

3.5 Velocidad, aceleración, $[x, \hat{p}]$ (Clase 3)

Habiendo definido como derivar operadores respecto al tiempo, podríamos ahora ver como es el operador velocidad, recordemos que antes dijimos que no se podía usar el límite de un cociente incremental por el problema de la medición, así que lo vamos a definir como $\hat{v} = \hat{\dot{r}}$, donde el operador posición es simplemente la multiplicación por $\mathbf{r} \equiv \hat{r}$ en esta representación usada (la de posición, ya veremos más sobre esto). Así según la ec.(23) para $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + U(\hat{r})$

$$\begin{aligned}\hat{v} &= \hat{\dot{r}} = i/\hbar[\hat{H}, \mathbf{r}] = i/(2m\hbar)[(-i\hbar\nabla)^2\mathbf{r} - \mathbf{r}(-i\hbar\nabla)^2] \\ &= -i\hbar/2m[2\nabla + \mathbf{r}\nabla^2 - \mathbf{r}\nabla^2] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\end{aligned}\quad (30)$$

donde para obtener esto hemos imaginado una función de onda a la derecha para realizar las derivaciones. Vemos la semejanza con la mecánica clásica en esta definición, que se trasladará también a los autovalores. Un aspecto que no analizamos antes porque queríamos llegar al Hamiltoniano, son las relaciones de conmutación entre los operadores posición e impulso. Notemos que la operación $x_j\partial x_k, j \neq k$ es conmutativa y por lo tanto se cumplirá que $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = 0, j \neq k$, lo que implica que podemos medir a la vez la coordenada de una partícula y la velocidad en direcciones ortogonales a la misma. Sin embargo por ejemplo

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = -i\hbar[x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x]\psi = -i\hbar[x\frac{\partial}{\partial x} - 1 - x\frac{\partial}{\partial x}]\psi = i\hbar\psi \forall \psi \Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad (31)$$

y de igual manera para y, z por lo tanto podemos resumir las relaciones de conmutación entre posición e impulso como

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (32)$$

la cual nos dice que no podemos definir la coordenada e impulso o velocidad de una partícula en la misma dirección, y así no podremos definir la posición y velocidad de una partícula a la vez.

Ahora veamos como definir el vector aceleración, según nuestra receta tendremos (como el operador velocidad no depende explícitamente del tiempo)

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}} &= \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = i/\hbar[\hat{H}, \hat{\mathbf{v}}] = i/m\hbar[\hat{H}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{H}] = i/m\hbar[U\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}U] \\ &= \frac{1}{m}[U\nabla - \nabla U] = \frac{1}{m}[U\nabla - U\nabla - \nabla U] \\ &\Rightarrow m\hat{\mathbf{a}} = -\nabla U,\end{aligned}\quad (33)$$

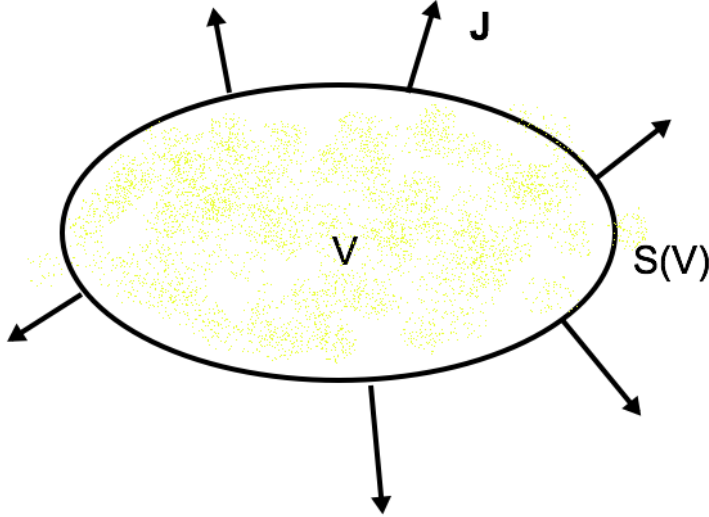
donde hemos supuesto una función de onda a la derecha del conmutador. Esta una ecuación entre operadores, coincide con la expresión de la 2da Ley de Newton.

