

La ecuación de Schrödinger

Seminario: Introducción a la física cuántica segundo semestre 2025–2026

Fernando Chamizo <https://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/>

La ecuación de Schrödinger es una ecuación en derivadas parciales que regula la evolución de los estados cuánticos. Con ella, los comportamientos discretos observados en algunos de los experimentos que dieron lugar a la física cuántica corresponden a los autovalores de ciertos operadores diferenciales.

2.1. Creando una ecuación

Inicialmente la mecánica cuántica se teorizó con los importantes trabajos de W. Heisenberg, M. Born y P. Jordan [12], [3], [2] basados en matrices infinitas, lo cual suena razonable para expresar intercambios discretos de energía como los que sugerían los experimentos. Con este lenguaje la multiplicación de matrices correspondía a una forma de operar frecuencias en *series de Fourier*. Sin embargo, E. Schrödinger cambió esta perspectiva dándole una orientación ondulatoria regida por una ecuación en derivadas parciales [18], [17]. El triunfo de la versión de Schrödinger, que es la que ha llegado hasta nuestros días, es comprensible, porque es más versátil y porque está más cerca de los métodos matemáticos habituales de la física, tanto en su tiempo como en la actualidad.

Antes de comenzar, debes repasar o aprender un poco de la terminología al uso en los fenómenos ondulatorios así como la conservación de la energía en la mecánica clásica. Ese es el contenido de los dos siguientes apartados, que podrían resultarte prescindibles.

Ondas. Cuando nos hablan de ondas a todos se nos vienen a la cabeza los senos y cosenos. En física a menudo las ondas corresponden a expresiones del tipo

$$u(x, t) = A \begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix} (kx - \omega t)$$

que, matemáticamente, son soluciones de la *ecuación de ondas* $u_{tt} = v_p^2 u_{xx}$ con $v_p = \omega/k$. El análisis de Fourier esencialmente dice que todas las soluciones son superposiciones de ellas. Tanto en matemáticas como en física, en muchas situaciones conviene unificar los senos y cosenos introduciendo ondas complejas, que convenientemente superpuestas por medio de las fórmulas atribuidas a L. Euler dan lugar a las ondas reales consideradas antes:

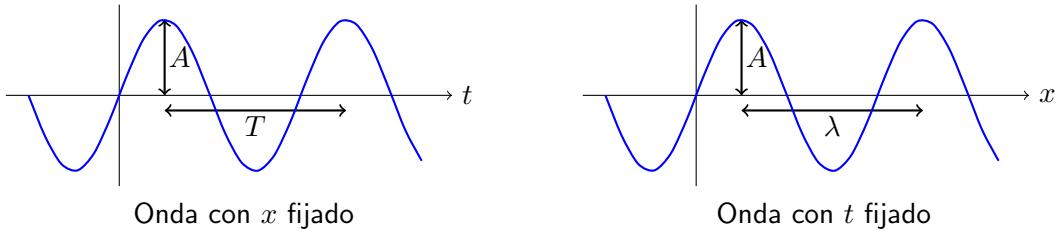
$$(1) \quad \varphi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \implies \begin{cases} A \cos(kx - \omega t) = \frac{1}{2}(\varphi(x, t) + \varphi(-x, -t)), \\ A \sin(kx - \omega t) = \frac{1}{2i}(\varphi(x, t) - \varphi(-x, -t)). \end{cases}$$

Un ejemplo matemático de la utilidad de este truco es que en las series de Fourier de funciones 1-periódicas las fórmulas son más sencillas y simétricas con ondas complejas que con reales. Un ejemplo de la física y la ingeniería es que es más fácil analizar circuitos de corriente alterna suponiendo que la diferencia de potencial y la corriente son ondas complejas.

La siguiente tabla recoge parte de la terminología habitual en física [6, §29.3] para estas ondas sinusoidales en una dimensión:

Símb.	Significado	Dim.
A	Amplitud: altura de las crestas	—
ν	Frecuencia angular: número de oscilaciones por unidad de tiempo	T^{-1}
ω	Frecuencia: $2\pi\nu$, número de radianes por unidad de tiempo	T^{-1}
T	Periodo: ν^{-1} , lo que tarda en repetirse un ciclo	T
λ	Longitud de onda: separación entre crestas para tiempo fijo	L
k	Número de ondas: $2\pi/\lambda$ salvo el signo	L^{-1}
v_p	Velocidad de fase: ω/k , avance de las crestas por unidad de tiempo	LT^{-1}

Estas gráficas tratan de ilustrar el significado de la amplitud, el periodo y la longitud de onda:



En tres dimensiones la situación es similar salvo que k y x son vectores porque hay que señalar una dirección, de hecho ya en el caso unidimensional hay dos posibilidades para el signo de k , correspondientes a las dos direcciones (sentidos) que hay en \mathbb{R} . La ecuación de ondas en tres dimensiones es $u_{tt} = v_p^2 \Delta u$ con $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ el operador laplaciano.

La unidad en el SI para indicar la frecuencia es el *hercio* (por el físico Hertz), es decir, $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$ donde Hz es el símbolo para el hercio.

Energía en un campo. Un modelo matemático recurrente en física consiste en que las partículas de prueba experimentan en cada punto del espacio una fuerza dada por un *campo vectorial*, una función $\vec{F} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Especialmente relevante es el caso en que $\vec{F} = -\nabla V$, cuando esto ocurre se dice que el campo es *conservativo* y que V es su *potencial* o la *energía potencial*. El potencial V está definido salvo una constante aditiva y en física a veces hay convenios para fijarla. En nuestro contexto unidimensional, el *campo* que da la fuerza es escalar y simplemente estamos escribiendo $F(x) = -V'(x)$. Ya habíamos mencionado la energía cinética $\frac{1}{2}mv^2$ de una partícula con masa m y velocidad v . Con ambos tipos de energía, se define la *energía total* de dicha partícula como

$$E = E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V.$$

El interés de esta cantidad es que permanece constante a lo largo de la trayectoria $x = x(t)$ de la partícula, se conserva, porque

$$\frac{dE}{dt} = mv\frac{dv}{dt} + V'\frac{dx}{dt} = (ma - F)v = 0.$$

Un análisis similar funciona en tres dimensiones con v^2 o p^2 el cuadrado de la norma de las cantidades vectoriales correspondientes.

Ya hemos visto cómo Einstein sugirió que las ondas de luz estuvieran, de algún modo, compuestas por partículas de luz. El paso de ondas a cuantos también es natural con la explicación de la radiación del cuerpo negro o con el átomo de Bohr interpretando que la radiación debida a la fórmula de Larmor no se produce porque no hay energía suficiente para producir un cuanto. Aunque suene paradójico, la idea que triunfó fue la hipótesis de L. de Broglie, planteada en su tesis doctoral en 1924, consistente en que la materia era de naturaleza ondulatoria. Además, esta idea surgía a partir de la física clásica, cuando se comparaban ecuaciones de mecánica y de la *óptica geométrica* (la que considera la luz formada por rayos), algo que tiene sus antecedentes en W. R. Hamilton. De Broglie asociaba a una partícula en movimiento con momento lineal p una *onda de materia* con longitud de onda

$$(2) \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{o, equivalentemente,} \quad \hbar k = p.$$

Si pensamos en el átomo de Bohr la onda asociada al electrón pegada a su órbita con esta longitud de onda, la condición de cuantización de Bohr equivale a pedir que no entre en conflicto con ella misma, que sea *estacionaria*.



Para radiaciones electromagnéticas (por ejemplo, la luz), la electrodinámica clásica afirma $p = E/c$ donde p es el momento lineal (que ya no se define como masa por velocidad), E la energía y c la velocidad de fase (la velocidad de la luz). Como para cada fotón se cumple $E = h\nu = \hbar\omega$, se tiene $p = \hbar\omega/v_p = \hbar k = h/\lambda$. Entonces (2) está en consonancia con la electrodinámica clásica. Otra concordancia notable, es que la mecánica clásica se basa en el *principio de mínima acción*, un principio variacional que afirma que las partículas libres se mueven de forma que la integral del momento lineal en función del espacio es estacionaria (localmente mínima). Por otro lado, el *principio de Fermat* de la óptica geométrica [6, §26], [4, §3] afirma algo similar para λ^{-1} , lo cual sugiere que p y λ^{-1} son proporcionales [9]. El espaldarazo experimental llegó en 1927, cuando se publicó el resultado de unos experimentos que mostraban que los electrones se difractaban como si fueran ondas con una longitud de onda compatible con (2). La *difracción* es un fenómeno consistente en que las ondas tienden a desviarse al pasar por una abertura.

