

Relación de dispersión para las ondas de materia de una partícula libre. Velocidad de fase y de grupo.

En el tema anterior, hemos introducido las relaciones de de Broglie-Einstein, que nos van a servir a continuación para obtener la relación de dispersión para las ondas de materia, que es como se denomina comúnmente a las funciones de onda que describen el movimiento de las partículas. La relación de dispersión, que es la ecuación que relaciona la frecuencia angular (ω) con el número de ondas (k), será necesaria para encontrar la ecuación de ondas para las ondas de materia.

Supongamos, por ejemplo, una partícula libre que se mueve en una sola dimensión (x) y que viene descrita mediante la siguiente función de onda:

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

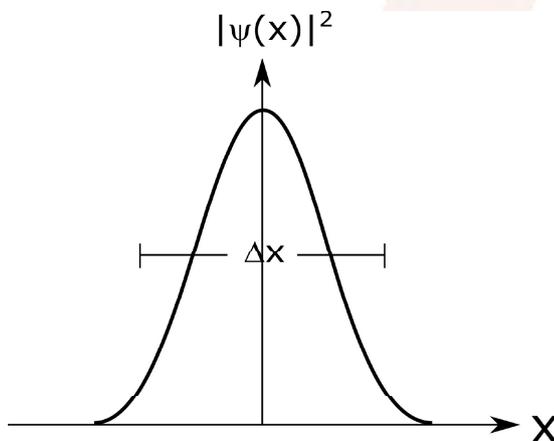
(posteriormente veremos que esta función de onda no puede describir una partícula, puesto que no es normalizable). Los valores de k y ω están relacionados con la cantidad de movimiento y la energía de la partícula mediante las relaciones de de Broglie-Einstein:

$$p = \hbar k \quad \text{y} \quad E = \hbar \omega$$

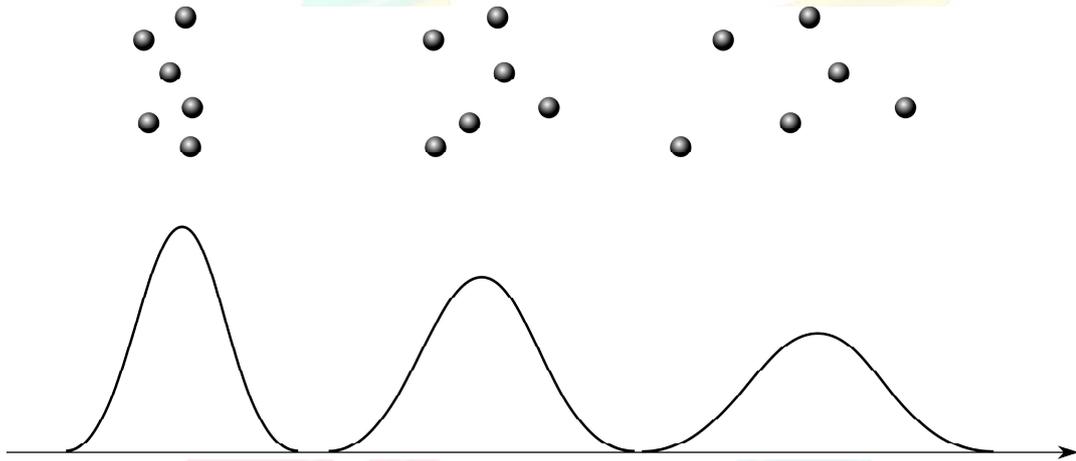
Por otro lado, de acuerdo con la mecánica clásica, la energía y la cantidad de movimiento de una partícula libre están también relacionadas entre sí mediante la ecuación $E = p^2/2m$. Esta ecuación nos permite encontrar directamente la relación de dispersión para una partícula libre:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Debemos resaltar varias propiedades de esta relación de dispersión. En primer lugar, podemos ver que la relación de dispersión no es lineal. Esto nos indica que el vacío es un medio dispersivo para las ondas de materia incluso cuando la partícula es libre. Vamos a ver cómo podemos interpretar este resultado a partir del principio de indeterminación y una analogía clásica. Si tenemos una partícula localizada con una indeterminación Δx el módulo al cuadrado de la función de onda en un instante determinado será más o menos de la forma que se muestra en la figura.



De acuerdo con el principio de indeterminación la partícula no tendrá una cantidad de movimiento bien definida y, por tanto, tampoco tiene una velocidad bien definida. Es decir, es como si la partícula tuviera una distribución de velocidades cuya anchura viene determinada como mínimo por el principio de indeterminación. Podemos pensar que ocurriría clásicamente con una serie de partículas, más o menos localizadas pero con una cierta distribución de velocidades (cada partícula con una velocidad distinta). Lo que ocurre es que las partículas se van separando conforme transcurre el tiempo como se muestra en la siguiente figura, ya que unas irán más lentas y otras más rápidas.



Del mismo modo, para nuestro caso, cuando transcurre el tiempo el módulo al cuadrado de la función de onda se irá ensanchando, lo que nos indica que la función de onda se está deformando y, por tanto, el vacío es un medio dispersivo, puesto que la función de onda se deforma.