3.6 Densidad de corriente y ecuación de continuidad

La integral $\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ en un volumen finito dará la probabilidad de encontrar a la partícula en dicho volumen. Si calculamos el cambio en el tiempo de dicha probabilidad tendremos dado que el volumen no cambia con el tiempo y usando la ecuación de Schrödinger

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r &= \int_V [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \partial/\partial t \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi(\mathbf{r}, t) \partial/\partial t \Psi^*(\mathbf{r}, t)] d^3r \\
&= i/\hbar \int_V [-\Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi(\mathbf{r}, t) \hat{H}^* \Psi^*(\mathbf{r}, t)^*] d^3r \\
&= i/\hbar \int_V [-\Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi^*(\mathbf{r}, t)^*] d^3r \\
&= i\hbar/2m \int_V [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t)^*] d^3r \\
&= -i\hbar/2m \int_V (\text{div} = \nabla) [\Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)^* - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)] \\
&= - \int_{S(V)} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{S}, \tag{34}
\end{aligned}$$

que interpretamos diciendo que la disminución (de ahí el -) de la probabilidad en V es el flujo hacia afuera de la probabilidad,



y llamamos densidad de corriente de probabilidad a

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = i\hbar/2m [\Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)^* - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)]. \tag{35}$$

La integral de superficie sobre S da la probabilidad por unidad de tiempo de que la partícula atraviese S .

En forma diferencial

$$\partial/\partial t |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0, \tag{36}$$

la cual se denomina ecuación de continuidad de la probabilidad, análoga a la clásica en diversos casos.

3.7 El espectro continuo

Todas las relaciones deducidas en la subsección 2.2 relativas a las propiedades de las funciones propias del espectro discreto, se pueden generalizar sin dificultad al caso de un espectro continuo de valores propios. Sea $\hat{\lambda}$ una magnitud física que posee espectro continuo. Designaremos sus valores propios simplemente por misma letra λ , sin subíndice, para expresar el hecho de que λ recorre una sucesión continua de valores. La función propia que corresponde al valor propio λ la representaremos por ψ_λ . De manera análoga a como una función de onda arbitraria ψ se puede desarrollar en serie (4) de funciones propias de una magnitud con espectro discreto, cabe también desarrollarla - pero esta vez como integral - tomando como base un sistema completo de funciones propias de una magnitud con espectro continuo. Un desarrollo de esta clase es de la forma (en un dado instante)

$$\psi(q) = \int d\lambda c(\lambda) \psi_\lambda(q), \quad (37)$$

donde la integración se extiende a todo el dominio de valores que puede tomar la magnitud $\hat{\lambda}$. Ahora el postulado de probabilidad lo expresamos diciendo que

$$|c(\lambda)|^2 d\lambda$$

represente la probabilidad de que la magnitud considerada tome valores comprendidos en $(\lambda, \lambda + d\lambda)$, para la función de onda $\psi(q)$.

Esto constituye una inmediata generalización de que $|c_i|^2$ del caso del espectro discreto, en el que determina la probabilidad del correspondiente valor λ_i . Dado que la suma de las probabilidades de todos los valores posibles debe ser igual a la unidad, se tiene:

$$\int |c(\lambda)|^2 d\lambda = 1, \quad (38)$$

y tendremos de acuerdo a esto y a la interpretación de la función de onda que

$$\int \psi^*(q) \psi(q) dq = \int |\psi(q)|^2 dq = \int |c(\lambda)|^2 d\lambda = 1,$$

lo cual usando (37) y comparando con la anterior conduce a

$$\begin{aligned} \int \psi^*(q) \psi(q) dq &= \int \int c_\lambda^* \psi_\lambda(q)^* d\lambda \psi(q) dq = \int c_\lambda^* \left[\int \psi_\lambda(q)^* \psi(q) dq \right] d\lambda, \\ &\downarrow \\ c(\lambda) &= \int \psi_\lambda(q)^* \psi(q) dq. \end{aligned} \quad (39)$$

Ahora veamos la condición de normalización que deberían cumplir las autofunciones ψ_λ para que valgan nuestras suposiciones anteriores. Para deducir la condición de normalización, substituyamos ahora (37) en (39), con lo que se obtendrá:

$$c(\lambda) = \int \psi_\lambda(q)^* \int d\lambda' c(\lambda') \psi_{\lambda'}(q) dq = \int c(\lambda') \left(\int \psi_\lambda(q)^* \psi_{\lambda'}(q) dq \right) d\lambda',$$

y pensando en una función generalizada de λ' (la δ de Dirac) tendremos que deberá ser

$$\int \psi_\lambda(q)^* \psi_{\lambda'}(q) dq = \delta(\lambda' - \lambda), \quad (40)$$

que sabemos no está definida en $\lambda' = \lambda(\delta(0) = \infty)$.

