



Solución analítica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula en una caja cuántica

CASTAÑETA, HERIBERTO¹
NOGALES, JORGE²

FECHA DE RECEPCIÓN: 12 DE MAYO DE 2015

FECHA DE ACEPTACIÓN: 9 DE JUNIO DE 2015

Resumen

En este artículo se analiza y resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo o en estado estacionario para una partícula en una caja unidimensional de potencial cero. Para este propósito se definen conceptos y postulados cuánticos como la función de onda y los requisitos matemáticos que debe cumplir como el de ser función continua, univaluada (un solo valor $f(x)$ para cada valor de x) y diferenciable (derivable). Se describen a los operadores cuánticos: como el operador de posición, operador derivada, operador del momento lineal clásico y cuántico, operador energía potencial y el operador Hamiltoniano. Se obtienen valores propios o eigenvalores. Se normalizan funciones aplicando métodos del cálculo integral y se establece la ecuación de Schrödinger para una dimensión y tres dimensiones. La solución da a una función de

Abstract

In this article, the Schrodinger equation is analyzed and resolved independent of time or steady state, for a particle into a one-dimensional box of zero potential. For this purpose the quantum postulates and concepts are defined like the function of wave and the mathematical requirements to be met such as being continuous function, single-valued (just one value $f(x)$ for each value of x) and differentiable (derivable). The quantum operators are described: such as the operator position, derived operator, operator of classical and quantum momentum, potential energy operator, Hamiltonian operator. Own values or eigenvalues are obtained. Functions are normalized applying methods of integral calculus and the Schrodinger equation is establish for a dimension and three dimensions. The solution gives to

¹ Carrera de ciencias químicas.FCPN-UMSA Cota Cota calle 27 campus universitario La Paz - Bolivia

² Química General e Inorganica,carrera Química Farmaceutica.FCFB-UMSA.Av.Saavedra 2224 La Paz - Bolivia

onda real que matemáticamente es una función trigonométrica seno. Se encuentra que la energía de la partícula esta cuantizada o limitada a valores discretos.

a function of real wave that mathematically it is a sine trigonometric function. It is found that the energy of the particle is quantized or limited to discrete values.

PALABRAS CLAVE

Mecanismos cuánticos, ecuación de Schrödinger, caja unidimensional de potencial cero

KEY WORDS

Quantum mechanics; Schrödinger equation; one-dimensional box.

INTRODUCCIÓN

La mecánica cuántica plantea una teoría para las partículas fundamentales de la materia, a través de la ecuación de Schrödinger se unifica el comportamiento corpuscular y ondulatorio de la materia, se pueden determinar diferentes propiedades (observables) de un sistema como el momentum (producto de la masa y velocidad) y la energía de un sistema (Castrillón J,2014: 40).

Desde el punto de vista químico, los electrones son las entidades que interesan debido a que están relacionados en la generación de los orbitales atómicos (Lombardi O., 2012:649) y formación de los orbitales moleculares conocidos como enlaces químicos cuando estos se solapan o traslapan. Con la ecuación de Schrödinger se puede estudiar el comportamiento de los electrones aislados (partícula en una caja de potencial) y cuando participan en la formación de enlaces químicos, oscilador armónico (Pogosyan G,2005:18) explicando diferentes conceptos básicos de la espectroscopia y estableciendo también las bases teóricas de la química computacional (Avenidaño, 2012:177).

En 1924 Louis de Broglie sugirió que una partícula lleva asociada una onda. Extendió la concepción dual onda-partícula de la luz a las partículas materiales como el electrón. Aquí surge el hecho de la materia tiene propiedades corpusculares como la masa (m) carga (q) momentum ($p=m.v$) y propiedades ondulatorias. Afirmó que la longitud de onda (λ , distancia entre dos ondas sucesivas) es inversamente proporcional al momento lineal ($p=m.v$; producto de la masa y la velocidad) de la partícula proponiendo la expresión que lleva su nombre : $\lambda = h/p$ relación de De Broglie. h es la constante de Planck ($h = 6,63 \times 10^{-34}$ J.s). La relación de De Broglie muestra que cuanto mayor sea el momento lineal (p) de la partícula, menor será la longitud de onda (λ) de su función de onda (Atkins, P. 2008:278).

