sistema como un todo debe ser igual al producto de las probabilidades correspondientes a cada una de sus partes. Esto significa que la función de onda  $\psi_{ab}(q_a, q_b)$  del sistema total se puede representar como un producto de las funciones de onda  $\psi_a(q_a)$  y  $\psi_b(q_b)$  de sus partes.

$$\psi_{ab}(q_a, q_b) = \psi_a(q_a) \psi_b(q_b)$$

Si ambas partes se encuentran en interacción mutua, esta relación entre la función de onda del sistema global y las funciones de onda de sus partes se conserva también en cualquier instante futuro:

$$\psi_{ab}(q_a, q_b, t) = \psi_a(q_a, t) \psi_b(q_b, t)$$

[PRINCIPIO]

### **3. Medición e indeterminismo:**

La cuantificación de la materia, es decir, el hecho de que toda partícula material sea múltiplo de una partícula mínima implica que una partícula material mínima no ocupa un solo punto del espacio tridimensional, sino un volumen  $v = \int dx dy dz$  y, por consiguiente, su movimiento no tiene lugar ocupando una sucesión continua de puntos en el espacio tridimensional, o sea, su movimiento no tiene una trayectoria.

El que una partícula no tenga una trayectoria determinada le priva también, al mismo tiempo, de cualesquiera otras características dinámicas relacionadas con ella. Es claro, por tanto, que para un sistema constituido únicamente por partículas mínimas sería imposible construir una mecánica lógicamente cerrada. La posibilidad de una descripción cuantitativa del movimiento de una partícula exige la existencia de sistemas que interaccionen con la minipartícula. Se llaman *aparatos* a estos sistemas que se utilizan como referencia en el estudio de la partícula. El proceso de interacción entre una partícula y un aparato es lo que se denomina *medición*.

Si una partícula sufre una medición, o sea, si interactúa con un aparato, el estado de tal partícula cambia en general. El carácter y la magnitud de este cambio dependen del estado de la partícula y pueden, por consiguiente, servir para caracterizarla cuantitativamente.

El proceso de medición posee, pues, una peculiaridad muy importante: ejerce siempre una acción sobre la partícula a la que se aplica, y esta acción no se puede hacer por principio tan débil cuanto se quiera para una precisión dada de la medición. Cuanto más precisa es esta, tanto más intensa es la acción que ha de ejercerse, y tan solo en las mediciones de precisión muy pequeña puede conseguirse que la acción sobre la partícula sea débil. Esta propiedad de las mediciones está lógicamente ligada al hecho de que las características dinámicas de la partícula se manifiestan precisamente como resultado de la propia medición. Si el proceso de medición se pudiera debilitar cuanto se quisiera manteniendo la precisión de la cantidad medida, ello significaría que tal cantidad medida es independiente del cambio de estado que sufre la partícula en el proceso de medición.

Esta circunstancia impide que esta mecánica se pueda desarrollar sobre la teoría de las ecuaciones de movimiento de una partícula, es decir, sobre relaciones de la forma

$$f(x, x', x'', t) = 0$$

como sí ocurría en la mecánica clásica. El único ente matemático a utilizar ahora es la función de onda de la partícula.

Es preciso, pues, definir las magnitudes dinámicas mediante operaciones a realizar sobre la función de onda, de modo que estas magnitudes coincidan con las magnitudes homólogas de la mecánica clásica al realizar la aproximación correspondiente en el paso del caso cuántico al caso clásico.

Llamaremos *operadores de onda* a las funciones operacionales que se definan como operaciones a realizar sobre la función de onda.

## PRINCIPIO

### **4. Operadores de onda:**

Una partícula  $p$  pasa por diferentes estados en su evolución dinámica por el espacio tiempo, ya

que varía su acción,  $S$ , y, por consiguiente, su función de onda:

$$\Psi(q) = |\Psi(q)| e^{i\frac{S}{\hbar}}$$

Sea  $H$  un operador de onda. Se dice que el operador  $H$  es lineal sii:

$$H\left(\sum_{j=1}^k a_j \Psi_j(p)\right) = \sum_{j=1}^k a_j H\Psi_j(p)$$

Donde  $a_j \in \mathbb{R}$ , y siendo  $\Psi_j(p)$  la función de onda de la partícula  $p$  en el estado  $j$ .

$$L\Psi_n(p) = L_n\Psi_n(p)$$

Dado un operador lineal  $L$  que actúa sobre la función de onda  $\psi(p)$ , se llamarán *estados estacionarios* de la partícula  $p$  respecto del operador  $L$ , a aquellos estados  $n$  de la partícula  $p$  para los cuales la función de onda  $\psi(p)$  verifica una ecuación de autovalores:

También se pueden denominar *estados  $L$ -estacionarios* de la partícula  $p$ . Cada autovalor,  $L_n$ , representa el valor de una magnitud dinámica definida por el estado  $L$ -estacionario  $n$ .

