De acuerdo con de Broglie, se tiene una onda asociada con las partículas microscópicas, cuya longitud de onda es:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

h = constante de Planck

p = momento lineal = mv

La onda asociada es la *función de onda* de la partícula.

La función de onda $\Psi(x, y, z, t)$ contiene toda la información acerca de las propiedades dinámicas. La ecuación que describe los estados estacionarios es:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

Es la llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

E = energía total del sistema

V(x) = potencial donde se mueve la partícula

La ecuación de una onda monocromática que se propaga en la dirección de x es:

$$y = y_0 \cos\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$

$$\frac{dy}{dx} = -y_o \frac{2\pi}{\lambda} sen\,(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x)$$

Y derivando con respecto a x:

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} y \ \text{, ó} \qquad \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} y = 0 \qquad (1)$$

Schrödinger demostró que la función de onda ψ es solución de una ecuación análoga:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = 0 \qquad (2)$$

La onda asociada ψ es la *función de onda* de la partícula

Reescribir ésta ecuación en función de la energía total y de la relación de de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Resp.

$$E = T + V = \frac{mv^2}{2} + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$= \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V \Rightarrow \frac{1}{\lambda^2} = \frac{2m(E-V)}{h^2} \quad ó \quad \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{8\pi^2 m(E-V)}{h^2}$$

Reemplazando en (2) obtenemos:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

La ecuación que describe los estados estacionarios es la llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (2.6)$$

que es la llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula. Así, dada una partícula que se mueve en un potencial V(x) que solo dependa de la posición y no dependa del tiempo (por ejemplo un potencial eléctrico o de cualquier tipo), su movimiento estará dado por la solución de la ecuación (2.6).

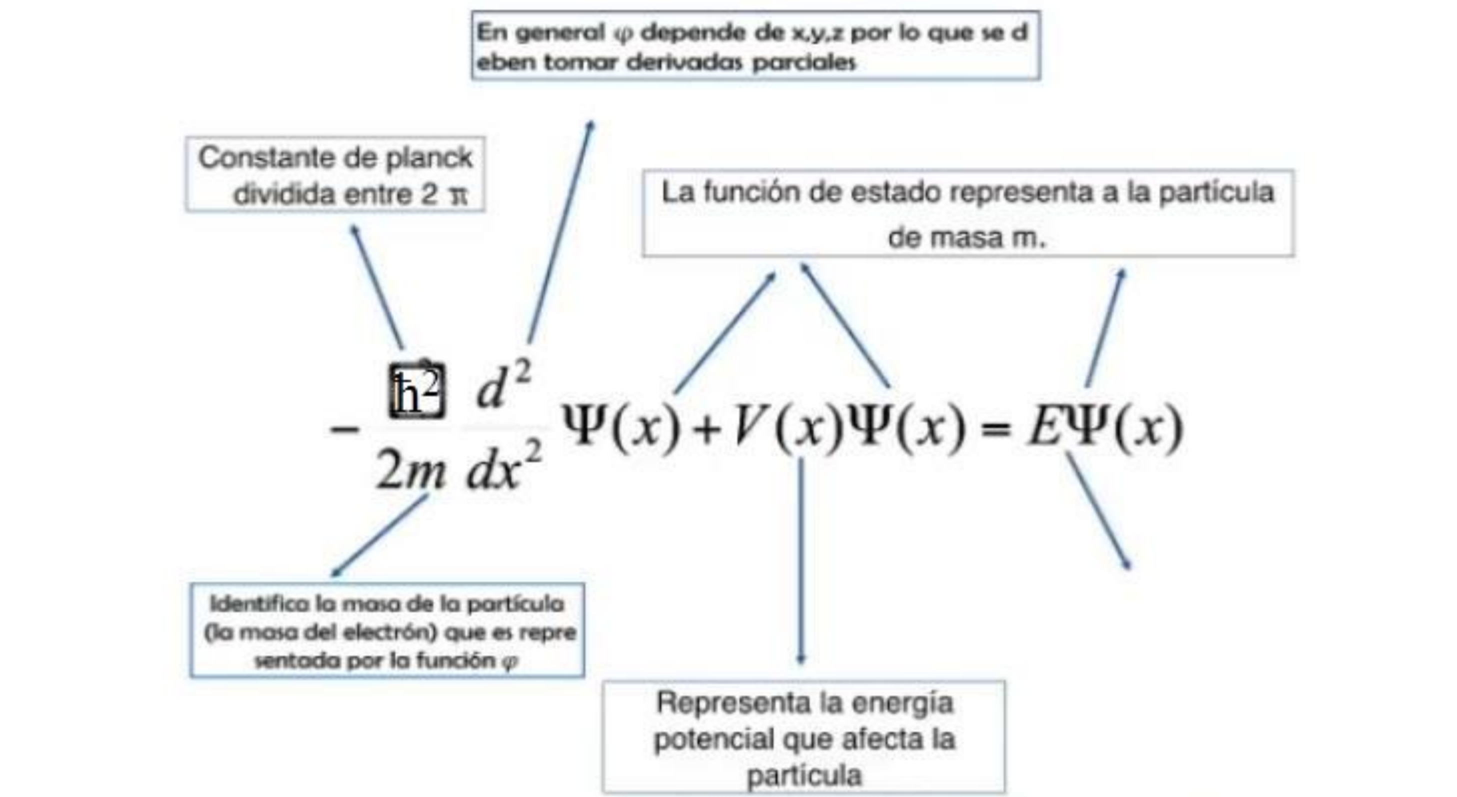
Una manera abreviada de escribir la ecuación (2.6) es por medio de un *operado*r, que es una operación ó conjunto de operaciones matemáticas que deben realizarse sobre una función determinada. Así, por ejemplo, hablamos del operador derivada, d/dx. Si se define al operador hamiltoniano como

