Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre.

En este apartado vamos a analizar un caso particular de la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre en una sola dimensión, que nos servirá para empezar a comprender las diferencias que existen entre el mundo clásico y el cuántico.

El caso particular que vamos a analizar se conoce como paquete de ondas gaussiano. Supongamos que en el instante inicial, $t = 0$, la función de onda depende de dos parámetros reales k_0 y a y que viene dada por:

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0x} e^{-x^2/a^2}$$

Lo primero que vamos a hacer es caracterizar las propiedades espaciales de la partícula. ¿Dónde se encuentra? ¿Tiene una posición bien definida? Recordamos que el módulo al cuadrado de esta función de onda es la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x, de modo que para el instante inicial:

$$\rho(x,0) = |\psi(x,0)|^2 = \psi^*(x,0)\,\psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2}$$

Podemos ver que se trata de una distribución gaussiana centrada en $x = 0$, de modo que el valor medio de la posición será $\langle x \rangle = 0$, y la partícula no tiene una posición bien definida. Podemos calcular explícitamente ambas propiedades, para lo cual tenemos que comprobar previamente si la función de onda está normalizada. Vamos a integrar la densidad de probabilidad para todos los valores de x:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,0)\ dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2}\ dx = 2\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_0^{\infty} e^{-2x^2/a^2}\ dx$$

Hacemos el siguiente cambio de variable:

$$s = \frac{2}{a^2}x^2, \qquad x = \frac{a}{\sqrt{2}}s^{1/2}, \qquad dx = \frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{2}}s^{-1/2}ds$$

y queda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,0)\ dx = 2\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_0^{\infty} e^{-s}\ \frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{2}}s^{-1/2}ds = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} s^{1/2}\ e^{-s}\ ds = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = 1$$

Por tanto está normalizada y la podemos utilizar directamente para calcular valores medios. El valor medio de la posición vale:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\ \rho(x,0)\ dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\ \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2}\ dx = 0$$

Esta integral es nula puesto que el integrando es una función impar de x. Por otro lado, podemos calcular la dispersión de la posición, Δx, para lo cual tenemos que calcular $\langle x^2 \rangle$, ya que:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

Este valor medio se calcula de forma análoga:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \ \rho\left(x,0\right) \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \ \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2} \ dx = 2\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{0}^{\infty} x^2 \ e^{-2x^2/a^2} \ dx$$

Hacemos el mismo cambio de variable y queda:

$$\begin{aligned}\left\langle x^2 \right\rangle &= 2\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_0^{\infty} \frac{a^2}{2} s \ e^{-s} \ \frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{2}} s^{-1/2} ds = \frac{a^2}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} s^{1/2} \ e^{-s} \ ds = \frac{a^2}{2\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \\ &= \frac{a^2}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{a^2}{4}\end{aligned}$$

Por tanto:

$$\Delta x = \sqrt{\left\langle x^2 \right\rangle} = \frac{a}{2}$$

De modo que la partícula que estamos describiendo tiene un valor medio de su posición nulo (es como si partiera del origen) pero no tiene una posición bien definida. La dispersión en su posición depende del parámetro a.

Vamos a analizar también la información sobre el momento de la partícula, para lo cual vamos a calcular su transformada de Fourier y la función de onda en la representación de momentos. La transformada de Fourier en el instante inicial vale:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(k,0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) \ e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/a^2} \ e^{-ikx} \ dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x^2}{a^2} + i(k-k_0)x\right)} \ dx\end{aligned}$$

Esta integral se calcula escribiendo el argumento de la exponencial como un cuadrado perfecto de la siguiente forma:

$$\frac{x^2}{a^2} + i\left(k-k_0\right)x = \left(\frac{x}{a} + ia\frac{k-k_0}{2}\right)^2 + a^2 \frac{\left(k-k_0\right)^2}{4}$$

Por tanto, nos queda:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(k,0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x}{a} + ia\frac{k-k_0}{2}\right)^2 - a^2 \frac{(k-k_0)^2}{4}} \ dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-a^2 \frac{(k-k_0)^2}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x}{a} + ia\frac{k-k_0}{2}\right)^2} \ dx\end{aligned}$$

Hemos sacado fuera de la integral la exponencial que no depende de x. La integral que queda se hace fácilmente con el cambio de variable:

$$r = \frac{x}{a} + ia\frac{k-k_0}{2}, \qquad\qquad dx = adr$$

y queda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x}{a} + ia\frac{k-k_0}{2}\right)^2} \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-r^2} adr = 2a \int_0^{\infty} e^{-r^2} dr$$

Por último, hacemos un cambio de variable similar a los anteriores: $r^2 = s$, $r = s^{1/2}$, $dr = \frac{1}{2}s^{-1/2}ds$ y queda $a\sqrt{\pi}$. Por tanto, la transformada de Fourier vale:

$$\tilde{\psi}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-a^2\frac{(k-k_0)^2}{4}} a\sqrt{\pi} = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}$$

Se trata de una distribución gaussiana centrada en $k = k_0$. Vamos a calcular la función de onda en la representación de momentos:

$$\bar{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar},0\right) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{a^2}{4}\left(\frac{p}{\hbar}-k_0\right)^2} = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-\hbar k_0)^2}$$

