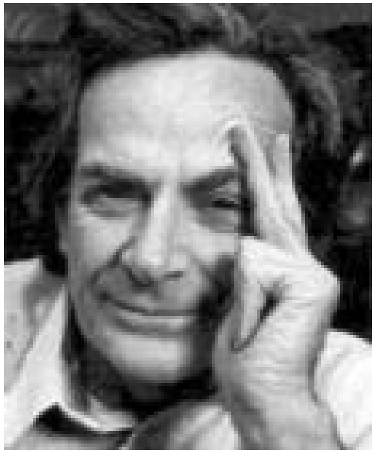
Introducción a la Mecánica Cuántica

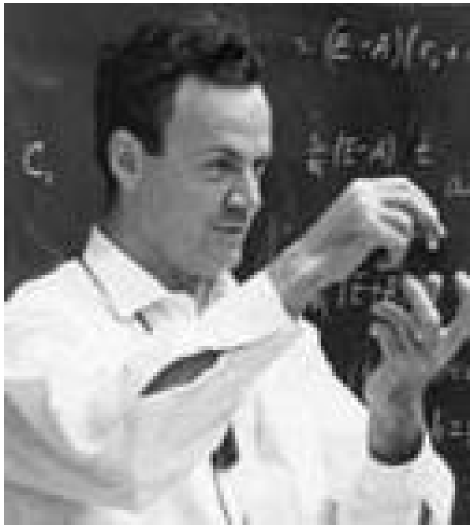
Características de la Mecánica Cuántica

No hay consenso general

Niels Bohr: “Si no está confundido por la física cuántica, entonces no la ha entendido”.



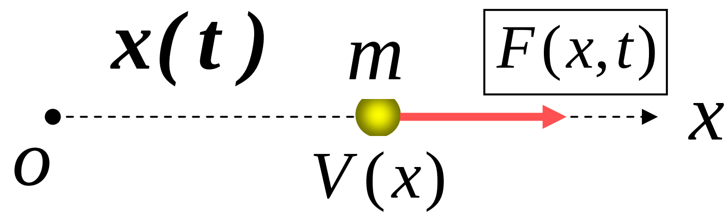
Richard Feynman: ”Creo que puedo decir con certeza que nadie entiende la mecánica cuántica”.



La Ecuación de Schrödinger

Mecánica Clásica ⇔ Mecánica Cuántica

(1) Mecánica Clásica:



$$\boxed{x(t)}$$

$$\Downarrow$$

$$v = \frac{dx}{dt} \Rightarrow p = mv$$

$$T = \frac{1}{2}mv^2$$

$$\Downarrow$$

$$a = \frac{dv}{dt} \Rightarrow \boxed{F = ma}$$

$$\boxed{x(t)}$$

$$\Uparrow$$

Condiciones Iniciales: $\Rightarrow$ $F = ma = \frac{d^2x}{dt^2}$

$$v(0) = v_0, x(0) = x_0$$

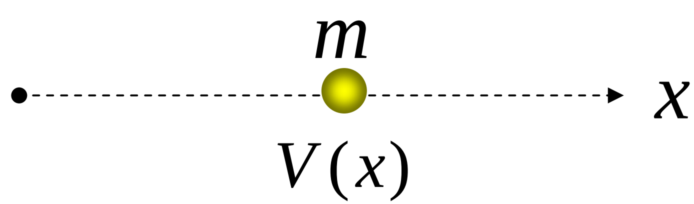
$$\Uparrow$$

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\Uparrow$$

$$V(x)$$

(2) Mecánica Cuántica



$x(t) \longrightarrow \Psi(x,t)$ **Función de Onda**

$$\boxed{F = ma} \longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi}$$

Ecuación de Schrödinger

$$\begin{matrix} x(0) \\ v(0) \end{matrix} \longrightarrow x(t) \qquad \Psi(x,0) \longrightarrow \Psi(x,t)$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34}\, J \cdot s$$

El Principio de Incertidumbre

La longitud de onda de Ψ se relaciona con el momento lineal de la partícula por la fórmula de de-Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

$$\sigma_x \sigma_P \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{Principio de Incertidumbre}$$