La fórmula (2) abrió un nuevo periodo en la física cuántica y propició la contribución fundamental de E. Schrödinger quien, en estos comienzos de la mecánica cuántica ondulatoria, introdujo la ecuación básica que rige la evolución de la onda asociada a una partícula. En vez de seguir sus argumentos [10] (parcialmente reflejados en [9] y [8]), procederemos de una manera que allanará el camino al formalismo actual. Debe quedar claro que la ecuación de Schrödinger no se deduce de primeros principios, es un postulado en sí misma de la física cuántica, a todo lo que podemos aspirar es a motivarla. Seguramente los matemáticos se sentirán complacidos al leer los siguientes fragmentos de una carta de Schrödinger a Wien poco antes de publicar su famosa ecuación:

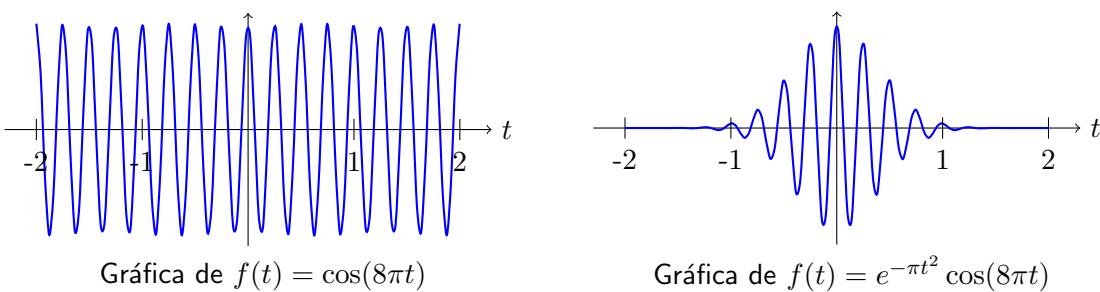
Una nueva teoría atómica me ocupa en este momento. ¡Ojalá supiera más matemáticas! Soy muy optimista al respecto y espero que, si logro dominar los cálculos, todo saldrá muy bien. Creo que puedo proporcionar un sistema vibratorio [...] que tenga las frecuencias del término de hidrógeno como frecuencias naturales [...]

Espero poder informar pronto sobre el asunto con un poco más de detalle y de manera fácil de entender. Por el momento, todavía tengo que aprender matemáticas para poder resolver completamente el problema de la oscilación –una ecuación diferencial lineal, similar a la de Bessel, pero menos conocida [...]

Está claro que una partícula no es una onda como (1) que se extiende por todo el espacio, sino que está localizada, es posible concretar una pequeña región en la que está. ¿Cómo reconciliar esto con (2)? En el lado de la física hay una analogía en la óptica geométrica antes mencionada: observamos rayos de luz (más evidentes en los láseres), pero tales rayos están formados por superposiciones de muchas ondas. En el lado matemático, la situación es familiar en el análisis de Fourier (J. Fourier resolvió la ecuación del calor suponiendo que todas las funciones son superposiciones de ondas). Por ejemplo, $\cos(8\pi t)$ se extiende por toda la recta real con frecuencia 4. La identidad integral basada en la *transformada de Fourier*

$$e^{-\pi t^2} \cos(8\pi t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\nu) \cos(2\pi\nu t) d\nu \quad \text{con } g(\nu) = e^{-\pi(\nu-4)^2}.$$

indica cómo obtener una versión localizada alrededor del origen de $\cos(8\pi t)$ superponiendo ondas de infinidad de frecuencias siendo las más relevantes las que tienen frecuencias cercanas a 4, nótese que $\max g = g(4)$.



Motivados por esto, para construir la ecuación buscada vamos a suponer que las ondas de materia son superposiciones de ondas (1) que tienen $k = p/\hbar$ y $\omega = E/\hbar$ para que sean

compatibles con (2) y con $\omega = E/\hbar$, que equivale a la fórmula de Planck-Einstein. Esto es,

$$\varphi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}.$$

Vamos ahora a definir el *operador momento lineal* que baja p del exponente y multiplica a φ . En física cuántica básica para distinguir los operadores de las cantidades clásicas se suele escribir un circunflejo encima¹. El operador en cuestión es

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \implies \hat{p}(\varphi) = p\varphi.$$

También, para cualquier función de la posición $g = g(x)$ se define el operador asociado que simplemente multiplica por dicha función:

$$\hat{g} = g \cdot \implies \hat{g}(\varphi) = g\varphi$$

Si queremos que se satisfaga la conservación de la energía debemos imponer

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \quad \text{con} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$$

donde \hat{p}^2 es el operador momento lineal aplicado dos veces. Se dice que \hat{H} es el *operador hamiltoniano* por ser el análogo del *hamiltoniano* que da la energía en la mecánica clásica, llamado así en honor a Hamilton. Se puede evitar cualquier referencia a E utilizando una derivada con respecto del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}\varphi.$$

Recordemos que nuestra suposición era que las ondas de materia, digamos $\Psi(x, t)$, son superposiciones de las ondas básicas $\varphi(x, t)$. Como \hat{H} y derivar con respecto del tiempo son operadores lineales, respetan las superposiciones, entonces $\Psi(x, t)$ satisface una ecuación similar

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi.$$

a la que se llama *ecuación de Schrödinger*, añadiendo a veces *dependiente del tiempo* para distinguirla de otra que veremos más adelante que solo actúa sobre la posición.

Las versiones matemáticamente explícitas para una y tres dimensiones espaciales de la ecuación de Schrödinger son las ecuaciones en derivadas parciales:

$$(3) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad \text{y} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi.$$

La primera se sigue descodificando la notación en el argumento anterior y la segunda se obtiene de manera similar salvo que \hat{p} es el operador vectorial $-i\hbar\nabla$. En esta última Δ es el operador

¹Muchos matemáticos refunfuñarán por la confusión con la notación de la transformada de Fourier, la cual, para mayor escándalo, en física cuántica se indica muchas veces solo cambiando el nombre de la variable. Si $f = f(x)$ es una función, $f(p)$ significa su transformada de Fourier con cierta normalización.

laplaciano que en física casi siempre se denota con ∇^2 , como si fuera aplicar dos veces el gradiente, lo cual tiene cierto sentido aquí.

Terminemos con dos observaciones al margen que solo llamarán tu atención si tienes conocimientos de física clásica, en el segundo caso con alguna profundidad. La mecánica clásica de una partícula en un campo conservativo se puede construir a partir de $H = E$ con $H = \frac{p^2}{2m} + V$, de modo que la ecuación $\hat{H}\varphi = E\varphi$ que cumple cada “trozo” de Ψ con energía definida es la ecuación clásica pasando a operadores mediante la regla de que los momentos lineales se traducen en derivadas (con cierta normalización) y las posiciones (o funciones de ellas) en multiplicaciones. En los primeros tiempos de la física cuántica esto dio una guía muy útil para transformar ecuaciones clásicas en cuánticas y constituye lo que se llama *primera cuantización*. La segunda observación, más avanzada, es que $px - Et$ es el producto de Minkowski de dos cuadrivectores en la cinemática relativista, lo que sugiere que nuestras $\varphi(x, t)$ son relativistas, invariantes Lorentz, sin embargo estamos aplicando la conservación de la energía no relativista lo que no es coherente y aboca a perder la oportunidad de que la ecuación de Schrödinger represente correctamente partículas con velocidades cercanas a la de la luz. El propio Schrödinger era consciente de ello, pero se vio forzado a esta incongruencia porque cuando usaba la energía relativista le salía una ecuación que no tenía sentido físico. En gran medida este problema lo resolvió P. Dirac introduciendo una ecuación matricial en que las ondas de materia pasaban a ser vectores de cuatro coordenadas con propiedades exóticas bajo cambios de coordenadas llamados *espinores*.