Esta ecuación expresa la normalización de las autofunciones de espectro continuo viéndose ortogonalidad para el caso $\lambda' \neq \lambda$, mientras que ahora la norma

$$\int |\psi_\lambda(q)|^2 dq = \delta(0),$$

es divergente. *O sea la función de onda a representar tiene módulo al cuadrado integrable (paquete de ondas) pero la base en que se la representa no, y este es un problema general de las bases de espectro continuo.*

Las bases de espectro continuo o discreto además cumplen con una llamada relación de clausura. Sustituyendo (39) en (37) se obtiene

$$\begin{aligned} \psi(q) &= \int d\lambda c(\lambda) \psi_\lambda(q) = \int \left[\int d\lambda \psi_\lambda(q')^* \psi_\lambda(q) \right] \psi(q) dq' \\ &\Downarrow \\ \int d\lambda \psi_\lambda(q')^* \psi_\lambda(q) &= \delta(q' - q), \end{aligned} \quad (41)$$

y de igual manera podríamos hacer una demostración para el caso discreto obteniendo ($\int d\lambda \rightarrow \sum_n$)

$$\sum_n \psi_n(q')^* \psi_n(q) = \delta(q' - q).$$

Repitamos y pongamos juntas algunas ecuaciones de arriba

$$\begin{aligned} \psi(q) = \int d\lambda c(\lambda) \psi_\lambda(q) &\longleftrightarrow c(\lambda) = \int \psi(q) \psi_\lambda(q)^* dq \\ \int \psi_\lambda(q)^* \psi_{\lambda'}(q) dq = \delta(\lambda' - \lambda) &\longleftrightarrow \int d\lambda \psi_\lambda(q) \psi_\lambda(q')^* = \delta(q' - q), \end{aligned}$$

de donde vemos que, de una parte, las funciones $\{\psi_\lambda(q)\}$ permiten el desarrollo de la función $\psi(q)$ con los coeficientes del desarrollo $c(\lambda)$ y que por otro lado de la ecuación de la derecha podemos inferir que $\{\psi_\lambda^*(q)\}$ pero ahora tomando a la variable q como índice genera un desarrollo completamente análogo de la función $c(\lambda)$ con coeficientes $\psi(q)$. Tanto $c(\lambda)$ como $\psi(q)$ determinan completamente el estado del sistema. *Decimos que $\psi(q)$ está en la representación- q mientras que $c(\lambda)$ en la representación- λ .* De manera análoga a como $|\psi(q)|^2$ determina la probabilidad de que el sistema tenga coordenadas pertenecientes a un intervalo dado $(q, q + dq)$, $|c(\lambda)|^2$ determina la probabilidad de que los valores de la magnitud λ se encuentren en un intervalo $(\lambda, \lambda + d\lambda)$. Las funciones $\psi_\lambda(q)$, son por un lado funciones propias de la magnitud $\hat{\lambda}$ en la representación q y por otro sus conjugadas complejas son las funciones propias de la coordenada \hat{q} en la representación λ .

Un ejemplo de esto son las autofunciones unidimensionales del impulso

$$\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x, \psi_{p_x}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i/\hbar p_x x} \text{ donde } q \equiv x, \lambda \equiv p_x$$

y entonces por ejemplo

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk, \quad k = \frac{p_x}{\hbar}, \\ A(k) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{ikx})^* \Psi(x) dx. \end{aligned}$$

Consideremos ahora el caso donde hay una relación biunívoca entre λ y $\xi = f(\lambda)$, por lo tanto $\psi_\xi(q)$ autofunción de $f(\hat{\lambda})$. Debemos conectar las normalizaciones cumpliéndose

$$\begin{aligned} \int \psi_{\xi'}^*(q) \psi_\xi(q) dq &= \int \psi_{\xi'=f(\lambda')}^*(q) \psi_{\xi=f(\lambda)}(q) dq = \delta(f(\lambda') - f(\lambda)) \\ &= \frac{1}{\left| \frac{df}{d\lambda} \right|} \delta(\lambda - \lambda'), \end{aligned}$$

donde hemos usado propiedades ya conocidas de la δ y por lo tanto concluimos que

$$\psi_{f(\lambda)}(q) = \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{df}{d\lambda} \right|}} \psi_\lambda(q). \quad (42)$$

