



## Ayudantía 3: Estados estacionarios

Fabián Cádiz

### 0.1. La ecuación de Schrödinger

La ecuación de onda  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) = -\hbar^2/2m\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x}, t)$  se deduce a partir de la estructura de las ondas de de Broglie. La primera gran contribución de Schrödinger fue incorporar los efectos de una fuerza cuando una partícula se encuentra sumergida en un potencial  $V(\vec{x})$ .

#### 0.1.1. Ecuación de movimiento

##### Principio IIb: Ecuación de Schrödinger

Cuando una partícula se encuentra bajo la influencia de un potencial  $V(\vec{x})$ , la evolución en el tiempo de la función de onda se rige por la ecuación de Schrödinger:

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

**Notas:**

1. La ecuación de Schrödinger es lineal, conforme al principio de superposición.
2. Es una ecuación a derivadas parciales de primer orden en el tiempo: ella determina completamente la función de onda a todo instante si se conoce la función de onda a un instante inicial  $t_0$
3. La función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  de una partícula en un potencial puede siempre escribirse bajo la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}} d^3p \varphi(\vec{p}, t) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

donde  $\varphi(\vec{p}, t)$  es la transformada de Fourier de  $\psi(\vec{x}, t)$ . Como para una partícula libre,  $|\varphi(\vec{p}, t)|^2$  es la densidad de probabilidad para la distribución de momentum al instante  $t$ . Además, las relaciones de incertidumbres siguen siendo válidas para una partícula en un potencial,  $\Delta x_i \Delta p_i \geq \hbar/2 \quad \forall t$ , con  $i = x, y, z$ .

### 0.1.2. Reinterpretación de las medidas de posición y momentum

Como hemos visto, la función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  y su transformada de Fourier  $\varphi(\vec{p}, t)$  dan las leyes de probabilidad de la posición  $\vec{x}$  y del momentum  $\vec{p}$ . Los valores medios correspondientes son<sup>1</sup>:

$$\langle \vec{x} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \vec{x} |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x})^* [\vec{x} \psi(\vec{x})] \quad (1)$$

$$\langle \vec{p} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \vec{p} |\varphi(\vec{p}, t)|^2 \quad (2)$$

La idea será generalizar esto para diferentes cantidades físicas, y la idea es poder expresar todo directamente a partir de la función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$ . En cuanto a  $\langle \vec{x} \rangle_t$ , la expresión (1) conviene perfectamente. Sin embargo, la expresión de  $\langle \vec{p} \rangle_t$  debe ser transformada, pues no depende explícitamente de  $\psi(\vec{x}, t)$ . Esto ya lo hicimos en la ayudantía anterior utilizando las propiedades de la transformada de Fourier:

$$\langle p_x \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}, t)^* [-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{x}, t)] \quad (3)$$

Esta expresión cumple con lo requerido, ya que permite expresar directamente  $\langle p_x \rangle_t$  a partir de  $\psi(\vec{x}, t)$ . Reagrupando las 3 relaciones análogas a (3) para las componentes  $p_x, p_y, p_z$ , se obtiene:

$$\langle \vec{p} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\vec{x}, t) [\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t)]$$

La estructura de esta expresión será generalizada a toda cantidad física.

### 0.1.3. Producto interno y norma

Sea  $L^2(\mathbb{R}^3)$  el espacio vectorial de las funciones a valores complejos de cuadrado integrable, es decir  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |f|^2 < \infty$ . Entonces se define el producto escalar como:

$$(f_1, f_2) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3x f_1(\vec{x})^* f_2(\vec{x})$$

Se puede verificar que cumple las propiedades de un producto escalar<sup>2</sup>, es decir:

1.  $\forall f \in L^2(\mathbb{R}^3)$

$$(f, f) \geq 0 \quad \text{y} \quad (f, f) = 0 \leftrightarrow f \equiv 0$$

2.  $\forall f, g \in L^2(\mathbb{R}^3)$

$$(f, g) = (g, f)^*$$

3.  $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \forall f, g, h \in L^2(\mathbb{R}^3)$

$$(f, \alpha g + \beta h) = \alpha (f, g) + \beta (f, h) \quad \text{lineal en el segundo argumento}$$

4.  $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \forall f, g, h \in L^2(\mathbb{R}^3)$

$$(\alpha f + \beta h, g) = \alpha^* (f, g) + \beta^* (h, g) \quad \text{antilineal en el segundo argumento}$$

<sup>1</sup>El subíndice  $t$  en (1) y (2) indican que en general estos valores dependen del tiempo

<sup>2</sup>Bajo la convención de que dos funciones son iguales si difieren en un conjunto de medida nula

La norma de una función de cuadrado integrable se define a partir del producto escalar:

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)} \geq 0, \quad \|f\| = 0 \leftrightarrow f \equiv 0$$

En particular, las funciones de onda cumplen:

$$\|\psi\| = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x})^* \psi(\vec{x})} = 1$$

Se dice que son normalizadas o de norma 1.