Sabemos de la mecánica clásica que son ejemplos de magnitudes dinámicas las siguientes:

- a. La energía total  $E$ :

$$E = -\frac{\mathcal{B}}{\mathcal{A}}$$

- b. El impulso  $p$ :

$$\vec{p} = \vec{\nabla}S$$

- c. La energía cinética  $T$ :

$$T = \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2$$

- d. La energía potencial  $U$ :

$$U = -\frac{\mathcal{B}}{\mathcal{A}} - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2$$

A cuyos correspondientes operadores de onda, llamaremos:

- a. Para la energía total (operador hamiltoniano):

$$\hat{H}\Psi_n(p) = E_n\Psi_n(p)$$

b. Para el impulso (operador impulso):

$$\hat{p}\Psi_n(p) = \vec{p}_n\Psi_n(p)$$

c. Para la energía cinética (operador energía cinética):

$$\hat{T}\Psi_n(p) = t_n\Psi_n(p)$$

d. Para la energía potencial (operador energía potencial):

$$\hat{U}\Psi_n(p) = U_n\Psi_n(p)$$

Estas magnitudes dinámicas se han definido como operaciones a realizar sobre la función de acción, operaciones que se traducen, mediante su operador asociado, en operaciones sobre la función de onda.

Los operadores de onda pueden, asimismo, ser representados en función de los operadores elementales del análisis matemático, como son, por ejemplo, los siguientes:

$$\begin{aligned}(\Delta x)_{x_0} &= x - x_0 \\ \Delta f(x)_{x_0} &= f(x_0 + \Delta x) - f(x_0) \\ \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{A}} &= \lim_{\substack{x_1 \rightarrow x_0 \\ \Delta t \rightarrow 0}} \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \\ \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{A}_k} &= \lim_{\substack{x_1 \rightarrow x_0 \\ \Delta x_k \rightarrow 0}} \frac{f(x_k + \Delta x_k) - f(x_k)}{\Delta x_k} \\ \vec{\nabla} f &= \left( \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{A}_1}, \dots, \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{A}_4} \right) \\ \vec{\nabla}^2 f &= \sum_{i=1}^4 \left( \frac{\mathcal{F}}{\mathcal{A}_i} \right)^2 \\ \Delta f(x) &= \sum_{j=1}^4 \frac{\mathcal{F}(x)}{\mathcal{A}_j} dx_j\end{aligned}$$

Y se obtienen las expresiones siguientes:

a. Expresión para el operador hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \Psi(p) = |\Psi(p)\rangle e^{\frac{iS}{\hbar}} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \Psi(p)}{\partial p} &= \frac{\partial}{\partial p} (|\Psi(p)\rangle e^{\frac{iS}{\hbar}}) \quad \rightarrow \\ \rightarrow \quad \frac{\partial \Psi(p)}{\partial p} &= |\Psi(p)\rangle \cdot i \frac{\partial S}{\partial p} e^{\frac{iS}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial p} |\Psi(p)\rangle e^{\frac{iS}{\hbar}} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial p} \Psi(p) \end{aligned}$$

O sea:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(p)}{\partial p} = - \frac{\partial S}{\partial p} \Psi(p)$$

Por tanto:

$$\left. \begin{aligned} H\Psi(p) &= \hat{E}\Psi(p) \\ i\hbar \frac{\partial \Psi(p)}{\partial p} &= E\Psi(p) \end{aligned} \right\} \rightarrow \hat{H}\Psi(p) = i\hbar \frac{\partial \Psi(p)}{\partial p}$$

O sea:

