4 / 5 / 2020

Notas: Mecánica Cuántica

§ Introducción

. 2da Ley de Newton

$$\vec{F} = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

vs.

Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \overbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}}^{KE} + \underbrace{U(x,t)}_{PE}\,\Psi(x,t)$$

- Objetivo: encontrar $x(t)$

Con ello,

$$v(t) = \frac{dx}{dt} \qquad a(t) = \frac{d^2x}{dt^2}$$

$$KE = \frac{mv^2}{2} \qquad \vec{P} = m\vec{v} \quad \ldots$$

- Objetivo: encontrar $\Psi(x,t)$.

Con ello

$$\langle x \rangle = \int \Psi(x,t)\, x\, \Psi^*(x,t)\, dx$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi(x,t)\; i\hbar \frac{d}{dt} \Psi^*(x,t)\, dx$$

...

¿Qué es $\Psi(x,t)$? Llamada función de onda

- La cantidad $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t)\,\Psi^*(x,t)$ es proporcional a la probabilidad de que la partícula se encuentre dentro de un intervalo dx en torno a x.

$\Rightarrow$ La suma de probabilidades para todos los dx en todos los lugares debe ser 1.

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx = 1}$$

Condición de normalización

· $|\Psi(x,t)|^2$ se le llama función de distribución de probabilidad.

§ Partícula en una caja

Cuando $U(x,t)$ es independiente del tiempo

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

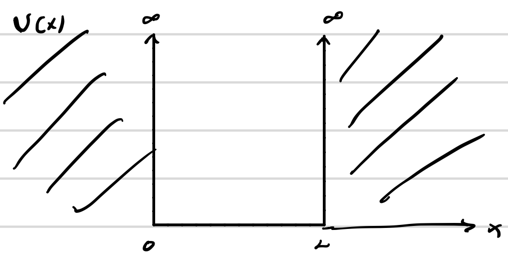
$$\rightarrow \begin{cases} \boxed{-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)} \\ \phi(t) = C e^{-iEt/\hbar} \end{cases}$$

Ec. de Schrödinger independiente del tiempo

$$\therefore \quad \Psi(x,t) = \psi(x)\cdot C e^{-iEt/\hbar}$$

Para una partícula en una caja,

$$U(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < x < L \\ \infty & ; \quad \text{para toda otra } x. \end{cases}$$



En esta región, $\psi(0) = 0$, $\psi(L) = 0$ y

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

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -k^2 \psi(x) \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

$$\psi(0) = 0 = A$$

Cuantización!

$$\psi(L) = 0 = B\sin(kL) \Rightarrow kL = n\pi$$

$$\Rightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

~. ~.

$$k_n^2 = \frac{n^2\pi^2}{L^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}} \qquad n = 1, 2, \ldots$$

- Energía cuantizada! E_n mecánica clásica esto no ocurre.

Por último,

$$\psi(x) = B \sin \frac{n\pi x}{L}$$

nueva normalización.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} B^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\therefore \quad \boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}}$$