$$H=-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x) \qquad (2.7)$$

entonces la ecuación (2.6) queda :

$$H\psi(x)=E\psi(x) \qquad (2.8)$$

Esta expresión condensada para la ecuación de Schrödinger, también es generalizada para el caso de tres dimensiones, pero en este caso el operador hamiltoniano involucra a las tres derivadas espaciales y el potencial también depende de las tres coordenadas espaciales.



$$T\,\Psi + V\,\Psi = E\,\Psi$$

$$H\,\Psi = E\,\Psi$$

2.3 Interpretación de ψ(x,y,z).

Born sugirió que ψ en un punto es una medida de la probabilidad de que la partícula esté en ese punto. O sea, dado que ψ es una función imaginaria, interpretó el producto de la función de onda y su conjugado, multiplicado por el elemento diferencial de volumen

$$\psi^*(r)\psi(r)dV = |\psi(r)|^2 dV \tag{2.9}$$

como la probabilidad que una partícula, como un electrón, se encuentre en un estado particular, descrito por la función de onda, en el lugar r y en el volumen de espacio dV.

De acuerdo con Born, el cuadrado $|\psi(r)|^2$ es una *densidad de probabilidad* (probabilidad por unidad de volumen) de que se pueda encontrar una partícula de materia en un estado particular de movimiento en una medición realizada en un experimento. Además, esta densidad de probabilidad debe de estar normalizada:

$$\int \psi(x)\psi^*(x)dx = 1 \tag{2.10}$$

De acuerdo con la interpretación de Born, las variables fundamentales de los elementos de la materia son estas funciones de probabilidad, que reemplazan a las variables de posición y velocidad de la mecánica clásica Newtoniana.

Probabilidad de hallar al electrón

Done

- La probabilidad de que un electrón esté en la región dx es:

$$P(x,t)dx = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = \Psi^* \Psi dx$$

que toma un valor real.

- Como el electrón debe estar en algún punto, la suma de las probabilidades en todos los valores posibles de x debe ser igual a 1.

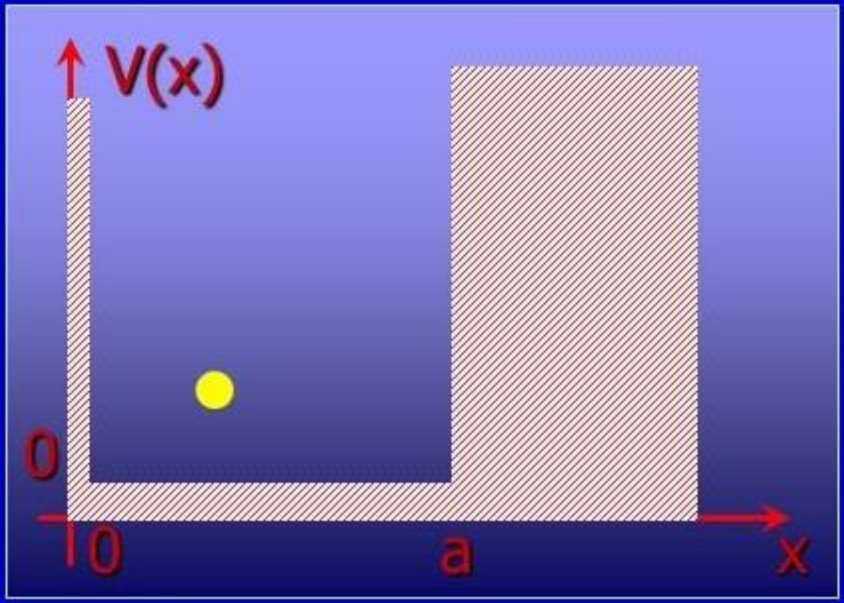
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = 1$$

Condición de normalización

Ejemplo de aplicación:

Partícula en una caja de potencial

- El problema siguiente que abordaremos es el de una partícula en una caja de potencial. ¿Qué quiere decir esto?



