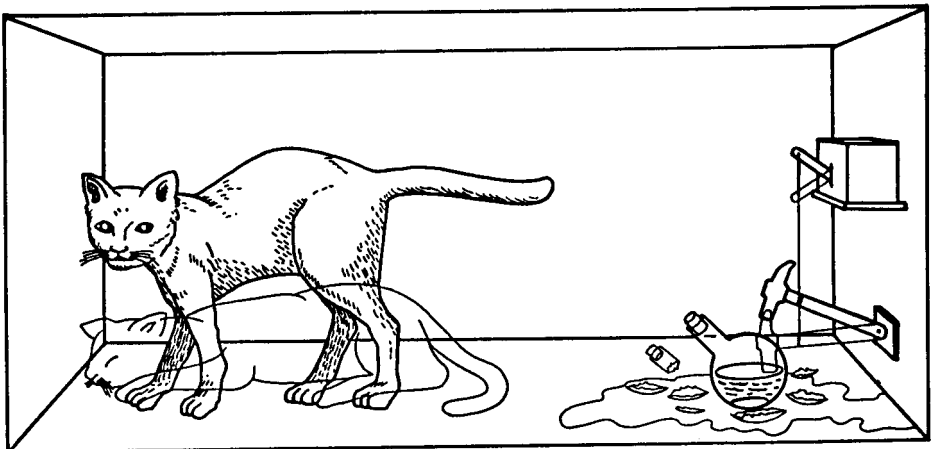


## 6

**Mecánica cuántica moderna**

*No tengo ninguna duda en decir que, desde el punto de vista filosófico, yo no creo en la existencia real de los átomos —tomando esta palabra en su sentido literal— como una partícula indivisible de materia. Espero que algún día encontremos, para lo que llamamos átomos, una representación mecánico-matemática que nos pueda explicar el peso atómico, la valencia y otras de las numerosas propiedades de los llamados átomos.*

F. A. KEKULÉ (1867)



## 6.0 INTRODUCCION

En capítulos precedentes hemos desarrollado los hechos ocurridos en el campo de la teoría cuántica de 1900 a 1925. A las aportaciones en este primer periodo se les ha dado el nombre de «vieja teoría cuántica». En estos años, aunque el desarrollo de la teoría fue rápido, no pudo sistematizarse. Hemos visto, por ejemplo, que en el campo de los átomos se logró un desarrollo teórico formal para el del hidrógeno, pero sólo con la ayuda de la espectroscopia pudieron encontrarse relaciones empíricas válidas para los demás, nuevos números cuánticos y hasta el principio de exclusión.

En este capítulo abordamos el segundo periodo de desarrollo de la teoría cuántica. Este parte, en 1923, con la hipótesis dual de Louis de Broglie, que tratamos en la sección 6.1. La sección 6.2 es un interludio físico-matemático para relacionar al lector con el movimiento ondulatorio, que tiene por objeto desembocar, en la sección 6.3, en la mecánica cuántica ondulatoria desarrollada por Schroedinger. A continuación, en la sección 6.4, abordamos la interpretación del cuadrado de la función de onda e, inmediatamente, entramos en una descripción de los problemas interpretativos de la mecánica cuántica, en la sección 6.5. Finalmente, la última sección se dedica a varios ejemplos simples de solución de la ecuación de Schroedinger, donde lo aprendido en las secciones precedentes pierde su carácter abstracto ante la aplicación.

### 6.1 NUESTRA CONCEPCION DUAL SOBRE LA NATURALEZA DE LA MATERIA

Con el capítulo anterior arribamos al inicio de la tercera década de este siglo, los años de 1920. Veinticinco años antes había sido descubierto el electrón, y éste seguía siendo considerado como una partícula material.

Como veremos en el curso de este capítulo, en esa misma década habría de modificarse de raíz nuestra concepción acerca de la naturaleza del electrón y, en general, de todas las partículas del microcosmos. Por lo pronto, en esta sección presentamos la proposición de De Broglie (Sec. 6.1.1) y su posterior verificación experimental (Sec. 6.1.2). En efecto, hoy no tenemos la menor duda de que los electrones no siguen el comportamiento de las partículas clásicas. Existe una abrumadora evidencia experimental de que, bajo ciertas condiciones, su comportamiento se asemeja al de las ondas, mientras que en otros casos guarda más similitud con el de los corpúsculos clásicos.

El problema para describir la naturaleza real de los electrones es que no contamos con un símil macroscópico de ellos. Nada en nuestro mundo cotidiano presenta tan extraño comportamiento. Por ello, hemos tenido que recurrir a dos descripciones que nos son comunes: la de un corpúsculo y la de una onda.

No es válido, por tanto, asegurar que el electrón *ES* un corpúsculo y una onda, que tiene una naturaleza dual. Creemos más adecuado reconocer que la dualidad existe en nuestra concepción de los electrones más que en el electrón mismo, lo que es enteramente diferente.

### 6.1.1 La hipótesis de De Broglie. Ondas piloto

Para empezar, resumamos brevemente cuál fue el derrotero que sufrió la concepción acerca de la naturaleza de la luz. Este dilema se prolongó durante siglos. Newton consideraba que la luz estaba compuesta de corpúsculos que viajaban muy rápidamente, pero al iniciarse el siglo XIX los experimentos de interferencia, realizados por Thomas Young (1773-1829), mostraron su naturaleza ondulatoria. Ello fue confirmado con la teoría electromagnética de Maxwell y su posterior verificación experimental, por Hertz, en 1889.

Como analizamos en el segundo capítulo (Sec. 2.9), esta última interpretación habría de modificarse en este siglo con la proposición de Einstein sobre el cuanto de luz, en 1905, y la demostración experimental de Compton, en 1923, respecto al carácter corpuscular de los fotones, cuya cantidad de movimiento resultó ser la prevista por la teoría, o sea,

$$p_f = h/\lambda. \quad (6-1)$$

Entonces, la luz parecía satisfacer dos conjuntos de propiedades: las de los corpúsculos y las de las ondas, aunque uno y otro parecían estar en conflicto mutuo<sup>1</sup>. Desde el punto de vista teórico, era necesario conjuntar el enfoque corpuscular y el ondulatorio, pues era inexplicable el «caprichoso» comportamiento de la luz en su interacción con la materia.

Un primer intento de unificación para explicar las interacciones radiación-materia fue ideado en 1923 y presentado en enero de 1924 por Niels Bohr, Hendrik Anton Kramers (1894-1952) y John Clarke Slater (1900-1976). Este trabajo, que rechazaba la existencia del fotón, fue escrito antes del descubrimiento de Compton. Estos autores pretendían «*arribar a una descripción consistente de los fenómenos ópticos, conectando los efectos discontinuos que ocurren en los átomos con el campo continuo de la radiación*». No nos detendremos aquí a analizar la teoría de Bohr y colaboradores, pues estaba equivocada, como pronto fue demostrado. Con este fracaso, Bohr comentó:

*«...uno debe estar preparado para el hecho de que la generalización que requiere la teoría electrodinámica clásica demanda una profunda revolución en los conceptos sobre los cuales ha descansado, hasta ahora, nuestra descripción de la naturaleza.»*

<sup>1</sup> En este punto, se recomienda al lector releer la sección 2.9.5.



LOUIS VICTOR DE BROGLIE (1892- ).  
 (Tomada de Hecht, *Physics in Perspective*,  
 © 1980. Addison-Wesley Publishing Co.  
 Cortesía de French Embassy, Press and  
 Information Division, Nueva York.)