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

b. Expresión para el operador impulso:

$$\begin{aligned} \Psi(p) = |\Psi(p)\rangle e^{\frac{iS}{\hbar}} \quad \rightarrow \quad \vec{\nabla}(\Psi(p)) &= \vec{\nabla}(|\Psi(p)\rangle e^{\frac{iS}{\hbar}}) \quad \rightarrow \\ \rightarrow \quad \vec{\nabla}\Psi(p) &= \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla}S |\Psi(p)\rangle e^{\frac{iS}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla}S \Psi(p) \quad \rightarrow \\ \rightarrow \quad -i\hbar \vec{\nabla}\Psi(p) &= \vec{\nabla}S \Psi(p) \quad \rightarrow \quad -i\hbar \vec{\nabla}\Psi(p) = \vec{p} \cdot \Psi(p) \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}\Psi(p) &= \vec{p}\Psi(p) \\ -i\hbar \vec{\nabla}\Psi(p) &= \vec{p}\Psi(p) \end{aligned} \right\} \rightarrow \hat{p}\Psi(p) = -i\hbar \vec{\nabla}\Psi(p)$$

O sea:

$$\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

c. Expresión para el operador energía cinética:

$$\begin{aligned} \Psi(p) = |\Psi(p)\rangle e^{i\frac{S}{\hbar}} \quad \dots \rightarrow T(\Psi(p)) = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 |\Psi(p)\rangle = \\ = \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla})^2 \Psi(p) = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(p) \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\left. \begin{aligned} \hat{T}\Psi(p) = T\Psi(p) \\ - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(p) = T\Psi(p) \end{aligned} \right\} \dots \rightarrow \hat{T}\Psi(p) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(p)$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2$$

d. Expresión para el operador energía potencial:

$$\begin{aligned} U = -\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{A}} - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2 \quad \dots \rightarrow U\Psi(p) = \left(-\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{A}} - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2\right) \Psi(p) = \\ = \left(-\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{A}}\right) \Psi(p) - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}S)^2 \Psi(p) = E \cdot \Psi(p) - T\Psi(p) = \\ = \hat{H}\Psi(p) - \hat{T}\Psi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}} \Psi(p) - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(p) \quad \dots \rightarrow \\ \dots \rightarrow U\Psi(p) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}} + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\right) \Psi(p) \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\left. \begin{aligned} U\Psi(p) = \hat{U}\Psi(p) \\ U\Psi(p) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}} + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\right) \Psi(p) \end{aligned} \right\} \dots \rightarrow \hat{U} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}} + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\right)$$

O sea

$$\hat{U} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathcal{A}} + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\right)$$

PRINCIPIO

**5.Ecuaciones de onda:**

Se llama *ecuación de onda* del operador  $L$  a la ecuación diferencial de autovalores de dicho operador cuando se expresa éste en función de los operadores diferenciales elementales.

Así, si es, pongamos por caso:

$$\hat{L} = \hat{L}\left(\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right)$$

Será la ecuación de onda la expresión siguiente:

$$\hat{L}\left(\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right)\Psi(p) - L\Psi(p) = 0$$

Son ejemplos de ecuaciones de onda:

- a. Ecuación de onda de la energía:

$$\hat{H}\Psi(p) = E\Psi(p) \quad \rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(p)}{\partial t} = E\Psi(p)$$

Por tanto:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(p)}{\partial t} - E\Psi(p) = 0$$

- b. Ecuación de onda del impulso:

$$\hat{p}\Psi(p) = \vec{p}\Psi(p) \quad \rightarrow \quad -i\hbar \vec{\nabla}\Psi(p) = \vec{p}\Psi(p)$$

Y se tiene, por tanto:

$$i\hbar \vec{\nabla}\Psi(p) + \vec{p}\Psi(p) = 0$$

- c. Ecuación de onda de la energía cinética:

$$\begin{aligned} \hat{T}\Psi(p) &= T\Psi(p) \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\Psi(p) = T\Psi(p) \quad \rightarrow \\ &\rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\Psi(p) = (E - U)\Psi(p) \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\Psi(p) + (E - U)\Psi(p) = 0$$

(Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo)

d. Ecuación de onda de la energía potencial:

$$\hat{U}\Psi(\mathbf{p}) = U\Psi(\mathbf{p}) \rightarrow \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \Psi(\mathbf{p}) = U\Psi(\mathbf{p}) \rightarrow$$

$$\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{p}) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{p}) = U\Psi(\mathbf{p})$$

Y se obtiene, por tanto, la ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{p}) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{p}) - U\Psi(\mathbf{p}) = 0$$

(Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo)

PRINCIPIO

**6.Integración de las ecuaciones de onda:**

La integración de una ecuación de onda de la forma

$$\hat{L}\left(\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right)\Psi(\mathbf{p}) - L\Psi(\mathbf{p}) = 0$$

es un problema de integración de ecuaciones diferenciales.