La teoría unificadora de estas propiedades es la teoría cuántica cuya ecuación propuesta por E. Schrödinger incluye la dualidad onda-partícula de De Broglie.

En este artículo analizaremos y resolveremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para una partícula en una caja de potencial cero, para este propósito definiremos a la función de onda (ψ psi) describiremos a los operadores cuánticos, se obtendrán valores propios o eigenvalores, se

normalizaran funciones y se establecerá la ecuación de Schrödinger para una y tres dimensiones. Un concepto fundamental de la mecánica cuántica es que la materia tiene propiedades ondulatorias. Significa que una partícula como el electrón de un átomo se puede describir mediante una función matemática la función de onda (ψ psi). La función de onda describe la distribución de los electrones en los átomos, y por ello ocupa un lugar central en cualquier interpretación de las propiedades de los átomos y de los compuestos que forman (Otero M,2009:40).

La función de onda simbolizada con la letra griega (ψ psi) es una función matemática, como la materia tiene comportamiento ondulatorio las funciones de onda generalmente son funciones trigonométricas seno y coseno también hay funciones exponenciales (numero e).

El comportamiento de una onda puede expresarse como $y = A \text{ Sen } Bx$ haciendo uso de psi

$\Psi = A \text{ Sen } Bx$; esta es una expresión de la amplitud de una onda tipo seno desplazándose en dimensión x , A y B son constantes. Aquí se plantea lo interesante, el comportamiento de la materia se describe con una ecuación para ondas que puede ser $\Psi = A \text{ Sen } Bx$.

La función de onda (ψ psi) describe el estado de un sistema, estas funciones de onda deben cumplir requisitos matemáticos, deben ser funciones continuas, univaluadas (un solo valor $f(x)$ para cada valor de x) y deben ser también diferenciables (derivables).

Algunos ejemplos de funciones de onda son : $\Psi = \text{Sen } x$; $\Psi = \text{Sen } 2x$; $\Psi = \text{Cos } x$

$\Psi = \text{Cos } x/4$; $\Psi = e^x$; $\Psi = e^{-4x}$ (Ball, D,2004: 275).

Operadores Cuánticos: Cuando se estudia el estado de un sistema se hacen mediciones de sus propiedades como la masa, el volumen, la posición x , el momentum ($\mathbf{p} = \mathbf{m.v}$, producto de la masa y la velocidad), la energía. En química cuántica cada propiedad es un observable. La química cuántica mide el valor de un observable realizando una operación matemática sobre la función de onda (Ψ psi), esta operación matemática constituye una instrucción matemática que actúa sobre la función de onda para generar otra función.

Esta operación la realiza el operador que usualmente se lo representa con un símbolo adecuado y su circunflejo. Por ejemplo, $3 \times 7 = 21$ es una multiplicación, el operador es la multiplicación, que da la instrucción "multiplique los dos números", de manera más formal y elegante, como lo hace la química cuántica, puede representar esta operación como $M(a,b)$ entendiéndose : tome los dos números y multiplique ; por tanto $M(3,7)=21$.

Los operadores pueden actuar sobre números o funciones. Utilizaremos ahora la diferenciación, si tenemos la función $f(x)=4x^2 + 7x -2$ la derivada respecto de x será el operador d/dx , este actuará sobre la función y generará otra función :

$$\frac{d}{dx} (4x^2 + 7x - 2) = 8x + 7 \quad \text{o} \quad \frac{d}{dx} f(x) = 8x + 7$$

A este operador derivada $\frac{d}{dx}$ se puede simbolizar con la letra **D**, entonces $D f(x) = 8x + 7$

Si aplicamos $\frac{d}{dx}$ dos veces a la función, estaremos calculando la segunda derivada:

$$\text{Una vez: } f(x) = 8x + 7, \text{ segunda vez: } \frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} f(x) \right] = 8 \quad \text{ó} \quad f''(x) = 8$$

