Interpretación de la función de onda

Lola González (lgonsan@usal.es),
Jesús Aldegunde (jalde@usal.es)
Sandra Gómez Rodríguez (sandra.gomez@usal.es)
Anzhela Veselinova (anzheves@usal.es)
Alberto Martín Santa Daría (albertoms@usal.es)

Departamento de Química Física
Proyecto de Innovación docente ID2022/163

Universidad de Salamanca

Partícula en 1 dimensión sin spin

$\Psi(x)$: función de onda correspondiente a una partícula sin spin en una dimensión

$\hookrightarrow x$: coordenada que determina la posición de la partícula en el espacio unidimensional

Como ejemplo de función de onda de una partícula sin espín en una dimensión se puede considerar la función de onda para una partícula en una caja de potencial de ancho **L**:

```
In[1]:= psi[x_] = Sqrt[2/L] Sin[Pi x / L]
```

raíz cua··· s··· número

Out[1]= $\sqrt{2}\sqrt{\frac{1}{L}}\,\sin\left[\frac{\pi x}{L}\right]$

seno

Supondremos que la función de onda está **normalizada**:

$$\int_\tau |\Psi(x)|^2 dx = \int_\tau \Psi^*(x)\Psi(x) dx = 1$$

La función de onda tiene dimensiones de $\mathsf{L}^{-1/2}$.

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

Partícula en 1 dimensión sin spin

- $|\Psi(x)|^2$: **Densidad de probabilidad** de encontrar a la partícula en x
- $|\Psi(x)|^2 dx$: **Probabilidad** de encontrar la partícula en un elemento de longitud dx alrededor de la posición x

$\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en una región del espacio $-x_1 \leq x \leq x_2$

$$P = \int_{-x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-x_1}^{x_2} \Psi^*(x)\Psi(x) dx$$

$\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en todo el espacio $\Rightarrow P = 1$

Partícula en 3 dimensiones sin spin

$\Psi(x,y,z)$: función de onda correspondiente a una partícula sin spin en tres dimensiones

$\hookrightarrow$ (x,y,z): coordenadas que determinan la posición de la partícula en el espacio tridimensional

Como ejemplo de función de onda de una partícula sin espín en tres dimensiones se puede considerar la partícula en una caja de dimensiones Lx, Ly, Lz:

```
In[2]:= psi3d[x_, y_, z_] = (Sqrt[2/Lx] Sin[Pi x /Lx]) (Sqrt[2/Ly] Sin[Pi y /Ly])
          raíz cu… … númer… raíz cu… … número p
        (Sqrt[2/Lz] Sin[Pi z /Lz])
         raíz cu… … número pi
```

$$\text{Out[2]= } 2\sqrt{2}\sqrt{\frac{1}{Lx}}\sqrt{\frac{1}{Ly}}\sqrt{\frac{1}{Lz}}\,\text{Sin}\left[\frac{\pi x}{Lx}\right]\text{Sin}\left[\frac{\pi y}{Ly}\right]\text{Sin}\left[\frac{\pi z}{Lz}\right]$$

seno seno seno

Supondremos que la función de onda está **normalizada**:

$$\int_{\tau_x}\int_{\tau_y}\int_{\tau_z}|\Psi(x,y,z)|^2 dx\,dy\,dz = 1$$

La función de onda tiene dimensiones de $\mathsf{L}^{-3/2}$.

Partícula en 3 dimensiones sin spin

- $|\Psi(x,y,z)|^2$: **Densidad de probabilidad** de encontrar a la partícula en la posición (x,y,z)
- $|\Psi(x,y,z)|^2 dx\,dy\,dz$: **Probabilidad** de encontrar la partícula en un elemento de volumen $dx\,dy\,dz$ alrededor de la posición (x,y,z)

  $\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en una región del espacio V

$$P = \int\int\int_V |\Psi(x,y,z)|^2 dx\,dy\,dz$$

  $\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en todo el espacio $\Rightarrow P = 1$

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

Partícula en 3 dimensiones sin spin

¿Qué ocurre si no integramos sobre todas las coordenadas?

$$D(z) = \int_{\tau_x}\int_{\tau_y} |\Psi(x,y,z)|^2 dx\, dy$$

Por ejemplo, se podría definir la siguiente función, en la que **no se integra sobre la coordenada z**:

In[8]:= $\mathrm{Dd}[z\_] = \int_0^{\mathrm{Ly}}\int_0^{\mathrm{Lx}} \mathrm{psi3d}[x, y, z]^2\, dx\, dy$

Out[8]= $\dfrac{2\,\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi z}{\mathrm{Lz}}\right]^2}{\mathrm{Lz}}$

Partícula en 3 dimensiones sin spin

$$D(z) = \int_{\tau_x} \int_{\tau_y} |\Psi(x, y, z)|^2 dx\, dy$$

Densidad de probabilidad de encontrar la partícula con un determinado valor de z y cualquier valor de x e y.
Dimensiones físicas: L^{-1}.

