APÉNDICE XI.- LAS FUNCIONES DE ONDA Y DE PROBABILIDAD DE SCHRÖDINGER

En este apéndice pretendo demostrar dos cosas:

I) *Que es posible obtener las ecuaciones de Schrödinger a partir de una simple ecuación de onda senoidal o cosenoidal.*

II) *Que la ecuación de onda de Schrödinger es un constructo matemático que no representa realidad física alguna, pero que la ecuación de probabilidad sí representa una realidad física.*

I. Se construye la ecuación de onda de Schrödinger

Una onda es un mecanismo para el transporte de energía y momento. En general, una onda es periódica, tanto en el espacio (repitiendo la *longitud de onda* λ) como en el tiempo (repitiendo el *período* T). Normalmente usamos el símbolo ν para la *frecuencia*, pero para no confundirlo con el símbolo v de la velocidad, mejor use en este apéndice para la frecuencia el símbolo f.

La velocidad (no-relativista) es la distancia dividida entre el tiempo:

(1) $v = x / t$

También, por definición, la velocidad es el producto de la longitud de onda y la frecuencia:

(2) $v = \lambda * f \Rightarrow f = \dfrac{v}{\lambda}$

De (1) y (2) se deduce que:

(3) $\dfrac{1}{f} = \dfrac{\lambda}{v} = \dfrac{\lambda t}{x}$

Ahora bien, después de un período, $t = T$, y la distancia recorrida por la onda es $x = \lambda$, de modo que la (3) se transforma en:

(4) $\dfrac{1}{f} = \dfrac{\lambda T}{\lambda} \Rightarrow T = \dfrac{1}{f}$

La función de onda cosenoidal es:

(5) $y = \cos x$

La función senoidal es la misma, pero con una diferencia de fase de 0.5π:

(6) $\cos x = sen(x + 0.5\pi)$

En el caso de funciones senoidales y cosenoidales, el tiempo de un período es $T = 2\pi$ segundos. Añadiendo un período $T = 2\pi$, la función da un resultado idéntico:

(7) $\cos(x) = \cos(x \pm 2\pi)$ y

(8) $sen(x) = sen(x \pm 2\pi)$

Hagamos la (7) más general, añadiendo la amplitud A:
(9) $y = A\cos x$

Ahora generalizamos el ángulo $x \to \gamma x$:
(10) $y = A\cos\gamma x$

Con esta generalización, el período ya no es $T = 2\pi$, sino $T = 2\pi/\gamma$ como comprobaremos a continuación, usando las identidades trigonométricas que afirman que $\cos(a+b) = \cos a * \cos b - sena * senb$ y que $\cos 2\pi = 1$ y $sen2\pi = 0$

(11) $y = A\cos[\gamma(x + \frac{2\pi}{\gamma})] = A\cos(\gamma x + 2\pi) \Rightarrow$

$y = A[\cos\gamma x * \cos(2\pi) - sen(\gamma x) * sen(2\pi)] = A\cos(\gamma x)$

Para una onda con longitud λ, se sigue que:

(12) $\gamma = \frac{2\pi}{\lambda}$, de modo que la (10) se queda como:

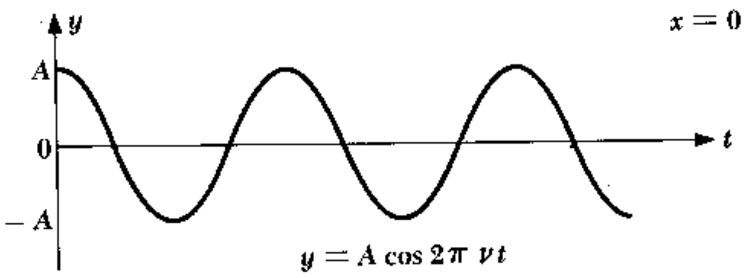
(13) $y = A\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) = A\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x + 2\pi\right) = A\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x+\lambda)\right)$

Con base en (1) y (2), la (13) se puede escribir también como:

(14) $y = A\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) = A\cos\left(\frac{2\pi f}{v}x\right) = A\cos\left(\frac{2\pi ft}{x}x\right) \Rightarrow$

(15) $y = A\cos(2\pi ft)$ (nota[1841])

Veamos ahora una gráfica de esta función cosenoidal (en donde $v = f$):



