SOBRE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER

Para la física cuántica no relativista, la ecuación básica a resolver es la ecuación de Schrö dinger. Al igual que las leyes de Newton, la ecuación de Schrödinger debe escribirse para una situación dada de una partícula cuántica que se mueve bajo la influencia de algunas fuerzas externas, aunque resulta más fácil enmarcar esto en términos de energías potenciales en lugar de fuerzas. Sin embargo, a diferencia de las leyes de Newton, la ecuación de Schrödinger no proporciona la trayectoria de una partícula, sino más bien la función de onda del sistema cuántico, que transporta información sobre la naturaleza de onda de la partícula, lo que nos permite solo discutir la probabilidad de encontrar la partícula en diferentes regiones del espacio en un momento dado en el tiempo.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial}\,\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\psi(x,t) \qquad (1)$$

La ecuación (1) se conoce como la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo o TDSE para abreviar. Esta es una ecuación diferencial lineal de segundo orden. El término en el lado izquierdo de la ecuación. (1) representa la energía total de la partícula. El primer término en el lado derecho representa la energía cinética de la partícula, mientras que el segundo término representa la energía potencial de la partícula. El TDSE tiene tres propiedades importantes:

1. El TDSE es consistente con la conservación de energía.

2. El TDSE es un valor lineal y singular, lo que implica que las soluciones se pueden construir mediante la superposición de dos o más soluciones independientes.

3. La solución de partículas libres (U (x) = 0) es consistente con una sola onda de De Broglie.

Si la energía potencial es independiente del tiempo, como hemos escrito anteriormente, podemos separar la ecuación. (1) en una forma independiente del tiempo usando la técnica matemática conocida como separación de variables. Aquí, suponemos que nuestra función de onda puede escribirse como producto de una función temporal y espacial

$$\psi\,(x, t) = \varphi\,(x)\,\chi\,(t) \qquad (2)$$

Sustituyendo la ecuación. (2) en el TDSE encontramos dos ecuaciones que deben ser iguales

$$i\,\hbar\,\partial\chi\,(t)/\partial t = E = \hbar\,\omega \qquad (3)$$

y

$$\left(-\frac{\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2} + U(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad (4)$$

La última ecuación, (4), se denomina ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o TISE para abreviar. Se puede ver que la solución de la ecuación (3) es una exponencial compleja oscilante:

$$\chi(t) = e^{-iEt/\hbar} = e^{-i\omega t}$$

Observamos otras tres propiedades de las soluciones de TISE.

1. Continuidad: Las soluciones al TISE φ (x) y su primera derivada φ ′ (x) deben ser continuas para todos los valores de x (este último es válido para el potencial finito U (x)).

2. Normalizable: las soluciones al TISE deben ser integrables al cuadrado, es decir, la integral del módulo al cuadrado de la función de onda en todo el espacio debe ser una constante finita para que la función de onda se pueda normalizar para dar $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$

3. Linealidad: debido a la linealidad del TISE, dadas dos soluciones independientes φ_1 (x) y φ_2 (x), podemos construir otras soluciones tomando una superposición apropiada de estas

$\varphi (x) = \alpha_1\varphi_1 (x) + \alpha_2\varphi_2 (x)$, donde $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$ para garantizar la normalización.

5.2 Probabilidad, normalisación, and valor esperado

Discutimos la interpretación de la función de onda según lo prescrito por Born. Allí notamos que el módulo al cuadrado de la función de onda da la densidad de probabilidad (probabilidad por unidad de longitud en una dimensión)

$$P(x)dx = |\varphi(x)|^2 dx| \qquad (5)$$

Esta interpretación nos ayuda a comprender la restricción de continuidad en la función de onda. No queremos que la probabilidad de que la partícula sea cero a un punto x y salta a un valor distinto de cero infinitamente cerca. (Nota: A veces decimos (imprecisamente) que | φ (x) | 2 es la probabilidad de encontrar la partícula en x. Sin embargo, uno debe tener cuidado de recordar la definición correcta.) De esta interpretación, vemos que podemos calcular el probabilidad de encontrar la partícula entre dos puntos x1 y x2 de la función de onda φ (x)

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x1}^{x2} \varphi(x)^2 \, dx \quad (6)$$

Relacionado con esto está el concepto de normalización de la función de onda. Requerimos que la partícula se encuentre en algún lugar del espacio y, por lo tanto, la probabilidad de encontrar la partícula entre −∞ y ∞ debe ser 1, es decir

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

Esto se conoce como la normalización de la función de onda y nos muestra cómo encontrar el factor de escala constante para soluciones de TISE.