### 0.1.4. Cantidades físicas y observables

#### Principio III

A cada cantidad física  $A$ , se le puede asociar un **observable**  $\hat{A}$ , que es un operador lineal hermítico actuando en el espacio de las funciones de onda. Si el estado de la partícula se describe por la función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$ , el valor medio  $\langle a \rangle$  de los resultados de una medida de la cantidad  $A$  al instante  $t$  está dado por:

$$\langle a \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\vec{x}, t) [\hat{A}\psi(\vec{x}, t)] \quad (4)$$

**Notas:**

1. Un operador lineal es una aplicación del espacio en si mismo :  $\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \chi(\vec{x}, t) = \hat{A}\psi(\vec{x}, t)$ .  
Un operador  $\hat{A}$  es hermítico si:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x [\hat{A}\psi_2]^* \psi_1 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_2^* [\hat{A}\psi_1] \quad (5)$$

para todo par de funciones  $\psi_1, \psi_2$ . Esto garantiza que el valor medio definido en 4 es un número real.

2. Si el observable  $\hat{A}$  está asociado a la cantidad  $A$ , el operador  $\hat{A}^2$  será asociado al cuadrado de la cantidad  $A$ . En consecuencia, se puede igualmente utilizar (4) para calcular el valor medio de  $\langle a^2 \rangle_t$ , y la desviación en los resultados está dada por:

$$\Delta a_t^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\vec{x}, t) [\hat{A}^2\psi(\vec{x}, t)] - \langle a \rangle_t^2 \quad (6)$$

3. La expresión (4) se puede reescribir en términos del producto interno definido sobre el espacio de las funciones de cuadrado integrable:

$$\langle a \rangle = (\psi, \hat{A}\psi)$$

### 0.1.5. Observables posición, momentum y hamiltoniano

Para la cantidad física asociada a la posición  $\vec{x}$ , el principio III (4) y la expresión (1) muestran que el operador  $\hat{r}$  asociado a la posición es simplemente la multiplicación por  $\vec{x}$  de la función de onda. (Se trata en realidad de un conjunto de 3 operadores,  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{z}$ ):

$$\hat{x}_i\psi(\vec{x}) = x_i\psi(\vec{x}) \quad , \quad \hat{x}_i = x_i \quad i = x, y, z$$

Para el observable momentum  $\hat{p}$ , la ecuación (2) nos da la expresión fundamental:

$$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

El operador  $\hat{H}$  asociado a la energía total es llamado **hamiltoniano** del sistema. Se define por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

en analogía a la expresión de la energía de una partícula en mecánica clásica. La ecuación de Schödinger se puede reescribir en términos del operador hamiltoniano:

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

La cual será extendida a todo sistema cuántico.

### 0.1.6. Conmutación de observables

Notemos primero una propiedad remarcable de los observables posición y momentum: estos operadores no conmutan. Por ejemplo, los operadores  $\hat{x}\hat{p}_x$  y  $\hat{p}_x\hat{x}$  no son iguales. En efecto:

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi = \hat{x}[\hat{p}_x\psi] = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

pero:

$$\hat{p}_x\hat{x}\psi = \hat{p}_x[\hat{x}\psi] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \hat{x}\hat{p}_x\psi - i\hbar\psi$$

Se obtiene, definiendo  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  como el **conmutador** de dos operadores:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \equiv \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar\hat{I}$$

donde  $\hat{I}$  es el operador identidad. Por otro lado, es claro que los operadores  $\hat{x}$  y  $\hat{p}_y$  conmutan. En general, designando  $\hat{x}_i, \hat{p}_i, i = x, y, z$  las componentes de  $\vec{x}$  y  $\vec{p}$ :

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{jk}$$

### 0.1.7. Funciones propias y valores propios de un observable

Sea un observable  $\hat{A}$ . Se dice que  $\psi_\alpha(\vec{x})$  es una función propia de este operador, y  $a_\alpha$  su valor propio correspondiente, si  $\psi_\alpha$  no es idénticamente nula y si la relación siguiente se cumple:

$$\hat{A}\psi_\alpha(\vec{x}) = a_\alpha\psi_\alpha(\vec{x}) \quad (7)$$

Por ejemplo, las funciones propias del operador momentum  $-i\hbar\vec{\nabla}$  son las ondas planas  $\psi_{\vec{p}_0} = e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{x}/\hbar}$ . El valor propio correspondiente a  $\psi_{\vec{p}_0}$  es  $\vec{p}_0$ . Se debe notar que los valores propios de un operador hermítico son reales. En efecto, a partir de (7) y multiplicando por  $\psi_\alpha^*$ , se tiene:

$$\psi_\alpha(\vec{x})^*[\hat{A}\psi_\alpha(\vec{x})] = a_\alpha|\psi_\alpha(\vec{x})|^2$$

$$a_\alpha = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_\alpha^*(\vec{x})[\hat{A}\psi_\alpha(\vec{x})]}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi_\alpha(\vec{x})|^2}$$

Como  $\hat{A}$  es hermítico:

$$a_\alpha^* = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x [\hat{A}\psi_\alpha(\vec{x})]^* \psi_\alpha(\vec{x})}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi_\alpha(\vec{x})|^2} = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_\alpha(\vec{x})^* [\hat{A}\psi_\alpha(\vec{x})]}{\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi_\alpha(\vec{x})|^2} = a_\alpha \quad \rightarrow \quad a_\alpha \in \mathbb{R}$$

### 0.1.8. Teorema

La medida al instante  $t$  de la cantidad física  $A$  da el resultado  $a$  con certeza (es decir, con probabilidad 1) si y solo si la función de onda al instante  $t$  es una función propia  $\psi_\alpha(\vec{x})$  del observable  $\hat{A}$ . El resultado  $a$  es entonces el valor propio  $a_\alpha$ , asociado a  $\psi_\alpha(\vec{x})$ .