También es una distribución gaussiana centrada en $\hbar k_0$. El módulo al cuadrado de esta función nos da la distribución de probabilidades para el momento de la partícula en el instante inicial:

$$\rho_p(p,0) = \left|\bar{\psi}(p,0)\right|^2 = \sqrt{\frac{a^2}{2\pi\hbar^2}} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-\hbar k_0)^2}$$

De forma similar a los cálculos anteriores, se puede calcular el valor medio del momento y su dispersión y se obtiene:

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p\ \rho_p(p,0)\ dp = \hbar k_0 \\
\left\langle p^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p^2\ \rho_p(p,0)\ dp = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^2} \\
\Delta p &= \sqrt{\left\langle p^2\right\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{\hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^2} - \hbar^2 k_0^2} = \frac{\hbar}{a}
\end{aligned}$$

Podemos ver que se verifica el principio de indeterminación:

$$\Delta x \Delta p = \frac{a}{2}\frac{\hbar}{a} = \frac{\hbar}{2}$$

En la página http://www.hbarra.es hay una aplicación denominada "Paquete de ondas gaussiano" que permite ver todas las propiedades que acabamos de ver.

Ya hemos caracterizado las propiedades de la partícula en el instante inicial. El valor medio de la posición es nulo y el de su cantidad de movimiento $\hbar k_0$. Ni la posición ni el momento están bien determinados y el producto de las dos indeterminaciones es del orden de la constante de Planck.

Vamos a ver ahora cómo evoluciona la función de onda y las propiedades de la partícula. El problema equivalente en mecánica clásica sería: si conocemos la posición y velocidad en el instante inicial, $t = 0$, de modo que $x(0) = x_0$ y $v(0) = v_0$, ¿cuál será la posición y velocidad en el instante t? La respuesta es sencilla para la partícula libre:

$$x(t) = x_0 + v_0 t, \qquad v(t) = v_0$$

El equivalente en mecánica cuántica es: si conocemos la función de onda en el instante inicial $t = 0$, $\psi(x,0)$, ¿cuál será la función de onda en el instante t, $\psi(x,t)$? La forma de calcular $\psi(x,t)$ la vimos en un apartado anterior. Si conocemos $\tilde{\psi}(k,0)$ la función de onda en el instante t vale:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k,0)\; e^{i(kx-\omega t)}\; dk$$

Por tanto, para obtener la evolución temporal tenemos que realizar la integral anterior para el paquete de ondas gaussiano que estamos estudiando, es decir:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i(kx-\omega t)}\, dk = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left[\frac{a^2}{4}(k-k_0)-i\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right]}\, dk$$

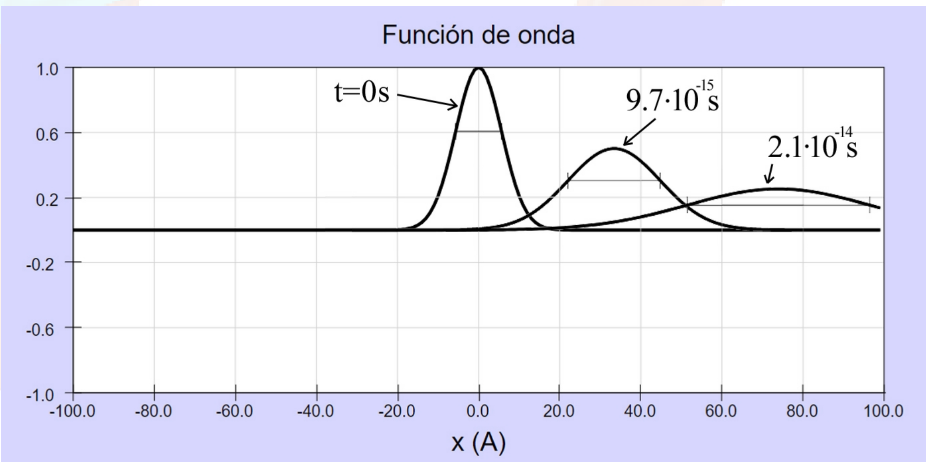
donde se ha tenido en cuenta que ω es una función de k (relación de dispersión). La forma de hacer esta integral es similar a una que apareció anteriormente. Se trata de escribir el argumento de la exponencial como un cuadrado perfecto como una función de k y seguir pasos análogos a los que se han hecho anteriormente. Tras una serie de cálculos se puede comprobar que la integral anterior vale:

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \left(1 + i\frac{2\hbar t}{ma^2}\right)^{-1/2} e^{ik_0x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t} \exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2 + i\frac{2\hbar t}{m}}\right\}$$

Por último, a partir de la función de onda, podemos calcular la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula, y vale:

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)^{-1/2} \exp\left\{-\frac{2a^2\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}\right\}$$

En la página http://www.hbarra.es hay una aplicación que simula el movimiento de este paquete de ondas para la partícula libre. En la siguiente imagen se muestra una evolución temporal obtenida con la aplicación.