Este operador puede estar multiplicado por un numero o una constante

$k \cdot \frac{d^2}{dx^2}$; si esta constante tendría el valor de $\frac{-h^2}{2m} = \frac{-h^2}{8\pi^2 m}$, entonces el operador será:

$$k \cdot \frac{d^2}{dx^2} \quad \text{ó} \quad \frac{-h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{-d^2}{dx^2}$$

Podremos finalmente representar a esta expresión como el operador energía cinética **E** y aplicado a la función de onda ψ ; así: $E\psi$ que indica ejecute la operación matemática indicada por $\frac{-h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{-d^2}{dx^2}$ sobre la función de onda ψ (Ball, D, 2004: 278).

Existe un tipo de combinación y función que genera un numero o constantes multiplicadas por la función original, por ejemplo: $\psi = \text{Sen } 3x$, aplicaremos el operador $\frac{d^2}{dx^2}$ simbolizado como operador segunda derivada **B**.

$$\text{Entonces } B \psi \text{ será:} \quad \psi = \frac{d^2}{dx^2} \text{ Sen } 3x$$

$$\frac{d^2}{dx^2} (\text{Sen } 3x) = \frac{d}{dx} (3 \cdot \text{Cos } 3x) = -9 \cdot \text{Sen } 3x ;$$

En símbolos $B\psi = k\psi$ que quiere decir el operador **B** actúa sobre la función de onda y como resultado de esta operación se obtiene un numero o constante **k** multiplicado por la misma función de onda ψ . La constante **k** tiene el valor de -9. Cuando un operador actúa sobre una función y genera la función original de partida multiplicada por un numero o una constante **k**, esta constante es el valor propio o eigenvalor, y la función se llama función propia (Roy U., 2008: 160).

En nuestro ejemplo la ecuación de eigenvalor es:

$$\frac{d^2}{dx^2} (\text{Sen } 3x) = -9 \cdot (\text{Sen } 3x) ;$$

La función original es generada después de aplicar el operador, la función de eigenvalor es $(\text{Sen } 3x)$ y el eigenvalor es -9.

Para cada observable de interés existe un operador, los únicos valores del observable obtenidos en una medida deben ser eigenvalores de la ecuación

de eigenvalores construida a partir del operador y de la función de onda ψ como : $\mathbf{B}\psi = k\psi$.

Dos observables elementales son la posición y el momentum lineal ($P=m\cdot v$)

El operador de posición es \hat{x} y se define: $\hat{x} = x$ se obtiene multiplicando la función por la variable x . Análogamente $\hat{y} = y$ $\hat{z} = z$.

El operador momento lineal \hat{P} se define como:

$$P_x = \frac{h}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{ó} \quad P_x = -i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{donde} \quad i = \sqrt{-1}$$

\hbar es la constante de Planck entre 2π , es decir $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Este momento lineal es la derivada respecto a la posición, para las otras dimensiones tenemos:

$$\hat{P}_y = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \quad \text{ó} \quad \hat{P}_y = -i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\hat{P}_z = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{ó} \quad \hat{P}_z = -i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial z}$$

Podemos obtener también el operador elevado al cuadrado, es decir: cuya expresión es :

$$\text{Si} \quad \hat{P}_x^2 = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{P}_x^2 = \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar^2}{i^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2}{(\sqrt{-1})^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\hat{P}_x^2 = \frac{\hbar^2}{-1} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}; \text{ análogamente } : \hat{P}_y^2 = -\hbar^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial y^2}; \hat{P}_z^2 = -\hbar^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

(Levine, 2001: 40)

El operador energía potencial V (energía de posición) se simboliza $\hat{V}(x)$, en cambio al operador energía cinética E.C. se le suele simbolizar con la letra T clásicamente la $E \cdot C = \frac{1}{2} m \cdot v^2$ si multiplicamos por $\left(\frac{m}{m}\right)$

$$\text{Tenemos } E \cdot C = \frac{1}{2} m v^2 \cdot \frac{m}{m} = \frac{1 m^2}{2 m} \cdot v^2$$