La demostración es la siguiente:

Si  $\psi$  es función propia de  $\hat{A}$  con valor propio  $a_\alpha$ , de forma evidente el valor medio  $\langle a \rangle$  vale  $a_\alpha$  (suponiendo que  $\psi$  está normalizada a 1,  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi|^2 = 1$ ). Además,  $\psi$  es función propia de  $\hat{A}^2$  con autovalor  $a_\alpha^2$ . En consecuencia, la varianza  $\Delta a^2$  se anula.

Recíprocamente, consideremos la norma al cuadrado de la función  $(\hat{A} - \langle a \rangle \hat{I}) \psi$ , donde  $\hat{I}$  es la identidad:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\hat{A}\psi(\vec{x}) - \langle a \rangle \psi(\vec{x})|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left( (\hat{A}\psi(\vec{x}))^* - \langle a \rangle \psi(\vec{x})^* \right) \left( \hat{A}\psi(\vec{x}) - \langle a \rangle \psi(\vec{x}) \right) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left\{ (\hat{A}\psi(\vec{x}))^* \hat{A}\psi(\vec{x}) - (\hat{A}\psi(\vec{x}))^* \langle a \rangle \psi(\vec{x}) - \langle a \rangle \psi(\vec{x})^* \hat{A}\psi(\vec{x}) + \langle a \rangle^2 |\psi(\vec{x})|^2 \right\} \end{aligned}$$

Como  $\hat{A}$  es un operador hermítico (ver definición, ecuación (5)), el primer término queda:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x (\hat{A}\psi(\vec{x}))^* \hat{A}\psi(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x})^* \hat{A}^2 \psi(\vec{x}) = \langle a^2 \rangle$$

y por la misma razón, los dos centrales son idénticos y valen:

$$\langle a \rangle \int_{\mathbb{R}^3} d^3x (\hat{A}\psi(\vec{x}))^* \psi(\vec{x}) = \langle a \rangle \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x})^* \hat{A}\psi(\vec{x}) = \langle a \rangle \langle a \rangle = \langle a \rangle^2$$

En consecuencia:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\hat{A}\psi(\vec{x}) - \langle a \rangle \psi(\vec{x})|^2 = \langle a^2 \rangle - 2\langle a \rangle^2 + \langle a \rangle^2 = \Delta a^2$$

Así, si la dispersión es nula, la norma del vector  $(\hat{A} - \langle a \rangle) \psi(\vec{x})$  es nula, y eso ocurre ssi este último es el vector nulo:

$$(\hat{A} - \langle a \rangle) \psi(\vec{x}) = 0, \quad \rightarrow \quad \hat{A}\psi(\vec{x}) = \langle a \rangle \psi(\vec{x})$$

### 0.1.9. Propiedad de ortogonalidad de dos autofunciones de un operador hermítico

Dos funciones  $f_1$  y  $f_2$  son ortogonales si:

$$(f_1, f_2) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x f_1^*(\vec{x})f_2(\vec{x}) = 0$$

Si  $\psi_\alpha$  y  $\psi_\beta$  son dos funciones propias de un operador hermítico correspondientes a valores propios  $a_\alpha$  y  $a_\beta$  diferentes, ellas son ortogonales. En efecto:

$$(\psi_\alpha, \hat{A}\psi_\beta) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_\alpha^*[\hat{A}\psi_\beta] = a_\beta \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_\alpha^*(\vec{x})\psi_\beta(\vec{x})$$

y por ser  $\hat{A}$  hermítico, esto es igual a:

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x [\hat{A}\psi_\alpha]^*\psi_\beta = a_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_\alpha^*(\vec{x})\psi_\beta(\vec{x})$$

Si  $a_\alpha \neq a_\beta$ , necesariamente  $(\psi_\alpha, \psi_\beta) = 0$ , es decir, son ortogonales.

### 0.1.10. Funciones propias de la energía y estados estacionarios

En todo sistema cuántico, el observable energía, o hamiltoniano, juega un rol privilegiado. Recordar que la ecuación de Schrödinger se puede escribir:

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

Es decir, la energía gobierna la evolución temporal del sistema.

Supongamos un sistema aislado, es decir, el potencial no depende explícitamente del tiempo. Consideremos las funciones propias del hamiltoniano, definidas por la ecuación a valores propios:

$$\hat{H}\psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha\psi_\alpha(\vec{x}) \quad (8)$$

donde  $E_\alpha$  son los valores propios, que son reales para un operador hermítico. Estas funciones de onda particulares corresponden a estados del sistema que tienen una energía bien definida  $E_\alpha$  (Ver el teorema 0.1.8). A partir de ellas uno obtiene soluciones de la ecuación de Schrödinger de la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_\alpha(\vec{x})e^{-iE_\alpha t/\hbar} \quad (9)$$

que son llamadas estados estacionarios.

#### Notas

1. La probabilidad de presencia para un estado estacionario (9) es independiente del tiempo:

$$|\psi(\vec{x}, t)|^2 = |\psi_\alpha(\vec{x})|^2$$

2. El valor medio de todo observable  $\hat{A}$  que no depende explícitamente del tiempo es igualmente constante en el tiempo:

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\vec{x}, t)[\hat{A}\psi(\vec{x}, t)] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_\alpha^*(\vec{x})[\hat{A}\psi_\alpha(\vec{x})]$$

3. Notamos la propiedad siguiente: Un estado de energía bien definida no está en *movimiento*. Tanto la probabilidad de presencia en el espacio como el valor medio de su posición son independientes del tiempo!. Para que un estado evolucione en el tiempo, se debe tener una superposición de estados estacionarios de energía diferente. Se verá más adelante que si  $\Delta E$  es la dispersión en la energía de un sistema, y si  $\tau$  es el tiempo característico de evolución de este último, entonces:

$$\Delta E \tau \geq \hbar/2$$

Esta relación se llama incertidumbre tiempo-energía. Sin embargo, existe una gran diferencia con el principio de incertidumbre visto anteriormente,  $\tau$  no es una variable aleatoria. En el caso límite de un estado estacionario,  $\Delta E = 0$ ,  $\tau = \infty$ .