Transformamos ahora la ecuación (15), tomando en cuenta que después de un período $T = 2\pi$, la distancia recorrida es igual a la longitud de onda, es decir, $x = \lambda$, y tomando en cuenta también la ecuación (2) $v = f * \lambda$:

(16) $y = A\cos(2\pi ft) = A\cos(2\pi ft - 2\pi) = A\cos[2\pi f(t - \frac{1}{f})] = A\cos[2\pi f(t - \frac{1}{f}\frac{x}{x})] \Rightarrow$

[1841] A la misma conclusión, pero por otro camino, llega Arthur Beiser, *Conceptos de Física Moderna* (1968): 73

$$y = A\cos[2\pi f(t - \frac{x}{f\lambda})] = A\cos[2\pi f(t - \frac{x}{v})]$$ (nota [1842])

Definimos ahora el 'número de onda':

(17) $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$

y la 'frecuencia angular':

(18) $\omega = 2\pi f$

Sustituyendo (17) y (18) en (16), obtenemos:

(19) $y = A\cos(\omega t - kx) = A\cos[\omega(t - \dfrac{x}{v})]$

La (19) es ***una función de onda plana, unidimensional, con longitud λ y frecuencia f.***

Derivamos ahora la (19) dos veces con respecto a x:

(20) $\dfrac{\partial y}{\partial x} = -A(-\dfrac{\omega}{v})sen[\omega(t - \dfrac{x}{v}) \Rightarrow \dfrac{\partial^2 y}{\partial x^2} = -\dfrac{\omega^2 A}{v^2}\cos[\omega(t - \dfrac{x}{v})]$

Y dos veces con respecto a t:

(21) $\dfrac{\partial y}{\partial t} = -\omega A sen[\omega(t - \dfrac{x}{v}) \Rightarrow \dfrac{\partial^2 y}{\partial t^2} = -\omega^2 A\cos[\omega(t - \dfrac{x}{v})]$

Combinando la (20) y la (21), obtenemos ***la ecuación de onda de Schrödinger***:

(22) $\dfrac{\partial^2 y}{\partial x^2} = -\dfrac{1}{v^2}\dfrac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

La solución general de la ecuación (22), para ondas que viajan en la dirección $+x$ es:
(23) $y = \psi = Ae^{i\omega(t - x/v)}$, en donde $i = \sqrt{-1}$ y A, la amplitud. Por lo tanto, la función de onda de la ecuación (23) tiene una parte compleja y una parte real.

II. Intermezzo: corroboración de la solución general de la ecuación diferencial

Para corroborar esto, primero separamos las variables

(I) $y = X(x)T(t)$ $\dfrac{1}{v^2}$ $\dfrac{X''(x)}{X(x)} = \dfrac{1}{v^2}\dfrac{T''(t)}{T(t)}$.

Dado que el lado izquierdo es independiente de t y el lado derecho, de x, se sigue que ambos términos son independientes tanto de x como de t y, por lo tanto, equivalentes a una constante K, p.e.

(II) $K = -(\omega / v)^2$ La solución general de la ecuación (22), para ondas que viajan en la dirección $+x$ es:

[1842] A la misma conclusión, pero por otro camino, llega Arthur Beiser, *Conceptos de Física Moderna* (1968): 74

(III) $\dfrac{X''(x)}{X(x)} = -\dfrac{1}{v^2}\dfrac{T''(t)}{T(t)} = K \Rightarrow$

(IV) $T'' = Kv^2T$ y $X'' = KX$.

Para que haya periodicidad de la onda, se requiere $-(\omega/v)^2 < 0$ y $\omega/v > 0 \Rightarrow$

(VI)(1) $T'' + \omega^2 T = 0$ y

(VII)(2) $X'' + (\omega/v)^2 X = 0$.

Se trata de dos ecuaciones diferenciales homogéneas de segundo orden, de la forma $ay'' + cy = 0$. En el caso de (VI)

(VIII) $r_{1,2} = \dfrac{0 \pm \sqrt{0 - 4\omega^2}}{2} = \pm i\omega \Rightarrow$

(IX) (3) $T(t) = Ae^{i*\omega*t} + Be^{-i*\omega*t}$

y en el caso de (VII) (2), se sigue que

(X) $r_{1,2} = \dfrac{0 \pm \sqrt{0 - 4(\omega/v)^2}}{2} = \pm i(\omega/v) \Rightarrow$

(XI) (4) $X(x) = Ce^{i(\omega/v)x} + De^{-i(\omega/v)x}$.