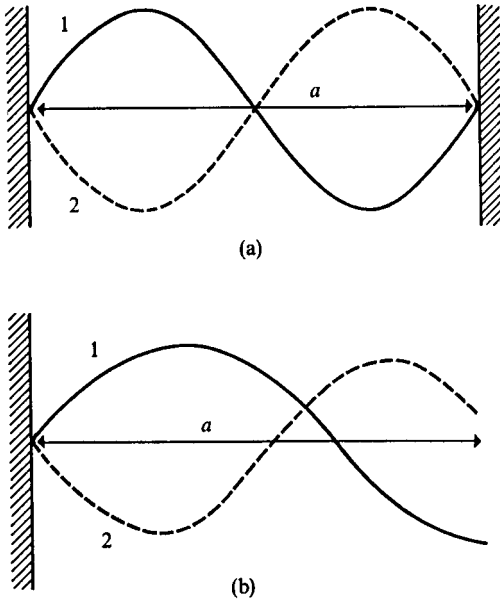
Resultó ser que el paso revolucionario que Bohr citaba se habría de dar en la mecánica y no en la óptica. El responsable fue el científico francés Louis Victor de Broglie (1892- ).

De Broglie iba a entrar a la Sorbona para estudiar historia medieval cuando la primera guerra mundial lo hizo alistarse en el ejército, donde participó en una unidad de radio-comunicación. Ello cambió su vida y, en 1919, se unió al laboratorio de física encabezado por su hermano Maurice de Broglie (1875-1960), donde se dedicaría a experimentar con rayos X.

De 1919 a 1923 realizó múltiples investigaciones, contribuyendo a aclarar la naturaleza de la radiación electromagnética. La propuesta que le valió recibir el premio Nobel de física fue enunciada en 1923, en dos breves escritos enviados a la Academia Francesa de Ciencias, que, posteriormente, incorporó en su tesis doctoral, en 1924. Dejemos que él mismo nos relate su proposición:

*«Después de un largo periodo de soledad y meditación, tuve súbitamente la idea, durante el año de 1923, de que el descubrimiento hecho por Einstein en 1905 debía generalizarse, extendiéndolo a todas las partículas materiales y, en particular, al electrón.»*

Como vemos, su idea era francamente revolucionaria, pues implicaba extender la concepción dual onda-corpúsculo, válida para la luz, a las hasta entonces consideradas partículas materiales, como el electrón. ¿Pero qué tipo de movimiento ondulatorio estaba relacionado con los electrones? Después de analizar las similitudes entre la óptica geométrica y la mecánica clásica, De Broglie concluyó que el movimiento de las partículas materiales debía estar guiado por una onda asociada, que denominó *onda piloto*. La cantidad de



**Figura 6.1** Onda piloto para el movimiento de una partícula en un segmento de recta. La onda en (a) mantiene su nodo fijo y oscila entre las posiciones 1 y 2 con el tiempo. Esta es una onda estacionaria. En (b), la onda no tiene un extremo fijo a la distancia. Una onda de este tipo no puede «guiar» el movimiento de la partícula.

movimiento,  $p$ , de la partícula y la longitud de onda,  $\lambda$ , de la onda piloto estarían relacionadas por una ecuación idéntica a la de la luz (6-1), es decir,

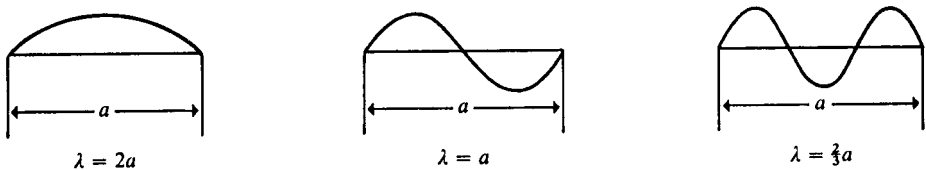
$$\lambda = h/p \tag{6-2}$$

Aunque no lo parezca, en (6-2) están contenidas las reglas de selección de Sommerfeld y Wilson, a las que ya hemos hecho referencia en la sección 3.4.1, lo cual ejemplificamos inmediatamente.

**Ejemplo 6.1** A partir de la relación de De Broglie, alcance el resultado del ejemplo 3.6 para la energía de una partícula que se mueve en un segmento de recta de longitud  $a$ .

En la figura 6.1 se ilustra el hecho de que la onda piloto asociada al movimiento de la partícula debe ser una onda estacionaria, similar a la que se presenta en una cuerda fija por sus extremos al oscilar.

Es claro que una onda estacionaria debe presentar un número entero de medias oscilaciones en el segmento de recta, como se observa en la figura 6.2.



**Figura 6.2** Perfiles de ondas estacionarias en un segmento de recta.

Entonces, en general, la relación entre  $a$  y  $\lambda$  es

$$a = \frac{n\lambda}{2} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6-3)$$

donde puede observarse la aparición de un número cuántico.

Despejando  $\lambda$  de (6-3) y sustituyéndola en la relación de De Broglie (6-2), obtenemos

$$\frac{2a}{n} = \frac{h}{p}$$

Despejando la cantidad de movimiento de la partícula

$$p = \frac{nh}{2a} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6-4)$$

hemos obtenido una condición de cuantización para  $p$ . Empleando la definición de la energía cinética y (6-4) alcanzamos

$$E_c = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6-5)$$

que es idéntica al resultado de aplicar las reglas de cuantización, lo que queríamos demostrar.

**PROBLEMA 6.1** Calcule los tres primeros valores de la energía de un electrón en un segmento de longitud de  $1 \text{ \AA}$ .

*Respuesta*  $E_1 = 6 \text{ aJ}$ ,  $E_2 = 24 \text{ aJ}$ ,  $E_3 = 54 \text{ aJ}$ , ...,  $E_n = 6n^2 \text{ aJ}$ .

**Ejemplo 6.2** Obtenga la cuantización de Bohr ( $mvr = nh/2\pi$ ) para el movimiento orbital del electrón en el átomo de hidrógeno. Emplee (6-2) y la condición de onda estacionaria.

*Solución* En este caso, como se muestra en la figura 6.3, sólo se obtienen ondas piloto sin interferencia cuando dentro del perímetro de la órbita quepan una o más longitudes de onda completas, es decir,

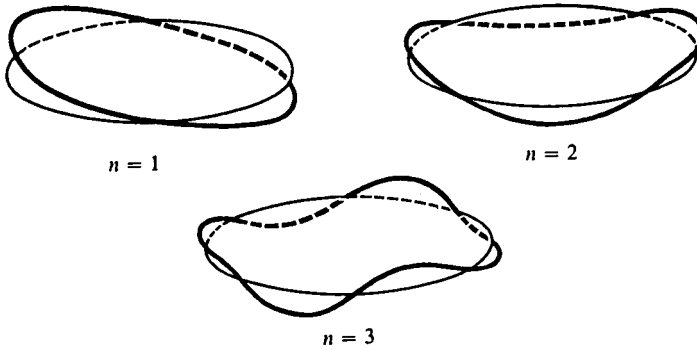
$$2\pi r = n\lambda ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6-6)$$

Despejando  $\lambda$  de (6-6) y sustituyendo en (6-2), tenemos

$$\frac{2\pi r}{n} = \frac{h}{p}$$

Ya que  $p = mv$ , mediante un rearrreglo simple se obtiene la ecuación de cuantización de Bohr (3-37):

$$mvr = n \left( \frac{h}{2\pi} \right) ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



**Figura 6.3** Ondas estacionarias en un círculo. La amplitud de la onda se ha colocado en un eje perpendicular al plano de la órbita. Se muestra sólo el perfil de la onda, la cual evolucionaría con el tiempo, manteniendo sus nodos fijos y oscilando por encima y por debajo de la órbita.

**Ejemplo 6.3** Calcule la longitud de onda asociada al movimiento de:

- a) una pelota de béisbol con  $m = 140$  g y  $v = 200$  km/h, y
- b) un electrón a una velocidad de  $10^6$  m/s.