Interpretación Estadística

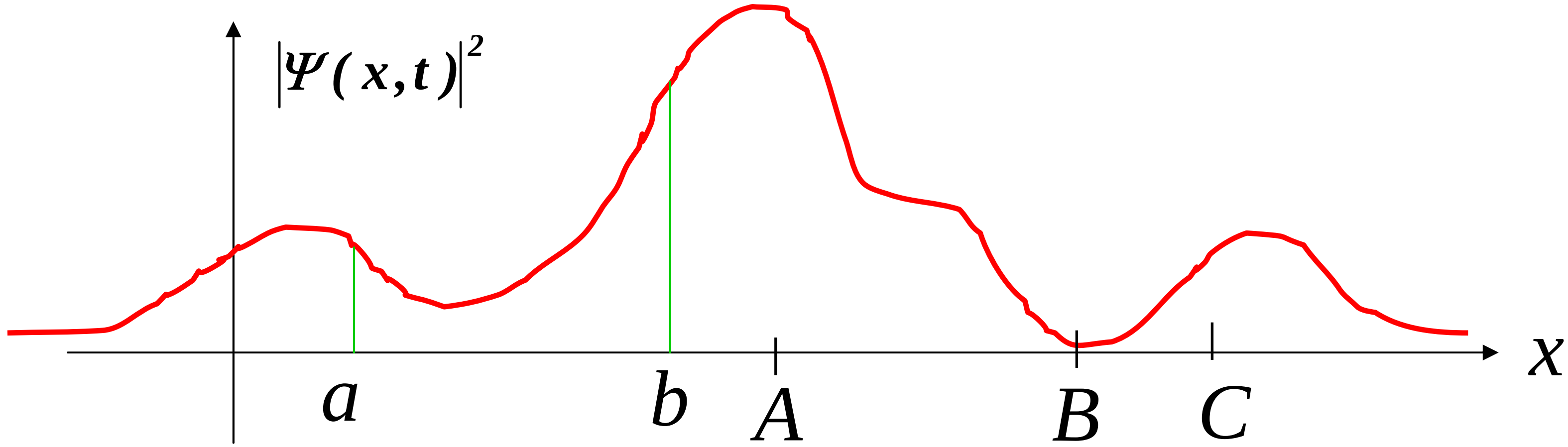
¿Qué es la Función de onda? $\Psi(x,t)$

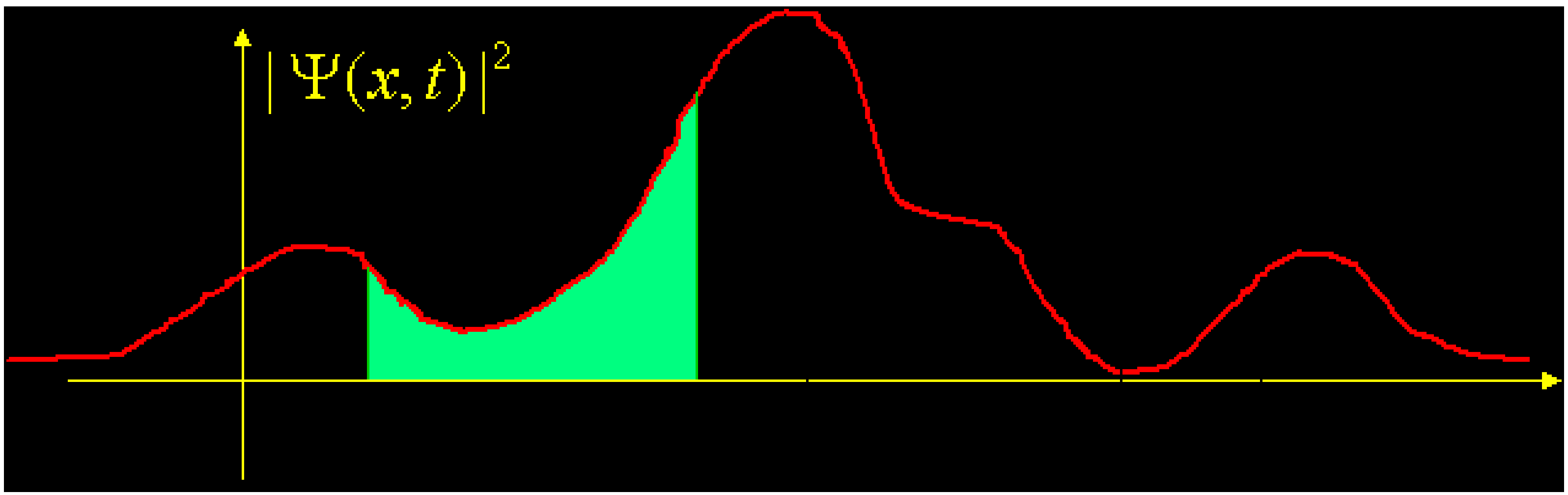
Interpretación estadística de Born:

$|\Psi(x,t)|^2$ Da la probabilidad de encontrar la partícula en

El punto x, al tiempo t□o más precisamente,

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{Probabilidad de encontrar} \\ \text{la partícula entre a y b al} \\ \text{tiempo t.} \end{array} \right\}$$





El área sombreada representa la probabilidad de encontrar la partícula entre a y b al tiempo t . Es más probable que la partícula se encuentre relativamente más cerca de A que de B.

La interpretación estadística introduce cierta indeterminación en la mecánica cuántica.

⇓

Mecánica cuántica ofrece información estadística sobre posibles resultados.

Normalización

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2$$ Densidad de Probabilidad de encontrar la partícula en el punto x, al tiempo t.

$$\rho(x)$$

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

Constante compleja

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

$$\Psi(x,t) \longrightarrow A\Psi(x,t)$$

Escoger una constante que cumpla esta ecuación

Normalización

$$\lim_{x\to\pm\infty}\Psi(x,t) = 0$$ Normalizable

Todas las variable dinámicas clásicas se pueden expresar en términos de momento y posición.

Por ejemplo

Energía cinética: $$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Momento Angular: $$\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Variable dinámica clásica $\longrightarrow$ Operador Cuántico

$$Q(x, p) \qquad\qquad Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\langle Q(x, p)\rangle = \int \Psi^* Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx$$

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Psi^* \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}dx$$

La ecuación de Schrödinger

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

- El potencial a veces no depende del tiempo, y la dependencia de ψ con el tiempo y el espacio se puede separar::

$$\Psi(x,t) = \psi(x) f(t)$$

$$i\hbar\, \psi(x) \frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 f(t)}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) f(t)$$

- dividir por $\psi(x)\, f(t)$:

$$i\hbar \frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)$$

El lado izquierdo depende solo de t, y el derecho solo de x. Por lo tanto, cada lado = constante

$$i\hbar \frac{1}{f}\frac{df}{dt} = B$$

La ecuación de autovalores de Schrödinger

- Integramos en ambos lados: $i\hbar \ln f = Bt + C$
- donde C es una constante de integración (suponer cero).
- Por lo tanto: $\ln f = \frac{Bt}{i\hbar}$ $f(t) = e^{Bt/i\hbar} = e^{-iBt/\hbar}$

La solución de la partícula libre: $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$

en que $f(t) = e^{-i\omega t}$, así que: $\omega = B/\hbar$, lo que significa que $B = E$!

Multiplicando por $\psi(x)$, la ecuación de Schrödinger solo dependiente del espacio:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$

La ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)}$$

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$$

donde:

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V}$$

Es el **operador Hamiltoniano**.

Valor medio

- Si medimos una magnitud repetidas veces, o medimos un conjunto grande de partículas, obtenemos el promedio de esa magnitud. Llamado “valor medio” $\langle x \rangle$ o “esperanza”. El valor medio de la posición x es:

$$\langle x \rangle = P_1 x_1 + P_2 x_2 + \cdots + P_N x_N = \sum_i P_i \ x_i$$

Para una variable continua:

$$\langle x \rangle = \int P(x) \ x \ dx$$

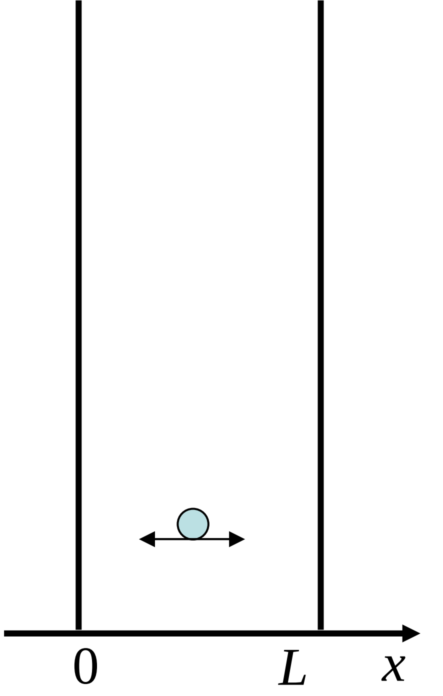
O bien:

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

Para cualquier función de x, por ejemplo $g(x)$:

$$\boxed{\langle g(x) \rangle = \int \ \Psi^*(x) \ g(x) \ \Psi(x) \ dx}$$

La partícula en la caja



- La partícula de masa *m* confinada a moverse en la caja de potencial constante.
- Fuera de la caja el potencial es infinito

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \le 0, x \ge L \\ 0 & 0 < x < L \end{cases}$$

- La función ψ debe ser a cero donde el potencial es ∞.
- Dentro de la caja V=0 y la función de Schrödinger vale:
- $$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$ donde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$
- La solución general es: $$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