Existen magnitudes físicas tales que en un cierto dominio de sus valores poseen un espectro discreto, y en otro, uno continuo. Para las funciones propias de una tal magnitud valen, todas las relaciones que se han deducido. Sólo hay que observar que el sistema completo de funciones está constituido por el conjunto de las funciones propias de ambos espectros. Por consiguiente, el desarrollo de una función de onda cualquiera respecto de las funciones propias de dicha magnitud tiene la forma:

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q) + \int d\lambda c(\lambda) \psi_\lambda(q). \quad (43)$$

Por último mencionemos que a la coordenada q que indica la posición de una partícula se le puede asociar un operador de manera que

$$\begin{aligned} \bar{q} &= \int dq \psi^*(q) \hat{q} \psi(q) = \int dq |\psi(q)|^2 q \\ &\Downarrow \\ \hat{q} \psi(q) &= q \psi(q), \end{aligned}$$

o sea en la representación- q es la multiplicación por q . Las autofunciones deben cumplir

$$\hat{q}\psi_{q_0}(q) = q_0\psi_{q_0}(q),$$

y si ahora escribimos

$$\begin{aligned}\psi(q) &= \int dq_0\psi(q_0)\delta(q - q_0) \\ \hat{q}\psi(q) &= \int dq_0\psi(q_0)\hat{q}\delta(q - q_0) = q\psi(q) \\ &\Downarrow \\ \hat{q}\delta(q - q_0) &= q_0\delta(q - q_0).\end{aligned}$$

es decir autoestados localizados tan irrealizables como los de un impulso dado de extensión infinita. Vemos que los coeficientes del desarrollo son $\psi(q_0)$.

3.8 Paquete de ondas

Pongamoslo como primer ejemplo de descripción de un sistema con la mecánica ondulatoria y la ecuación de Schrodinger y estudiemos que contacto tiene con la mecánica clásica. Como ya dijimos la función de onda de un autoestado de una partícula con impulso \mathbf{p} que es

$$\Psi(\mathbf{r}) = cte e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \mathbf{k}\hbar = \mathbf{p},$$

no es de módulo cuadrado integrable y rigurosamente no podría representar el estado físico de una partícula, así como una onda plana monocromática no es físicamente realizable. Por esta razón construiremos un paquete de ondas con la forma

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int A(\mathbf{k})e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k, \omega\hbar = E = p^2/2m, \\ c_{\mathbf{k}}(t) &= A(\mathbf{k})e^{-i\omega t} (cte = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}),\end{aligned}\tag{44}$$

siendo el coeficiente de expansión de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (comparemos con la ec.(24) que es para desarrollo en autoestados estacionarios discretos) y donde supondremos que $A(\mathbf{k}) \in \mathbb{C}$ es suficientemente regular para poder ser derivable. A diferencia de una onda con un impulso sólo, el paquete (44) puede hacerse de módulo cuadrado integrable y más aún cualquier onda de módulo cuadrado integrable puede ser escrita como en (44).

Vamos a trabajar por simplicidad con un paquete en una dimensión

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)e^{i(kx - \omega t)} dk,\tag{45}$$

que en $t = 0$ tendrá la forma

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)e^{ikx} dk,\tag{46}$$

y donde $A(k)$ será simplemente la transformada de Fourier

$$A(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{ikx})^* \Psi(x, 0) dx, \quad (47)$$

y no es ni mas ni menos que la regla que hemos visto para hallar el coeficiente de la componente de un impulso dado en $\Psi(x, 0)$.