*Solución*

- a) De (6-2),

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

En este caso,

$$v = 200 \frac{\text{km}}{\text{h}} \left( \frac{10^3 \text{ m}}{1 \text{ km}} \right) \left( \frac{1 \text{ h}}{3600 \text{ s}} \right) = 55.5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

de donde

$$\lambda = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(0.14 \text{ kg}) \left( 55.5 \frac{\text{m}}{\text{s}} \right)} = 8.5 \times 10^{-35} \text{ m}$$

- b) Para el electrón,

$$\lambda = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{(9.101 \times 10^{-31} \text{ kg}) \left( 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \right)} = 7.28 \times 10^{-10} \text{ m} = 7.28 \text{ \AA}$$

longitud de onda que corresponde a la de los rayos X en el espectro electromagnético.

**PROBLEMA 6.2** Una partícula se mueve a una velocidad de 1 m/s. La longitud de onda de De Broglie para la misma es de  $3.96 \times 10^{-5}$  cm. Encuentre la masa de la partícula.

*Respuesta*  $m = 1.673 \times 10^{-24}$  g. Puede tratarse de un protón o neutrón.

PROBLEMA 6.3 Calcule la longitud de onda de De Broglie para un electrón en la segunda órbita de Bohr para el átomo de hidrógeno.

Respuesta  $\lambda = 6.64 \times 10^{-10} \text{ m} = 6.64 \text{ \AA}$ .

PROBLEMA 6.4 En un acelerador de partículas se ha conseguido que un protón ( $m_p = 1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ) alcance una energía cinética de  $31.5 \text{ GeV} = 31.5 \times 10^9 \text{ eV}$ .

- Transforme esta energía a joules.
- Calcule la velocidad del protón mediante la fórmula clásica para la energía cinética.
- Obtenga la longitud de la onda piloto de De Broglie.

Respuesta

- $5.047 \times 10^{-9} \text{ J}$
- $2.456 \times 10^9 \text{ m/s}$
- $1.61 \times 10^{-16} \text{ m} = 161 \text{ am}$

### 6.1.2 Evidencias experimentales del comportamiento ondulatorio de la materia. Difracción de electrones

Einstein y De Broglie propusieron, casi simultáneamente, la confirmación experimental de la hipótesis de las ondas piloto. Si fuera cierto que un movimiento ondulatorio estaba asociado a las partículas, éstas deberían presentar patrones de interferencia y difracción similares a los de la radiación electromagnética.

Era bien sabido que para que una rejilla lograra difractar a una onda, la separación entre sus incisiones debería ser del orden de la longitud de la onda incidente. Ya que la longitud de onda para los electrones, según De Broglie, es inversamente proporcional a su masa, la detección experimental de la difracción sólo sería factible usando como dispersores a los átomos de un cristal, pues están separados entre sí algunos angstroms.

PROBLEMA 6.5 Se desea diseñar un experimento para corroborar que los electrones pueden difractarse. Se pretende emplear un cristal de cloruro de cesio como «rejilla», en el que la menor distancia entre iones es de  $3.5 \text{ \AA}$ . ¿A qué velocidad deben bombardearse los electrones para que su longitud de onda coincida con este parámetro de la malla cristalina?

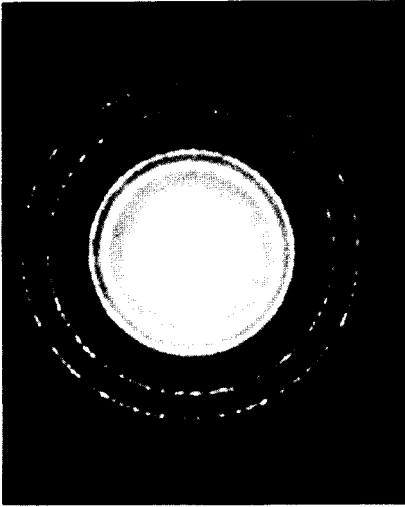
Respuesta  $v = 2.08 \times 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$

En 1927 culminaron los experimentos realizados para confirmar o refutar la hipótesis de De Broglie en cuanto a la difracción de electrones.

Por una parte, Clinton Joseph Davisson (1881-1958) y Lester Halbert Germer (1896-)<sup>2</sup>, estadounidenses, empleando como blanco un cristal de níquel, obtuvieron patrones de difracción como el que se muestra en la figura 6.4.

<sup>2</sup> Años antes, estos autores habían obtenido los mismos resultados, los cuales debieron aguardar la hipótesis de De Broglie para poder ser interpretados.





**Figura 6.4** Patrón de difracción electrónica para una muestra policristalina de cloruro de telurio. (Cortesía de A. J. Ardell, trabajo de investigación no publicado.)

Independientemente, en Inglaterra, George Paget Thomson (1892- ) (hijo de J. J. Thomson), empleando láminas metálicas delgadas, alcanzó resultados similares (véase Fig. 6.5).

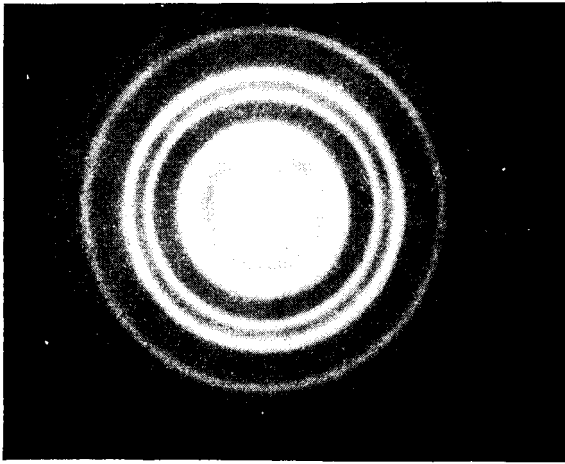
En ambos experimentos se confirmó *cuantitativamente* que la difracción observada para los electrones era consistente con la relación  $\lambda = h/p$ .



CLINTON JOSEPH DAVISSON (1881-1958), y LESTER HALBERT GERMER (1896- ). (Propiedad de AIP Niels Bohr Library.)



GEORGE PAGET THOMSON (1892- ). (Propiedad de AIP Niels Bohr Library, W. F. Meggers Collection.)

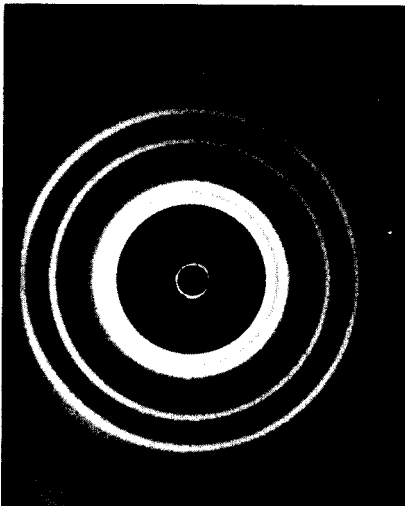


**Figura 6.5** Difracción electrónica producida por una lámina delgada de oro. [Tomada J. C. Slater, *Concepts and Developments of Modern Physics*. Cortesía de G. P. Thomson y O. Oldenburg. 1970, Dover Publications, Nueva York. (Reimpresión del libro *Modern Physics*, 1955, McGraw-Hill.)]

De Broglie recibió el premio Nobel en 1929. Por su parte, Davisson y Thomson<sup>3</sup> lo merecieron en 1937.