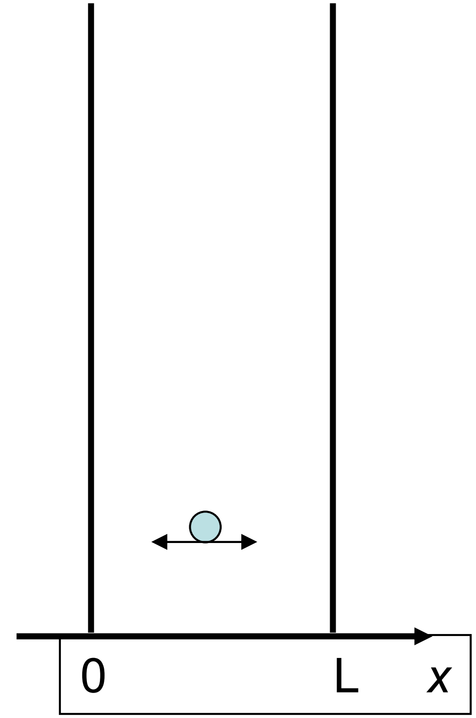
Condiciones de borde

– ψ debe ser cero en $x = 0$ y en $x = L$. Luego:

- B = 0 y $kL = n\pi$ con n *entero*.

- La función de onda es:

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$



- Normalizar:

$$A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{2/L}$$

ψ normalizada es:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

La Energía esta cuantizada

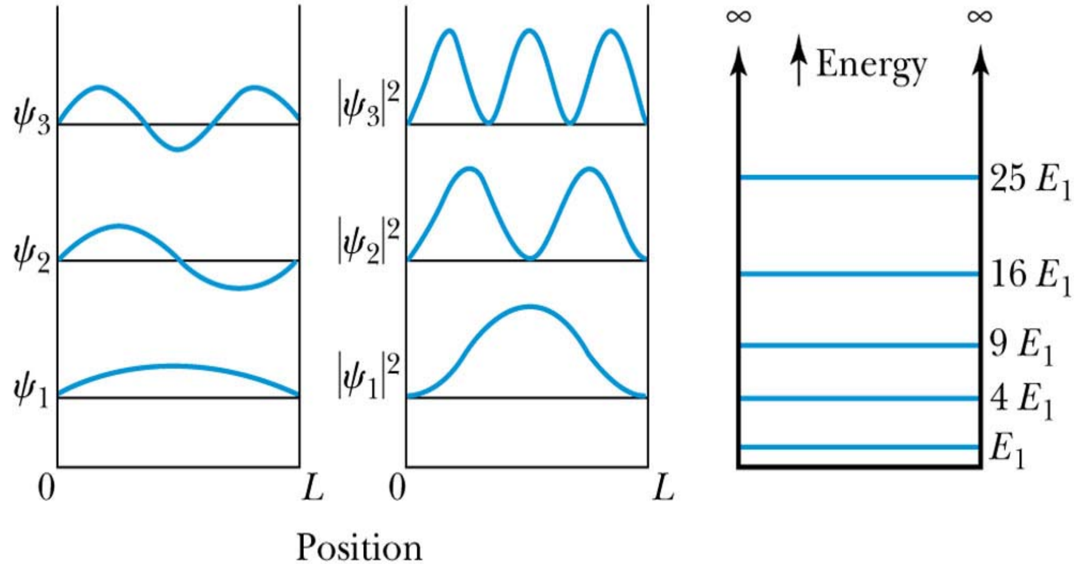
- Valores de k válidos: $$k_n = \frac{n\pi}{L} = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}$$

- Y la Energía: $$E_n = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

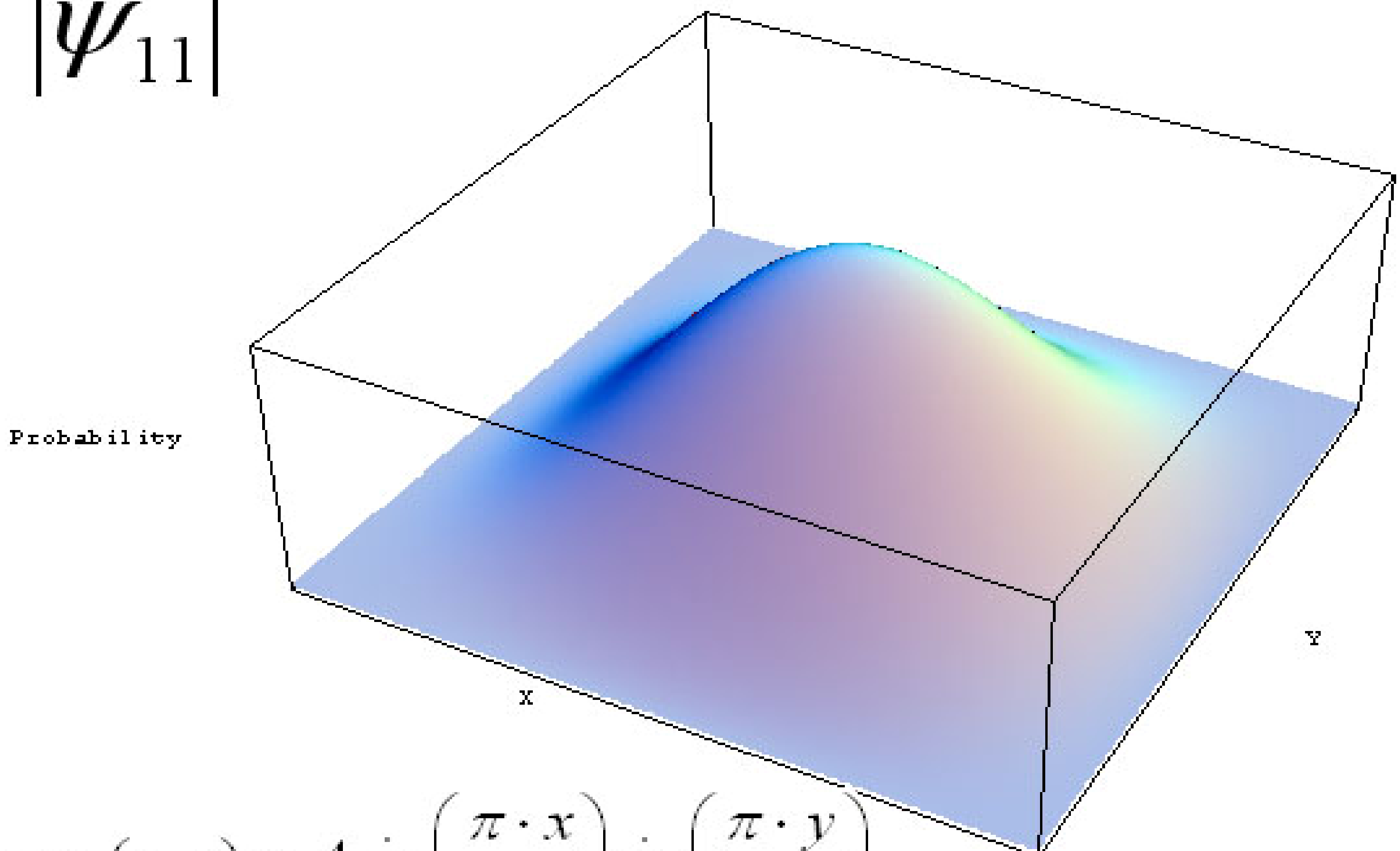
- La energía depende de n y no puede ser cero.