El valor medio de la posición se desplaza a una velocidad constante $\hbar k_0/m = \langle p \rangle (0)/m$, por tanto, se comporta de forma similar a como lo hace en mecánica clásica. Por otro lado, la dispersión en la posición va aumentando con el tiempo, como se aprecia en la figura anterior. Podemos extraer el valor de la dispersión si comparamos $\rho(x,t)$ con una función de distribución gaussiana genérica para una variable aleatoria s:

$$\rho_s(s) = \frac{1}{\Delta s\sqrt{2\pi}} e^{-(s-\langle s \rangle)^2/2\Delta s^2}$$

donde $\langle s \rangle$ es el valor medio de la distribución y Δs la dispersión. Por tanto, podemos concluir que la dispersión en la posición de la partícula evoluciona de la forma:

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$

de modo que como habíamos dicho, la anchura de la distribución aumenta con el tiempo. Este fenómeno lo habíamos estudiado anteriormente y vimos que era una consecuencia de la relación de dispersión no lineal. Podemos interpretar el ensanchamiento del paquete de ondas mediante argumentos clásicos. Según hemos visto anteriormente, en el instante inicial la partícula tiene una indeterminación en su momento que vale $\Delta p(0) = \hbar/a$. Como consecuencia también tiene una indeterminación en su velocidad:

$$\Delta v(0) = \frac{\Delta p(0)}{m} = \frac{\hbar}{ma}$$

Si tenemos un conjunto de partículas con una dispersión en sus velocidades, como cada partícula se mueve a una velocidad distinta el conjunto se va dispersando. La dispersión en la posición vendrá dada por:

$$\Delta x_{\mathrm{cl}} = \Delta v\ t = \frac{\hbar}{ma} t$$

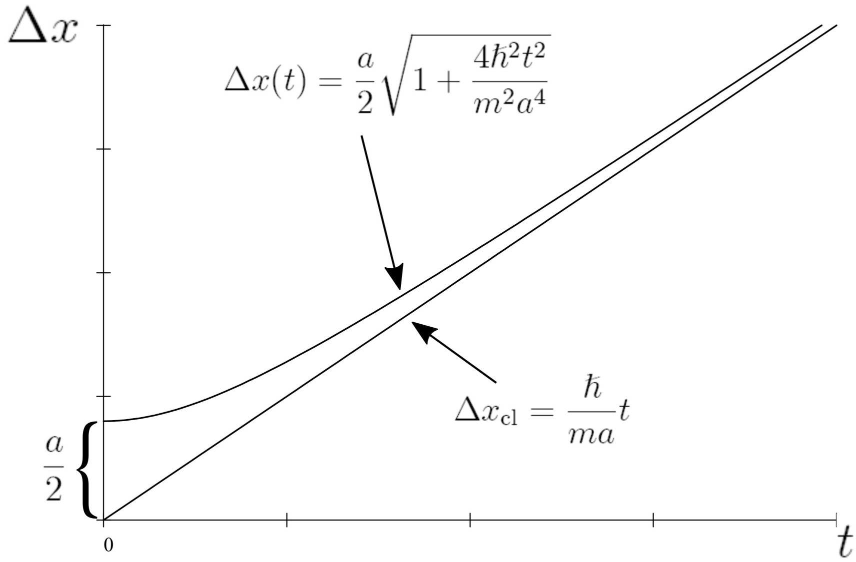
Vamos a comparar con la expresión cuántica $\Delta x(t)$. Para tiempos grandes, llegará un momento en que podamos despreciar la unidad que hay dentro de la raíz de la expresión de $\Delta x(t)$, de modo que:

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \underset{t\gg}{\sim} \frac{a}{2}\sqrt{\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} = \frac{\hbar}{ma} t$$

Vemos que este resultado coincide con el anterior, de modo que podemos achacar el aumento en la dispersión de la posición al hecho de que la partícula, en la descripción cuántica, no tiene una velocidad bien definida. Para tiempos pequeños las dos expresiones Δx_{cl} y $\Delta x(t)$ difieren, ya que en mecánica clásica la dispersión puede ser nula en el instante inicial, mientras que en mecánica cuántica no, ya que Δx nunca puede ser menor que $\hbar/2\Delta p$.

En la siguiente figura se puede ver una comparación entre el resultado que predice la teoría cuántica y el argumento clásico.

Para terminar, vimos que la función de distribución del momento para el caso de la partícula libre no varía con el tiempo, de modo que tanto el valor medio como la dispersión



del momento se mantienen constantes. En resumen, las propiedades de la partícula en el instante t son:

$$\langle x \rangle (t) = \frac{\hbar k_0}{m} t, \qquad \langle p \rangle (t) = \hbar k_0, \qquad \Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1+\frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}, \qquad \Delta p(t) = \frac{\hbar}{a}$$

de modo que el valor medio de la posición se desplaza con el tiempo de forma idéntica a la posición de la partícula en mecánica clásica. Por otro lado, en mecánica cuántica la partícula no tiene una posición bien definida y la indeterminación aumenta continuamente con el tiempo. Este aumento continuo lo hemos justificado mediante argumentos clásicos a partir de la indeterminación del momento.