(recordemos que el momentum lineal $P=m\cdot v$) entonces $EC = \frac{1 \hat{P}^2}{2m}$

y entonces la E.C. $T_{(x)} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ (utilizando \hat{P}_x^2)

$$T(x) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \text{ esta es la expresión mecano cuántica de la E.C.}$$

El operador Hamiltoniano \hat{H} es la suma de la EC (T) y E potencial (V), así:

$$\hat{H} = EC + V \quad \text{ó} \quad \hat{H} = T + \hat{V}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V} \text{ que es la expresión del operador Hamiltoniano}$$

Para que esto no sea tan abstracto damos el ejemplo para calcular el momento \hat{P}_x teniendo la función de onda $\psi_{(x)} = e^{-i4x}$. Aplicando el operador \hat{P}_x tenemos

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

$$\hat{P}_x = -i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x} e^{-i4x}$$

$$\hat{P}_x = (-i \hbar)(-i4) \cdot e^{-i4x} = -4 \hbar \cdot e^{-i4x} = -4 \hbar \psi$$

El eigenvalor es $-4 \hbar$ es el valor del momentum (el observable)

Entre los operadores de la mecánica cuántica el hamiltoniano probablemente sea el más importante.

Para comprender mejor a la función de onda ψ (psi) Max Born interpretó a ésta, afirmando que es la región en el espacio donde exista la máxima probabilidad de encontrar a un electrón entre los puntos a y b , es decir $\psi \cdot \psi$ ó ψ^2 (Lastiri, 2012:271).

$$\text{Esta afirmación se la expresa así: } P = \int_b^a \psi_x \psi dt \quad \text{ó} \quad P = \int_b^a \psi^2 dt$$

$$\text{para una dimensión } P = \int_b^a \psi^2 dx$$

$$\text{para dos dimensiones: } P = \int_b^a \psi^2 dx dy$$

$$\text{y para 3D: } P = \int_b^a \psi^2 dx dy dz$$

Desde el punto de vista químico ψ^2 es un orbital atómico. Si la probabilidad para una partícula con función de onda ψ y se evaluará en todo el espacio ($-\infty$ a $+\infty$) la probabilidad sería igual a 1 ó 100% entonces la función está normalizada, es decir: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_x \psi dt = 1$

Daremos un ejemplo, suponiendo que existe una Ψ para un sistema $\Psi_{(x)}$ donde x es la única variable, si la región de interés va de $X=0$ a $X=L$ normalizaremos la función de onda. Para este propósito la función Ψ debe multiplicarse por alguna constante N (de normalización) $\Psi \rightarrow N, \Psi$, sustituyendo en la integral

$$\int_D \Psi^* \Psi dx = 1$$

$$\int_0^L (N \Psi)^* (N \Psi) dx = \int_0^L N \cdot N \Psi^* \Psi dx = 1$$

$$\int_0^L N^2 \Psi^* \Psi dx = 1 ; N^2 \int_0^L \Psi^* \Psi dx = 1 ; N^2 \int_0^L \left(\text{sen } \frac{n\pi x}{L} \right)^* \left(\text{sen } \frac{n\pi x}{L} \right) dx = 1 ;$$

$$N^2 \int_0^L \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1 \quad (\text{utilizando } \text{sen}^2 x = \frac{1}{2} (1 - \cos 2x)) ;$$

$$N^2 \int_0^L \frac{1}{2} \cdot (1 - \cos 2 \frac{n\pi x}{L}) dx = 1 ; N^2 \cdot \frac{1}{2} \int_0^L (1 - \cos 2 \frac{n\pi x}{L}) dx = 1 ;$$

$$N^2 \cdot \frac{1}{2} \left[\int_0^L dx - \int_0^L \cos 2 \frac{n\pi x}{L} dx \right] = 1 ; N^2 \cdot \frac{1}{2} \left[x I_o^L - \frac{1}{2n\pi} \cdot \text{Sen } \frac{2n\pi x}{L} I_o^L \right] = 1 ;$$

$$N^2 \cdot \frac{1}{2} \left[L - \left(\frac{L}{2n\pi} \cdot \text{Sen } \frac{2n\pi L}{L} \right) \right] = 1 ; N^2 \cdot \frac{1}{2} \left[L - \left(\frac{1}{2n\pi} \cdot 0 \right) \right] = 1 ; N^2 \cdot \frac{1}{2} L = 1 ;$$

$$\frac{1}{2} N^2 L = 1 ; N^2 = \frac{2}{L} \therefore N = \sqrt{\frac{2}{L}} ;$$