- El caso de $n = 1$ recibe el nombre de "estado base".

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

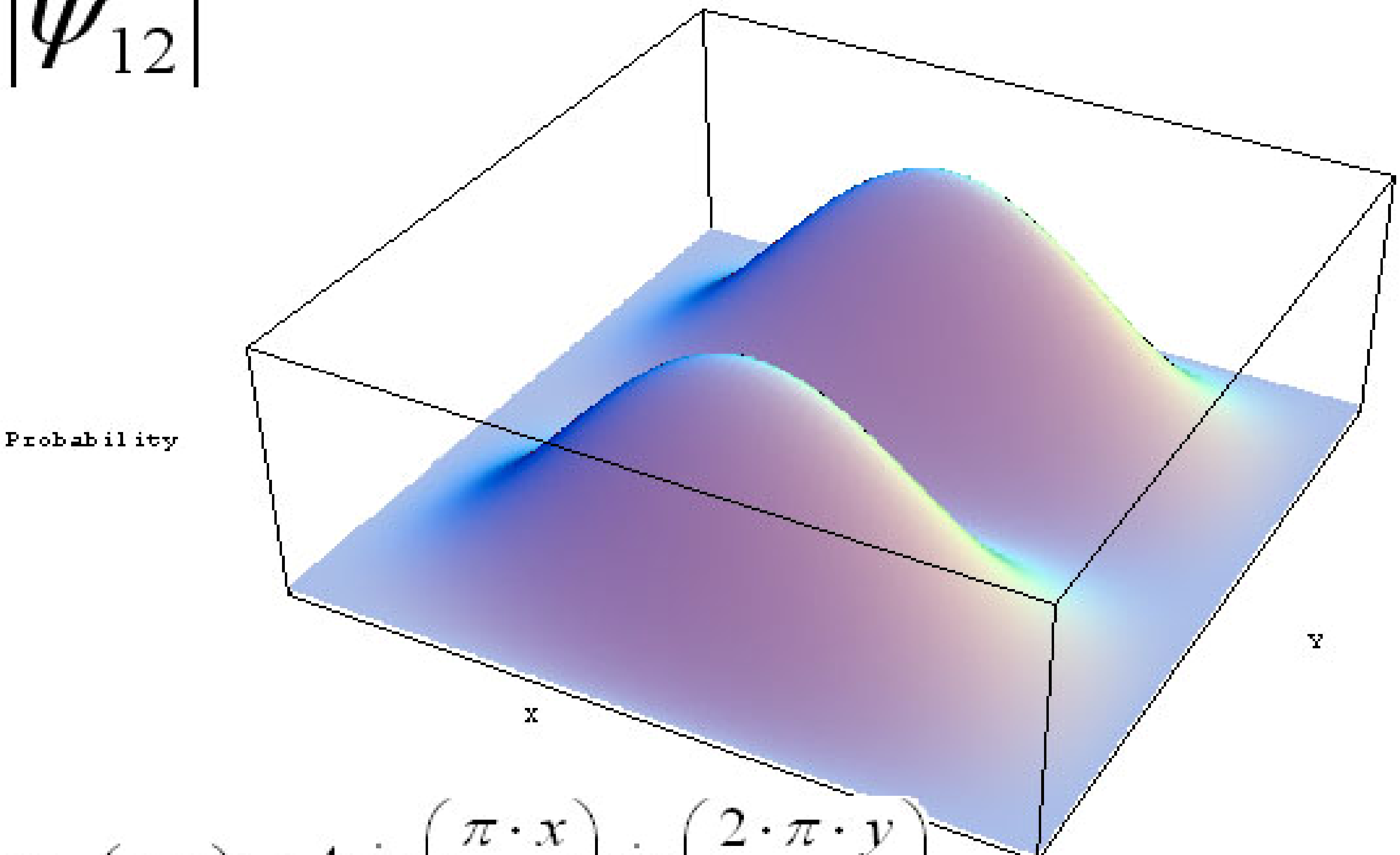


$$\left|\psi_{11}\right|^2$$



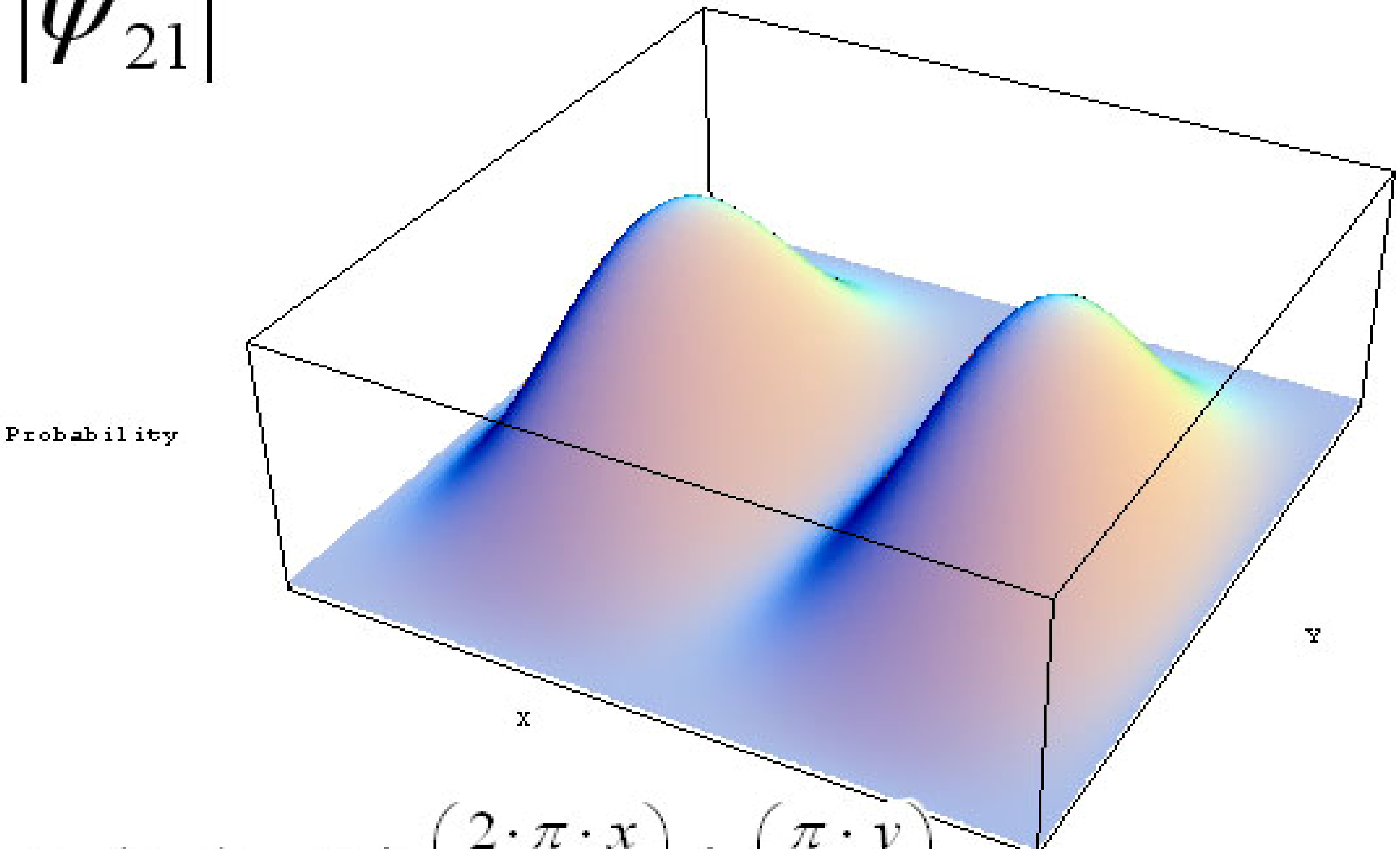
$$\psi_{11}(x,y) = A\sin\left(\frac{\pi \cdot x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi \cdot y}{a}\right)$$