Se trata de determinar la expresión de la función de onda

$$\Psi(\mathbf{q}) = |\Psi(\mathbf{q})| e^{i\frac{S}{\hbar}}$$

en los estados L-estacionarios, así como los valores de la magnitud mecánica L asociada al operador de onda  $\hat{L}$ , en cada uno de dichos estados.

Así, por ejemplo:

a. De la ecuación de onda de la energía

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{p})}{\partial t} - E\Psi(\mathbf{p}) = 0$$

se pueden obtener los valores  $\Psi_1(\mathbf{p}), \Psi_2(\mathbf{p}), \dots, \Psi_n(\mathbf{p})$  y los valores  $E_1, E_2, \dots, E_n$ .

b. De la ecuación de onda del impulso

$$i\hbar \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{p}) + \vec{p} \Psi(\mathbf{p}) = 0$$

se pueden obtener los valores  $\psi_1(\mathbf{p}), \psi_2(\mathbf{p}), \dots, \psi_n(\mathbf{p})$  y los valores  $p_1, p_2, \dots, p_n$ .

c. De la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{p}) + (E - U) \Psi(\mathbf{p}) = 0$$

se pueden obtener los valores  $\psi_1(\mathbf{p}), \psi_2(\mathbf{p}), \dots, \psi_n(\mathbf{p})$  y los valores  $E_1 - U_1, E_2 - U_2, \dots, E_n - U_n$ .

d) De la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

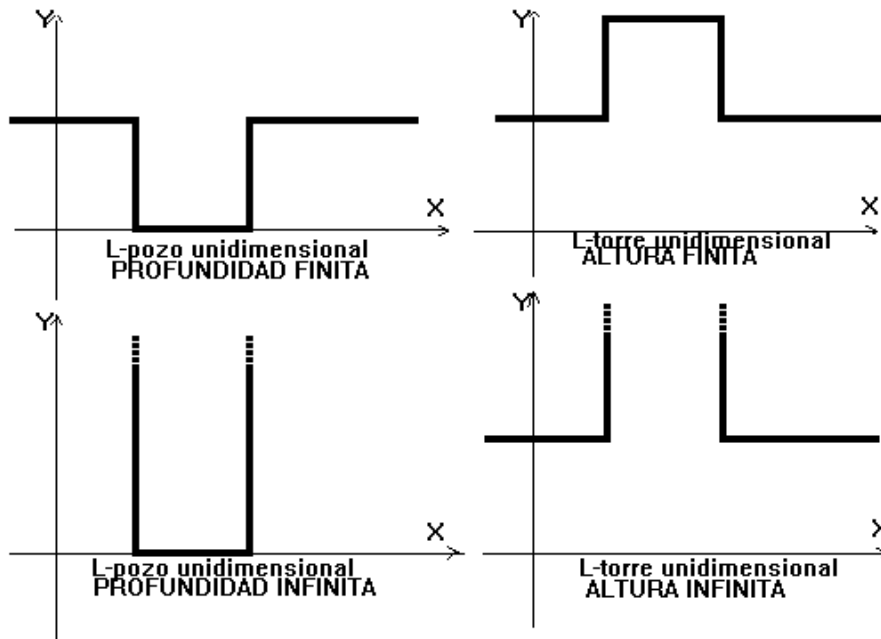
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{p}) + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(\mathbf{p}) - U \Psi(\mathbf{p}) = 0$$

se pueden obtener los valores  $\psi_1(\mathbf{p}), \psi_2(\mathbf{p}), \dots, \psi_n(\mathbf{p})$  y los valores  $U_1, U_2, \dots, U_n$ .

Para poder realizar la integración es preciso saber las condiciones en las que se desarrolla la existencia física de la partícula. Estas condiciones se traducen en condiciones de contorno para la ecuación diferencial en cada caso concreto.