## 0.2. Estados propios de la energía y evolución temporal

Explicitando el hamiltoniano, la ecuación a valores propios (8) es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi_\alpha(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha \psi_\alpha(\vec{x})$$

que es llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Sus soluciones definen un conjunto  $\{E_\alpha, \psi_\alpha(\vec{x})\}$  de valores propios y de funciones propias de la energía. Los números  $E_\alpha$  son los **niveles de energía del sistema**. Consideremos ahora una función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  que en  $t = 0$  es una superposición de estados estacionarios:

$$\psi(\vec{x}, 0) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{x}) \tag{10}$$

Dado que la ecuación de Schrödinger es lineal, la evolución en el tiempo de esta función de onda se escribe inmediatamente:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-iE_{\alpha}t/\hbar} \psi_{\alpha}(\vec{x})$$

Veremos más adelante que en virtud del teorema espectral de Riesz, toda función de onda conocida en  $t = 0$  se puede desarrollar según (10), con:

$$C_{\alpha} = (\psi_{\alpha}, \psi(\vec{x}, 0)) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_{\alpha}(\vec{x})^* \psi(\vec{x}, 0)$$

donde las funciones  $\psi_{\alpha}$  son de norma 1. En consecuencia, la evolución temporal de toda función de onda para un sistema aislado ( $V$  no depende explícitamente del tiempo) es inmediatamente conocida si se conocen las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger. La resolución de un problema de mecánica cuántica para un sistema aislado pasa entonces por la determinación de las funciones propias y valores propios de la energía.

### Problema 1: Funciones de onda reales

---

Sea una función de onda  $\psi(x)$  real. Muestre que  $\langle p \rangle = 0$

#### Solución

Se tiene

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x) [\hat{p}\psi(x)] = -i\hbar \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \\ \langle p \rangle &= -\frac{i\hbar}{2} \int_{\mathbb{R}} dx \frac{\partial}{\partial x} \{\psi(x)^2\}\end{aligned}$$

Finalmente:

$$\langle p \rangle = -\frac{i\hbar}{2} [\psi^2] \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

### Problema 2: Estados isotrópicos del átomo de Hidrógeno

---

Los niveles de energía de los estados con simetría esférica del átomo de hidrógeno se obtienen por el cálculo unidimensional siguiente. Considere un electrón de masa  $m$  en un potencial  $V(x)$  tal que  $V = \infty$  si  $x \leq 0$ ,  $V = -A/x$  si  $x > 0$ , donde  $A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ , con  $e$  la carga elemental. Se define  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 1/137$  (constante de estructura fina), donde  $c$  es la velocidad de la luz.

- Muestre que la función de onda  $\psi(x) = Cxe^{-x/a}$  para  $x \geq 0$  y  $\psi(x) = 0$  para  $x < 0$  es función propia del hamiltoniano para un valor de  $a$  que se debe determinar. Calcule el valor propio  $E$  correspondiente, expréselo en términos de  $a, m, \alpha, \hbar$  y  $c$ .
- Calcule numéricamente  $E$  y  $a$ . Utilice  $mc^2 = 5,11 \times 10^5$  eV y  $\hbar c = 197$  eV nm.
- Determine la constante de normalización  $C$  en función de  $a$ .
- Calcule el valor medio de  $1/x$  en el estado  $\psi$  y deduzca el valor medio de la energía potencial. Calcule el valor medio de la energía cinética. Qué relación válida en mecánica clásica encuentra entre estas 2 cantidades?

#### Solución

a) El operador hamiltoniano en este caso es:

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{A}{x}$$

Se tiene, para  $\psi(x) = Cxe^{-x/a}$ :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx} \{Cxe^{-x/a}\} &= Ce^{-x/a} - \frac{C}{a}xe^{-x/a} \\ \frac{d^2}{dx^2} \{Cxe^{-x/a}\} &= -\frac{2C}{a}e^{-x/a} + \frac{C}{a^2}xe^{-x/a} = -\frac{2}{ax}\psi(x) + \frac{1}{a^2}\psi(x)\end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$\hat{H}\psi(x) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\psi(x) - \frac{\hbar^2}{2ma^2}\psi(x) - \frac{A}{x}\psi(x)$$

Si se cumple  $A = \hbar^2/(ma)$ , entonces:



$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

La energía asociada a este estado es:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{mA^2}{2\hbar^2} = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}$$

Finalmente:

$$E = -\frac{mc^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar c)^2} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2}$$

b) Tenemos:

$$a = \frac{\hbar^2}{mA} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{\alpha mc}$$

$$a = 137 \frac{\hbar c}{mc^2} = 137 \frac{197 \text{ eV nm}}{5,11 \times 10^5 \text{ eV}} = 0,053 \text{ nm} \sim 0,5 \text{ \AA}$$

y

$$E = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} = \frac{5,11 \times 10^5}{2 (137)^2} = -13,6 \text{ eV}$$