Supongamos que $|A(k)|$ se ve como en la fig.(7) estando centrado en k_0 con un ancho Δk a media altura

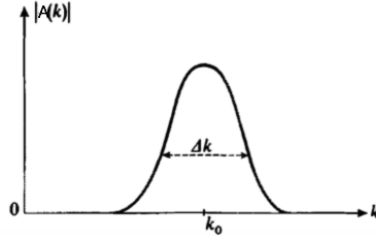


Figura 7: coeficiente del paquete de ondas

Ahora

$$A(k) = |A(k)| e^{i\alpha(k)} \Rightarrow \Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)| e^{i(kx + \alpha(k))} dk,$$

y como hemos pedido que $A(k)$ sea derivable (deben serlo tanto A como α) podemos hacer una expansión alrededor de k_0 , ya que según la figura para k alejados será $|A(k)|$ despreciable, del tipo

$$\alpha(k) = \alpha(k_0) + \alpha'(k_0)(k - k_0) + \dots \approx \alpha(k_0) + \alpha'(k_0)(k - k_0),$$

donde será válida cuando Δk sea pequeño, pues así los diferentes k son cercanos a k_0 , y así el paquete en este caso tendrá la forma

$$\Psi(x, 0) \approx \frac{e^{i(k_0 x + \alpha(k_0))}}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)| e^{i(k-k_0)(x-x_0)} dk, \quad x_0 = -\alpha'(k_0), \quad (48)$$

donde la exponencial $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ tiene una longitud de onda (periodo espacial de oscilación) $\lambda = 2\pi/(k - k_0) \sim 2\pi/\Delta k$ y cuando $|x - x_0| \gg \lambda$ (este procedimiento es sólo estimativo) oscila muchas veces en ese intervalo produciendo contribuciones positivas y negativas que se cancelaran, por otro lado cuando $x \sim x_0$ casi no oscila y la contribución será máxima en la integral. Allí $|\Psi(x_0, 0)|$ será máximo siendo $x_M(t = 0) \equiv x_0$ el centro del paquete de ondas. De esta manera en $t = 0$ el paquete tendrá una extensión espacial Δx tal que

$$\frac{\Delta x}{\lambda} \simeq 1$$

$$\Delta k \Delta x \simeq 2\pi \gtrsim 1,$$

que es una relación conocida para la transformada de Fourier, y nos dice que es imposible construir un paquete donde la extensión en k multiplicada por la extensión en x sea menor que 1.

El máximo del paquete en x también puede hallarse derivando la fase e igualando a cero

$$\frac{d}{dk} (kx + \alpha(k))|_{k_0} = 0 \Rightarrow x = -\alpha'(k_0) = x_0$$

que se llama condición de fase estacionaria donde se esta pidiendo que la fase varíe en forma despreciable para el k_0 donde el modulo $|A(k)|$ es máximo así no tenemos interferencias destructivas.

Veamos la evolución temporal del paquete. Cada onda plana que contribuye al paquete (45) tiene una velocidad de fase $v_\phi = \omega/k$ donde por ejemplo para una onda luminosa en el vacío $\omega = ck$ y por lo tanto $v_\phi = c$ igual para todas las componentes del paquete y por lo tanto el paquete tendrá una velocidad de grupo ($v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k_0}$) $v_g = c$ donde el perfil del paquete viajará con esa velocidad sin cambiar de forma. Ahora para un medio dispersivo $v_\phi = c/n(k)$ siendo $n(k)$ el índice de refracción y ya cada onda viaja a una velocidad diferente dependiendo de la longitud de onda. Para el caso de la onda asociada a una partícula libre tendremos la relación de dispersión

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{k} \hbar = \frac{k^2 \hbar^2}{2mk \hbar} = \frac{k \hbar}{2m},$$

que puesto en el paquete tendremos

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)| e^{i[k(x - v_\phi(k)t) + \alpha(k)]} dk, \quad (49)$$

y si nuevamente usamos el criterio de fase estacionaria tendremos $\frac{d\phi}{dk}|_{k_0} = x - k_0 \hbar t / 2m + \alpha'(k_0) = 0$ y por lo tanto la posición del máximo del paquete viaja como

$$x(t) = \frac{\hbar k_0}{m} t - \alpha'(k_0) = v_g t + x_0, \quad v_g = \frac{d}{dk} \left(\omega = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = 2v_\phi(k_0).$$

Ahora podemos hacer algunas consideraciones físicas de lo analizado.

- La expansión (46) o su versión en términos del impulso $p = k \hbar$ de una partícula

$$\Psi(x, 0) \equiv \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(p) \frac{1}{(2\pi \hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp, \quad a(p) = \frac{A(p/\hbar)}{\hbar^{1/2}}, \quad (50)$$

puede usarse para expandir en $t = 0$ una función de onda cualquiera aún en presencia de un potencial y no sólo para un paquete libre ($U \equiv 0$).