$D(z)\, dz$: **Probabilidad** de encontrar la partícula en un intervalo dz alrededor de z (cualquier valor de x e y).

En coordenadas esféricas (r, θ, ϕ):

Por ejemplo, definimos esta función para la partícula en todo el espacio 3D, en coordenadas esféricas:

```
In[10]:= psiesf[r_, t_, p_] = Sqrt[1/(Pi a^3)] Exp[-r/a]
```

raíz c··· número··· exponencia

Out[10]= $\dfrac{\sqrt{\frac{1}{a^3}}\, e^{-\frac{r}{a}}}{\sqrt{\pi}}$

Dimensiones físicas de $\Psi(r, \theta, \phi)$: $L^{-3/2}$

Partícula en 3 dimensiones sin spin

- $|\Psi(r,\theta,\phi)|^2$: **Densidad de probabilidad** en el punto (r,θ,ϕ)
- $|\Psi(r,\theta,\phi)|^2\, r^2\, sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$: **Probabilidad** en un elemento de volumen $r^2\, sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$

  $\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en una región del espacio V

$$P = \int\int\int_V |\Psi(r,\theta,\phi)|^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi$$

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

¿Y si no integramos sobre la distancia radial al origen?

$$P(r) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\Psi(r,\theta,\phi)|^2 \; r^2 \; \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

Si se integra sobre las direcciones del espacio salvo la distancia radial al origen, se obtiene esta función de probabilidad:

In[14]:= $\mathrm{Pp}[r\_] = \int_0^{2\,\mathrm{Pi}} \int_0^{\mathrm{Pi}} \mathrm{psiesf}[r,\, t,\, p]^2 \, r^2 \, \mathrm{Sin}[t] \, dt \, dp$

seno

Out[14]= $\dfrac{4\, e^{-\frac{2r}{a}}\, r^2}{a^3}$

Partícula en 3 dimensiones sin spin

$$P(r) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\Psi(r,\theta,\phi)|^2 \; r^2 \, \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

Densidad de probabilidad de encontrar la partícula a una determinada distancia r y en cualquier dirección (valor de θ y ϕ).
Dimensiones físicas: L^{-1}.
$\hookrightarrow$ **Función de distribución radial** $P(r)$

$P(r)\,dr$: **Probabilidad** de encontrar la partícula a una distancia del origen entre r y $r + dr$, en cualquier dirección del espacio.

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

N partículas sin spin en el espacio 1D

$\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)$: Función de onda del sistema
$\hookrightarrow$ x_1: coordenada que determina la posición de la primera partícula
$\hookrightarrow$ x_2: coordenada que determina la posición de la segunda partícula
$\hookrightarrow$ ...

Si por ejemplo ahora consideramos 4 partículas en una caja monodimensional de ancho L:

```
In[15]:= psiN[x1_, x2_, x3_, x4_] =
  Sqrt[2/L] Sin[Pi x1 /L] Sqrt[2/L] Sin[Pi x2 /L] Sqrt[2/L]
  raíz cua··· s··· número·· raíz cua··· s··· número·· raíz cuadra
    Sin[Pi x3 /L] Sqrt[2/L] Sin[Pi x4 /L]
    s··· número·· raíz cua··· s··· número pi
```

Out[15]= $$\frac{4 \,\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x1}{L}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x2}{L}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x3}{L}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x4}{L}\right]}{L^2}$$

N partículas sin spin en el espacio 1D

Condición para la **normalización** de la función de onda

$$\underbrace{\int\int\int\dots\int}_{\text{Todo el espacio}} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_1 \, dx_2 \dots dx_N = 1$$

implica una integral múltiple sobre las N dimensiones de este espacio. Las dimensiones físicas de esta función son $\mathsf{L}^{-N/2}$

N partículas sin spin en el espacio 1D

- $|\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2$: **Densidad de probabilidad** de encontrar la partícula 1 en x_1, la partícula 2 en x_2, y así sucesivamente.

- $|\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_1 \, dx_2 \ldots dx_N$: **Probabilidad** de encontrar la partícula 1 en un elemento de longitud dx_1 alrededor de la posición x_1, la partícula 2 en un elemento de longitud dx_2 alrededor de la posición x_2, etc.