$a = a_0$  es el radio de Bohr,  $E = -13,6 \text{ eV}$  es la energía de ionización del átomo de Hidrógeno:  $\psi(x)$  es el estado fundamental de un electrón en el átomo de Hidrógeno.

c) La condición de normalización para la función de onda  $\psi$  es:

$$\int_{\mathbb{R}} dx |\psi(x)|^2 = \int_0^\infty dx |\psi(x)|^2 = 1$$

Se tiene

$$\int_0^\infty dx C^2 x^2 e^{-2x/a} = C^2 \int_0^\infty dx x^2 e^{-2x/a}$$

Consideremos la integral:

$$I(\lambda) = \int_0^\infty dx e^{-2\lambda x/a} = \frac{a}{2\lambda}$$

luego:

$$\frac{dI}{d\lambda} = -\frac{2}{a} \int_0^\infty dx x e^{-2\lambda x/a} = -\frac{a}{2\lambda^2}$$

$$\frac{d^2I}{d\lambda^2} = \frac{4}{a^2} \int_0^\infty dx x^2 e^{-2\lambda x/a} = \frac{a}{\lambda^3}$$

Evaluando esta última identidad en  $\lambda = 1$ :

$$\int_0^{\infty} dx x^2 e^{-2x/a} = \frac{a^3}{4}$$

Se deduce:

$$\int_{\mathbb{R}} dx |\psi(x)|^2 = \frac{C^2 a^3}{4} = 1$$

La constante de normalización vale:

$$C = \frac{2}{a^{3/2}}$$

d) Se tiene:

$$\langle 1/x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x)^* \frac{1}{x} \psi(x)$$

$$\langle 1/x \rangle = \int_0^{\infty} dx C^2 x e^{-2x/a} = \frac{4}{a^3} \int_0^{\infty} dx x e^{-2x/a}$$

Esta última integral se puede obtener evaluando la primera derivada de  $I(\lambda)$  en  $\lambda = 1$ :

$$\int_0^{\infty} dx x e^{-2x/a} = \frac{a^2}{4}$$

Luego:

$$\langle 1/x \rangle = \frac{1}{a}$$

Se deduce:

$$\langle V \rangle = -A \langle \frac{1}{x} \rangle = -\frac{A}{a} = -\frac{mA^2}{\hbar^2} = -mc^2 \alpha^2 = 2E$$

Y:

$$\langle E \rangle = E = \langle p^2/2m \rangle + \langle V \rangle$$

Así:

$$\langle p^2/2m \rangle = E - \langle V \rangle = -E$$

Encontramos la relación:

$$\langle p^2/2m \rangle = \frac{1}{2} \langle \frac{A}{x} \rangle$$

lo que también es cierto en mecánica clásica si se realiza un promedio sobre una órbita circular (teorema del Virial).

### Problema 3: Partícula en una caja

Una partícula está en el ground-state de una caja unidimensional de largo  $L$ , cuya función de onda viene dada por:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-i\pi^2 \hbar t / (2mL^2)}$$

En  $t = 0$  las paredes se disuelven espontáneamente y la partícula se mueve libremente. Cuál es la probabilidad de que, después de  $t = 0$ , el momentum de la partícula esté entre  $p$  y  $p + dp$ ? . Dibuje aproximadamente  $|\psi(p)|^2$  en función de  $p$ .

#### Solución

Para encontrar la densidad de probabilidad del momentum debemos encontrar  $\psi(p, t)$ . En  $t = 0$  tenemos:

$$\psi(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, 0) e^{-ipx/\hbar}$$

y sabemos que  $\psi(p, t) = \psi(p, 0) e^{-ip^2 t / (2m\hbar)}$ , por lo que  $|\psi(p, t)|^2 = |\psi(p, 0)|^2$ . (Resultado ya conocido para una partícula libre).

$$\psi(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{[0, L]} dx \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-ipx/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{L\pi\hbar}} \int_{[0, L]} dx \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-ipx/\hbar}$$

$$\psi(p, 0) = \frac{1}{2i\sqrt{L\pi\hbar}} \left\{ \int_{[0, L]} dx e^{ix(\frac{\pi\hbar}{L} - p)/\hbar} - \int_{[0, L]} dx e^{-ix(\frac{\pi\hbar}{L} + p)/\hbar} \right\}$$

Llamaremos  $p_0 = \pi\hbar/L$ , y entonces:

$$\psi(p, 0) = \frac{1}{2i\sqrt{L\pi\hbar}} \left\{ \frac{\hbar}{i(p_0 - p)} e^{ix(p_0 - p)/\hbar} \Big|_0^L - \frac{\hbar}{i(p_0 + p)} e^{-ix(p_0 + p)/\hbar} \Big|_0^L \right\}$$

$$\psi(p, 0) = -\frac{1}{2\sqrt{L\pi\hbar}} \left\{ -\frac{\hbar(1 + e^{-ipL/\hbar})}{(p_0 - p)} + \frac{\hbar(1 + e^{-ipL/\hbar})}{(p_0 + p)} \right\}$$

$$\psi(p, 0) = \frac{\hbar}{2\sqrt{L\pi\hbar}} (1 + e^{-ipL/\hbar}) \left\{ \frac{1}{(p_0 - p)} - \frac{1}{(p_0 + p)} \right\}$$

$$\psi(p, 0) = \frac{\hbar}{\sqrt{L\pi\hbar}} (1 + e^{-ipL/\hbar}) \frac{p_0}{(p_0^2 - p^2)} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{L\pi\hbar}} \frac{\pi}{L} \frac{(1 + e^{-ipL/\hbar})}{(p_0^2 - p^2)} = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi L}} p_0 \left( \frac{1 + e^{-ipL/\hbar}}{p_0^2 - p^2} \right)$$