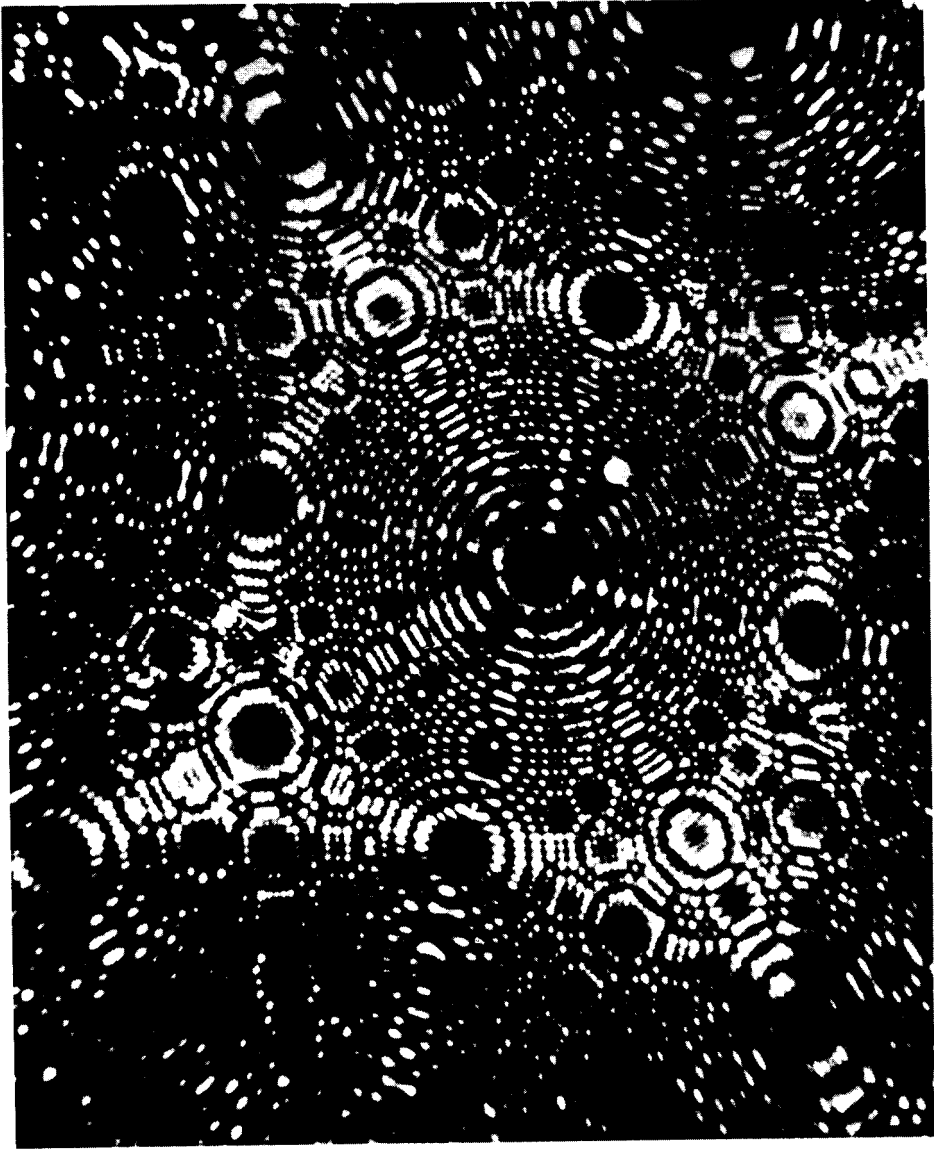
En la figura 6.6 presentamos un patrón de difracción característico de los rayos X, donde puede apreciarse su similitud con el de los electrones.

No puede caber la menor duda, después de observar las figuras 6.4 y 6.5, de que los electrones se comportan como ondas en este tipo de experimentos. A partir de este descubrimiento se genera la óptica electrónica, que condujo al desarrollo del microscopio electrónico en la década de 1930. Este aparato amplía en mil veces el campo visual en comparación con el microscopio de luz.



**Figura 6.6** Patrón de difracción de rayos X producido por el aluminio policristalino. (Cortesía de Education Development Center, Inc., Newton, Mass.)

<sup>3</sup> Paradójicamente, quien descubre que los electrones «son» corpúsculos y obtiene el premio Nobel por ello, tuvo un hijo que también lo recibió por demostrar que los electrones «son» ondas.



**Figura 6.7** Imagen de una punta de iridio metálico obtenida mediante la técnica de ionización de átomos de helio por un campo eléctrico. (Microscopia de ionización por campo, MIC.) (Foto del profesor E. Muller, Pennsylvania State University. Tomada de P. Atkins, *Physical Chemistry*, 2.<sup>a</sup> ed., Oxford University Press, 1982.)

Con electrones muy veloces podrían observarse, en teoría, detalles hasta de  $0.1 \text{ \AA}$ . Sin embargo, no han podido resolverse tecnológicamente los problemas de aberración cromática que se presentan. A pesar de ello, mediante técnicas modernas de microscopia, se han logrado fotografías como la de la figura 6.7.

No obstante que la evidencia experimental es copiosísima e irrefutable, no resulta simple «asimilar» que electrones, neutrones, protones, átomos, moléculas, etc., se comporten como ondas. Así, nos vemos obligados a aceptar que el comportamiento dual onda-corpúsculo es una categoría fundamental en el microcosmos. Si los electrones, por ejemplo, se comportan de una manera «extraña», es porque obedecen reglas muy fuera de nuestra esfera de experiencias. Pero los electrones son así. ¡Ni hablar!

## 6.2 LA ECUACION DEL MOVIMIENTO ONDULATORIO. ONDAS ESTACIONARIAS

Esta sección no es más que un interludio físico-matemático donde encontraremos la ecuación fundamental del movimiento ondulatorio. La razón es obvia: una vez propuesta la hipótesis de De Broglie, resulta lógico pensar que la descripción de un sistema de partículas puede efectuarse empleando relaciones válidas para las ondas.

En la sección 2.5 analizamos algunas de las características de las ondas<sup>4</sup> y, en particular, de las ondas electromagnéticas. Para éstas, que se propagan a la velocidad de la luz,  $c$ , existe una relación fundamental entre frecuencia y longitud de onda: la ecuación (2-46),

$$c = \lambda \nu$$

Para la propagación del campo eléctrico,  $\mathcal{E}$ , obtuvimos allí la relación (2-47), que indica el cambio sinusoidal de la magnitud de  $\mathcal{E}$  conforme la posición,  $x$ , y el tiempo,  $t$ , cambian:

$$\mathcal{E}(x, t) = A \operatorname{sen} 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - \nu t \right)$$

Para cualquier otra onda cuya velocidad de propagación sea  $v$ , tenemos, similarmente,

$$v = \lambda \nu \quad (6-7)$$

Si, además, la perturbación que se propaga no es un campo eléctrico, sino cualquier magnitud,  $\phi$ , como pudiera ser la amplitud de oscilación de una onda sinusoidal en una cuerda,

$$\phi(x, t) = A \operatorname{sen} 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (6-8)$$

Esta última ecuación representa una onda sinusoidal de frecuencia  $\nu$  y longitud de onda  $\lambda$ , que viaja hacia la derecha del eje  $x$ , con velocidad dada por (6-7). Para cualquier onda existe una relación simple entre sus derivadas, conocida

<sup>4</sup> Se recomienda al lector releer dicha sección antes de proseguir.

como *ecuación general de onda*. Puesto que contamos con la onda sinusoidal de la ecuación (6-8), podemos alcanzar dicha relación.

