La ecuación de Schrödinger para una partícula sometida a una fuerza conservativa.

Vamos a considerar a continuación el caso de una partícula sometida a una fuerza conservativa. Para encontrar la ecuación de Schrödinger en este caso vamos en primer lugar a escribir la ecuación de Schrödinger para la partícula libre de una forma más adecuada. Algo que debe quedar claro es que la ecuación de Schrödinger para este caso no se puede demostrar, de modo que lo que haremos será derivar la ecuación, pero no demostrarla.

Vamos a considerar la función de onda de una partícula que se mueve en una sola dimensión, x, en un instante determidado, $\psi(x)$. La interpretación física que hemos dado a esta función es que su módulo al cuadrado nos da la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en la posición x, de modo que podemos utilizar esta función para calcular el valor medio de la posición, la dispersión de la posición, etcétera. La función de onda también contiene la información sobre la velocidad de la partícula a través de la función de onda en la representación de momentos, $\bar{\psi}(p)$:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\ dx$$

La interpretación física que hemos dado a esta función es que su módulo al cuadrado nos da la densidad de probabilidad de que el momento de la partícula tome el valor p. Por tanto, podemos utilizar esta función para calcular el valor medio del momento, la dispersión del momento, etcétera. El hecho es que las dos funciones $\psi(x)$ y $\bar{\psi}(p)$ contienen la misma información, ya que siempre podemos obtener cualquiera de ellas a partir de la otra. Si conocemos $\bar{\psi}(p)$ podemos calcular $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\ dp$$

Nos podemos platear lo siguiente. Si $\psi(x)$ y $\bar{\psi}(p)$ contienen la misma información, ¿podríamos utilizar la función $\psi(x)$ directamente para calcular el valor medio del momento? La respuesta es que sí, tal como vamos a ver a continuación. El valor medio del momento vale:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p\ \left|\bar{\psi}(p)\right|^2\ dp = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}^*(p)\ \ p\ \ \bar{\psi}(p)\ dp$$

Vamos a sustituir la función $\bar{\psi}^*(p)$ por su expresión en función de $\psi(x)$:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\ dx}\ \ p\ \ \bar{\psi}(p)\ dp$$

Reordenamos esta expresión colocando a la izquierda la integral en x y la función $\psi^*(x)$ que es la única que solo depende de x:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\, \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} p\ \bar{\psi}(p)\ \ e^{\frac{i}{\hbar}px}\ dp}$$

Lo que está señalado con una llave se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\ p\ \bar{\psi}(p)\ e^{\frac{i}{\hbar}px}\ dp = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\bar{\psi}(p)\ e^{\frac{i}{\hbar}px}\ dp\right) = -i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$$

Por tanto, hemos llegado a la siguiente expresión:

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)$$

Esta expresión es muy similar a la del valor medio de la posición x, que se puede escribir como:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\ x\ \psi(x)\,dx$$

sólo que en este caso, lo que aparece entre las dos funciones de onda es un operador, que denominaremos el operador momento y lo notaremos por $\hat{p}$, de modo que:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Por tanto, el valor medio del momento se puede calcular directamente a partir de la función de onda $\psi(x)$ de la siguiente forma:

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\ \hat{p}\ \psi(x)\,dx$$

Se puede demostrar fácilmente que el operador $\hat{p}$ que acabamos de definir, no solo nos permite calcular el valor medio de p, sino también el de p^2 y de cualquier función del momento. Como ejemplo:

$$\begin{aligned}\left\langle p^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\ \hat{p}^2\ \psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\ \hat{p}\hat{p}\ \psi(x)\,dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\ \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\ \psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\right)\end{aligned}$$

Es importante ver cómo se aplica el operador $\hat{p}^2$:

$$\hat{p}^2 = \hat{p}\hat{p} = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

A partir de este valor medio y el valor medio de p podemos calcular la dispersión del momento como $\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$. Como veremos a lo largo de todo el curso, en mecánica cuántica las variables dinámicas de la mecánica clásica estarán representadas mediante operadores, en el sentido de que dichos operadores nos permitirán calcular los valores medios de las magnitudes físicas.

El hecho de haber definido el operador $\hat{p}$ nos permite escribir la ecuación de Schrödinger para el movimiento unidimensional de una partícula libre de la siguiente forma:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x,t)$$

Para el caso del movimiento tridimensional podemos definir un operador momento para cada dirección:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad \text{, o bien,} \qquad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

y la ecuación de Schrödinger en este caso sería:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi(\vec{r},t)$$