Imaginarás que si hay una primera cuantización es que hay una *segunda cuantización* (el nombre se debe a Jordan). Así es y está relacionada con ambas observaciones pues utiliza familias de operadores y fundamenta la *teoría cuántica de campos*, la teoría de los que disponemos en la actualidad para combinar la física cuántica y la relatividad especial, dando cuenta de las partículas elementales. Para ilustrar su complejidad, basta decir que uno de los *Millennium Prize Problems* [19] esencialmente pregunta si tiene sentido matemático.

2.2. Interpretación y propiedades

Antes de nada, vamos a cambiar el término antiguo *onda de materia* por el más general y moderno *función de ondas*. En nuestro contexto la función de ondas es una función $\Psi = \Psi(x, t)$ asociada a una partícula que resuelve la ecuación de Schrödinger. En un contexto más amplio, una función de ondas puede representar el estado de un sistema cuántico más complejo, por ejemplo de un átomo con muchos electrones.

La pregunta más fundamental es qué representa la función de ondas Ψ . Paradójicamente, Schrödinger inventó su ecuación antes de tener clara la respuesta. Debido a la aparición de un factor i en el primer miembro, necesariamente Ψ toma valores complejos². Si Ψ representa a la partícula, parece natural suponer que fijado un tiempo t habrá “más partícula” en x cuanto mayor sea $|\Psi(x, t)|$, lo mismo que hay “más ola” en la zona cercana a su cresta.

²Es poco conocido que Schrödinger intentó algunas cosas extrañas para escapar de los números complejos [13] hasta acabar aceptándolos. Recientemente, [16] ha alcanzado cierta fama (seguramente efímera) afirmando que la necesidad de los números complejos se puede comprobar experimentalmente y tal experimento se ha llevado a cabo.

La idea que triunfó es la *regla de Born* [1] [10, §13.7], formulada unos días después del artículo de Schrödinger [18], que afirma:

Para cada t fijado, $|\Psi(x, t)|^2$ es proporcional a la probabilidad de detectar la partícula en x .

Más adelante veremos que “detectar” o “medir” es algo que lleva a un problema todavía no resuelto en la fundamentación de la física cuántica.

Desde el punto de vista matemático, lo que estamos diciendo es que si *normalizamos* Ψ multiplicándola por una constante para que se cumpla $\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ entonces $f(x) = |\Psi(x, t)|^2$ es la función de densidad de la partícula que ahora, al menos en cuanto a detección se refiere, pasa a ser un ente probabilista. Eso suena un poco feo (y, de hecho, más de lo que parece a este nivel), pero es lo que hay. En palabras de Schrödinger: “*No soy amigo de la teoría de la probabilidad, la he odiado desde el primer momento en que nuestro querido amigo Max Born la dio a luz*” [10, §12.2]. Con esta interpretación, $\dim \Psi = L^{-1/2}$ en una dimensión y $\dim \Psi = L^{-3/2}$ en tres dimensiones.

Un primer problema técnico es que para que Ψ sea normalizable debemos admitir que sea de cuadrado integrable. De hecho, cuando es necesario se supone que Ψ o sus derivadas en x tienen cierto decaimiento a la larga en dicha variable. Esto es cuestionable porque ni siquiera $g \in L^2(\mathbb{R})$ implica $\lim_{x \rightarrow \infty} g(x) = 0$. Repitiendo literalmente una aclaración del famoso texto básico de física cuántica [11] “*Un matemático competente puede darte contraejemplos patológicos, pero no aparecen en física, para nosotros la función de ondas y todas sus derivadas tienden a cero en el infinito*”.

Un problema mucho más serio es que la normalización no solo es necesaria para un tiempo fijado sino para todo tiempo. Si Ψ satisface la ecuación de Schrödinger, entonces $\kappa\Psi$ con κ en \mathbb{R} o en \mathbb{C} también la satisface, por que es lineal. Eso permite que la normalización para cada t sea posible bajo las premisas anteriores. Ahora bien, si κ dependiera de t entonces $\kappa(t)\Psi$ dejaría de cumplir en general la ecuación. Si, por ejemplo, $|\Psi(x, 0)|^2$ es función de densidad y $|\Psi(x, 1)|^2$ no lo es porque su integral es $1/2$ hemos perdido la mitad de la probabilidad y si fuera 2 , la interpretación probabilista sería imposible. Lo único compatible con esta interpretación es que la probabilidad se conserve, es decir, en nuestro contexto unidimensional, que haya un milagro matemático por el que la primera ecuación de (3) implique

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dt = 0.$$

Veamos cómo se demuestra tal milagro. Derivando bajo el signo integral, nos enfrentamos a

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t},$$

donde, siguiendo la tradición en física, la estrella indica el conjugado (porque la barra se utiliza para otra cosa). El golpe de gracia es que utilizando (3),

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) = -\frac{\partial j}{\partial x} \quad \text{con} \quad j(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right).$$

De aquí,

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial j}{\partial x} dx = j(-\infty, t) - j(\infty, t)$$

que es cero bajo nuestras hipótesis de que Ψ y su derivada con respecto de x tienden a cero cuando $x \rightarrow \infty$.

Una vez que sabemos que la interpretación de la función de ondas es consistente, debemos abordar el problema de si es coherente con la realidad. Si la ecuación de Schrödinger tiene sentido físico, para ondas muy concentradas, que parecieran partículas, deberíamos recuperar la física clásica. El electrón en el átomo de hidrógeno puede que se comporte como una onda según (2) o según (3), pero las antiguas televisiones con sus tubos de rayos catódicos funcionaban cuando se aplicaban leyes clásicas a los electrones considerados como partículas que impactaban a la pantalla.

Partiendo de que $|\Psi|^2$ es una función de densidad para cualquier tiempo, la posición media y la fuerza media se definen como

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad \text{y} \quad \langle F \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} V'(x) |\Psi(x, t)|^2 dx.$$

En tres dimensiones pasarían a ser vectores de tres coordenadas $\langle \vec{x} \rangle$ y $\langle \vec{F} \rangle$ con $-V'$ reemplazado por $-\nabla V$. El *teorema de Ehrenfest* (por P. Ehrenfest, un físico teórico amigo de Einstein) afirma que la ecuación de Schrödinger implica

$$m \frac{d^2 \langle \vec{x} \rangle}{dt^2} = \langle \vec{F} \rangle.$$

Dicho de una forma colorista: la mecánica clásica (basada en $F = ma$) es la mecánica cuántica (basada en la ecuación de Schrödinger) en promedio.

Veamos la demostración del teorema de Ehrenfest en una dimensión. En tres es bastante similar. Escribiendo como antes $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$ y usando la ecuación de Schrödinger en la forma $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar^{-1} \hat{H}(\Psi)$ con $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$,

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar^{-1} x \hat{H}(\Psi) \Psi^* + i\hbar^{-1} x \Psi \hat{H}(\Psi^*)) dx.$$

Integrando por partes dos veces, $\int_{-\infty}^{\infty} f'' g = \int_{-\infty}^{\infty} f g''$, suponiendo el decaimiento adecuado en el infinito, de ahí,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{H}(f) g = \int_{-\infty}^{\infty} f \hat{H}(g),$$

por tanto,

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (x \hat{H}(\Psi) - \hat{H}(x \Psi)) dx.$$

Operando, el paréntesis interior es $\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$, de modo que

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p}(\Psi) dx.$$

Esta igualdad es bastante sugestiva, porque, de algún modo, indica que la masa por el promedio de la velocidad es el promedio del momento. Derivando de nuevo con respecto de t , todo funciona como antes reemplazando el operador \hat{x} (multiplicar por x) por \hat{p} . Es decir,

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -i\hbar^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* ((\hat{p}\hat{H})(\Psi) - (\hat{H}\hat{p})(\Psi)) dx.$$

Es sencillo comprobar que $\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p}$ coincide con $-i\hbar\hat{V}'$, porque $\hat{p}^3 - \hat{p}^3 = 0$ y $\hat{p}(V) = -i\hbar V'$, y eso termina la prueba.