  $\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en una longitud l del espacio N-dimensional

$$P = \underbrace{\int\int\int \ldots \int_l}_{N \text{ integraciones}} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_1 \, dx_2 \ldots dx_N$$

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

¿Y si integramos sólo sobre la coordenada de una partícula?

$$D_1(x_2, x_3, ..., x_N) = \int |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_1$$

Por ejemplo, integrando sólo sobre las coordenadas de la partícula 1, se podría definir la siguiente función, que será función de las coordenadas de las otras tres partículas:

In[20]:= $\mathrm{Dn}[x2\_, x3\_, x4\_] = \int_0^L \mathrm{psiN}[x1, x2, x3, x4]^2 \, dx1$

Out[20]= $\dfrac{8\,\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi\, x2}{L}\right]^2 \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi\, x3}{L}\right]^2 \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi\, x4}{L}\right]^2}{L^3}$

N partículas sin spin en el espacio 1D

$$D_1(x_2, x_3, ..., x_N) = \int |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_1$$

Densidad de probabilidad de encontrar a la partícula 2 en x_2, a la 3 en x_3, etc., cuando la partícula 1 ocupa cualquier posición en el espacio. Dimensiones físicas: L^{-N+1}.

$$D_1(x_2, x_3, ..., x_N) \, dx_2 \, dx_3 \, ... dx_N$$

Probabilidad de encontrar la partícula 2 en un elemento de longitud dx_2 alrededor de la posición x_2, la partícula 3 en un elemento de longitud dx_3 alrededor de la posición x_3, etc., cuando la partícula 1 ocupa cualquier posición en el espacio.

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

N partículas sin spin en el espacio 1D

¿Y si no integramos sobre las coordenadas de una partícula?

$$D(x_1) = \underbrace{\int\int\int \ldots \int}_{N-1 \text{ integraciones}} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_2 \ldots dx_N$$

Integrando sobre todas las coordenadas menos las de la partícula 1, se podría definir la siguiente función, que será función sólo de las coordenadas de la partícula 1:

In[24]:= Dnn[x1_] = $\int_0^L \int_0^L \int_0^L$ psiN[x1, x2, x3, x4]^2 dx2 dx3 dx4

Out[24]= $\frac{2 \,\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x1}{L}\right]^2}{L}$

N partículas sin spin en el espacio 1D

$$D(x_1) = \underbrace{\int\int\int\ldots\int}_{N-1 \text{ integraciones}} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_2 \ldots dx_N$$

Densidad de probabilidad de encontrar a la partícula 1 en x_1 cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio.
Dimensiones físicas: L^{-1}.

$$D(x_1)\, dx_1$$

Probabilidad de encontrar la partícula 1 en un elemento de longitud dx_1 alrededor de la posición x_1 cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio.

N partículas sin spin en el espacio 1D

¿Y si no integramos sobre las coordenadas de dos partículas?

$$D'(x_1, x_2) = \underbrace{\int\int\int \dots \int}_{N-2\ \text{integraciones}} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_3 \, dx_4 \dots dx_N$$

Densidad de probabilidad de encontrar la partícula 1 en x_1 y la partícula 2 en x_2 cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio. Dimensiones físicas: L^{-2}.

$$D'(x_1, x_2) \, dx_1 \, dx_2$$

Probabilidad de encontrar la partícula 1 en un elemento de longitud dx_1 alrededor de x_1 y la partícula 2 en un elemento de longitud dx_2 alrededor de x_2, cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio.

N partículas sin spin en el espacio 1D

¿Y si ahora integramos sobre las coordenadas de la partícula 2?

$$D(x_1) = \int D'(x_1, x_2) dx_2$$

Densidad de probabilidad de encontrar a la partícula 1 en x_1 cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio.
Dimensiones físicas: L^{-1}.

VNiVERSiDAD
D SALAMANCA

N partículas sin spin en el espacio 1D

Recuperamos la expresión obtenida anteriormente!!

$$\begin{aligned} D(x_1) &= \int D'(x_1, x_2) dx_2 = \\ &= \int \underbrace{\int \int \int \ldots \int}_{N-2} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_3 \, dx_4 \ldots dx_N \, dx_2 \\ &= \underbrace{\int \int \int \ldots \int}_{N-1} |\Psi(x_1, x_2, ..., x_N)|^2 \, dx_2 \, dx_3 \, dx_4 \ldots dx_N \end{aligned}$$

VNiVERSiDAD DSALAMANCA

N partículas sin spin en 3 dimensiones

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)$: Función de onda del sistema
$\hookrightarrow$ $\vec{r}_1$: vector de posición de la primera partícula
$\hookrightarrow$ $\vec{r}_2$: vector de posición de la segunda partícula
$\hookrightarrow$ ...