Dado que

(XII) $y = X(x) * T(t)$,

se sigue que:

(XIII) (5) $y = ACe^{i\omega(t+x/v)} + ADe^{i\omega(t-x/v)} + BCe^{i\omega(-t+x/v)} + BDe^{i\omega(-t-x/v)}$

que representa la solución general.

Ahora tenemos que encontrar los valores de A, B, C & D. Para condiciones iniciales y de frontera adecuadas, se encuentra, *entre otras que, la siguiente* (M es la amplitud, que arriba se ha designado con la letra A):

(XIV) *si* $x = 0$, *para todo* t, $\rightarrow X(0) = M$

se sigue que la (XI) (4) se transforma en:

(XV)(6) $X(0) = Ce^{i(\omega/v)0} + De^{-i(\omega/v)0} = M \overset{x=0}{\Rightarrow} C + D = M$.

En la (XV) se trata de una ecuación lineal con dos términos desconocidos, así que podemos determinar libremente el valor de una de las dos constantes:

(XVI) $CD=M=$

Combinando (XIII), (XIV) y (XVI), obtenemos:

(XVII) (7) $y = AMe^{i\omega t} + BMe^{-i\omega t} = M$

Tomando ahora en cuenta la condición inicial $t = 0$, se sigue que:

(XVIII) $y = AMe^{i\omega t} + BMe^{-i\omega t} = M \overset{t=0}{\Rightarrow} (A + B) = 1$

Otra vez tenemos una ecuación lineal con dos términos desconocidos y podemos fijar libremente una de las dos constantes:
(XIX) $B = 0 \Rightarrow A = 1$

Combinando la (XIII), la (XVI) y la (XIX), obtenemos:
(XX) $y = \psi = Me^{i\omega(t - x/v)}$

La (XX) es la misma que la (23) ($M \equiv A$), Q.E.D

III. La función de probabilidad se deriva de la función de onda

Sustituimos la (2) y la (18) en la (23) y obtenemos:
(24) $\psi = Ae^{(-i2\pi\nu)*(t - x/\lambda\nu)} = Ae^{-i2\pi(t\nu - x/\lambda)}$

Recordemos:
(25) $E = h\nu = 2\pi\hbar\nu \Rightarrow \nu = E/2\pi\hbar$ y
(26) $\lambda = h/p = 2\pi\hbar/p$

Sustituyendo (25) y (26) en la (24), obtenemos:
(27) $\psi = Ae^{-i2\pi(Et/2\pi\hbar - px/2\pi\hbar)} = Ae^{-i\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]}$

Recordemos ahora la igualdad de Euler:
(28) $e^{-i\theta} = \cos\theta - isen\theta$

Sustituyendo la (28) en la (27), obtenemos:
(29) $\psi = A\left[\cos\frac{1}{\hbar}(Et - px) - isen\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]$

Por definición, la ecuación de onda conjugada es la siguiente:
(30) $\psi_{conjugada} = A\left[\cos\frac{1}{\hbar}(Et - px) + isen\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]$

Por definición también, la función de probabilidad es:
(31) $P = |\psi|^2 = \psi * \psi_{conjugada}$

Tomando en cuenta que $-(i * i) = -(-1) = 1$, y combinando la (30) y (31), obtenemos ***la función de probabilidad de Schrödinger***:
(32) $P = A\left[\cos\frac{1}{\hbar}(Et - px) - isen\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right] * \ A\left[\cos\frac{1}{\hbar}(Et - px) + isen\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right] =$

$$A^2\left[\cos^2\frac{1}{\hbar}(Et-px)+sen^2\frac{1}{\hbar}(Et-px)\right]\Rightarrow$$

(33) $P = A^2$

La ecuación (33) $P = A^2$ representa la función de probabilidad de Schrödinger. Específicamente, el factor $i = \sqrt{-1}$ en las ecuaciones (29) y (30) es un constructo matemático, al cual no corresponde un valor real, de modo que *estas dos ecuaciones de onda no representan una realidad física*, pero, **al multiplicar estas dos ecuaciones entre sí, obtenemos el valor *real* de *la probabilidad de encontrar la partícula en determinado punto del espacio-tiempo (*** x, y, z, t ***), y esta probabilidad sí representa una realidad física.***