A partir de la relación de dispersión podemos calcular la velocidad de fase de las ondas de materia:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v_{cl}}{2}$$

La velocidad de fase es la mitad de la velocidad clásica de la partícula. Este resultado, aunque sorprende de entrada, no tiene relevancia, ya que la velocidad que tiene sentido y que, por tanto, debe coincidir con la velocidad clásica de la partícula es la velocidad de grupo y no la velocidad de fase. Vamos a repasar brevemente el concepto de velocidad de grupo. Supongamos que tenemos una partícula descrita mediante un paquete de ondas unidimensional formado por tres ondas armónicas de número de ondas k , $k + dk$, y $k - dk$. Las frecuencias angulares correspondientes serán ω , $\omega + d\omega$, y $\omega - d\omega$:

$$\psi(x, t) = A [e^{i(kx - \omega t)} + e^{i[(k+dk)x - (\omega+d\omega)t]} + e^{i[(k-dk)x - (\omega-d\omega)t}]]$$

La primera onda armónica se desplaza a una velocidad ω/k , que es su velocidad de fase. Esto lo podemos ver fácilmente fijándonos en el punto que tiene fase nula en cada instante, de modo que $kx - \omega t = 0$, y:

$$x = \frac{\omega}{k}t$$

De la misma forma, la segunda onda armónica se desliza a una velocidad $(\omega + d\omega) / (k + dk)$. Ahora bien, como $d\omega$ y dk son cantidades diferenciales, esta velocidad de fase será prácticamente igual a ω/k . Lo mismo ocurre con la tercera onda armónica. Aunque se desplace a una velocidad $(\omega - d\omega) / (k - dk)$, esta será también prácticamente igual a ω/k . Es decir, que la función de onda $\psi(x, t)$ es una superposición de ondas armónicas que se desplazan todas a una velocidad aproximadamente igual a ω/k , por tanto, podemos pensar que la partícula a la que representa viaja aproximadamente a esa velocidad. Vamos a ver que no es así.

Reagrupando términos, se puede escribir de la siguiente forma:

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} [1 + 2 \cos(dk x - d\omega t)]$$

Podemos ver ahora cómo evoluciona la densidad de probabilidad, calculando el módulo al cuadrado de la función de onda:

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t)\psi(x, t) = |A|^2 [1 + 2 \cos(dk x - d\omega t)]^2$$

Esta densidad de probabilidad se desliza a una velocidad que vale $d\omega/dk$. Lo podemos ver si nos fijamos en el punto en el que la fase del coseno se anula:

$$dk x - d\omega t = 0 \quad \implies \quad x = \frac{d\omega}{dk} t$$

Esta velocidad se conoce como la velocidad de grupo:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

La velocidad de grupo es la velocidad con la que se desliza un paquete de ondas (grupo). Podemos calcular cuánto vale la velocidad de grupo para las ondas de materia a partir de la relación de dispersión:

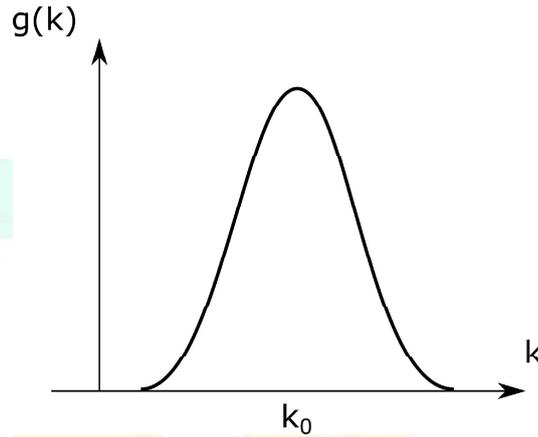
$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d \hbar k^2}{d\omega 2m} = \frac{\hbar k}{m} = v_{cl}$$

es decir, que la velocidad de grupo sí que coincide con la velocidad clásica de la partícula. Estamos viendo que para el caso de una partícula libre, la descripción ondulatoria tiene algunas similitudes con la descripción corpuscular. El resultado que hemos encontrado se puede generalizar para un paquete de ondas arbitrario. El paquete de ondas más general que puede describir el movimiento unidimensional de una partícula viene dado por una superposición lineal de todas las ondas armónicas:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

Cada onda armónica está caracterizada por un valor de k , ya que ω está relacionado con k a través de la relación de dispersión. La función $g(k)$ es el peso que le damos a la onda armónica de número de ondas k , dentro de la superposición lineal.

En general, la función $g(k)$ es compleja, pero para el razonamiento que vamos a realizar conviene considerar un caso sencillo en el que $g(k)$ sea una función real. Vamos a suponer que la función $g(k)$ tiene una forma similar a la que se muestra en la siguiente figura, es decir, que tiene un máximo para un cierto valor del número de ondas k_0 .



Es decir, que el número de ondas al que le estamos dando un mayor peso es k_0 y como el número de ondas está relacionado con la cantidad de movimiento podemos suponer que la cantidad de movimiento de la partícula será $\hbar k_0$ y su velocidad $v = \hbar k_0/m$.

Ahora bien, el paquete de ondas de la ecuación anterior tendrá su máximo donde se produzca una superposición de las ondas que forman el paquete (donde se produzca una interferencia constructiva) y esto se producirá cuando la fase de la exponencial sea estacionaria para $k \simeq k_0$. Para que la fase sea estacionaria (que no varíe con k) tenemos que imponer que su derivada respecto de k sea cero, es decir:

$$\frac{d}{dk} (kx - \omega(k)t)_{k=k_0} = x - \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)_{k=k_0} t = x - \frac{\hbar k_0}{m} t = 0$$

Por tanto, en el instante t , el valor de x para el que la función $\psi(x, t)$ será máxima es el que verifica la condición anterior. Si $\psi(x, t)$ es máxima la densidad de probabilidad será máxima. Por tanto, la posición x para la que tendremos mayor probabilidad de encontrar a la partícula en el instante t será:

$$x = \frac{\hbar k_0}{m} t$$

y este punto se desplaza a la velocidad $\hbar k_0/m$ que habíamos predicho anteriormente.

En la página web <http://www.hbarra.es> hay varias aplicaciones que permiten entender mejor lo que hemos visto en este apartado. Se trata de "Dispersión de un sistema de partículas", "Velocidad de fase y de grupo" e "Integral tipo Fourier".