Si consideramos ahora 2 partículas en una caja tridimensional de dimensiones Lx, Ly, Lz, podemos definir la siguiente función de onda para el sistema:

```
In[26]:= psiN3d[x1_, y1_, z1_, x2_, y2_, z2_] =
  Sqrt[2 / Lx] Sin[Pi x1 / Lx] Sqrt[2 / Ly] Sin[Pi y1 / Ly] Sqrt[2 / Lz] Sin[Pi z1 / Lz]
  raíz cuad··· s··· número pi raíz cuad··· s··· número pi raíz cuad··· s··· número pi
   Sqrt[2 / Lx] Sin[Pi x2 / Lx] Sqrt[2 / Ly] Sin[Pi y2 / Ly] Sqrt[2 / Lz] Sin[Pi z2 / Lz]
   raíz cuad··· s··· número pi raíz cuad··· s··· número pi raíz cuad··· s··· número pi
```

Out[26]=

$$\frac{8 \,\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x1}{Lx}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi x2}{Lx}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi y1}{Ly}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi y2}{Ly}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi z1}{Lz}\right] \mathrm{Sin}\left[\frac{\pi z2}{Lz}\right]}{Lx\, Ly\, Lz}$$

VNiVERSiDAD DSALAMANCA

N partículas sin spin en 3 dimensiones

Condición para la **normalización** de la función de onda

$$\underbrace{\int\int\int\ldots\int}_{\text{Todo el espacio}} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2 \ldots d\vec{r}_N = 1$$

implica una integral múltiple sobre las $3N$ dimensiones de este espacio. Las dimensiones físicas de esta función son L$^{-3N/2}$.

N partículas sin spin en 3 dimensiones

- $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2$: **Densidad de probabilidad** de encontrar la partícula 1 en $\vec{r}_1$, la partícula 2 en $\vec{r}_2$ y así sucesivamente.
- $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N$: **Probabilidad** de encontrar la partícula en un elemento de volumen $d\vec{r}_1$ alrededor de $\vec{r}_1$, a la partícula 2 en un elemento de volumen $d\vec{r}_2$ alrededor de $\vec{r}_2$, etc.

  $\hookrightarrow$ **Probabilidad** P en un volumen V del espacio $3N$-dimensional

$$P = \underbrace{\int\int\int \dots \int_V}_{3N \text{ integraciones}} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N$$

N partículas sin spin en 3 dimensiones

¿Y si no integramos sobre las coordenadas de una partícula?

$$D(\vec{r}_1) = \underbrace{\int\int\int\dots\int}_{3N-3 \text{ integraciones}} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_2 \, d\vec{r}_3 \, d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N$$

Densidad de probabilidad de encontrar a la partícula 1 en la posición $\vec{r}_1$ cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio. Dimensiones físicas: L^{-3}.

$D(\vec{r}_1)\, d\vec{r}_1$: **Probabilidad** de encontrar la partícula 1 en un elemento de volumen $d\vec{r}_1$ centrado alrededor de $\vec{r}_1$ cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio.

N partículas sin spin en 3 dimensiones

¿Y si no integramos sobre las coordenadas de dos partículas?

$$D'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \underbrace{\int\int\int\dots\int}_{3N-6 \text{ integraciones}} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_3 \, d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N$$

Densidad de probabilidad de encontrar la partícula 1 en $\vec{r}_1$ y la partícula 2 en $\vec{r}_2$ cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio. Dimensiones físicas: L^{-6}.

$D'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \, d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2$: **Probabilidad** de encontrar la partícula 1 en un elemento de volumen $d\vec{r}_1$ centrado en $\vec{r}_1$ y la partícula 2 en un elemento de volumen $d\vec{r}_2$ centrado en $\vec{r}_2$ cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición del espacio.

¿Y si ahora integramos sobre las coordenadas de la partícula 2?

$$D(\vec{r}_1) = \int\int\int D'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2$$

Densidad de probabilidad de encontrar a la partícula 1 en la posición $\vec{r}_1$ cuando el resto de partículas ocupan cualquier posición en el espacio. Dimensiones físicas: L^{-3}.

N partículas sin spin en 3 dimensiones

Recuperamos la expresión obtenida anteriormente!!

$$
\begin{aligned}
D(\vec{r}_1) &= \int\int\int D'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_2 = \\
&= \int\int\int \underbrace{\int\int\int \dots \int}_{3N-6} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_3 \, d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N \, d\vec{r}_2 \\
&= \underbrace{\int\int\int \dots \int}_{3N-3} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N)|^2 \, d\vec{r}_2 \, d\vec{r}_3 \, d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N
\end{aligned}
$$

VNiVERSiDAD D SALAMANCA