El último tema que vamos a abordar en este apartado es bajo qué condiciones esperamos resolver la ecuación de Schrödinger y cómo podemos hacerlo.

La ecuación de Schrödinger es una ecuación de evolución, dado un perfil inicial $\Psi(x, 0)$, intuitivamente, es posible aproximar $\Psi(x, \epsilon)$ mediante

$$i\hbar(\Psi(x, \epsilon) - \Psi(x, 0)) \approx \hat{H}\Psi(x, 0)$$

y repitiendo el proceso (*método de Euler, diferencias finitas*) tendríamos un método numérico para aproximar $\Psi(x, t)$. Este esquema sugiere que bajo la condición $\Psi(x, 0) = f(x)$ y pidiendo alguna regularidad obtendremos solución única de la ecuación de Schrödinger. Se prueba que es así en cursos de matemáticas. Físicamente esto tiene sentido porque $\Psi(x, 0)$ tiene información tanto acerca de la posición como del momento iniciales, al menos en promedio (recordemos las fórmulas para $\langle x \rangle$ y su derivada temporal), y eso es todo lo que necesitamos para hallar la evolución futura (o pasada) de una partícula.

Un método que se aplica con éxito en las ecuaciones en derivadas parciales lineales clásicas es el de *separación de variables*. Vamos a ver a qué conduce aquí y cuál es su interpretación física. Según este método hay que buscar soluciones del tipo $\Psi(x, t) = f(t)\psi(x)$ y después superponerlas. Al sustituir en la ecuación de Schrödinger y dividir por $\Psi(x, t)$ se obtiene

$$i\hbar \frac{f'(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}.$$

Ahora bien, el primer miembro depende de t y el segundo de x , por tanto, ambos deben ser iguales a una constante que llamaremos E , enseguida veremos el motivo de esta notación. El primer miembro da lugar a una ecuación diferencial ordinaria de primer orden cuya solución salvo multiplicación por constantes es $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$, mientras que ψ satisface la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*

$$(4) \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

llamada sí porque \hat{H} solo actúa sobre la posición x . Esto funciona en una y tres dimensiones dando lugar a las ecuaciones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + (V - E)\psi = 0 \quad \text{y} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + (V - E)\psi = 0.$$

Nótese que estas ecuaciones son reales. Con lo que sabemos de la motivación de la ecuación de Schrödinger, E es la energía y (4) es el análogo cuántico de su conservación: $\frac{p^2}{2m} + V = E$. Por otro lado, $f(t)\Psi(x)$ es lo que en física se llama una *onda estacionaria*, la que oscila en el tiempo con un movimiento armónico y el método de separación de variables es la realización de la confianza habitual de que toda onda sea superposición de ondas estacionarias.

La ecuación (4) afirma que E es un autovalor de \hat{H} . Por analogía con el álgebra lineal, parece razonable que en ciertas situaciones los valores de E sean discretos, esto es, que la energía esté cuantizada. Si este es el caso, existen unas energías E_n permitidas, que se dice que conforman el *espectro discreto*, y unas soluciones ψ_n de (4) tales que la solución de la ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo) es

$$\Psi(x, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)$$

con a_n coeficientes que se ajustan con la condición inicial $\Psi(x, 0)$. En caso de que los valores de E no fueran discretos, conformando el llamado *espectro continuo*, para superponer las soluciones $f(t)\psi_n(x)$ del método de separación de variables necesitaríamos integrar en lugar de sumar. En algunos problemas se combinan ambas situaciones.

La regularidad exigida en (4) y la que permite que (3) tenga solución en algún sentido, es algo sobre lo que hay mucha literatura matemática y algún problema abierto. En física, es natural considerar potenciales con singularidades y la regla es que ψ se supone siempre continua para respetar la interpretación ondulatoria y en el caso de una dimensión se requiere que ψ'' tenga a lo más las singularidades permitidas para V , para que así pueda cancelarlas en (4).

2.3. Ejemplos destacados

El objetivo es considerar una serie de ejemplos comunes simples de naturaleza académica en los que hay soluciones explícitas de la ecuación de Schrödinger. La existencia de soluciones explícitas es muy inusual. Por otro lado, si se admiten soluciones aproximadas, la llamada *aproximación WKB* [11], que no veremos aquí, es muy útil en el caso unidimensional. Está basada en un desarrollo de Taylor en \hbar donde el término de orden cero correspondería al comportamiento clásico.

Antes de comenzar, conviene recordar lo básico del análisis de Fourier que deberías de conocer de cursos anteriores sin meternos en el incómodo rigor de las cuestiones de regularidad ([5], [15] y [7] son muy buenas referencias).

Una función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ de periodo uno “buena” admite un desarrollo de Fourier

$$f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n e^{2\pi i n x} \quad \text{donde} \quad c_n = \int_0^1 f(x) e^{-2\pi i n x} dx.$$

La suma se dice que es la serie de Fourier y los c_n los *coeficientes de Fourier*. Una vez que uno sabe que f tiene un desarrollo de Fourier, la fórmula para los c_n es fácil de deducir porque $\int_0^1 e^{2\pi i n x} e^{-2\pi i m x} dx$ es 1 si $n = m$ y 0 en otro caso.

Por otro lado, una función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ no periódica, pero con “buen decaimiento en el infinito” admite una especie de desarrollo de Fourier con integrales:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(f)(\xi) e^{2\pi i x \xi} d\xi \quad \text{donde} \quad \mathcal{F}(f)(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i \xi x} dx.$$

Lo primero es la *fórmula de inversión* y lo segundo define la *transformada de Fourier*.

Partícula libre en una circunferencia. Supongamos $V = 0$ que es lo mismo que imponer desde el punto de vista clásico que la partícula no está sometida a ningún cambio. Además, suponemos que está confinada a una circunferencia de longitud L que no altera la dinámica (el rozamiento y la fuerza centrífuga son despreciables). Matemáticamente lo que estamos haciendo es imponer que Ψ sea L -periódica en x . Las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo heredan esta simetría, así que debemos resolver

$$(5) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - E\psi = 0 \quad \text{con} \quad \psi(x) = \psi(x + L).$$

Por el curso que seguiiste de ecuaciones diferenciales ordinarias deberías saber que las soluciones de $y^{(n)} + a_{n-1}y^{(n-1)} + \dots + a_1y' + a_0y = 0$ son combinaciones lineales de e^{rx} donde r recorre las raíces de $x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0 = 0$ salvo añadir algunas más cuando hay raíces múltiples. En nuestro caso las raíces son $\pm r$ con $r = \hbar^{-1}\sqrt{-2mE}$ y las soluciones asociadas $\psi_+(x) = Ae^{rx}$ y $\psi_-(x) = Ae^{-rx}$ excepto para $E = 0$ en cuyo caso la raíz es doble y $\psi(x) = A + Bx$ que se reduce a $\psi = A$ al imponer la periodicidad. Si $E < 0$ claramente ψ no es L -periódica, entonces este caso no ocurre. Si $E > 0$ la periodicidad exige $rL = 2\pi in$ con $n \in \mathbb{Z}$ que implica que la energía está cuantizada, solo puede tomar los valores

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{mL^2} \quad \text{con} \quad n \in \mathbb{Z}.$$

A pesar de que el signo de n no influye en la energía, podemos aprovecharlo para parametrizar ψ_+ y ψ_- escribiendo que

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2\pi i n x / L} \quad \text{y} \quad E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{mL^2}$$

dan “todas” las soluciones ψ y E de (5) con ψ normalizada, entendiendo que para $n \neq 0$ en realidad $\{\psi_n, \psi_{-n}\}$ es una base del espacio de soluciones para una misma energía $E_n = E_{-n}$. Entonces la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$\Psi(x, t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n \psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n e^{2\pi i n x / L - iE_n t / \hbar}.$$

Tomando $t = 0$ y con el cambio $x \mapsto Lx$, tenemos que $\Psi(Lx, 0)$ es 1-periódica y la fórmula de los coeficientes de Fourier implica

$$a_n = \sqrt{L} \int_0^1 \Psi(Lx, 0) e^{-2\pi i n x} dx = \int_0^L \Psi(x, 0) \psi_n^*(x) dx.$$

Si recuerdas la *identidad de Parseval*, nota que con ella se obtiene una prueba directa de la conservación de la probabilidad: si $\Psi(x, 0)$ está normalizada, entonces $\Psi(x, t)$ también lo está para cualquier t .