Con esto, la densidad de probabilidad es:

$$|\psi(p, 0)|^2 = \frac{\hbar}{\pi L} p_0^2 \frac{|1 + e^{-ipL/\hbar}|^2}{(p_0^2 - p^2)^2}$$

pero

$$|1 + e^{-ipL/\hbar}|^2 = 1 + e^{ipL/\hbar} + e^{-ipL/\hbar} + 1 = 2 + 2 \cos(pL/\hbar) = 4 \cos^2\left(\frac{pL}{2\hbar}\right)$$

Con esto, se obtiene finalmente:

$$|\psi(p, 0)|^2 = \frac{\hbar}{\pi L} \left( \frac{2p_0 \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right)}{p^2 - p_0^2} \right)^2$$

donde  $p_0 = \frac{\hbar\pi}{L}$ . La densidad de probabilidad es simétrica en torno al origen ( $\langle\psi\rangle = 0$ ), lo cual se puede anticipar notando que la función de onda en  $t = 0$  es real (ver problema 1). En otras palabras, la partícula tiene igual probabilidad de tener un momentum  $+p$  que  $-p$ . El módulo para el momentum más probable es  $|p| = |p_0|$ , que equivale a una longitud de onda de de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p_0} = \frac{hL}{\pi\hbar} = 2L$$

**Problema 4: Combinación lineal de estados estacionarios**

Sean  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  dos autofunciones normalizadas del hamiltoniano con autoenergías  $E_1$  y  $E_2$  respectivamente ( $E_1 \neq E_2$ ). Considere la combinación lineal:

$$\psi(x, t) = \lambda\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \mu\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}, \quad \lambda, \mu \in \mathbb{C}$$

a) Qué condición sobre  $\lambda$  y  $\mu$  se debe imponer para que  $\psi$  represente la función de onda de una partícula?

b) Calcule  $\langle \hat{x} \rangle$ ,  $\langle H \rangle$ ,  $\Delta \hat{H}$

**Solución**

a) Se debe tener

$$\int_{\mathbb{R}} dx |\psi(x, t)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx (\lambda^* \psi_1(x)^* e^{+iE_1t/\hbar} + \mu^* \psi_2(x)^* e^{+iE_2t/\hbar}) (\lambda \psi_1(x) e^{-iE_1t/\hbar} + \mu \psi_2(x) e^{-iE_2t/\hbar}) = 1$$

Esto es:

$$\int_{\mathbb{R}} dx (|\lambda|^2 |\psi_1|^2 + \lambda^* \mu \psi_1(x)^* \psi_2(x) e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + \lambda \mu^* \psi_1(x) \psi_2^*(x) e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + |\mu|^2 |\psi_2(x)|^2) = 1$$

$$|\lambda|^2 + \lambda^* \mu e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} \psi_1(x)^* \psi_2(x) + \lambda \mu^* e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \psi_1(x) \psi_2^*(x) + |\mu|^2 = 1$$

Por ser  $\psi_1$  y  $\psi_2$  dos autofunciones de  $\hat{H}$  con diferentes valores propios, ellas son ortogonales, es decir:

$$\int_{\mathbb{R}} dx \psi_1^* \psi_2 = \left( \int_{\mathbb{R}} dx \psi_2^* \psi_1 \right) = 0$$

Luego, se debe cumplir:

$$|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$$

b) Tenemos:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x)^* [x\psi(x)]$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx (x|\lambda|^2 |\psi_1|^2 + x\lambda^* \mu \psi_1(x)^* \psi_2(x) e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + x\lambda \mu^* \psi_1(x) \psi_2^*(x) e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + x|\mu|^2 |\psi_2(x)|^2)$$

$$\langle x \rangle_{\psi} = |\lambda|^2 \langle x \rangle_{\psi_1} + |\mu|^2 \langle x \rangle_{\psi_2} + 2\text{Re} \{ \lambda \mu^* e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \} (\psi_1, \hat{x} \psi_2)$$

Se ve que el valor medio de la posición en el estado  $\psi$  contiene un término que depende del tiempo, que oscila con una frecuencia característica dada por

$$w = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

En el caso particular  $\lambda = \mu = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , se tiene:

$$\langle x \rangle_\psi = \frac{1}{2} \langle x \rangle_{\psi_1} + \frac{1}{2} \langle x \rangle_{\psi_2} + (\psi_1, \hat{x} \psi_2) \cos wt$$

Ahora bien:

$$\langle E \rangle = (\psi, \hat{H} \psi)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx (\lambda^* \psi_1(x)^* e^{+iE_1 t/\hbar} + \mu^* \psi_2(x)^* e^{+iE_2 t/\hbar}) \hat{H} (\lambda \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \mu \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar})$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dx (E_1 |\lambda|^2 |\psi_1(x)|^2 + E_1 \lambda^* \mu e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \psi_1(x)^* \psi_2(x) + \mu^* \lambda E_2 e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + E_2 |\mu|^2 |\psi_2(x)|^2)$$