Podemos encontrar ya la forma de la ecuación de onda para las ondas de materia para el caso de una partícula sometida a una fuerza conservativa dada por un potencial, de modo que $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$ (vamos a estudiar directamente el caso de una partícula que se mueve en el espacio ordinario y consideraremos que el potencial no depende del tiempo). En el término de la derecha de la última ecuación podemos reconocer la energía de la partícula libre escrita en función del operador momento. Para una partícula que se mueve en un potencial $V(\vec{r})$, la energía será:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Por tanto, la ecuación de onda para este caso será:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t)$$

o bien:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \end{aligned}$$

Esta ecuación se conoce como la ecuación de Schrödinger para una partícula sin espín que se mueve en el potencial $V(\vec{r})$. La ecuación anterior no se puede deducir de la mecánica clásica, simplemente nos hemos basado en ésta para escribirla, pero hay que tener en cuenta que esta ecuación hay que postularla y no se puede deducir. El hecho real es que la ecuación de Schrödinger da unos resultados excelentes y permite explicar una gran cantidad de fenómenos que no se podían explicar mediante la mecánica clásica. Debido a que hemos utilizado la relación entre la energía y la cantidad de movimiento no relativista, la ecuación anterior no será válida para el caso de altas energías.

La ecuación de Schrödinger que acabamos de exponer se suele escribir de la siguiente forma:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$$

donde $\hat{H}$ es un operador que actúa sobre la función de onda y que se denomina el operador Hamiltoniano (al igual que el momento está representado en mecánica cuántica mediante el operador $\hat{p}$, el operador hamiltoniano representará a la energía). Veremos que existe una estrecha relación entre el operador Hamiltoniano y la función Hamiltoniana de la mecánica clásica. En el caso particular que hemos considerado, el operador Hamiltoniano es el siguiente:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

Una de las propiedades fundamentales de la ecuación de Schrödinger es su carácter lineal respecto de la función de onda, por lo que se verifica directamente el principio de superposición lineal.

Podríamos pensar que la ecuación anterior se puede deducir mediante el mismo argumento que dimos para el caso de la partícula libre. La relación de dispersión en este caso se obtiene de nuevo a partir de la relación entre la energía y la cantidad de movimiento:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

de modo que la relación de dispersión será:

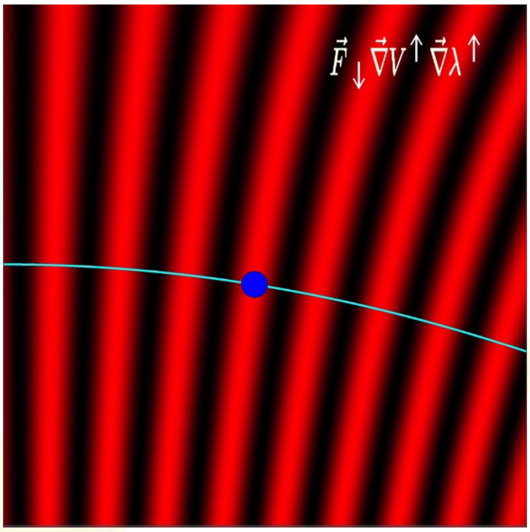
$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2(\vec{r})}{2m} + V(\vec{r})$$

El problema es que en este caso el número de ondas depende de la posición, por tanto, una función de onda de la forma $\psi(\vec{r},t) = Ae^{i\left(\vec{k}(\vec{r})\cdot\vec{r}-\omega t\right)}$ podemos comprobar fácilmente que no será una solución de la ecuación de Schrödinger. Lo que sí podemos deducir es que si el potencial varía suavemente en el espacio la solución anterior sí será válida. Como veremos posteriormente en este límite la mecánica clásica da una buena descripción del movimiento de una partícula y, de hecho, veremos que la ecuación de Schrödinger contiene a la teoría clásica bajo cierto límite. La longitud de onda asociada a una partícula que se mueve en un potencial $V(\vec{r})$ será:

$$\lambda(\vec{r}) = \frac{h}{\sqrt{2m\left(E - V(\vec{r})\right)}}$$

de modo que como cabía esperar depende de la posición. Esta dependencia de la longitud de onda con la posición es la responsable de que la trayectoria de un paquete de ondas se curve, tal como corresponde a una partícula que está sometida a una fuerza. En la siguiente figura se puede ver que cuando existe un gradiente de potencial también existirá un gradiente en la longitud de onda produciendo una curvatura de los frentes de onda. La relación entre el gradiente de la longitud de onda y el gradiente de potencial es la siguiente:

$$\vec{\nabla}\lambda = \frac{m\lambda^3}{h^2}\vec{\nabla}V(\vec{r})$$



Esta figura se ha obtenido del applet "Partícula sometida a una fuerza constante" que se encuentra en la página web https:\\www.hbarra.es. En el applet se muestra la trayectoria clásica de una partícula sometida a una fuerza constante en la dirección vertical. Simultáneamente se muestran los frentes de onda. Al haber un gradiente de potencial también habrá un gradiente en la longitud de onda. Como el potencial es mayor en la parte superior, la longitud de onda también será mayor. Podemos ver en la figura que los frentes de onda están más separados en la parte superior. También podemos ver que la trayectoria clásica es ortogonal a los frentes de onda. Es algo parecido a lo que ocurre en óptica entre los frentes de onda y el rayo luminoso.