Partícula libre en la recta real. De nuevo consideramos que la partícula no está sometida a ningún campo, $V = 0$, pero ahora el espacio es toda la recta real en lugar de la circunferencia, con lo que perdemos la condición $\psi(x) = \psi(x + L)$ en (5). Esta condición solo afectaba a que n/L debía ser un entero entre L y todo debería ser similar salvo cambiar n/L por un número arbitrario ξ , no entero en general. Lo que conduce a $\psi_\xi(x) = e^{2\pi i \xi x}$ y $E_\xi = 2\pi^2 \hbar^2 \xi^2/m$. Despues habría que cambiar la suma por una integral porque tenemos una cantidad continua de energías. Con todo esto la solución sería

$$(6) \quad \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(\xi) \psi_\xi(x) e^{-iE_\xi t/\hbar} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} A(\xi) e^{2\pi i \xi x - iE_\xi t/\hbar} d\xi \quad \text{con} \quad E_\xi = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \xi^2.$$

Así se procede en muchos textos, por ejemplo [11, §2.4], pero a un matemático no experimentado le puede causar cierto resquemor que ahora las ψ_ξ no son normalizables y que hayamos descartado sin más explicación las soluciones $E < 0$ que corresponderían a ξ imaginario puro y ψ_ξ con crecimiento exponencial en $+\infty$ o $-\infty$.

Para justificar (6), notemos primero que $e^{2\pi i \xi x - iE_\xi t/\hbar}$ satisface la ecuación de Schrödinger (aunque no sea normalizable). Por la linealidad de la integral entonces $\Psi(x, t)$ también la cumple y por la fórmula inversión con A igual a la transformada de Fourier de $\Psi(x, 0)$ obtenemos una solución de la ecuación bajo la condición inicial elegida. La unicidad nos dice que no hay que considerar ningún caso más, (6) es correcta con la elección indicada de A .

El paquete de ondas gaussiano. Ahora analizaremos con más detalle un caso particular del ejemplo anterior para ilustrar un fenómeno cuántico. La filosofía expresada anteriormente es que algo nos parece una partícula cuando es una onda concentrada y que momento y energía nos parece p y E si tiene mucho de la onda $e^{i(px-Et)/\hbar}$. Con esta idea, para $a > 0$ consideramos en el instante $t = 0$ el *paquete de ondas gaussiano*

$$f(x) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-x^2/a^2} e^{ipx/\hbar}.$$

El coeficiente con la raíz cuarta es solo para normalizar. Tomando $\Psi(x, 0) = f(x)$ estamos considerando la función de ondas en el instante inicial de una partícula de anchura comparable a a y mv inicial esencialmente p . Según (6), la evolución viene dada por

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(f)(\xi) e^{2\pi i \xi x - iE_\xi t/\hbar} d\xi \quad \text{con} \quad E_\xi = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \xi^2.$$

Utilizando la bien conocida transformada de Fourier de la gaussiana [5]

$$e^{-\pi \xi^2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi x^2} e^{-2\pi i \xi x} dx,$$

tras un cambio de variable se obtiene $\mathcal{F}(f)(\xi)$. Aburriéndose con más cambios de variable (en realidad, hay atajos posibles) se llega a la fórmula explícita, aunque bien fea,

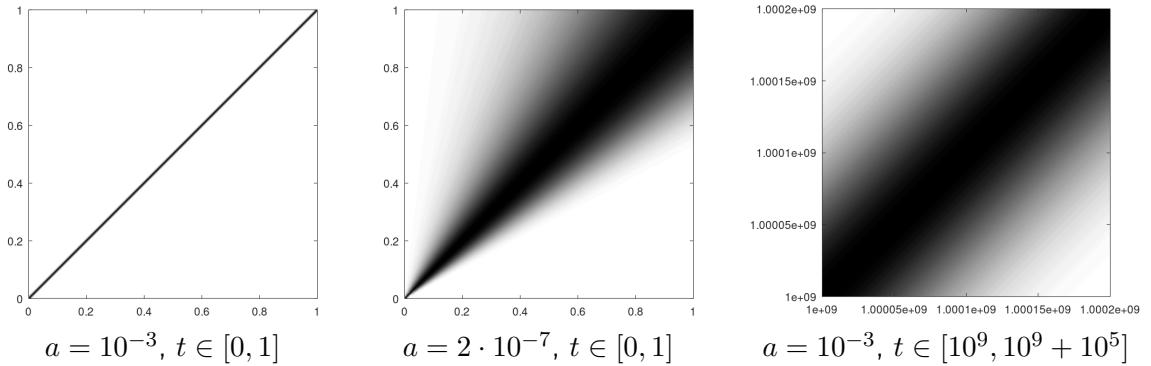
$$\Psi(x, t) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{ma}{ma^2 + 2i\hbar t}} e^{i(px - \frac{p^2}{4\pi m}t)/\hbar} e^{-\frac{m(x-pt/m)^2}{ma^2 + 2i\hbar t}}.$$

Por tanto, la función de densidad es

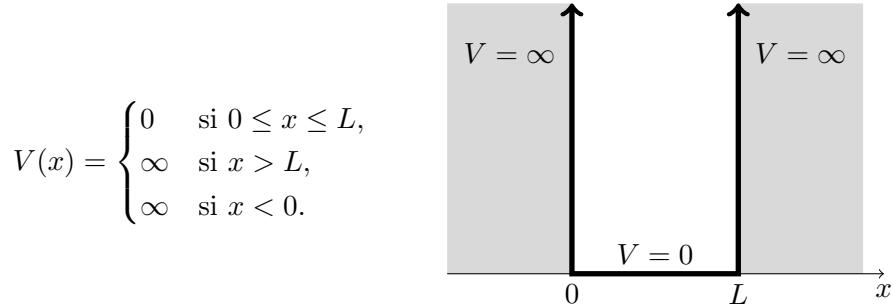
$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{\delta(t)}{\pi a^2}} e^{-\delta(t) \left(\frac{x-pt/m}{a}\right)^2} \quad \text{con} \quad \delta(t) = \frac{2}{1 + 4\hbar^2 a^{-4} m^{-2} t^2}.$$

Si ma^2/t es mucho mayor que \hbar entonces $\delta(t) \approx 2$ y suponiendo a pequeño (para que se parezca a una partícula) el decaimiento de la exponencial nos dice que esencialmente veremos que se mueve con $x = pt/m = vt$, de acuerdo con la *primera ley de Newton*. Al ser \hbar tan pequeño esta es la situación típica en el mundo macroscópico para tiempos razonables. Sin embargo para t arbitrariamente grande o para m y a más propios del mundo subatómico se consigue que ma^2/t sea menor que \hbar y $\delta(t) \approx 0$, con lo que la probabilidad se vuelve más uniforme. En otras palabras, perdemos la certeza de dónde está la partícula.

Las siguientes figuras ilustran diferentes aspectos del fenómeno mostrando la densidad de $|\Psi(x, t)|^2$ para un paquete gaussiano correspondiente a la masa de un protón m_p con $p/m_p = 1 \text{ ms}^{-1}$. En la primera figura si a tiene un tamaño pequeño, pero no subatómico (un milímetro), la onda concentrada evolucionará como una partícula de velocidad uno. Sin embargo, si concentrarmos mucho el paquete gaussiano, por un fenómeno que estudiaremos más adelante, la onda se difunde rápidamente, como muestra la segunda figura. Finalmente, la tercera ilustra que tal difusión ocurre siempre que esperemos lo suficiente.



El pozo de potencial infinito. La situación física ahora es que tenemos una partícula cuántica confinada al intervalo $I = [0, L]$. Es decir, está en un caja con paredes impenetrables en $x = 0$ y $x = L$, lo que lleva a que $\Psi(x, t) = 0$ para $x \notin I$. En física la situación se suele indicar diciendo que el potencial es $V = 0$ en I y $V = \infty$ en $\mathbb{R} - I$.