Dado que  $\phi(x, t)$  depende de dos variables,  $x$  y  $t$ , las derivadas a realizar serán derivadas parciales. Por ello, procederemos con lentitud. Para la derivada de  $\phi$  respecto a  $x$ , como  $A$  es una constante,

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = A \frac{\partial}{\partial x} \left[ \text{sen } 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \right] \quad (6-9)$$

La derivada del seno es el coseno, pero habrá que hacer uso de la regla de la cadena, es decir,

$$\frac{\partial}{\partial x} (\text{sen } u) = \cos u \cdot \frac{\partial u}{\partial x}$$

Aplicando lo anterior en (6-9) con  $u = 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right)$ , obtenemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = A \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \right] \right\} \cos 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right)$$

Finalmente, para efectos de derivar respecto a  $x$ , la variable  $t$  se considera como una constante, así que el resultado final es

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = A \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right) \cos 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \quad (6-10)$$

Una segunda derivación aplicada sobre (6-10) nos lleva a que

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = A \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left[ \cos 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \right]$$

de donde

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -A \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \text{sen } 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \quad (6-11)$$

Derivando ahora respecto al tiempo ( $x$  permanece como constante), siguiendo un procedimiento enteramente similar, obtenemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A(-2\pi v) \cos 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right)$$

y

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -A(2\pi v)^2 \text{sen } 2\pi \left( \frac{x}{\lambda} - vt \right) \quad (6-12)$$

Podemos observar que (6-12) es idéntica a (6-11) si se le divide entre  $\lambda^2 v^2$ , es decir,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{1}{\lambda^2 v^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}$$

De (6-7) el resultado final es

$$\boxed{\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}} \quad (6-13)$$

Aunque (6-13) ha sido obtenida de un caso particular, es la que rige todo movimiento ondulatorio en una dimensión. Cualquier perturbación  $\phi(x, t)$  que se traslade a velocidad  $v$  constante puede considerarse una onda si sus derivadas satisfacen (6-13), llamada *ecuación general del movimiento ondulatorio*.

**Ejemplo 6.4** Indique si cada una de las siguientes funciones representa o no a una onda:

- a)  $\phi(x, t) = e^{-xt}$ .  
 b)  $\phi(x, t) = \text{sen}(x + t)$ .  
 c)  $\phi(x, t) = e^{2\pi x/\lambda} \text{sen } 2\pi vt$ , donde  $\lambda$  y  $v$  son constantes.

Para que  $\phi$  sea una onda, debe satisfacer (6-13), siendo  $v$  una constante.

- a)  $\phi = e^{-xt}$ .

Calculemos la primera derivada de  $\phi(x, t)$  respecto a  $x$ :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_t = \left(\frac{\partial(e^{-xt})}{\partial x}\right)_t = e^{-xt}(-t) = -te^{-xt}$$

El subíndice  $t$  enfatiza el hecho de que, en la derivación,  $t$  se mantiene constante.

La segunda derivada es, entonces,

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_t = \left(\frac{\partial(-te^{-xt})}{\partial x}\right)_t = -t \left(\frac{\partial(e^{-xt})}{\partial x}\right)_t = -te^{-xt}(-t) = t^2 e^{-xt}$$

Hagamos lo mismo, pero ahora derivando respecto a  $t$ , siendo  $x$  constante:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_x = \left(\frac{\partial(e^{-xt})}{\partial t}\right)_x = e^{-xt}(-x) = -xe^{-xt}$$

y

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right)_x = \left(\frac{\partial(-xe^{-xt})}{\partial t}\right)_x = -x \left(\frac{\partial(e^{-xt})}{\partial t}\right)_x = -xe^{-xt}(-x) = x^2 e^{-xt}$$

Sustituyamos ambas derivadas en la ecuación general de una onda. Suponiendo su validez en este caso, obtenemos

$$t^2 e^{-xt} = \frac{1}{v^2} x^2 e^{-xt}$$

Despejando  $v$  obtenemos un absurdo:

$$v = \sqrt{\frac{x^2}{t^2}} = \frac{x}{t}$$

pues  $v$  no es una constante, y queda claro que  $\phi(x, t) = e^{-xt}$  no representa una onda.

- b)  $\phi(x, t) = \text{sen}(x + t)$ .

La primera derivada de  $\phi(x, t)$  respecto a  $x$  es

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_t = \left(\frac{\partial(\text{sen}(x+t))}{\partial x}\right)_t = \cos(x+t)$$

y la segunda:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_t = \left(\frac{\partial(\cos(x+t))}{\partial x}\right)_t = -\text{sen}(x+t)$$

Ahora, derivando respecto a  $t$ , obtenemos idénticos resultados:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)_x = \left(\frac{\partial(\text{sen}(x+t))}{\partial t}\right)_x = \cos(x+t)$$

y

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right)_x = \left(\frac{\partial(\cos(x+t))}{\partial t}\right)_x = -\text{sen}(x+t)$$

Así,  $\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_t = \frac{1}{v^2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right)_x$  se satisface con  $v = 1$ .

Por tanto,  $\phi(x, t) = \text{sen}(x+t)$  sí representa a una onda con velocidad unitaria.

c)  $\phi(x, t) = e^{2\pi x/\lambda} \text{sen } 2\pi vt$ .

Para derivar respecto a  $x$ , como  $t$  se considera constante, definimos:

$$\begin{aligned} a &= 2\pi/\lambda \\ b &= \text{sen } 2\pi vt \end{aligned}$$

La función a derivar es  $\phi = be^{ax}$ . Entonces,

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = b\left(\frac{\partial e^{ax}}{\partial x}\right) = bae^{ax}$$

Para la segunda derivada:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = ba\left(\frac{\partial e^{ax}}{\partial x}\right) = ba^2e^{ax}$$

Sustituyendo los valores de  $a$  y  $b$ :

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 e^{2\pi x/\lambda} \text{sen } 2\pi vt$$

En la derivación respecto a  $t$  conviene ahora definir

$$c = e^{2\pi x/\lambda} \quad ; \quad d = 2\pi v$$

y, entonces,  $\phi = c \text{sen } dt$ , cuyas derivadas son

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = cd \cos dt$$

y

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = -cd^2 \text{sen } dt = -(2\pi v)^2 e^{2\pi x/\lambda} \text{sen } 2\pi vt$$

Sustituyendo las segundas derivadas en (6-11), tenemos, después de cancelar a  $e^{2\pi x/\lambda} \text{sen } 2\pi vt$  en ambos miembros:

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = -\frac{1}{v^2} (2\pi v)^2$$

De donde

$$v^2 = -v^2 \lambda^2$$

Y ya que  $v^2$  no puede ser un número negativo,  $\phi(x, t)$  no es una onda, pues su velocidad tendría que ser un número imaginario.

**PROBLEMA 6.6** Indique cuáles de las siguientes funciones son asignables a una onda:

- a)  $\phi(x, t) = \text{sen}(xt)$
- b)  $\phi(x, t) = 4\pi^2 \left(\frac{x}{\lambda} - vt\right)^2$
- c)  $\phi(x, t) = e^{x-t} + (x - t)$
- d)  $\phi(x, t) = x^2 t$

Respuesta b) y c)

**De acuerdo con De Broglie, la onda asociada al movimiento de una partícula confinada debe ser una onda estacionaria, para que no interfiera consigo misma.**

La mejor manera de visualizar una onda estacionaria es imaginar cuál es el resultado de enviar ondas idénticas, a través de una cuerda, en sentido contrario. El resultado ondulatorio que se produce es una onda estacionaria, para la cual los puntos donde se producen nodos permanecen fijos en el tiempo, al igual que aquellos donde se presentan crestas y valles.

Volviendo a tomar nuestro ejemplo de onda sinusoidal de la ecuación (6-8), la que viaja hacia la derecha, es claro que un cambio de signo en el argumento del seno produce una onda que viaja en sentido contrario, o sea, hacia la izquierda del eje  $x$ . Se obtiene una onda estacionaria como resultado de sumar dos sinusoidales que viajan en sentidos opuestos.

En la figura 6.8 se ha hecho dicha suma gráficamente, pudiéndose observar que la onda estacionaria (línea continua) vibra, manteniendo fijos sus nodos.