Lo que tenemos es un potencial que vale 0 entre los dos puntos inicial (x=0) y final (x=a), pero que en ellos y hacia los lados es infinito. De esa forma, la partícula queda confinada entre las "paredes" determinadas por el potencial.

2.4 Partícula en una Caja de Potencial.

En este caso el potencial está definido por:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & si \quad 0 < x < L \\ \infty, & si \quad x < 0 \quad \grave{o} \quad x > L \end{cases} \tag{2.12}$$

donde L es el ancho del potencial.

La ecuación de Schrödinger que hay que resolver es:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

La solución es:

$$\psi(x) = A\ sen\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}x\right) \tag{2.13}$$

por la condición de frontera $\psi(x=L) = 0$, tenemos que se debe cumplir:

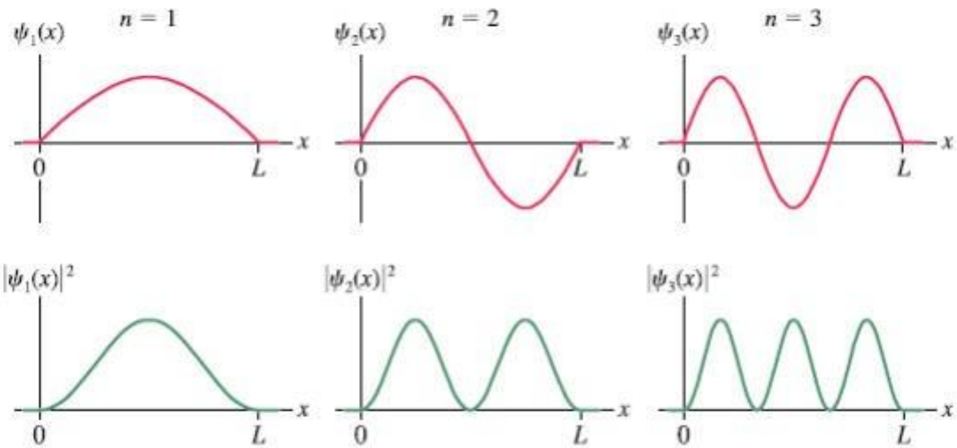
$$sen\left(\sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}x\right) = \text{sen}\ (n\pi) \qquad n=1,2,3...$$

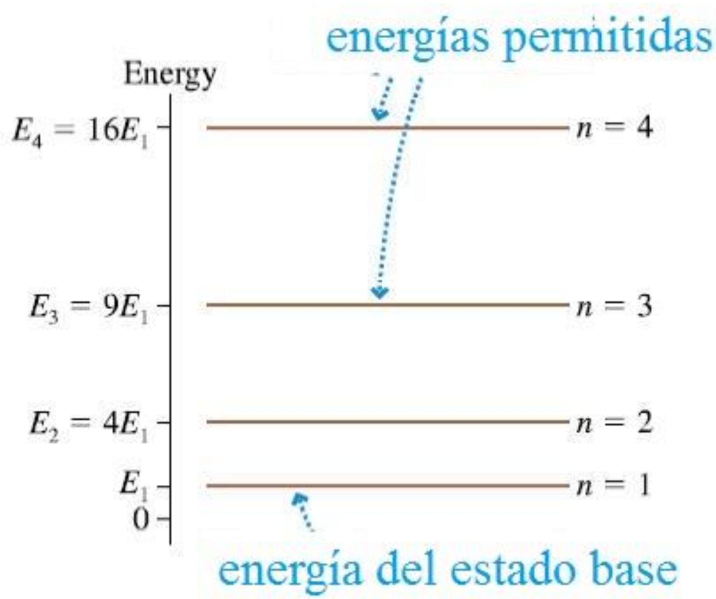
lo que nos lleva a la condición de cuantización de la energía dentro de la caja:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}, \tag{2.14}$$

La energía del nivel más bajo o estado base corresponde a n = 1 :

Función de onda y densidad de probabilidad





$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\frac{n\pi}{L}x & 0 \le x \le L \\ 0 & x \le 0,\ x \ge L \end{cases}$$

$$E_n = \left(\frac{hn}{L}\right)^2 \frac{1}{8m}$$