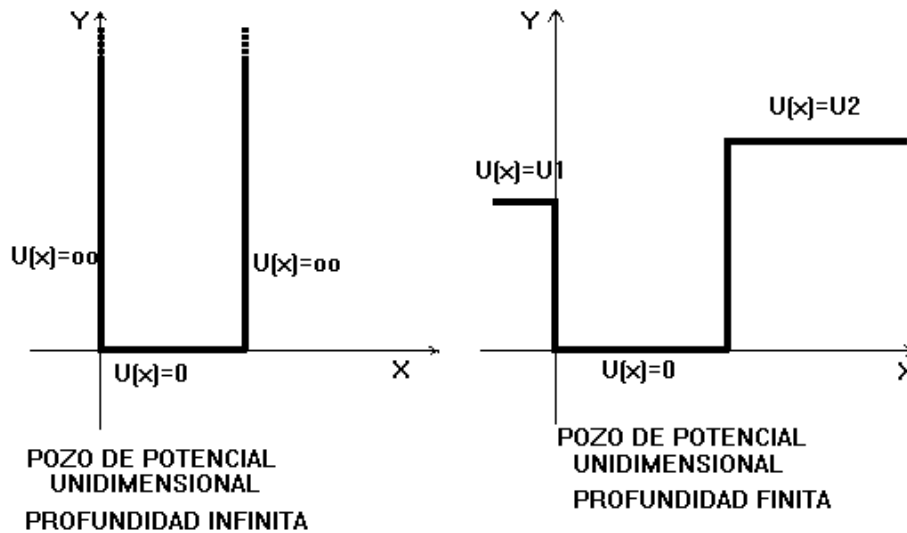
Una región del espacio tiempo  $M_4$ , en donde se mantenga invariante la magnitud  $L$  se dirá que es una  $L$ -región. Si  $L$  es superior en un entorno de la región se dice que ésta es un  $L$ -pozo, caso contrario, una  $L$ -torre.

Si las condiciones de  $L$ -pozo o  $L$ -torre dependen de una sola dimensión, se dirá que son  $L$ -pozo unidimensional u  $L$ -torre unidimensional, respectivamente. Una  $L$ -torre de altura infinita, o un  $L$ -pozo de profundidad infinita, son aquellos casos de  $L$ -torre u  $L$ -pozo en los que la diferencia entre el interior y el entorno dado tiende a hacerse infinita.



Podemos considerar L-torres u L-pozos relativos a cualesquiera de las magnitudes mecanocuánticas (energía total, energía cinética, impulso, energía potencial). Se define así el concepto de *torre de energía*, de *torre cinética*, *torre de impulso*, *torre de potencial*, o bien, de *pozo de energía*, *pozo de impulso*, *pozo de potencial*.

Veamos un ejemplo de integración de la ecuación de onda en un pozo de potencial infinito, unidimensional:



Ejemplo:

Sea una micropartícula en un pozo de potencial unidimensional de profundidad infinita:

Partiendo de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi(\rho) + (E - U) \Psi(\rho) = 0$$

Se tiene, al hacer  $y = z = 0$ :

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

Y siendo en los bordes, paredes  $x = 0$  y  $x = a$ ,  $\psi(0) = 0$ ,  $\psi(a) = 0$ , y en todo el fondo del pozo es  $U(x) = 0$ , se tiene:

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

Si llamamos ahora:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Queda una ecuación diferencial sencilla:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + k^2 \Psi = 0$$

Cuyas soluciones son:

$$\psi(x) = A \cdot \text{sen } kx + B \cdot \text{cos } kx$$

y, al aplicar las condiciones de contorno:

$$\psi(0) = 0 \rightarrow \psi(0) = A \cdot \text{sen } 0 + B \cdot \text{cos } 0 = 0 \rightarrow 0 + B \cdot 1 = 0 \rightarrow B = 0$$

con lo que resulta:

$$\psi(x) = A \cdot \text{sen } kx$$

$$\psi(a) = 0 \rightarrow \psi(a) = A \cdot \text{sen } ka = 0 \rightarrow ka = 0 + n \cdot \Pi, n \in \mathbb{N}$$

o sea:

$$k = n \Pi / a, n = 1, 2, \dots, \text{ y } \psi(x) = A \cdot \text{sen} \left( \frac{n \Pi}{a} \cdot x \right)$$

de lo cual resulta:

$$E_n = \frac{(n\pi)^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, n = 1, 2, \dots$$

así, pues, se obtienen valores para la energía y función de onda, en los estados  $\Psi$ -estacionarios:

$$E_0 = \frac{(0\pi)^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{0^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = 0 \text{ ----- } \Psi_0(x) = 0$$

$$E_1 = \frac{(1\pi)^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \text{ ----- } \Psi_1(x) = A \text{ sen}\left(\frac{\pi}{a} x\right)$$

.....  
 .....

$$E_n = \frac{(n\pi)^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \text{ ----- } \Psi_n(x) = A \text{ sen}\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

---oo0oo---

---

[Ir a página inicial-->MATEMATICA, FISICA, ASTRONOMIA](#)

---