- La restricción matemática aproximada (en términos de $\lambda = p/h = p/2\pi \hbar$) hallada $\Delta p \Delta x \gtrsim h = 2\pi \hbar$ se denomina relación de incerteza de Heisenberg y desde el punto de vista de poder medir simultáneamente magnitudes físicas se interpreta de la siguiente manera. Ya vimos antes que en (50) $|a(p)|^2$ es la probabilidad de medir el impulso de la partícula entre $p + dp$ y que $|\psi(x)|^2$ la probabilidad de medir la posición de la partícula entre x y $x + dx$, ambas en $t = 0$. El ancho de ambas distribuciones de probabilidad son Δp y Δx respectivamente y como las mediciones darán resultados distribuidos dentro de estos intervalos, son de alguna manera la precisión con que podemos medir dichas magnitudes. Dichas precisiones están comprometidas por la relación de incerteza, es decir no podemos hacer ambas tender a cero y así no podemos definir a la vez posición e impulso porque no podemos medir a la vez *ambos*. Los casos límites son:

1. Partícula con un impulso determinado

$$a(p) = \delta(p - p_0) \Rightarrow \psi(x) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} \Rightarrow |\psi(x)|^2 = cte$$

es decir la partícula tiene igual probabilidad de estar en $(-\infty, \infty) \Rightarrow \Delta p = 0, \Delta x = \infty$.

2. Partícula con una posición dada

$$\psi(x) = \delta(x - x_0) \Rightarrow a(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \right)^* \delta(x - x_0) dx = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}px_0}, |a(p)|^2 = cte,$$

es decir *la partícula tiene igual probabilidad de tener un impulso en $(-\infty, \infty) \Rightarrow \Delta p = \infty, \Delta x = 0$.*

- Finalmente, vimos que el máximo de un paquete libre con

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(p) e^{i/\hbar[px - Et]} dp, E = p^2/2m,$$

$$\max |a(p)| \text{ en } p_0, \Rightarrow x_{\max}(t) = \frac{p_0}{m}t + x_0$$

se mueve como una partícula clásica libre con velocidad cte $v_0 = p_0/m$. Así por ejemplo una partícula de polvo de tamaño $1\mu = 10^{-6}m$ y con masa $m = 10^{-15}kg$ y velocidad $v_0 = 10^{-3}m/seg \Rightarrow p_0 = 10^{-18}Jseg/m$. Si podemos medir su posición con $\Delta x = 0.01\mu = 10^{-8}m$ tendremos una incerteza en su impulso de $\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta x = 10^{-8}p_0$ con lo cual la relación de incerteza casi no produce restricciones.

Entonces en realidad lo que está sucediendo es que una partícula clásica es descrita directamente por la posición del máximo de un paquete, sin tener en cuenta su ancho y dispersión en impulsos ya que ambos son pequeños en este caso.

3.9 Ejemplo : paquete de ondas gaussiano

Consideremos como ejemplo de lo estudiado *un paquete de ondas de forma gaussiana* que tiene la ventaja de poder hacer los cálculos analíticamente sin aproximaciones. Supongamos que nuestro paquete en $t = 0$ vale (usamos k para no arrastrar \hbar)

$$\Psi(x, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{ikx} dk, A(k) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \quad (51)$$

donde se puede ver que $A(k)$ es una campana de gauss centrada en k_0 .

Ahora vamos a necesitar $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2} dk = \sqrt{\pi}$ y si escribimos la fase como

$$-\frac{a^2}{4}(k - k_0)^2 + ikx = -\frac{a^2}{4} [k - k_0 - 2ix/a^2]^2 + ik_0x - x^2/a^2$$

y haciendo el cambio de variables

$$u = a/2 [k - k_0 - 2ix/a^2], du = (a/2)dk \quad (52)$$

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

siendo la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición x en $t = 0$

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

que es otra campana de Gauss pero en x .

Ahora analicemos la relación de incerteza y cuanto valen $\Delta x, \Delta p$. La función e^{-2x^2/a^2} cae a $1/\sqrt{e} \approx 1.65$ (aprox la mitad) de su valor en $x = 0$ en $x = \pm a/2$, de igual manera cuando calculemos $|A(k)|^2 \sim e^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}$ cayendo a $1/\sqrt{e}$ en $k - k_0 = 1/a$. Si definimos entonces $\Delta x = a/2, \Delta p = \Delta k/\hbar = 1/a\hbar$ tendremos $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ que es más precisamente la relación de incerteza de Heisenberg.