Entonces la función de onda normalizada es :

$$\Psi(x) = N \Psi(x)$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \text{Sen } \frac{2n\pi x}{L}$$

Según Levine,(2001:11) la Ecuación de Schrödinger es una de las ideas más revolucionarias e importantes en la mecánica cuántica es la ecuación de Schrödinger que tiene que ver con el observable más importante : la energía. Cualquier variación ó cambio en la energía de un sistema (átomo, molécula), la ecuación de Schrödinger constituye una de las maneras más sencillas de medir este cambio ó contenido energético; la mecánica cuántica es capaz de predecir esta propiedad. La ecuación de Schrödinger se basa en la función Hamiltoniana H, la energía total de un sistema, es la suma de la energía de movimiento (EC = T) y de la energía de posición ó energía potencial (V). $E_{\text{TOTAL}} = E_{\text{CINÉTICA}} + E_{\text{POTENCIAL}}$ o $E_{\text{TOTAL}} = T + V$. Schrödinger utilizó operadores que actúan sobre Ψ funciones de onda empleando el operador momento lineal y la ecuación de movimiento

$$\hat{P}_x = i \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{P}_x^2 = \hbar^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

y suponiendo que la Energía potencial \hat{V} es una función de la posición $\hat{x} = x$

Schrödinger reemplazó E_{TOTAL} en la expresión para deducir un operador para la energía, denominado operador Hamiltoniano $E_T = \hat{T}(x) + \hat{V}(x)$

$$\hat{H} = \hat{T}(x) + \hat{V}(x) \quad \text{como : } \left(\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2} = -\frac{\hbar^2 \cdot \partial^2}{2m \partial x^2} \right)$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \cdot \partial^2}{2m \partial x^2} + \hat{V}(x)$$

Este operador \hat{H} opera sobre funciones de onda y el eigenvalor es la del sistema:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) \right] \Psi = E \Psi$$

Esta es la ecuación de Schrödinger unidimensional en estado estacionario (independiente del tiempo). La ecuación Schrödinger en tres dimensiones es :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \hat{V}(x) \right] \Psi = E \Psi$$

Aunque la ecuación de Schrödinger puede ser difícil de aceptar al principio, ésta funciona: cuando se le aplica a sistemas ideales e incluso reales, produce los valores para las energías de los sistemas. Por ejemplo, ésta predice correctamente los cambios de energía del átomo del hidrógeno, que es un sistema que se ha estudiado por décadas antes de los trabajos de Schrödinger. Sin embargo, la mecánica cuántica utiliza una nueva herramienta matemática —la ecuación de Schrödinger— para predecir fenómenos atómicos observables. Como los valores de los observables atómicos y moleculares se predicen adecuadamente mediante la ecuación de Schrödinger y las funciones de onda, éstas se consideran el camino correcto para concebir los fenómenos atómicos. El comportamiento de los electrones se describe por medio de una función de onda. La función de onda se emplea para determinar las propiedades de los electrones. Los valores de estas propiedades pueden predecirse operando sobre función de onda con el operador adecuado. El operador apropiado para predecir la energía del electrón es el operador hamiltoniano. (Ball, 2004:280)

Para ver cómo funciona la ecuación de Schrödinger, el siguiente ejemplo mostrará cómo opera el hamiltoniano sobre una función de onda. Considere un electrón confinado en un sistema finito. El estado del electrón se describe por medio de la función de onda $\Psi = \sqrt{2} \text{sen } kx$ en la que k es alguna constante. Suponga que la energía potencial es cero, o $V(x) = 0$. Calcularemos la energía del electrón. Puesto que la energía potencial es cero, el electrón sólo posee energía cinética. La ecuación de Schrödinger se reduce a:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \psi = E \psi$$