$$\left|\psi_{12}\right|^2$$



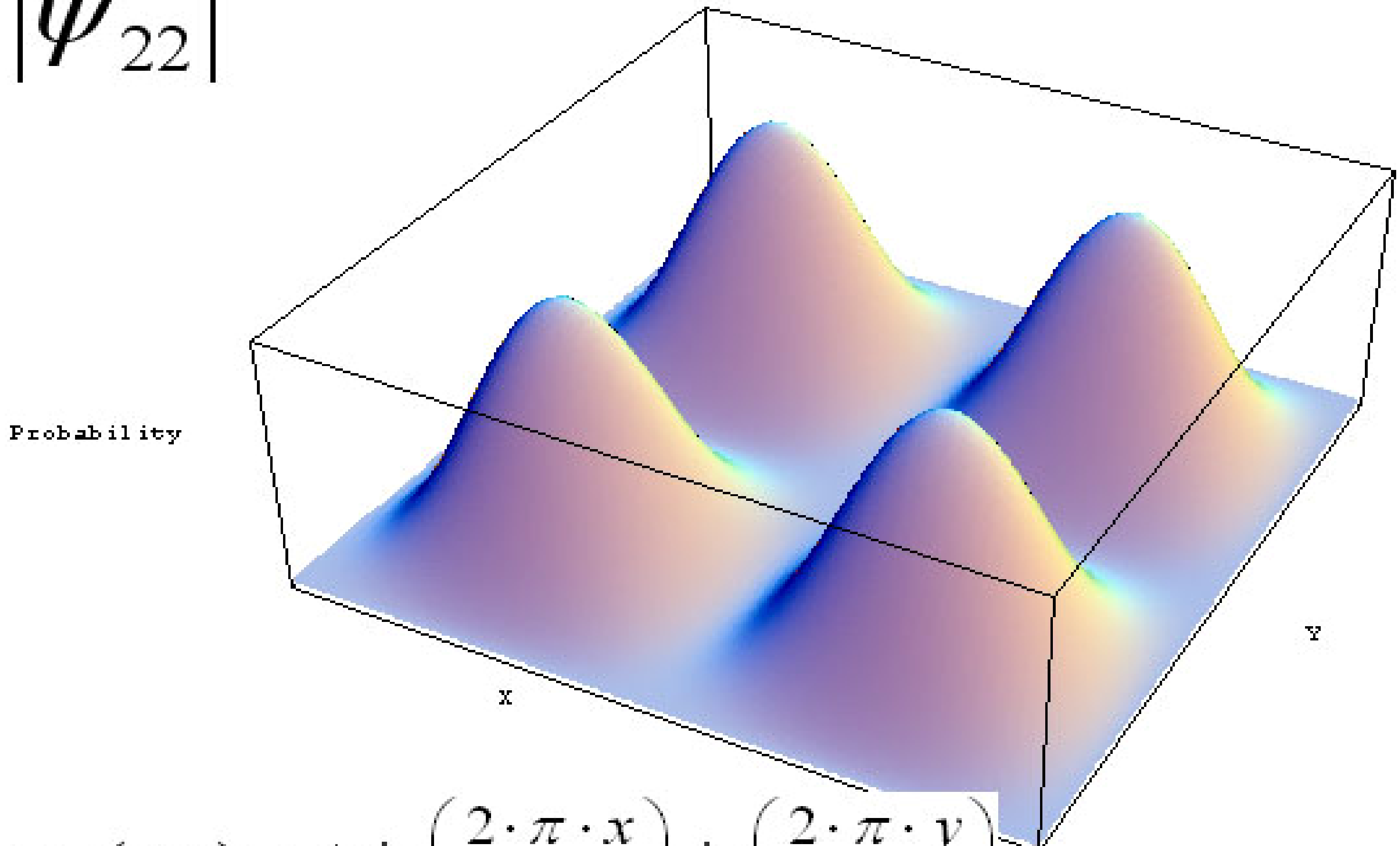
$$\psi_{12}(x,y) = A\sin\left(\frac{\pi\cdot x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\cdot\pi\cdot y}{a}\right)$$

$$|\psi_{21}|^2$$



$$\psi_{21}(x,y) = A\sin\left(\frac{2\cdot\pi\cdot x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi\cdot y}{a}\right)$$