¿Por qué se escribe de esta forma tan rara? Si una partícula tiene energía total E_0 , la conservación de la energía afirma $E_0 = \frac{1}{2}mv^2 + V$ y toda la zona $\{x \in \mathbb{R} : V(x) > E_0\}$ le estaría vedada porque $\frac{1}{2}mv^2 > 0$. Por tanto, imponer $V = \infty$ en una zona asegura que ninguna partícula clásica tendrá energía suficiente para llegar allí. Si prefieres algo más concreto matemáticamente, suponemos que las funciones de onda admisibles en el instante se anulan para $x \in \mathbb{R} - I$ porque formalmente para que el término $V\psi$ de la ecuación se cancele con el resto, cuando $V = \infty$ la única posibilidad es tener un $\infty \cdot 0$.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo vuelve a ser como (5), pero ahora el confinamiento al intervalo induce unas nuevas condiciones de frontera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - E\psi = 0 \quad \text{en } I \text{ con } \psi(0) = \psi(L) = 0.$$

Repitiendo lo visto en el caso de la circunferencia, las soluciones son $A + Bx$ para $E = 0$ y combinaciones lineales de e^{rx} y e^{-rx} con $r = \hbar^{-1}\sqrt{-2mE}$ para $E \neq 0$. Al imponer $\psi(0) = \psi(L) = 0$ vemos que no hay solución no idénticamente nula cuando $E = 0$. En el resto de los casos, $\psi(x) = Ae^{rx} + Be^{-rx}$ y se debe cumplir

$$A + B = 0, \quad Ae^{rL} + Be^{-rL} = 0.$$

Para que este sistema homogéneo en A y B tenga solución no trivial, el determinante debe ser nulo, lo que implica $e^{2rL} = 1$ y obliga a $r = i\pi n/L$ con $n \in \mathbb{Z} - \{0\}$ que conduce a la energía $\pi^2\hbar^2n^2/(2mL^2)$ y como $A = -B$ la ψ será $\sin \frac{\pi nx}{L}$ salvo multiplicar por una constante. El signo de n solo cambia el signo de tal constante y, por tanto, para no repetir debemos restringirnos a $n > 0$. En resumidas cuentas, las soluciones normalizadas y sus energías son

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi nx}{L} \quad \text{y} \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2mL^2} \quad \text{con } n \in \mathbb{Z}^+.$$

Comparando con el caso de la partícula en la circunferencia, nótese que ahora la energía mínima no es cero. En cierto modo es imposible que una partícula cuántica en una caja se esté quieta. Quizá hayas oído decir que es imposible alcanzar el *cero absoluto* (la temperatura de cero kelvin). Es el mismo fenómeno cuántico. Una vez más, el tamaño minúsculo de \hbar impide que en el mundo macroscópico detectemos la cuantización de la energía o su valor mínimo.

En física cuántica las soluciones de mínima energía tienen a menudo una especial importancia. Se dice que corresponden al *estado fundamental*. Recuérdese que ya apareció este nombre al hablar del átomo de Bohr.

La solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \frac{2}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-iE_n t/\hbar} \sin \frac{\pi nx}{L}.$$

Para hallar los a_n en función de $\Psi(x, 0)$ podemos expresar el seno en términos de exponentiales complejas y aplicar las fórmulas de Fourier o que $\int_0^L \sin \left(\frac{\pi nx}{L} \right) \sin \left(\frac{\pi mx}{L} \right) dx = 0$ para $n, m \in \mathbb{Z}^+$ distintos, mientras que es $L/2$ si son iguales. La fórmula resultante es

$$a_n = \int_0^L \Psi(x, 0) \psi_n(x) dx,$$

similar al caso de la circunferencia salvo que el conjugado es ahora innecesario.

El pozo de potencial finito. Ahora para $V_0, L > 0$ fijados consideramos el potencial discontinuo:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } -L \leq x \leq L, \\ 0 & \text{si } x > L, \\ 0 & \text{si } x < -L. \end{cases}$$

Antes de comenzar, analicemos qué ocurriría para una partícula clásica de energía total E . Recordando la conservación de la energía, necesariamente $E \geq -V_0$. Si $E < 0$ la partícula no puede salir del pozo, la parte $|x| > L$ está vedada porque implicaría $\frac{1}{2}mv^2 = E < 0$. Para $-V_0 < E < 0$ la partícula se queda eternamente rebotando contra las paredes con velocidad $v = \pm\sqrt{2(E + V_0)}/m$. Por otro lado, si $E > 0$ la partícula no queda atrapada por el pozo, tiene energía suficiente para escapar de él dirigiéndose al infinito con velocidad constante. Por tanto, es de esperar que para $E > 0$ tengamos en el lado cuántico una deformación del caso de la partícula libre en \mathbb{R} con su espectro continuo, mientras que el caso $-V_0 < E < 0$ sea más parecido al pozo de potencial infinito con sus energías cuantizadas. Para no alargarnos, consideraremos solo este caso que es el único que da lugar a soluciones normalizables, situación que supondremos.

Se puede probar que siempre que un potencial sea una función par, cada solución de $\hat{H}\psi = \psi$ se puede escribir como combinación lineal (o suma) de una solución par y otra impar. Por ello es gratis limitarnos a las soluciones que cumplen $\psi(x) = \psi(-x)$ o $\psi(x) = -\psi(-x)$. De nuevo, para no extendernos demasiado, solo consideraremos la primera posibilidad. La segunda es muy similar, solo conlleva pequeños cambios.

En definitiva, con estas restricciones, debemos hallar ψ y E tales que

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - (V_0 + E)\psi = 0 & \text{en } |x| < L, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - E\psi = 0 & \text{en } |x| > L, \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{bajo} \\ \psi(x) = \psi(-x), \int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 < \infty. \end{array}$$

Nótese que como V tiene discontinuidades de salto en $x = \pm L$, admitimos que ψ'' tenga a lo más discontinuidades de salto allí y eso implica la continuidad de ψ y ψ' .

Ya sabemos que la primera de las ecuaciones tiene solución general

$$A e^{rx} + B e^{-rx} \quad \text{con } r = \hbar^{-1} \sqrt{2m(E + V_0)}.$$

La paridad fuerza $A = B$ y se obtiene un coseno salvo multiplicar por constantes. La solución general de la segunda es

$$A e^{sx} + B e^{-sx} \quad \text{con } s = \hbar^{-1} \sqrt{-2mE}.$$

en $x > L$ debe ser $A = 0$ para evitar el crecimiento exponencial que impediría normalizar y en $x < L$ se tiene $B = 0$ por la misma razón. La paridad implica entonces que las soluciones son proporcionales a $e^{-s|x|}$.

En resumen,

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(rx) & \text{si } |x| \leq L, \\ B e^{-s|x|} & \text{si } |x| \geq L \end{cases} \quad \text{con } r = \hbar^{-1} \sqrt{2m(E + V_0)}, \quad s = \hbar^{-1} \sqrt{-2mE}.$$

Para respetar la continuidad de ψ y ψ' , los dos trozos deben pegar bien. Esta exigencia equivale a que el siguiente sistema homogéneo en A y B tenga solución no trivial:

$$A \cos(rL) = B e^{-sL}, \quad -rA \sin(rL) = -sB e^{-sL}.$$

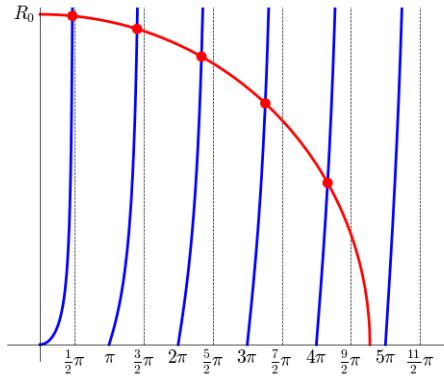
La anulación del determinante lleva a la condición necesaria y suficiente

$$s = r \tan(rL).$$

Por otro lado, r y s no son independientes porque $r^2 + s^2 = 2mV_0\hbar^{-2}$. Tenemos, entonces, dos ecuaciones no lineales con dos incógnitas y dados V_0 y L podríamos pedir a un ordenador que aproximara las soluciones y así obtener las correspondientes ψ y E . Es mucho mejor entender geométricamente qué está ocurriendo. Para ello definimos $R_0 = L\hbar^{-1}\sqrt{2mV_0}$ y reescribimos las ecuaciones para r y s como

$$(rL)^2 + (sL)^2 = R_0^2, \quad sL = rL \tan(rL).$$

Esto es lo mismo que decir que (rL, sL) está en la intersección en el primer cuadrante de la circunferencia $x^2 + y^2 = R_0^2$ con la gráfica de $y = x \tan x$.