Rescribamos la expresión de la siguiente manera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E \psi$$

Necesitamos evaluar la segunda derivada de Ψ , multiplicada por el conjunto adecuado de constantes, restablecer la función de onda original y encontrar la constante E que multiplica a Ψ . Dicha E representa la energía del electrón. Si evaluamos la segunda derivada, obtendremos:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sqrt{2} \text{sen } kx) = -k^2 (\sqrt{2} \text{sen } kx) = -k^2 \psi$$

Por lo tanto, podemos sustituir $-k^2 \Psi$ en el lado izquierdo de la ecuación de Schrödinger:

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

A partir de esta expresión, vemos que el eigenvalor de la energía se encuentra representado por la expresión:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

La parte de la energía cinética del hamiltoniano tiene forma similar en todos los sistemas. Sin embargo, el operador de la energía potencial V depende del sistema de interés. En los ejemplos de sistemas en los que emplearemos la ecuación de Schrödinger se aplicarán diferentes expresiones para la energía potencial. Encontraremos que la forma exacta de la energía potencial determina si la ecuación diferencial de segundo orden tiene solución exacta. En caso de que la tenga, decimos que tiene solución analítica. En muchos casos NO tiene solución analítica y debe aproximarse. Las aproximaciones pueden ser muy buenas y suficientemente buenas, de tal manera que sus predicciones concuerden con las determinaciones experimentales. Sin embargo, las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger, junto con algunas predicciones específicas de diversos observables, como la energía, son necesarias para ejemplificar la verdadera utilidad de la mecánica cuántica.. (Ball,2004:287)

Solución analítica de la ecuación Schrödinger unidimensional para una partícula en una caja :

El primer sistema para el que existe una solución analítica (Salas A, 2011:421) consiste en una partícula material encerrada en una "caja" de una dimensión, cuyas paredes consisten en barreras infinitamente altas. Este sistema recibe el nombre de PARTÍCULA EN UNA CAJA. Las barreras infinitamente altas dentro de la caja corresponden a energías potenciales infinitas; la energía potencial dentro de la caja misma se define como cero. Se coloca arbitrariamente a uno de los lados de la caja en $x = 0$ y la otra a una distancia L . Dentro de esta caja la energía potencial es 0. Fuera de la caja, la energía potencial es infinita. (Guzmán F, 2010:55)

El análisis cuántico de este sistema utilizando la mecánica cuántica es similar al análisis que aplicaremos a cada sistema. Primero, considere las dos regiones donde la energía potencial es infinita. De acuerdo con la ecuación de Schrödinger,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \infty \right] \Psi = E\Psi$$

Debe ser verdadera para $x < 0$ y $x > L$. El infinito presenta un problema y, en este caso la forma de eliminarlo consiste en multiplicarlo por cero. Así, Ψ debe ser exactamente igual a cero en las regiones $x < 0$ y $x > L$. No importan los eigenvalores de la energía, puesto que si es idéntico a cero, de acuerdo con la interpretación de Born la partícula posee una probabilidad nula de localizarse en dichas regiones. (De Vicenzo S, 2008:1)

Consideremos la región donde los dominios de x corre de 0 a L . La energía potencial se define igual a cero en esta región; así, la ecuación de Schrödinger se convierte en:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \Psi = E\Psi$$

Que representa una ecuación diferencial de segundo orden. Esta ecuación diferencial posee una solución analítica conocida. Es decir, se conocen funciones que al sustituirse en la ecuación diferencial de segundo orden anterior satisfacen la igualdad. La forma más general de la solución de la ecuación anterior es: $\Psi = A \cos kx + B \sin kx$

Donde A , B y k son constantes por determinar mediante las condiciones del sistema.

Como conocemos la forma de Ψ , podemos determinar la expresión de E sustituyendo Ψ en la ecuación de Schrödinger y evaluando la segunda derivada. Ésta equivale a:

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$$

Demostraremos que la expresión de la energía de una partícula en una caja es $E = k^2 \hbar^2 / 2m$.