Es importante mencionar que el criterio usado para calcular los anchos conduce al mismo resultado que si hubieramos definido

$$\begin{aligned}\sqrt{\overline{\Delta x^2}} &\equiv \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2}} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 |\Psi(x, 0)|^2 dx} \\ \sqrt{\overline{\Delta p^2}} &\equiv \sqrt{\overline{(p - \bar{p})^2}} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (p - \bar{p})^2 |A(p/\hbar)/\hbar|^2 dp},\end{aligned}\tag{53}$$

que son las desviaciones medias cuadráticas. Donde si usamos $\Psi(x, 0)$ al ser par dará $\bar{x} = 0$ y

$$\bar{p} = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} p e^{-\frac{a^2}{2\hbar}(p-p_0)^2} dp = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} p_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{2\hbar}\xi^2} d\xi + \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} \int \xi e^{-\frac{a^2}{2\hbar}\xi^2} d\xi = p_0,$$

nuevamente usando paridad y si calculamos (53) usando las expresiones de $\Psi(x, 0), A(p/\hbar)/\hbar$ obtendremos $\sqrt{\overline{\Delta x^2}} \sqrt{\overline{\Delta p^2}} = \hbar/2$.

Más aún, puede demostrarse que para cualquier función ψ que cumple $\bar{x} = 0, \bar{p} = 0$ (por simplicidad) y que esta normalizada de manera que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ (es necesario $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$), se cumple

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \left| cte x \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx &\geq 0, cte \in \mathbb{R} \\ cte^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi|^2 dx + cte \int_{-\infty}^{\infty} \left[x \psi^* \frac{d\psi}{dx} + x \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right] dx + \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d\psi}{dx} \frac{d\psi^*}{dx} \right] dx &\geq 0, \\ cte^2 \overline{\Delta x^2} + cte \int_{-\infty}^{\infty} \left[x \frac{d|\psi|^2}{dx} \right] dx + \cancel{\psi^* \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\infty}^{\infty}} - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d^2\psi}{dx^2} \psi^* \right] dx &\geq 0, \\ cte^2 \overline{\Delta x^2} + cte \left[\cancel{x|\psi|^2 \Big|_{-\infty}^{\infty}} - \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx}_1 \right] + 1/\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} [\psi^* \hat{p}^2 \psi] &\geq 0, \\ cte^2 \overline{\Delta x^2} - cte + \frac{1}{\hbar^2} \overline{\Delta p^2} &\geq 0,\end{aligned}$$

\forall función de onda independiente de la cte si no hay solución de la cuadrática $f(cte) \geq 0 \Rightarrow D = 1 - 4\overline{\Delta x^2} \frac{1}{\hbar^2} \overline{\Delta p^2} \leq 0$

$$\sqrt{\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta p^2}} \geq \hbar/2.$$

$$\forall \psi(x) \mid \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \text{ que cumple } \bar{x} = 0, \bar{p} = 0 \Rightarrow \sqrt{\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta p^2}} \geq \hbar/2,$$

obteniéndose la igualdad para el caso de un paquete gaussiano con $p_0 = 0$.

Si analizamos ahora la evolución temporal basta con multiplicar cada $e^{ikx} \times e^{-i\omega t}, \hbar\omega = \hbar^2 k^2/2m = E$ pues el paquete está libre y son estados estacionarios, con lo que tendremos haciendo los cambios de variables necesarios y usando