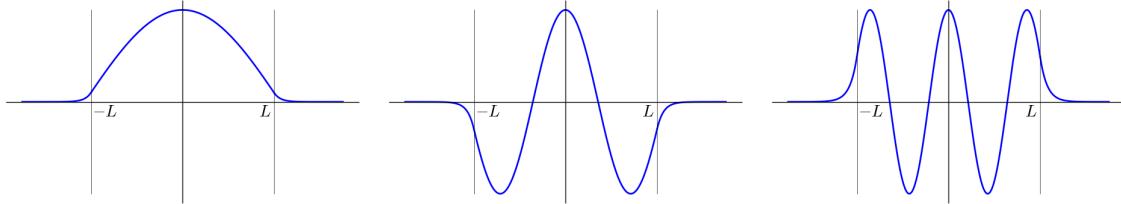
Debido a los ceros y las asíntotas de $\tan x$ hay un corte por cada banda de anchura π , así que hay aproximadamente R_0/π energías y soluciones, de hecho son exactamente la parte entera de R_0/π más uno.

Si V_0 crece (el pozo se hace profundo), físicamente debería tender a un pozo de potencial infinito cambiando E por $E + V_0$, para llevar el fondo del pozo a nivel zero. Comprobemos esta afirmación. Si V_0 se hace grande, R_0 también y las primeras intersecciones estarán muy arriba y, por tanto, cerca de las asíntotas, es decir,

$$rL \approx \frac{\pi n}{2} \quad \text{con } n \in \mathbb{Z}^+ \text{ impar} \implies E_n + V_0 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m(2L)^2} \quad \text{con } n \in \mathbb{Z}^+ \text{ impar.}$$

La fracción de la derecha corresponde a las energías del pozo de potencial infinito cambiando L por $2L$, lo cual es lógico porque ahora la anchura es doble. La condición de que sea impar se debe a que solo hemos considerado la simetría $\psi(x) = \psi(-x)$. El estudio de $\psi(x) = -\psi(-x)$ lleva a los niveles de energía restantes.

Las gráficas de las soluciones correspondientes a las tres energías más pequeñas son del tipo



Sabemos que en $|x| > L$ hay un decaimiento exponencial. Para valores macroscópicos la pequeñaza de \hbar implica que s es inmensamente grande y $e^{-s|x|}$ prácticamente nulo, de modo que nos parece que la partícula está confinada a $[-L, L]$. Sin embargo, cuánticamente hay una mínima probabilidad de detectarla fuera. Esta posibilidad cuántica de que una partícula “atraviese paredes” sin tener energía suficiente para hacerlo desde el punto de vista clásico se llama *efecto túnel* [11] [14, §3.5] y se ilustra mejor considerando un modelo en el que una partícula que viene desde la izquierda, representada por un paquete de ondas, está sometida al potencial $-V$. Al llegar a la pared $x = -L$ gran parte del paquete de ondas se refleja hacia la izquierda, pero una pequeña parte de él atraviesa el pozo y viaja hacia la derecha. Lejos de ser una mera curiosidad, es la base del *microscopio de efecto túnel*, desarrollado en 1981, que permite “ver” átomos individuales.

E. Mach ha pasado a la posteridad por su influencia sobre Einstein y porque su nombre se asocia a velocidades superiores a la del sonido. Menos conocido es que fue uno de los últimos físicos que negó la teoría atómica. Según se cuenta, cuando le hablaban de átomos replicaba “¿Tú los has visto?”. Hoy, más de cien años después de su muerte, podemos decir que sí gracias a fenómenos cuánticos.

Ejercicios de la sección 2

EJERCICIO 1. Explica por qué $v_p = \omega/k$ indica la velocidad de avance de las crestas de la onda $u(x, t) = A \operatorname{sen}(kx - \omega t)$.

EJERCICIO 2. Muestra que si F es conservativo, esto es, $F = -\nabla V$ entonces el trabajo $\int_{\gamma} \vec{F} \cdot d\vec{r}$ depende de los extremos de γ pero no de la trayectoria que describe.

EJERCICIO 3. Comprueba que las dimensiones son coherentes en la ecuación de Schrödinger.

EJERCICIO 4. Para $L > 0$, supongamos una función de ondas que en un instante t_0 es de la forma $\Psi(x, t_0) = A \operatorname{máx}(0, 1 - |x|/L)$. Calcula la probabilidad de que en dicho instante se detecte en $(-\infty, -\frac{L}{4}] \cup [\frac{L}{2}, \infty)$ la partícula que representa.

EJERCICIO 5. Comprueba que $\Psi(x, t) = e^{2\pi i \xi x - i E_\xi t / \hbar}$ con $E_\xi = 2\pi^2 \hbar^2 \xi^2 / m$ satisface la ecuación de Schrödinger con $V = 0$ para cualquier $\xi = 0$.

EJERCICIO 6. Consideremos $\Psi(x, t) = A e^{-\alpha(x^2 + i\hbar t/m)}$ con $\alpha > 0$. Halla A para que esté normalizada y calcula el potencial V para que satisfaga la ecuación de Schrödinger. Nota: Dicho potencial, convenientemente escalado, tiene un papel muy destacado en física cuántica y aparecerá más tarde en el curso.

EJERCICIO 7. Demuestra el teorema de Ehrenfest en el caso tridimensional.

EJERCICIO 8. Si $\Psi_1(x, t)$ y $\Psi_2(x, t)$ son dos soluciones normalizadas de la misma ecuación de Schrödinger en una dimensión, demuestra que $\int_{\mathbb{R}} \Psi_1^*(x, t) \Psi_2(x, t) dx$ no depende del tiempo.

EJERCICIO 9. Expresa $\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}$ en términos de \hat{p} .

EJERCICIO 10. Demuestra que si Ψ resuelve la ecuación de Schrödinger en una dimensión entonces $\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} (\Im(\Psi^* \Psi_x))$ donde $\Im(z)$ indica la parte imaginaria de z y Ψ_x es la derivada parcial de Ψ .

EJERCICIO 11. Aplica el ejercicio anterior a una solución estacionaria $\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$ y deduce que si el potencial se anula en ciertos intervalos I_j , se tiene $\psi(x) = A_j e^{ipx/\hbar} + B_j e^{-ipx/\hbar}$ para $x \in I_j$ con $|A_j|^2 - |B_j|^2$ independiente de j . Escribe una fórmula para p y comprueba que tiene dimensiones de momento.

EJERCICIO 12. La ecuación de Schrödinger es en parte relativista y en parte no. Vas a comprobar que las *transformaciones de Galileo* no preservan las soluciones, pero sí la probabilidad. En términos matemáticos, demuestra que dada una solución Ψ de la ecuación unidimensional, la función $\Psi'(x, t) = e^{-i(mvx + \frac{1}{2}mv^2t)/\hbar} \Psi(x + vt, t)$ con v constante (con dimensiones de velocidad), satisface la ecuación de Schrödinger cambiando $V(x)$ por $V(x + vt)$. Nota: Obviamente se cumple $|\Psi|^2 = |\Psi'|^2$, en ese sentido la probabilidad se conserva.

EJERCICIO 13. Para una función de ondas radial, $\Psi(x, y, z, t) = g(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, t)$ que satisface la ecuación de Schrödinger halla qué ecuación debe cumplir g . **Indicación:** Todo lo que debes hacer es recordar o hallar cómo es el operador laplaciano en coordenadas esféricas.

EJERCICIO 14. Consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en tres dimensiones con un potencial $V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$. Si ψ_j , $j = 1, 2, 3$, son soluciones normalizadas para el caso unidimensional con potenciales V_j y energías E_j , prueba que $\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$ es solución normalizada del problema tridimensional para cierta energía E . Expresala en términos de las E_j .