Como ya no podemos hablar con certeza sobre la posición de la partícula, ya no podemos garantizar el resultado de una sola medición de cualquier cantidad física que dependa de la posición. Sin embargo, podemos calcular el resultado más probable para una sola medición (también conocido como el valor esperado), que es equivalente al resultado promedio para muchas mediciones. Por ejemplo, supongamos que deseamos determinar la ubicación esperada de una partícula midiendo su coordenada x. Realizando un gran número de mediciones, encontramos el valor x1 un cierto número de veces n1, x2 un número de veces n2, etc., y de la manera habitual, podemos calcular la posición promedio

$$\langle x \rangle = \frac{\sum n_i x_i}{\sum n_i} \qquad (8)$$

Aquí usamos la notación <x> para representar el valor promedio de la cantidad entre paréntesis. El número de veces que medimos n_i cada posición x_i es proporcional a la probabilidad P (xi) dx de encontrar la partícula en el intervalo dx en x_i. Haciendo esta sustitución y cambiando sumas a integrales, tenemos

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\, \varphi(x)^2 dx \qquad (9)$$

donde en el último paso asumimos que la función de onda está normalizada de modo que la integral en el denominador de la ecuación es igual a 1. El valor esperado de cualquier función de x se puede encontrar de manera similar, reemplazando x con f (x) en la ecuación.

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \varphi(x)^2 dx \qquad (10)$$

Se puede calcular la varianza en la posición de la partícula, denotada Δx^2, o la llamada desviación estándar:

$$\Delta x = \sqrt{\Delta x^2}$$

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \qquad (11)$$

Postulados de medición clásicos: dos postulados clave para mediciones clásicas que fallan para mediciones cuánticas implican los supuestos implícitos que

1. Realidad independiente: las mediciones revelan "elementos de realidad física" que existen independientemente de la observación. En otras palabras, las mediciones revelan información sobre las propiedades que posee una partícula, que existían antes de la medición, y simplemente ignoramos el valor de lo observable antes de realizar la medición. Por ejemplo, clásicamente diríamos que la medición de la posición de un electrón unido a un núcleo de hidrógeno simplemente nos dice dónde estaba el electrón antes de la medición.

2. Sin perturbaciones: se pueden realizar mediciones que no perturben el sistema. En física clásica, todo lo que se necesita para hacer esto es hacer que nuestra interacción de medición sea lo suficientemente débil para que no haya alteraciones del sistema.

Postulados de mediciones en Mecánica cuántica

1. Resultado de medición de valor único: cuando se realiza una medición correspondiente a un operador $\hat{A}$, el resultado es uno de los valores propios del operador, a_n.

2. Colapso de la función de onda: como resultado de una medición que produce un valor propio a_n, la función de onda "colapsa" en el estado propio correspondiente del operador de medición $\psi(x,t) \to \varphi_n(x)$

3. Probabilidad de resultado: la probabilidad de un resultado de medición particular es igual al módulo cuadrado de la superposición entre las funciones de onda antes y después de la medición. Por ejemplo, la probabilidad de obtener el resultado de medición an, correspondiente al estado propio φ_n (x) viene dada por

$$P_n = |\langle \varphi_n | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^{*(x)}\, \psi(x,t)\, dx \right|^2 \qquad (12)$$

Un corolario útil para el Postulado 3, nos da una receta para determinar los coeficientes de expansión de un estado arbitrario. Por ejemplo, consideremos un estado expandido en los estados propios de energía $\{\varphi_n (x)\}$, dado por

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \, \varphi_n e^{-i\omega n \, t} \qquad (13)$$

con coeficientes de expansión $\{c_n\}$. Aquí se ha incluido la dependencia del tiempo de los estados propios de energía dados por los factores de fase e $(-\, i\omega_n t)$ explícitamente. (Recuerde que ω_n = En / es la frecuencia angular asociada con el valor propio de energía En.) Al tomar la superposición del estado en la ecuación. (6.10) con uno de los estados propios de energía, digamos φm (x), encontramos

$$\langle \varphi_m | \psi(t=0) \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \varphi *_m (x) \, \psi(x,t=0) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{m.n} = c_m \qquad (14)$$

donde al pasar de la segunda a la tercera línea, usamos la ortonormalidad de los estados propios de energía. Entonces vemos que los coeficientes de expansión $\{c_n\}$ asociados con los estados propios de energía de un estado arbitrario están dados por la superposición del estado en t = 0 con los estados propios correspondientes $\{\varphi_n (x)\}$.

Interpretación de la medición cuántica.

Un desafío importante asociado con la hipótesis del colapso de la medición es que es un proceso fundamentalmente estocástico, el resultado de la medida real es completamente aleatorio e impredecible. Solo podemos decir con qué probabilidad esperamos obtener un resultado de medición particular. Otra dificultad radica en el colapso instantáneo de la función de onda en sí. Una vez que se conoce la función de onda, la ecuación de Schrödinger es completamente determinista al describir su evolución. No hay aleatoriedad asociada con la evolución del estado entre mediciones. Así, parece que hay dos tipos diferentes de evolución temporal en la mecánica cuántica: “evolución unitaria" bajo la acción de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y “colapso" asociado con la medición. Hay consecuencias de la hipótesis del colapso de la medición y esto afecta nuestra interpretación de la física cuántica.