que $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(\xi^2+\beta^2)} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t) &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i(kx-\omega t)} dk \\
&= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i(kx-\hbar k^2 t/2m)} dk \\
&= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{i(k_0 x - \hbar k_0^2 t/2m) + \phi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\frac{a^2}{4} + i\hbar t/2m)\xi^2 + i\xi(x - k_0 \hbar t/m) - \phi} d\xi \\
&= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{i(k_0 x - \hbar k_0^2 t/2m) + i^2(x - k_0 \hbar t/m)^2 / 2(a^2 + i2\hbar t/m)} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-1/4(a^2 + i2\hbar t/m)[\xi^2 - 4i\xi(x - k_0 \hbar t/m)/(a^2 + i2\hbar t/m) + 4i^2(x - k_0 \hbar t/m)^2 / (a^2 + i2\hbar t/m)^2]} d\xi \\
&= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{i(k_0 x - \hbar k_0^2 t/2m) - (x - k_0 \hbar t/m)^2 / (a^2 + i2\hbar t/m)} \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-1/4(a^2 + i2\hbar t/m)[\xi + 2i(x - k_0 \hbar t/m)/(a^2 + i2\hbar t/m)]^2} d\xi \\
&= \frac{2\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}(a^2 + i2\hbar t/m)^{1/2}} e^{i(k_0 x - \hbar k_0^2 t/2m) - (x - k_0 \hbar t/m)^2 / (a^2 + i2\hbar t/m)} \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta = \frac{2\sqrt{a} e^{i(k_0 x - \hbar k_0^2 t/2m) - (x - k_0 \hbar t/m)^2 / (a^2 + i2\hbar t/m)}}{(2\pi)^{3/4}(a^2 + i2\hbar t/m)^{1/2}} \sqrt{\pi} \\
\eta &= \frac{\xi + 2i(x - k_0 \hbar t/m)/(a^2 + i2\hbar t/m)}{2} (a^2 + i2\hbar t/m)^{1/2}, (a^2 + i2\hbar t/m) = (a^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2)^{1/2} e^{i\theta} \\
\tan 2\theta &= \frac{2\hbar t}{ma^2},
\end{aligned}$$

obteniéndose para la probabilidad de encontrar a la partícula en t

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{\sqrt{2a}}{(\pi)^{1/2}(a^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x - k_0 \hbar t/m)^2}{a^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2} 2a^2}$$

que viaja hacia la derecha con velocidad $v = k_0 \hbar/m$ y va siendo modulado en el tiempo, sin embargo se debe cumplir $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ (la probabilidad de encontrar a la partícula debe seguir siendo 1) donde el ancho y altura varían para que ésto suceda.

Para caer a $1/\sqrt{e}$ el ancho vale

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

y como $A(k, t) = \sqrt{a} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 - i\omega(k)t} / (2\pi)^{1/4}$ al tomar el módulo cuadrado no cambia, tampoco lo hará su ancho y por lo tanto $\Delta p = \Delta k/\hbar = 1/a\hbar$ y por lo tanto

$$\Delta x \Delta p = \hbar/2 \times \sqrt{1 + 4\hbar^2 t^2/a^4 m^2},$$

lo que indica que como Δp es constante Δx debe aumentar con el tiempo como se ve en la Fig.(8). El comportamiento constante de la incerteza en el impulso puede interpretarse del hecho que es una partícula libre y de que el impulso es una constante de movimiento.

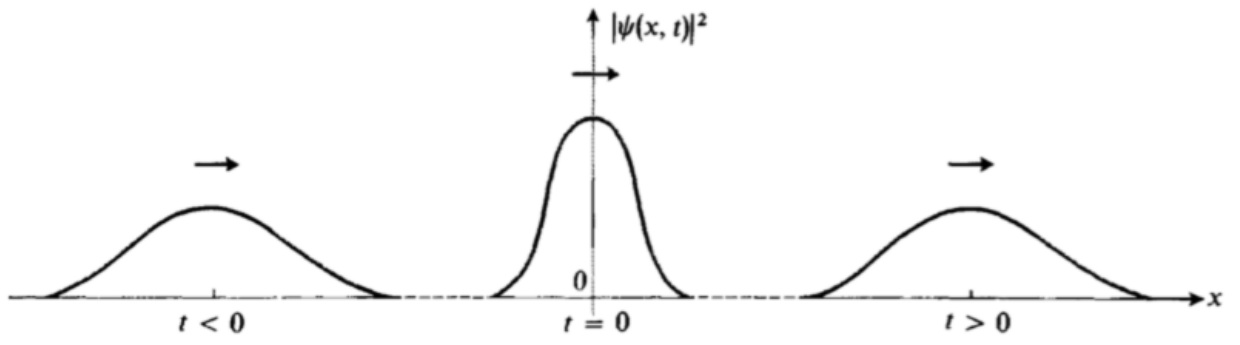


Figura 1: Evolución temporal de un paquete gaussiano