Dado que  $\psi_1$  y  $\psi_2$  son ortogonales:

$$\langle E \rangle = E_1 |\lambda|^2 + E_2 |\mu|^2$$

Dado que  $|\mu|^2 + |\lambda|^2 = 1$ , el resultado se interpreta de la siguiente manera: en un sistema donde los resultados posibles que uno puede encontrar al medir la energía son  $E_1$  y  $E_2$ ,  $|\lambda|^2$  representa la probabilidad de encontrar el valor  $E_1$ , y  $|\mu|^2$  es la probabilidad de encontrar el valor  $E_2$ . Finalmente, calculemos la dispersión :

$$\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

El cálculo de  $\langle E^2 \rangle$  es análogo al de  $\langle E \rangle$ , cambiando  $E_1$  por  $E_1^2$  y  $E_2$  por  $E_2^2$ , luego:

$$\begin{aligned} \Delta E^2 &= (E_1^2 |\lambda|^2 + E_2^2 |\mu|^2) - (E_1 |\lambda|^2 + E_2 |\mu|^2)^2 \\ &= (E_1^2 |\lambda|^2 + E_2^2 |\mu|^2) - |\lambda|^4 E_1^2 - |\mu|^4 E_2^2 - 2E_1 E_2 |\lambda|^2 |\mu|^2 \\ &= E_1^2 |\lambda|^2 \underbrace{(1 - |\lambda|^2)}_{|\mu|^2} + E_2^2 |\mu|^2 \underbrace{(1 - |\mu|^2)}_{|\lambda|^2} - 2E_1 E_2 |\lambda|^2 |\mu|^2 \\ \Delta E^2 &= |\lambda|^2 |\mu|^2 (E_1 - E_2)^2 \end{aligned}$$

Se ve entonces que si se tiene una superposición de dos (o más) estados estacionarios, la energía del estado sigue una ley de probabilidad donde la dispersión no es nula, salvo en los casos particulares en que  $|\mu|$  o  $|\lambda|$  valen 1.

### Problema 5: Efecto Ramsauer

En 1921, Ramsauer había constatado que para ciertos valores particulares de la energía incidente, algunos gases nobles (helio, argón o neón) eran perfectamente transparentes a rayos de electrones de baja energía. Esto se puede explicar en el modelo unidimensional siguiente: Se considera una solución estacionaria de la ecuación de Schrodinger de energía positiva  $E$ , para una partícula de masa  $m$  en el potencial siguiente:  $V(x) = 0$  para  $|x| > a$ ,  $V(x) = -V_0$  para  $|x| \leq a$  ( $V_0 > 0$ ).

Escribiendo  $q^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$ ,  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ , se estudia una solución de la forma:

$$\psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad x \leq -a$$

$$\psi(x) = Be^{iqx} + Ce^{-iqx} \quad -a < x \leq a$$

$$\psi(x) = De^{ikx} \quad x > a$$

- Escriba las relaciones de continuidad en  $x = a$  y  $x = -a$ .
- Definiendo  $\Delta = (q + k)^2 - e^{i4qa}(q - k)^2$ , calcule la probabilidad de transmisión  $T = |D|^2$ . Calcule la probabilidad de reflexión  $R = |A|^2$ . Verifique que  $R + T = 1$ .
- Muestre que  $T = 1$  para ciertos valores de la energía. Interprete el resultado del efecto Ramsauer.
- Para el helio, la energía incidente a la cual se produce el fenómeno es  $E = 0,7 \text{ eV}$ . Suponiendo que el radio del átomo de helio es  $a = 0,1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$ , calcule la profundidad  $V_0$  del pozo de potencial al interior del átomo.

### Solución

a) En  $x = a$  y  $x = -a$  la discontinuidad del potencial es finita, luego  $\psi$  y su derivada son continuas. En  $x = -a$ , esto se traduce por:

$$e^{-ika} + Ae^{ika} = Be^{-iqa} + Ce^{iqa} \quad (11)$$

$$ik(e^{-ika} - Ae^{ika}) = iq(Be^{-iqa} - Ce^{iqa}) \quad (12)$$

En  $x = a$ , la continuidad de  $\psi$  y su derivada implica:

$$Be^{iqa} + Ce^{-iqa} = De^{ika} \quad (13)$$

$$iq(Be^{iqa} - Ce^{-iqa}) = ikDe^{ika} \quad (14)$$

b) De 11 se obtiene :

$$C = e^{-i(k+q)a} + Ae^{i(k-q)a} - Be^{-2iqa}$$

Reemplazando esto último en 12, se obtiene  $B$  en función de  $A$ :

$$B = \frac{(k+q)}{2q}e^{-i(k-q)a} + \frac{(q-k)}{2q}Ae^{i(k+q)a} \quad (15)$$

y por lo tanto  $C$  en función de  $A$ :

$$B = \frac{(q-k)}{2q}e^{-i(k+q)a} + \frac{(q+k)}{2q}Ae^{i(k-q)a} \quad (16)$$

Ahora bien, mutiplicando 11 por  $iq$  y 12 por  $ik$ , la suma de las 2 ecuaciones resultantes da:

$$(q + k)De^{ika} = 2qBe^{iqa}$$

y la diferencia:

$$(q - k)De^{ika} = 2qCe^{-iqa}$$

Utilizando 15 y 16 se obtiene:

$$(q + k)De^{ika} = (k + q)e^{-i(k-2q)a} + (q - k)Ae^{i(k+2q)a} \quad (17)$$

$$(q - k)De^{ika} = (q - k)e^{-i(k+2q)a} + (q + k)Ae^{i(k-2q)a} \quad (18)$$

De 17, se obtiene  $A$  en función de  $D$ :

$$A = \frac{(q + k)}{(q - k)} \{De^{-i2qa} - e^{-2ika}\}$$

Reemplazando en 18 se llega a la expresión:

$$(q - k)De^{ika} = (q - k)e^{-i(k+2q)a} + \frac{(q + k)^2}{(q - k)}e^{-2iqa}e^{ika} \{De^{-i2qa} - e^{-2ika}\}$$

$$(q - k)^2De^{ika} = (q - k)^2e^{-i(k+2q)a} + (q + k)^2De^{-4iqa}e^{ika} - (q + k)^2e^{-i(k+2q)a}$$