$$\left|\psi_{22}\right|^2$$

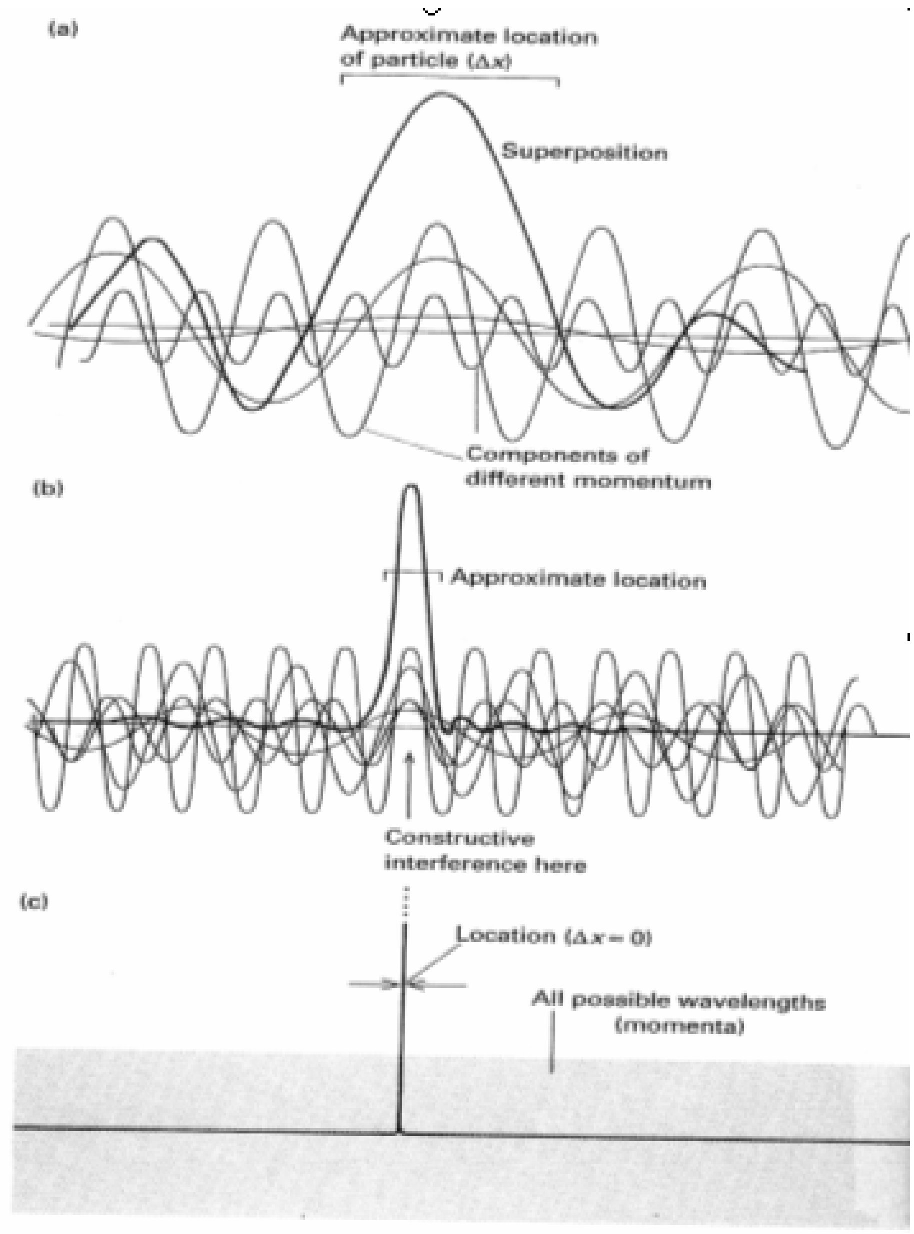


$$\psi_{22}(x,y) = A\sin\left(\frac{2\cdot\pi\cdot x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\cdot\pi\cdot y}{a}\right)$$

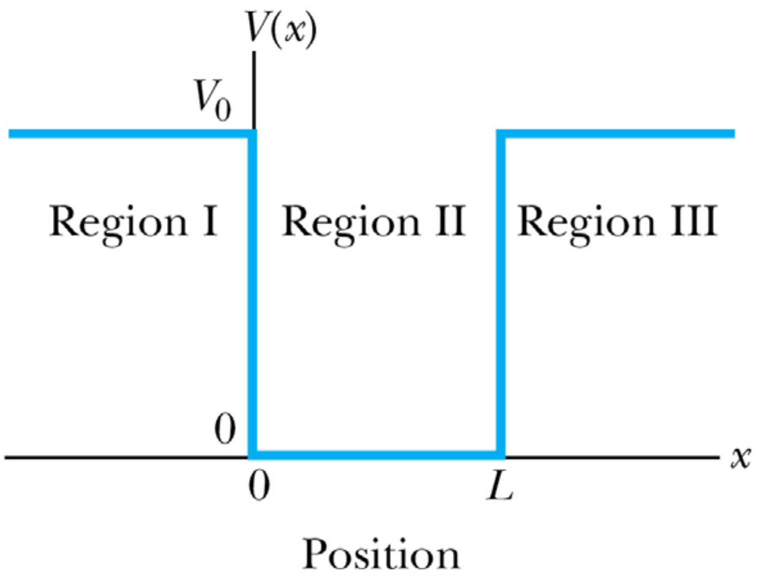
De la partícula cuántica a la partícula clásica que se mueve de un lado al otro

Usar la ecuación de Schrödinger completa que depende del tiempo (ya que queremos que la partícula se mueva en el tiempo).

La solución da una superposición de ondas, que se vuelve más grande donde hay mayor probabilidad de encontrar la partícula en un determinado t.



Caja con paredes finitas



- El pozo finito es:

$$V(x)=\begin{cases} V_0 & x\le 0 \quad \text{region I} \\ 0 & 0<x<L \quad \text{region II} \\ V_0 & x\ge L \quad \text{region III}\end{cases}$$

La ecuación de Schrödinger en las regiones I y III es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E-V_0 \qquad \text{regions I, III}$$

hacer: $\boxed{\alpha^2=2m(V_0-E)/\hbar^2}$ $\Rightarrow$ $\dfrac{d^2\psi}{dx^2}=\alpha^2\psi$

Como Ψ debe ser cero en el infinito, las soluciones son:

$$\psi_{\mathrm{I}}(x)=Ae^{\alpha x} \qquad \text{region I, } x<0$$

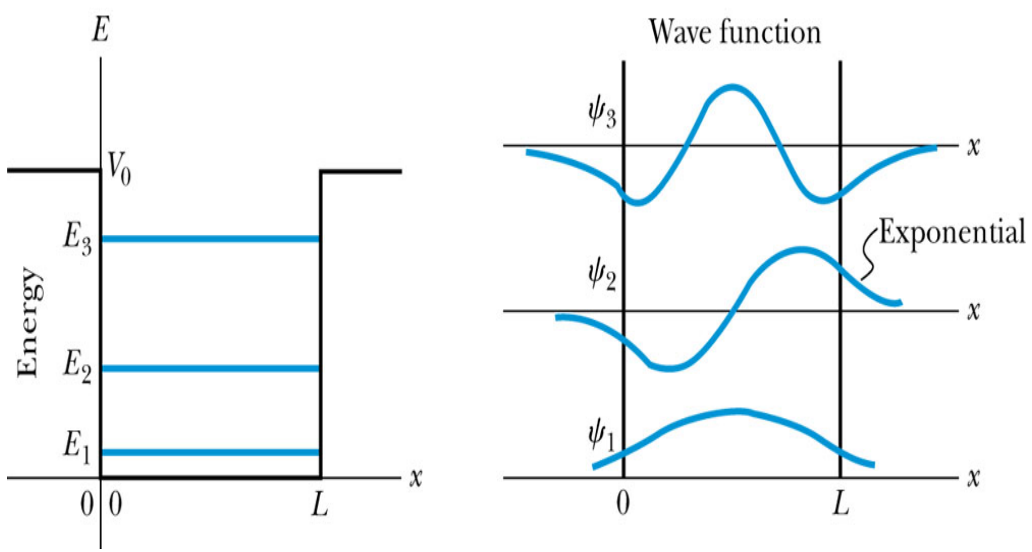
$$\psi_{\mathrm{III}}(x)=Be^{-\alpha x} \qquad \text{region III, } x>L$$

Pozo finito (cont.)