Todo lo que hay que hacer consiste en sustituir la función de onda $\Psi = A \cos kx + B \sin kx$ en la ecuación de Schrödinger, recordando que la energía potencial V es cero. De esta manera, obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (A \cos kx + B \sin kx) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (kA \sin kx - kB \cos kx) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 A \cos kx - k^2 B \sin kx) \end{aligned}$$

Extrayendo como factor $-k^2$ de los términos entre paréntesis, podemos obtener nuestra función de onda original:

$$= \frac{-(-k^2)\hbar^2}{2m} (A \cos kx + B \sin kx)$$

Los dos signos negativos se cancelan y el conjunto de términos que se multiplican por la función de onda son constantes. Así, hemos demostrado que la operación del hamiltoniano sobre la función de onda da como resultado una ecuación de eigenvalores; el eigenvalor o valor propio es la energía de una partícula con dicha función de onda:

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$$

Uno de los requisitos de la función de onda consiste en que debe ser continua, reconocemos que la función de onda en las regiones $x < 0$ y $x > L$ deben ser cero, entonces el valor de la función de onda en $x < 0$ y $x > L$ debe ser cero. Este hecho es verdad al aproximarse estos límites de x desde el exterior de la caja, pero la continuidad de la función de onda exige que este requisito también se cumpla al aproximarse estos límites desde el interior de la caja. Es decir $\Psi(0)$, debe ser igual a $\Psi(L)$, que deben, ser igual a cero. Este requisito, que la función de onda debe ser igual a determinado valor en las fronteras del sistema, recibe el nombre de condición en la frontera. La condición en la frontera $\Psi(0)$ se aplica primero: como $x = 0$, la función de onda se convierte en:

$$\Psi(0) = 0 = A \cos 0 + B \sin 0$$

Ya que $\sin 0 = 0$, el segundo término no impone restricciones al posible o posibles valores de B . Pero $\cos 0 = 1$ representa un problema, a menos que $A = 0$. Así, con el fin de satisfacer esta primer condición en la frontera, A debe ser cero, lo cual significa que las únicas funciones de onda aceptables son: $\Psi(x) = B \sin kx$

Ahora apliquemos la otra condición en la frontera: $\Psi(L) = 0$. Utilizando la función de onda anterior, obtenemos: $\Psi(L) = 0 = B \sin kL$

En la que L ha sido sustituida por x . No podemos exigir que B sea igual a cero. Si así fuera, Ψ sería cero entre 0 y L ; por consiguiente, sería cero en todas partes y la partícula no existiría en ningún lado. Rechazamos esta posibilidad, ya que la existencia de la partícula está fuera de duda. Para que la función de onda sea igual a cero en $x = L$, el valor de $\sin kL$ debe ser cero: $\sin kL = 0$

En términos de radianes, $\sin kL$ es igual a 0 cuando kL es igual a $0, \pi, 2\pi, 3\pi, 4\pi \dots$ o para todos los valores enteros de π . Rechazamos el valor 0 porque $\sin 0$ es igual a 0 y, así, la función de onda no existiría en ninguna parte. De esta forma tenemos la siguiente restricción al argumento de la función seno: $kL = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$

$$\text{Al despejar } k, \text{ tenemos: } k = n\pi / L$$

En la que n es un entero positivo. Contar con una expresión para k nos permite reescribir tanto la función de onda como la expresión para las energías:

$$\psi(x) = B \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}$$

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

Donde se ha sustituido la definición de h en la última expresión para la energía. Los valores de la energía dependen de algunas constantes y de n , que se encuentra restringida a valores enteros positivos. Esto significa que la energía no puede tener cualquier valor; sólo puede tener valores determinados por h, m, L y el más importante n . La energía de la partícula en la caja se encuentra *cuantizada*, ya que el valor de la energía está restringido a ciertos valores. El entero n recibe el nombre de *número cuántico*. La determinación de la función de onda no se encuentra completa. Ésta debe normalizarse. Se supone que se multiplica por alguna constante N tal que :

$$\int_0^L (N\psi)^* (N\psi) dx = 1$$

Los límites de la integral son 0 hasta L , ya que la única región de interés para la función de onda diferente de cero abarca de $x=0$ a $x=L$. La infinitesimal dt es sencillamente dx . Supondremos que la constante de normalización forma parte de la constante B que multiplica el término que incluye al seno de la función de onda. La integral por evaluar es:

$$\int_0^L \left(N \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \right)^* \left(N \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \right) dx = 1$$