Finalmente:

$$D = \frac{4qk}{\Delta}e^{-2i(k-q)a}$$

y de 17:

$$A = \frac{k^2 - q^2}{\Delta}e^{-2ika} (1 - e^{4iqa})$$

Además:

$$|\Delta|^2 = ((q + k)^2 - e^{4iqa}(q - k)^2) ((q + k)^2 - e^{-4iqa}(q - k)^2)$$

$$|\Delta|^2 = (q + k)^4 - (q + k)^2(q - k)^2 (e^{-4iqa} + e^{4iqa}) + (q - k)^4$$

$$|\Delta|^2 = q^4 + 4q^3k + 6q^2k^2 + 4qk^3 + k^4 - 2(k^2 - q^2)^2 \cos 4qa + q^4 - 4q^3k + 6q^2k^2 - 4qk^3 + k^4$$

$$|\Delta|^2 = 2q^4 + 12q^2k^2 + 2k^4 - 2(k^2 - q^2)^2 \cos 4qa = 2q^4 + 12q^2k^2 + 2k^4 - 2(k^2 - q^2)^2 (1 - 2 \sin^2 2qa)$$



$$|\Delta|^2 = 2q^4 + 12q^2k^2 + 2k^4 - 2(k^2 - q^2)^2 + 4(k^2 - q^2) \sin^2(2qa)$$

$$|\Delta|^2 = 16q^2k^2 + 4(k^2 - q^2) \sin^2(2qa)$$

y

$$R = |A|^2 = \frac{4(k^2 - q^2)^2}{|\Delta|^2} \sin^2(2qa) \quad T = |D|^2 = \frac{16k^2q^2}{|\Delta|^2}$$

de donde:

$$R + T = 1$$

c) Para todos los valores de  $q$  tales que  $\sin 2qa = 0$ , es decir para  $qa = n\pi/2$ , la probabilidad de transmisión es igual a 1, y entonces no hay reflexión,  $T = 1, R = 0$ . Esto se produce cuando el largo del pozo  $2a$  es un múltiplo de  $\lambda/2$ , donde  $\lambda = 2\pi/q$  es la longitud de onda de de Broglie de la partícula en el pozo de potencial. Todas las ondas reflejadas interfieren de manera destructiva y el pozo se vuelve transparente a la onda incidente.

d) Las energías correspondientes a  $T = 1$  se obtienen a partir de la condición:

$$qa = n\pi/2$$

y

$$q^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$$

Esto da:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} - V_0$$

Tomando  $n = 1$  y  $E = 0,7 \text{ eV}$ , se tiene:

$$V_0 = 9,4 - 0,7 = 8,7 \text{ eV}$$

## Resumen

1. La descripción del estado de una partícula en el espacio se logra por una función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  donde su módulo cuadrado da la densidad de probabilidad de presencia en el punto  $\vec{x}$  al instante  $t$ .
2. La evolución en el tiempo de la función de onda de una partícula colocada en un potencial  $V(\vec{x})$  se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger:

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

donde el observable energía  $\hat{H}$ , o hamiltoniano del sistema, es:

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

3. La amplitud de probabilidad del momentum de la partícula está dado por la transformada de Fourier de la función de onda:

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}, t) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

4. Esto lleva a la relación de incertidumbre de Heisenberg que relaciona las dispersiones sobre las medidas de posición y momentum:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

5. A cada magnitud física se le asocia un observable, operador lineal hermítico actuando sobre las funciones de onda. El valor medio  $\langle a \rangle_t$  al instante  $t$  de la medida de la cantidad  $A$  es:

$$\langle a \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}, t) [\hat{A} \psi(\vec{x}, t)]$$

6. El observable posición  $\hat{x}$  corresponde a la multiplicación por  $\vec{x}$  de la función de onda. El observable momentum es:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Estos dos observables no conmutan, se tiene  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

7. Si la función de onda es función propia del observable  $\hat{A}$  correspondiente al valor propio  $a_\alpha$ , el resultado de una medida de  $A$  es  $a_\alpha$  con probabilidad uno.
8. Para un sistema aislado en un potencial independiente del tiempo, los estados estacionarios son los estados propios de la energía, con una función de onda de la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_\alpha(\vec{x}) e^{-iE_\alpha t/\hbar}$$

donde  $\psi_\alpha$  es una solución normada ( $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi_\alpha|^2 = 1$ ) de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}\psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha\psi_\alpha(\vec{x})$$

La evolución en el tiempo de toda función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  se escribe inmediatamente una vez conocidas las soluciones estacionarias:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-iE_{\alpha}t/\hbar} \psi_{\alpha}(\vec{x}), \quad \text{con} \quad C_{\alpha} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_{\alpha}^{*}(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t = 0)$$