EJERCICIO 15. Sea $\psi(x) = Axe^{-a^4 x^2}$ con $A, a \in \mathbb{R}^+$ solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial V con $V(0) = 0$. Halla $A \in \mathbb{R}^+$ para que esté normalizada y calcula V y E . ¿Qué dimensiones tienen a y A ?

EJERCICIO 16. Explica por qué si $\psi = \psi(x)$ es una solución normalizada de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}(\psi) = 0$. **Indicación:** Una forma de proceder, aunque no la más rápida, es recordar la relación entre \hat{p} y $\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}$ de un ejercicio anterior.

EJERCICIO 17. En el caso de la partícula libre en la circunferencia, demuestra la conservación de la probabilidad (si $\Psi(x, 0)$ está normalizada, entonces $\Psi(x, t)$ también lo está para cualquier t)

utilizando la identidad de Parseval para series de Fourier. **Nota:** Tal identidad afirma que si f es 1-periódica $\int_0^1 |f|^2$ es la suma de los cuadrados de sus coeficientes de Fourier.

EJERCICIO 18. Si un potencial es par, $V(x) = V(-x)$, demuestra que cada solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para cierta energía es suma de una solución par y otra impar (quizá una de las dos idénticamente nula).

EJERCICIO 19. Consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión con un potencial que cumple $V(x) > V_0$ para cierta constante V_0 . Demuestra que no hay soluciones normalizables con $E < V_0$. **Indicación:** Comprueba la identidad $\psi''\psi = (\psi\psi')' - (\psi')^2$ o $\psi''\psi^* = (\psi^*\psi')' - |\psi'|^2$ si trabajas con números complejos.

EJERCICIO 20. En el pozo de potencial infinito con $L = 1/5$, Dada la condición inicial $\Psi(x, 0) = A \operatorname{sen}^3(5\pi x)$ halla A para que esté normalizada y obtén una fórmula explícita para $\Psi(x, t)$. ¿Cuál es la probabilidad de detectar la partícula en $x > 1/10$ en el instante $t = 20\pi^{-1}\hbar^{-1}m$?

EJERCICIO 21. Sea $\Psi(x, t)$ solución de la ecuación de Schrödinger para el pozo de potencial infinito y sea $T = 4mL^2/(\pi\hbar)$. Comprueba que T tiene dimensiones de tiempo y demuestra que $\Psi(x, 0) = \Psi(x, T)$ y $\Psi(x, T/4) = \frac{1-i}{2}\Psi(x, 0) - \frac{1+i}{2}\Psi(L-x, 0)$. **Nota:** Estas y otras repeticiones de las condiciones iniciales en algunos sistemas se llaman *resurgimiento cuántico* o, a veces, *efecto Talbot cuántico* por el pionero de la fotografía H. F. Talbot que observó un análogo óptico.

EJERCICIO 22. Calcula las soluciones de la la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo de potencial cúbico infinito en tres dimensiones. Es decir, para $V(x, y, z) = 0$ si $x, y, z \in [0, L]$ y $V(x, y, z) = \infty$ en otro caso. Halla el número de soluciones linealmente independientes para los seis valores más pequeños de la energía. **Indicación:** Puedes dar por supuesto que el método de separación de variables es aplicable aquí.

EJERCICIO 23. Considera el pozo de potencial finito con $L = 1$. ¿A partir de qué valor de V_0 hay solo una solución par con energía $-V_0 < E < 0$? Calcula el límite de E/V_0^2 cuando $V_0 \rightarrow 0$ y explica la paradoja de que E/V_0 sea adimensional y el resultado por V_0 no lo sea.

EJERCICIO 24. En física muchas veces se usan potenciales con deltas de Dirac. Más allá de la definición matemática que quizás conozcas, intuitivamente la *delta de Dirac* $\delta = \delta(x)$ se entiende como la derivada de H donde $H(x) = 0$ en $x < 0$ y $H(x) = 1$ en $x > 0$, de modo que $\int_I \delta = 1$ para cualquier intervalo $0 \in I$. Con esta información, determina las soluciones normalizables de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para $V = \alpha\delta$ con $\alpha < 0$. ¿Qué dimensiones tiene α ? **Indicación:** En cierto modo, $\delta(x) = 0$ para $x \neq 0$ y $\delta(0) = \infty$, por tanto, $V = 0$ en $\mathbb{R} - \{0\}$. Despues hay que ajustar las cosas en el origen para que ψ'' sea como la derivada de una función escalón. Salvo normalizaciones, solo hay una solución.

EJERCICIO 25. Considera el potencial $V(x) = V_i(x) + V_0L\delta(x - L/2)$ donde V_i corresponde al pozo de potencial infinito y δ es la delta de Dirac. Comprueba que la solución de $\hat{H}\psi = E\psi$ con E mínima es de la forma $\psi(x) = A \operatorname{sen}(x\sqrt{2mE}/\hbar)$ en $[0, \frac{L}{2}]$ y $\psi(x) = B \operatorname{sen}((L-x)\sqrt{2mE}/\hbar)$ en $[\frac{L}{2}, L]$. Demuestra que E es la menor solución positiva de la ecuación

$$\frac{\hbar\sqrt{2E}}{LV_0\sqrt{m}} + \tan \frac{L\sqrt{mE}}{\hbar\sqrt{2}} = 0.$$

Referencias

- [1] M. Born. Zur quantenmechanik der stoßvorgänge. *Zeitschrift für Physik*, 37(12):863–867, Dec 1926.
- [2] M. Born, W. Heisenberg, and P. Jordan. Zur Quantenmechanik. II. *Zeitschrift für Physik*, 35(8):557–615, Aug 1926.
- [3] M. Born and P. Jordan. Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, 34(1):858–888, Dec 1925.
- [4] M. Born and E. Wolf. *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. With contributions by A. B. Bhatia, P. C. Clemmow, D. Gabor, A. R. Stokes, A. M. Taylor, P. A. Wayman and W. L. Wilcock. Third revised edition. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [5] H. Dym and H. P. McKean. *Fourier series and integrals*. Probability and Mathematical Statistics, No. 14. Academic Press, New York-London, 1972.
- [6] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on physics. Vol. 1: Mainly mechanics, radiation, and heat*. Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1963. Available in <https://www.feynmanlectures.caltech.edu/>.
- [7] G. B. Folland. *Fourier analysis and its applications*. The Wadsworth & Brooks/Cole Mathematics Series. Wadsworth & Brooks/Cole Advanced Books & Software, Pacific Grove, CA, 1992.
- [8] P. Fong. *Elementary quantum mechanics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, expanded edition, 2005.
- [9] A. Galindo and P. Pascual. *Quantum mechanics. I*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1990. Translated from the Spanish by J. D. García and L. Alvarez-Gaumé.
- [10] M. Giliberti and L. Lovisetti. *Old Quantum Theory and Early Quantum Mechanics. A Historical Perspective Commented for the Inquiring Reader*. Challenges in Physics Education. Springer Nature Switzerland AG, 2024. With a foreword by H. Kragh.
- [11] D. J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics (2nd Edition)*. Pearson Prentice Hall, 2nd edition, 2004.
- [12] W. Heisenberg. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33(1):879–893, Dec 1925.
- [13] R. Karam. Schrödinger's original struggles with a complex wave function. *American Journal of Physics*, 88(6):433–438, 06 2020.

- [14] K. Konishi and G. Paffuti. *Quantum Mechanics: A New Introduction*. Oxford University Press, 03 2009.
- [15] T. W. Körner. *Fourier analysis*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, Cambridge, 2022. With a foreword by T. Tao.
- [16] M.-O. Renou, D. Trillo, M. Weilenmann, T. P. Le, A. Tavakoli, N. Gisin, A. Acín, and M. Navascués. Quantum theory based on real numbers can be experimentally falsified. *Nature*, 600(7890):625–629, Dec 2021.
- [17] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 384(4):361–376, 1926.
- [18] E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem. Zweite Mitteilung. *Annalen der Physik*, 384(6):489–527, 1926.
- [19] Wikipedia contributors. Millennium prize problems — Wikipedia, the free encyclopedia. https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Millennium_Prize_Problems&oldid=1336589333, 2026. [Online; accessed 11-February-2026].