- Dentro del pozo, V=0, la función vale:
- $$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$ donde $$k = \sqrt{(2mE)/\hbar^2}$$
- La solución es: $$\psi_{\mathrm{II}} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \qquad \text{region II, } 0 < x < L$$
- Las condiciones de borde
- requieren que: $$\psi_{\mathrm{I}} = \psi_{\mathrm{II}} \text{ at } x = 0 \text{ and } \psi_{\mathrm{II}} = \psi_{\mathrm{III}} \text{ at } x = L$$

- así la función es
- contínua

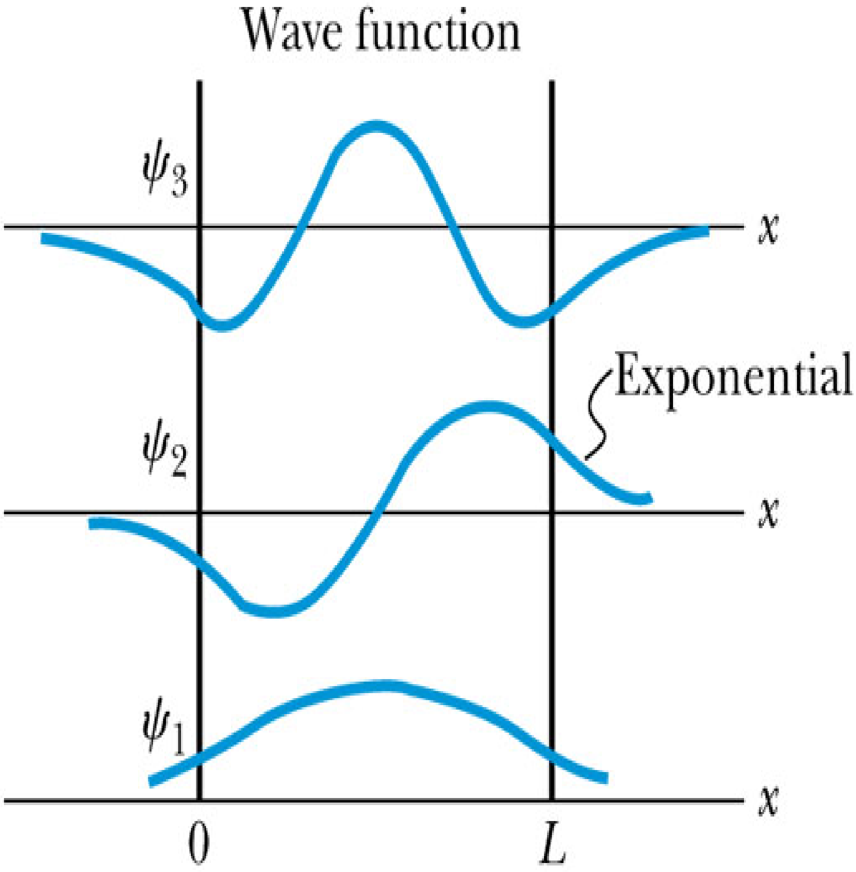
- Notar: $\Psi \neq 0$ fuera de.
- la caja !!!



Profundidad de penetración

Es la distancia fuera del pozo de potencial a la cual la probabilidad de encontrar la partícula ψ^2 se hace muy pequeña.

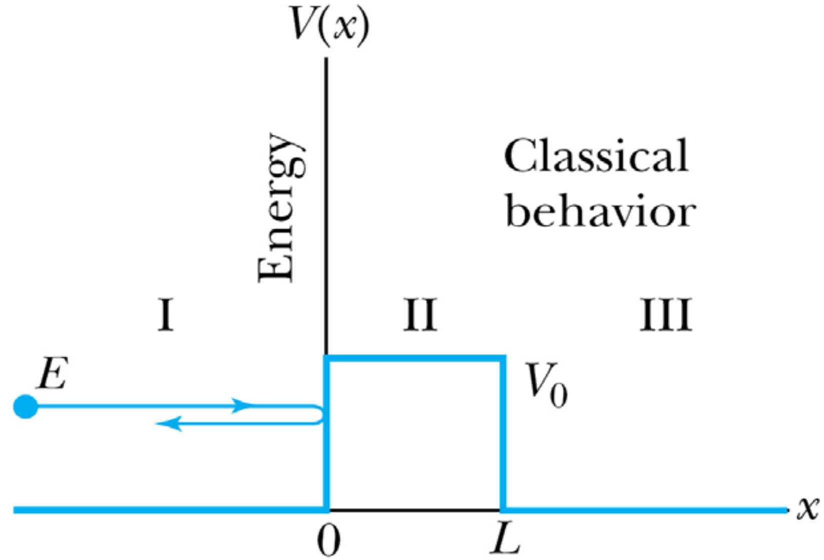
$$\delta x \approx \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$



Esto viola lo conocido por la mecánica clásica !
“No hay forma de encerrar completamente ninguna cosa”.

Efecto túnel

•**Supongamos una partícula que no tiene energía suficiente para penetrar una barrera de potencial como la de la figura, $E < V_0$.**