La ecuación de la onda estacionaria de la figura 6.8 es

$$\phi_{\text{est}}(x, t) = A \text{sen } 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - vt\right) + A \text{sen } 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} + vt\right) \quad (6-14)$$

Esta expresión puede simplificarse mediante la relación trigonométrica

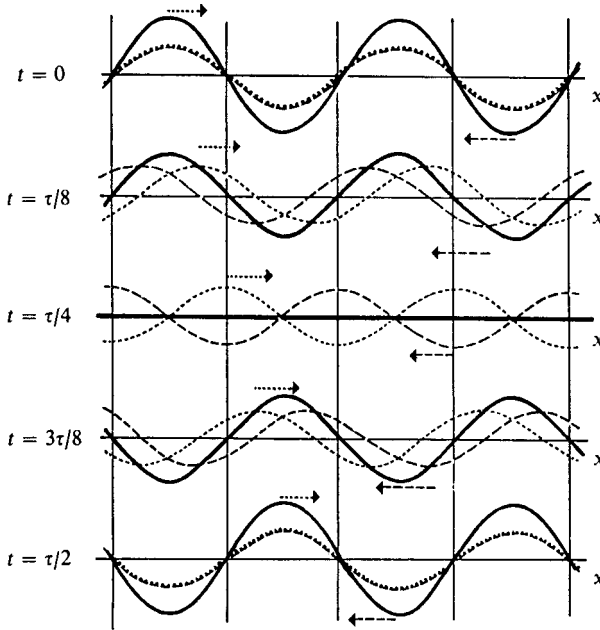
$$\text{sen}(a \pm b) = \text{sen } a \cos b \pm \text{sen } b \cos a,$$

de donde

$$\text{sen}(a - b) + \text{sen}(a + b) = \text{sen } a \cos b - \text{sen } b \cos a + \text{sen } a \cos b + \text{sen } b \cos a$$

$$\text{sen}(a - b) + \text{sen}(a + b) = 2 \text{sen } a \cos b \quad (6-15)$$





**Figura 6.8** La línea de puntos muestra la onda que viaja hacia la derecha; la línea discontinua la que viaja hacia la izquierda, y la línea continua la onda estacionaria (6-14), que es la suma de ambas. Se presentan los perfiles de onda desde  $t = 0$  hasta  $t = \tau/2$ , siendo  $\tau$  el periodo,  $\tau = 1/\nu$ .

Aplicando (6-15) en (6-14), obtenemos

$$\phi_{\text{est}}(x, t) = 2A \sin \frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi \nu t \tag{6-16}$$

El resultado alcanzado es sumamente importante. Una onda estacionaria consiste de un producto de dos funciones, cada una de ellas dependiente de una coordenada. La senoide depende de  $x$  y la cosenoide del tiempo,  $t$ . Además, esta dependencia temporal se presenta en toda onda estacionaria.

Nuevamente el ejemplo particular de la senoide nos permite alcanzar un resultado general. Para toda onda estacionaria, tenemos que

$$\phi_{\text{est}}(x, t) = \Psi(x) \cos 2\pi \nu t \tag{6-17}$$

donde  $\Psi(x)$  es una función únicamente de la posición.

Analicemos bajo qué condiciones la  $\phi_{\text{est}}(x, t)$  propuesta en (6-17) es una onda. Para ello, debe satisfacer la ecuación (6-13). Por tanto, tenemos que calcular las derivadas  $\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_t$  y  $\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right)_x$  y sustituirlas en la ecuación general de una onda.

Ya que la dependencia temporal y espacial están separadas, las derivadas resultan simples en este caso.

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_t = \cos 2\pi vt \frac{d\Psi(x)}{dx}$$

y

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_t = \cos 2\pi vt \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \quad (6-18)$$

son las derivadas de  $\phi_{\text{est}}$  respecto a  $x$ . Por otra parte,

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_x = -(2\pi v)\Psi(x) \text{ sen } 2\pi vt$$

y

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}\right)_x = -(2\pi v)^2\Psi(x) \cos 2\pi vt \quad (6-19)$$

son las correspondientes al tiempo.

Sustituyendo (6-18) y (6-19) en (6-13), la dependencia temporal se cancela, obteniéndose

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\left(\frac{2\pi v}{v}\right)^2\Psi(x)$$

Como, de (6-7),

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{v}{v}$$

obtenemos finalmente que

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi(x) \quad (6-20)$$

**PROBLEMA 6.7** Demuestre que  $\Psi(x) = A \text{ sen } \frac{2\pi}{\lambda}x$  satisface (6-20).

Esta ecuación es de suma importancia, pues establece una condición para que la función  $\phi_{\text{est}}(x, t)$  sea precisamente una onda. Es decir, cuando la función  $\Psi(x)$  de la ecuación (6-17) es tal que la ecuación (6-20) se satisface, entonces la función  $\phi_{\text{est}}(x, t)$  será precisamente una onda, pues de esta manera cumple la ecuación general (6-13). La ecuación (6-20) se conoce como la de una *onda estacionaria*, o sea, aquélla que posee una dependencia temporal  $\cos(2\pi vt)$ .

### 6.3 LA ECUACION DE SCHROEDINGER. NACIMIENTO DE LA TEORIA CUANTICA MODERNA

Erwin Schroedinger (1887-1961) fue el primero en emplear la idea de las ondas piloto de De Broglie junto con una ecuación para el movimiento ondulatorio, como las que han sido descritas en la sección anterior.

En 1926, Schroedinger publicó cuatro históricos trabajos en los que estableció la *mecánica ondulatoria*, como hoy se conoce. En esta sección pretendemos introducir, sin intentar ser formales, los fundamentos de esta nueva mecánica.

Debemos hacer notar que casi simultáneamente a la primera publicación de Schroedinger apareció, a finales de 1925, un trabajo de Werner Heisenberg (1901-1976), dedicado al mismo tema, donde se alcanzaban resultados similares. Lo curioso es que los dos trabajos parecían enteramente diferentes, tanto en las suposiciones físicas de partida como en los métodos matemáticos empleados. Inmediatamente, otros dos científicos, Max Born (1882-1970) y Pascual Jordan (1902- ), dieron mayor formalidad y rigor al trabajo de Heisenberg al presentar, en 1926, un trabajo titulado *Sobre mecánica cuántica*, donde empleaban matrices para representar a las variables de un sistema. Por ello, la teoría de Heisenberg, Born y Jordan recibe el nombre de *mecánica matricial*. Sin embargo, la incógnita no había sido resuelta, pues la mecánica ondulatoria de Schroedinger y la matricial de Heisenberg alcanzaban los valores correctos para las frecuencias y las intensidades relativas de las líneas espectrales del hidrógeno, siendo que su metodología y puntos de partida eran diferentes.

El mismo Schroedinger fue quien desentrañó el misterio, al demostrar que ambas teorías eran equivalentes. Es decir, la mecánica matricial puede derivarse de la mecánica ondulatoria, y viceversa. El hallazgo, como indica George



ERWIN SCHROEDINGER (1887-1961).  
(Tomada de d'Abro, *The Rise of the New Physics*, Dover Publications.)



WERNER HEISENBERG (1901-1976).  
 (Tomada de Hecht, *Physics in Perspective*,  
 © 1980. Addison-Wesley Publishing Co.  
 Cortesía de AIP Niels Bohr Library,  
 Archives for History of Quantum Chemistry.)

Gamow (1904-1968), fue tan sorprendente como la aseveración de que las ballenas y los delfines no son peces como el tiburón o el arenque, sino mamíferos como los elefantes o los caballos.

Aunque es conveniente insistir en que Schroedinger y Heisenberg desarrollaron dos versiones, aparentemente diferentes, de la misma teoría, en lo que sigue adoptaremos el enfoque del primero, llamándole indistintamente mecánica ondulatoria o *mecánica cuántica*.