Esta función ya se evaluó en el ejemplo de normalización. Siguiendo el mismo procedimiento, encontramos que

$$N = \sqrt{2/L}.$$

Ya que tanto la función de onda como la energía dependen de cierto número cuántico n , normalmente se les asigna un subíndice n , Ψ_n y E_n para indicar la dependencia. Las funciones de onda aceptables para una partícula en una caja de una dimensión se expresan de la siguiente manera:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Las energías cuantizadas de las partículas en esta caja son:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

CONCLUSIONES

La solución analítica de la ecuación de Schrödinger da una función de onda real una función matemática trigonométrica sinusoidal. Al resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo aplicada a una partícula confinada en una pequeña región en el espacio (una caja cuántica) o sometida a una fuerza de atracción (como en el átomo) se encuentra que pueden obtenerse soluciones aceptables solamente para ciertas energías, es decir la energía de la partícula esta cuantizada o limitada a valores discretos.

Es importante destacar también, la aparición natural del número cuántico n que surge en la solución analítica de la ecuación de Schrödinger.

La mecánica cuántica aplicada a la química desarrolla a la química cuántica que utiliza sus postulados haciendo uso de herramientas matemáticas que pueden parecer algo complicadas pero que dan la esencia a esta teoría. Si se quiere entender la esencia de la química, debemos entender el significado y el modo de operar de la ecuación de Schrödinger, G.N. LEWIS en 1933 afirmaba “no cabe duda de que con la ecuación de Schrödinger se esta muy cerca del fundamento matemático para resolver el problema completo de la estructura atómica y molecular”.

REFERENCIAS

- Atkins, P. & de Paula, J. (2008) Química Física 8ª edición. Buenos Aires: Panamericana. pag.278-293
- Ball W. D. (2004) Físicoquímica. Thomson ed. México DF, pag.273-307
- Levine N. I. (2001) Química Cuántica 5ª edición. Prentice Hall ed. Madrid, España. pag.1-57
- Castrillón J., Freire O. & Rodríguez B. (2014) mecánica cuántica fundamental, una propuesta didáctica. Revista Brasileira de Ensino de Física, 36(1).
- De Vicenzo S. (2008) Impenetrable barriers in quantum mechanics. Revista mexicana de Física, 54(1), 1-6.
- Durán O. & Ramírez C. (2012) Solución de la ecuación de Schrödinger mediante la view. Avances en ciencias e Ingeniería, 3(4), 177-184.
- Guzmán F. S. (2010) Solución de la ecuación de onda como un problema de valores iniciales usando diferencias finitas. Revista mexicana de Física, 56(1), 51-68.
- Lastari M. (2012) Aplicaciones intencionales de la mecánica cuántica. Ágora, Papeles de filosofía, 31(2), 271-285.
- Lombardi O. & Martínez J. C. (2012) Entre mecánica cuántica y estructuras químicas: ¿a qué refiere la química cuántica? Scientia Studia, 10(4), 649-670.
- Otero M. R., Fanaro M. & Arlego M. (2009) Investigación y desarrollo de propuestas didácticas para la enseñanza de la Física en la Escuela Secundaria: Nociones Cuánticas. Revista electrónica de investigación en educación en ciencias (REIEC), 4(1), 40-48
- Pogosyan G. S., Vicent L.E. & Wolf K.B. (2005) El límite del oscilador cuántico a la partícula libre. Revista mexicana de Física, 51(1), 18-22.
- Roy U., Ghosh S. & Bhattacharya K. (2008) Some intricacies of the momentum operator in quantum mechanics. Revista Mexicana de Física, 54(2), 160-167.
- Salas A. H. & Castillo J. E. (2011) Soluciones exactas a la ecuación de Schrödinger para una fibra óptica quiral. Revistas mexicana de Física, 57(2011), 421-425.