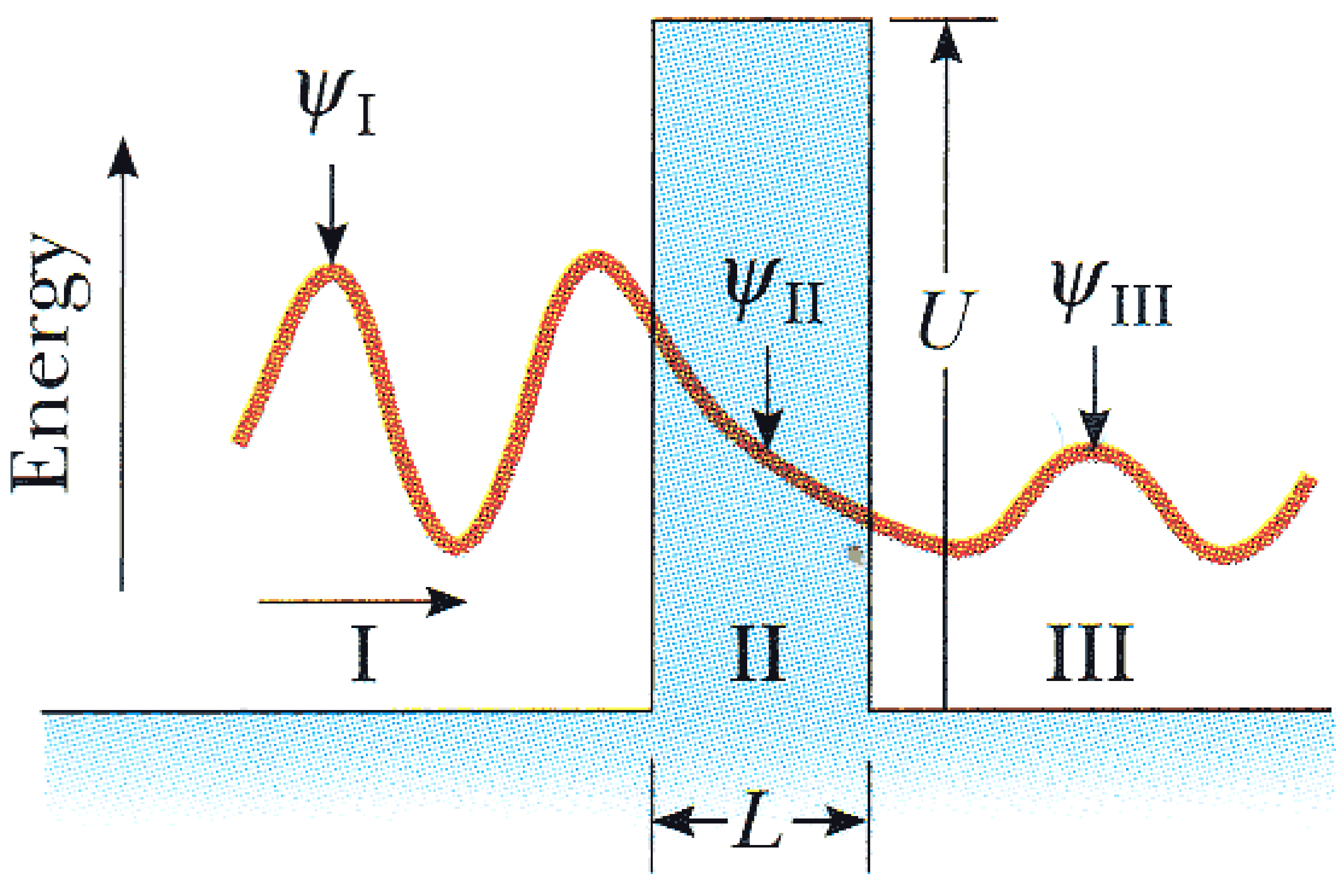
Según la mecánica clásica no debería pasar. La mecánica cuántica permite atravesar con probabilidad no nula !!

La función de onda en la región II vale: $\psi_{\mathrm{II}} = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$ donde $\kappa = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

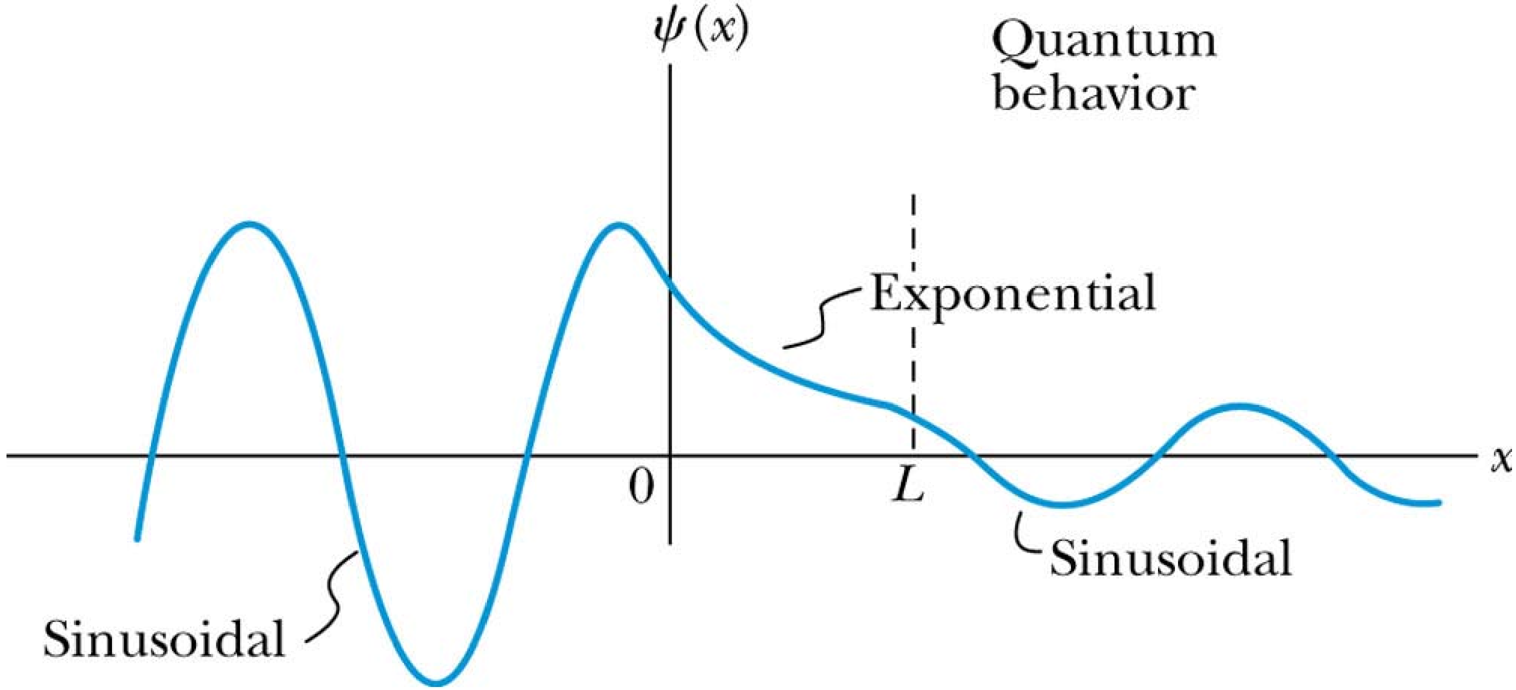
La probabilidad de que la partícula pase del otro lado de la barrera es:

$$T = \left[1 + \frac{V_0^{\,2}\sinh^2(\kappa L)}{4E(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

Penetración de barreras (tunneling)



Túnel e incertidumbre



Se puede considerar que el "tuneleo" es otra manifestación del principio de incertidumbre en la forma $\Delta E.\ \Delta t > \hbar$ La partícula puede violar la conservación de energía en una cantidad ΔE durante un tiempo del orden de $\Delta t \sim \hbar / \Delta E$.

STM: aplicación del efecto túnel