### 6.3.1 La ecuación unidimensional independiente del tiempo de Schroedinger

Antes de iniciar esta sección es preciso hacer una aclaración: la mecánica cuántica no puede derivarse de otros conceptos más fundamentales, pues es una ciencia que se ha desarrollado de varios postulados. Podríamos, aquí mismo, abandonar el enfoque histórico que hemos mantenido a lo largo del libro y presentar escuetamente los postulados de la mecánica cuántica, de los cuales ésta puede ser desarrollada por entero. Sin embargo, nada hay en la experiencia cotidiana que sugiera las leyes de esta ciencia. Algo enteramente diferente sucede con la geometría o la mecánica clásica. A nadie deben sorprender los postulados de Euclides, o la ley de acción y reacción, ya que cualquiera puede aceptar como válidos sus enunciados desde hechos de su propia vivencia diaria. Así, en lugar de ser formales, sacrificaremos el rigor para ir presentando, uno a uno, los conceptos que, para muchos lectores, serán nuevos y abstractos.

En esta sección pretendemos arribar a un resultado particular de la mecánica ondulatoria: la ecuación independiente del tiempo que describe el estado de una partícula en una dimensión. La aportación de Schroedinger fue

mucho más general, pues con base en los fundamentos de la física clásica generados por William Rowan Hamilton (1805-1865), Joseph Louis, conde de Lagrange (1736-1813), y Moritz Hermann von Jacobi (1801-1874), encontró una forma sistemática de obtener relaciones para cualquier sistema de partículas, en las que sus propiedades ondulatorias estén presentes.

La relación de De Broglie (6-2) entre la cantidad de movimiento de una partícula y la longitud de la onda asociada a su movimiento no contiene ninguna información sobre la amplitud y la naturaleza de dicha onda. Para encontrar esta información basta considerar la ecuación que, desde el siglo XIX, se consideraba válida para cualquier movimiento ondulatorio. Como el mismo Schroedinger indicó en 1926, era necesario *tomar en serio la teoría ondulatoria de De Broglie para las partículas en movimiento*, y esto fue precisamente lo que hizo.

Para partículas limitadas en un cierto confin, como es el caso abordado en los ejemplos 6.1 y 6.2, la onda asociada a su movimiento debe ser estacionaria, como allí discutimos. Por tanto, su amplitud debe venir dada por la ecuación (6-17), donde  $\Psi(x)$  debe satisfacer (6-20). Así, podemos sustituir la longitud de onda en (6-20) por  $h/p$ , como indica la hipótesis de De Broglie, y obtener

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\left(\frac{2\pi p}{h}\right)^2\Psi \quad (6-21)$$

Esta es una ecuación muy especial, pues contiene tanto la amplitud  $\Psi(x)$  de una onda como la cantidad de movimiento de una partícula. En ella está implícita la concepción dual que De Broglie introdujo. A continuación, haremos unas cuantas transformaciones sobre (6-21) para llegar a la deseada ecuación de Schroedinger. Para empezar, al igual que en el capítulo 3, usaremos

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

con lo que (6-21) se transforma en

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \quad (6-22)$$

En segundo término, ya que la energía cinética puede expresarse como

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}, \quad (6-23)$$

la cantidad de movimiento al cuadrado puede despejarse

$$p^2 = 2mE_c \quad (6-24)$$

y puesto que la suma de las energías cinética,  $E_c$ , y potencial,  $V$ , es la energía total, entonces  $E_c = E - V$ , lo que sustituido en (6-24) conduce a

$$p^2 = 2m(E - V) \quad (6-25)$$

Finalmente, reemplazando  $p^2$  de (6-25) en la ecuación de onda (6-22), obtenemos

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}\Psi \quad (6-26)$$

Rearreglando esta expresión, tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V\Psi = E\Psi \quad (6-27)$$

Esta es, precisamente, la ecuación de Schroedinger unidimensional, independiente del tiempo, para una partícula. Como vemos, se trata de una ecuación diferencial, pues involucra a la función de amplitud  $\Psi(x)$  y su segunda derivada  $\Psi''(x)$ . La ecuación (6-27) relaciona a  $\Psi(x)$  y  $\Psi''(x)$ , que corresponden a parámetros ondulatorios, con las energías total y potencial y con la masa, este último un parámetro corpuscular. Por tanto, se encuentran presentes los dos ingredientes, corpuscular y ondulatorio, mostrados en el comportamiento de las partículas microscópicas.

Para el lector poco familiarizado con ecuaciones como la (6-27), vale la pena aclarar lo que se obtiene al resolverlas. En toda ecuación diferencial, el objetivo es obtener la función que está afectada por la derivación,  $\Psi(x)$ , en nuestro caso. Lo anterior quedará claro en cuanto abordemos algunos ejemplos en las secciones que siguen, aunque vale la pena ejemplificar inmediatamente la solución de otras ecuaciones diferenciales diferentes a la (6-27).

**Ejemplo 6.5** Encuentre la solución de la ecuación

$$\frac{d\Psi}{dx} = 4$$

*Solución* Este tipo de ecuaciones se puede integrar inmediatamente. Multiplicándola por  $dx$ , obtenemos

$$d\Psi = 4dx$$

Integrando ambos lados y recordando incluir la constante de integración,  $C$ , alcanzamos

$$\Psi = 4x + C$$

Es decir, funciones como  $4x + 2$ ,  $4x + 5.5$  ó  $4x + \pi$  son soluciones de la ecuación diferencial, pues para todas ellas su derivada es igual a 4.

Queda claro, entonces, que el resultado de resolver una ecuación diferencial es una función. Además, a diferencia de las ecuaciones algebraicas que tienen, en general, un número finito de soluciones, una ecuación diferencial presenta un número infinito de respuestas, pues la constante de integración puede tomar cualquier valor.

**PROBLEMA 6.8** Resuelva la ecuación diferencial

$$\frac{d\Psi}{dx} = 1/x$$

**Ejemplo 6.6** Resuelva la ecuación diferencial de segundo orden

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\Psi$$

*Solución* En este caso no es posible integrar directamente, como se hizo en el ejemplo 6.5, aunque existen procedimientos especiales de resolución. Por tanto, sólo nuestra experiencia de cálculo diferencial puede sernos de utilidad. ¿Cuál será la función que al ser derivada dos veces vuelve a ser obtenida, excepto por un cambio de signo? Aquellos lectores con un manejo fluido de derivación reconocerán que tanto  $(\sin x)$  como  $(\cos x)$  cumplen con esta condición. Es más, cualquier combinación lineal de estas funciones es una buena solución. Procedamos a demostrarlo.

Sea

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

Derivando una primera vez, obtenemos

$$\frac{d\Psi}{dx} = A \cos x - B \sin x$$

Una ulterior derivación nos lleva a

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -A \sin x - B \cos x = -\Psi(x)$$

con lo que la demostración concluye.

Nuevamente, la ecuación diferencial ha aceptado un número infinito de soluciones, ya que tanto  $A$  como  $B$  son arbitrarias.

De lo desarrollado en los ejemplos anteriores, es claro que de la ecuación de onda (6-27) podremos obtener como solución a la *función de onda*  $\Psi(x)$  asociada a la partícula. Pero, ¿para qué nos sirve este conocimiento? Esta y otras dudas genuinas nos asaltan de inmediato:

- ¿Cuál es el significado físico de  $\Psi(x)$ ? O ¿qué es esa onda?
- Si no podemos emplear en sistemas microscópicos las leyes de la física clásica, ¿basta el conocimiento de  $\Psi(x)$  para caracterizar el comportamiento de nuestra partícula?
- Aparentemente, las únicas variables involucradas en la ecuación de Schrodinger son la energía total y la energía potencial. ¿Cómo se encuentra la energía cinética y otras variables<sup>5</sup> como la velocidad, la posición, la cantidad de movimiento, etc.?
- ¿Está contenida la mecánica clásica en la mecánica cuántica?, o bien, ¿puede aplicarse la ecuación de onda para cuerpos masivos, obteniéndose los mismos resultados que al usar las leyes de Newton?