Integrando la función (33) a partir de (32), obtenemos la *probabilidad de encontrar una partícula real en algún punto del universo entero*, que obviamente es $P = 1$:

(34) $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 dV = 1$

Recordemos:

(27) $\psi = Ae^{-i/\hbar[(Et-px)]}$

Derivamos la ecuación (27) con respecto al tiempo:

(35) $\frac{\partial\psi}{\partial t} = Ae^{-i/\hbar[(Et-px)]} * \frac{-iE}{\hbar}$

Combinando la (27) y la (35), obtenemos:

(36) $\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-iE}{\hbar}\psi \Rightarrow E\psi = \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hbar i\frac{\partial\psi}{\partial t}$

Ahora derivamos la (27) con respecto al espacio (en la dirección del eje X):

(37) $\frac{\partial\psi}{\partial x} = Ae^{-i/\hbar[(Et-px)]} * \frac{-ip}{\hbar}$

Combinando la (27) y la (37), obtenemos:

(38) $\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{-ip}{\hbar}\psi$

Derivando la (38) con respecto al espacio, obtenemos:

(39) $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = Ae^{-i/\hbar[(Et-px)]} * \frac{-ip}{\hbar} * \frac{-ip}{\hbar}$

Combinando la (27) y la (39), y tomando en cuenta que $i^2 = (\sqrt{-1})^2 = -1$, obtenemos:

(40) $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{-p^2}{\hbar^2}\psi \Rightarrow p^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$

Recordemos que la energía total es la suma de la energía cinética y la energía potencial. Si la partícula se mueve en la dirección del eje X, la ecuación es:

(41) $E = K + U = \frac{1}{2}mv^2 + U(x,t)$

Recordemos también que:

(42) $p = mv \Rightarrow p^2 = m^2v^2$

Combinando (41) y (42), obtenemos:

(43) $E = \frac{p^2}{2m} + U(x,t)$

Multiplicamos los términos con ψ :

(44) $E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + U\psi$

Sustituimos ahora la (36) y la (40) en la (44) y obtenemos:

(45) $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi$

La ecuación (45) es ***la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*****,** en una sola dimensión espacial (el eje X). En tres dimensiones espaciales se ve así:

(46) $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi$

Busquemos ahora *la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,* cuando la partícula está en estado estacionario. Para esto introducimos un nuevo símbolo, a saber, Ψ , que representa la función de onda independiente del tiempo, de modo que la (45) se transforma en la (47):

(47) $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi$

De (27) se deduce que **la ecuación de onda independiente del tiempo** es:

(48) $\Psi = Ae^{-i\left[\frac{1}{\hbar}(Et - px)\right]} = Ae^{-iEt/\hbar}e^{ipx/\hbar}$

Definimos la parte independiente del tiempo de la ecuación (48) como (49) (49)$\overline{\psi} = Ae^{ipx/\hbar}$

Sustituimos la (49) en la (48) para obtener:

(50) $\Psi = \overline{\psi} * e^{-iEt/\hbar}$

Ahora sustituimos la (50) en la (47), para obtener:

$$(51)\quad i\hbar \frac{\partial \overline{\psi} e^{-iEt/\hbar}}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \overline{\psi} e^{-iEt/\hbar}}{\partial x^2} + U\overline{\psi} e^{-iEt/\hbar}$$

De la (51) se deduce que:

$$(52)\quad i\hbar\overline{\psi}(-iE/\hbar)(e^{-iEt/\hbar}) = \frac{-\hbar^2}{2m} e^{-iEt/\hbar}\frac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial x^2} + U\overline{\psi} e^{-iEt/\hbar}$$

De la (52) se deduce:

$$(53)\quad E\overline{\psi} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial x^2} + U\overline{\psi} \Rightarrow$$

$$(54)\quad \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial x^2} + (E-U)\overline{\psi} = 0$$

La (54) es **la ecuación de Schrödinger, independiente del tiempo**, **cuando la partícula está en estado estacionario.**

Conclusión. Estamos ahora en condiciones para dar una definición de una función de onda. ***La función de onda de Schrödinger es un constructo matemático, que no representa una realidad física, asociada a una partícula libre, de energía*** E ***y momento*** p***, que se mueve con velocidad*** v***, el cual, multiplicada con su conjugada, nos da la función de probabilidad de encontrar una partícula en determinado punto del espacio-tiempo (*** x, y, z, t ***), que sí representa una realidad física.***