Las respuestas a estas interrogantes no son tan simples de presentar y mucho menos de abstraer. Nuestra vivencia diaria tiene lugar en un mundo donde todos, o casi todos, los fenómenos cotidianos son comprensibles em-

<sup>5</sup> En adelante, las llamaremos *variables dinámicas* del sistema que se estudia.

pleando argumentos clásicos. Resulta difícil, entonces, entender y acostumbrarnos a que estas leyes no sirven en el microcosmos. Sin embargo, es hora de empezar a convencernos de que, por raras que parezcan, las leyes de la mecánica cuántica describen fielmente los sistemas de partículas, lo cual se ha confirmado miles de veces por quienes experimentan con moléculas, átomos o partículas subatómicas.

Antes que empezar la búsqueda de soluciones para la ecuación de Schrodinger, que no desarrollaremos hasta la sección 6.6, pretendemos ir mostrando pausadamente más ideas sobre la estructura de la mecánica cuántica.

### 6.3.2 Operadores en mecánica cuántica. Problemas de valor propio

Retomemos la ecuación de Schrodinger para una dimensión, (6-27), pero para una partícula con energía potencial cero.

En este caso, la ecuación de onda toma la forma

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E_c\Psi} \quad (6-28)$$

Hemos reemplazado a la energía total,  $E$ , por la cinética, dado que  $V = 0$ .

La ecuación (6-28) «dice» mucho si la sabemos leer. La función de onda de una partícula en estas condiciones, ( $V = 0$ ), debe ser tal que basta «derivarla dos veces y multiplicarla por  $-\hbar^2/2m$ » para obtener de nueva cuenta a  $\Psi(x)$ , pero ahora multiplicada por la energía cinética de la partícula.

A la frase colocada entre comillas en el párrafo anterior, es decir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (6-29)$$

se le conoce como *operador de la energía cinética*. Debe tenerse presente que en (6-29) sólo se ha escrito una «receta», lo que hay que hacer sobre la función de onda del sistema para poder obtener la energía cinética de la partícula.

**Por tanto, un operador no es más que una receta que debe seguirse. Si denotamos por  $\hat{E}_c$  al operador de la energía cinética (6-29), la ecuación de onda (6-28) puede escribirse como**

$$\hat{E}_c\Psi = E_c\Psi \quad (6-30)$$

Debemos reconocer que  $\hat{E}_c$ , en el lado izquierdo, representa al operador cierta acción que debe efectuarse sobre  $\Psi$ ; y  $E_c$ , en el lado derecho, es el número que corresponde a la energía cinética de nuestra partícula.

El término «operador» tiene un significado matemático preciso. Los operadores actúan sobre las funciones, transformándolas en otras funciones. Como par de ejemplos tenemos:



- «multiplicar por dos» es un operador, pues transforma toda función  $f(x)$  en la función  $g(x) = 2f(x)$ .
- «derivar respecto a  $x$ » es también un operador, pues opera sobre  $f(x)$ , dando como resultado  $g(x) = df/dx$ .

**PROBLEMA 6.9** a) ¿«Tomar la raíz cuadrada» es un operador? b) ¿Es un operador «integrar» de cero a  $x$ ?

*Respuesta* a) No, pues a cada función asigna dos resultados. Por ejemplo,  $\sqrt{x^2} = \pm x$ .  
 b) Sí.

**Ejemplo 6.6** Aplique el operador de energía cinética a la función  $\Psi = e^{2ix}$ , donde  $i = \sqrt{-1}$ , para verificar la ecuación (6-30) o refutarla.

Calculemos la segunda derivada de  $\Psi$ :

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{de^{2ix}}{dx} = 2ie^{2ix}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left[ \frac{d\Psi}{dx} \right] = \frac{d}{dx} (2ie^{2ix}) = -4e^{2ix} = -4\Psi$$

Multiplicando esta ecuación por  $-\frac{\hbar^2}{2m}$ , obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2\hbar^2}{m} \Psi$$

En el lado izquierdo de esta ecuación tenemos al operador de la energía cinética actuando sobre  $\Psi$ , es decir,

$$\hat{E}_c \Psi = \frac{2\hbar^2}{m} \Psi$$

Comparando esta relación con la (6-30) es claro que la energía cinética de la partícula representada por  $\Psi$  es<sup>6</sup>

$$E_c = \frac{2\hbar^2}{m}$$

Vemos que empezamos a dar respuesta a alguna de las preguntas e incógnitas presentadas al final de la sección anterior. La función de onda de una partícula o sistema dados no presenta, aparentemente, una interpretación clara y una utilidad inmediata, pero al hacer actuar sobre ella al operador adecuado, puede ser empleada para darnos a conocer los valores de las variables dinámicas del sistema bajo estudio. Lo anterior parece ser cierto, al menos cuando la función de onda,  $\Psi$ , satisfaga ecuaciones como la (6-30).

<sup>6</sup> No se tome en cuenta, por el momento, que las unidades de  $E_c$  no son unidades de energía.

El hallazgo decisivo de Schroedinger fue presentar un método para encontrar los operadores de cada variable dinámica de un sistema dado. Hasta ahora sólo hemos presentado el operador de la energía cinética,

$$\hat{E}_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad (6-31)$$

pero Schroedinger mostró cómo obtener cualquier otro.

**Ejemplo 6.7** La expresión clásica de la energía cinética de una partícula que se mueve en una dimensión es

$$E_c = p^2/2m$$

Conocido el operador de la energía cinética (6-31), obtenga:

- El operador del cuadrado de la cantidad de movimiento.
- El operador de la cantidad de movimiento.

*Solución*

- Partiremos del supuesto de que la expresión clásica se cumple también por los correspondientes operadores mecánico-cuánticos  $\hat{E}_c$  y  $\hat{p}_x^2$ , es decir,

$$\hat{E}_c = \hat{p}_x^2/2m$$

De esta expresión podemos despejar el operador de  $p_x^2$  como

$$\hat{p}_x^2 = 2m\hat{E}_c = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

- Debemos entender, antes que nada, el significado del cuadrado de un operador. Multiplicar un operador por sí mismo es algo que no tiene sentido, pues los operadores no son números, sino «recetas» o transformaciones de una función en otra. El cuadrado de un operador debe entenderse como la aplicación, dos veces sucesivas, del mismo. Así,  $\hat{p}_x^2$  actuando sobre una función  $\Psi$  no es más que el resultado de aplicar  $\hat{p}_x$  sobre  $\Psi$  y volverlo a aplicar nuevamente, es decir,

$$\hat{p}_x^2\Psi = \hat{p}_x(\hat{p}_x\Psi)$$

Para obtener  $\hat{p}_x$  debemos razonar qué transformación aplicada dos veces produce el mismo efecto que  $\hat{p}_x^2$ , o sea,

$$\hat{p}_x\hat{p}_x = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

Es obvio que  $\hat{p}_x$  debe contener una primera derivada, la que al actuar dos veces se convierta en la segunda derivada. Además, para que aparezca el factor  $-\hbar^2$ , es necesario introducir a  $i = \sqrt{-1}$  en la definición de  $\hat{p}_x$ , pues de otra forma nunca alcanzaremos el signo menos deseado. La respuesta es, entonces<sup>7</sup>,

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (6-32)$$

<sup>7</sup> También pudo escribirse  $\hat{p}_x = i\hbar \frac{d}{dx}$ , pero se prefiere (6-32), con el signo menos.

