Ecuación de Schrödinger

Pedro Velarde

Departamento de Ingeniería Energética
Instituto de Fusión Nuclear
Universidad Politécnica de Madrid

14 de febrero de 2019

Experimentos singulares

Hay una ristra de experimentos que han permitido orientar y clarificar varios aspectos de la física moderna

- Líneas discretas de emisión de los átomos (1885) $\rightarrow$ Espectro discreto de emisión electromagnética de los átomos
- Espectro de la radiación en una cavidad (1900) $\rightarrow$ Discretización de la energía de los fotones
- Efecto fotoeléctrico (Lenard 1902) $\rightarrow$ Discretización de la energía de los fotones
- Dispersión de Rutherford (1911) $\rightarrow$ Núcleo atómico
- Franck-Hertz (1914) $\rightarrow$ Espectro discreto de los átomos en interacción con electrones
- Stern-Gerlach (1922) $\rightarrow$ Espín del electrón
- Dispersión de Compton (1923) $\rightarrow$ Los fotones son partículas
- Davisson-Germer y G. Thomson (1927) $\rightarrow$ Los electrones son ondas
- Penzias-Wilson (1964) $\rightarrow$ Radiación de fondo del universo
- A. Aspect (1982) $\rightarrow$ La interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica es la correcta
- Zeilinger (1997) $\rightarrow$ Teletransporte de estados cuánticos entrelazados
- LIGO Team (2016) $\rightarrow$ Existencia de las ondas gravitacionales

Relación de dispersión en función de E y p

- Por los experimentos de Compton y Thomson-Davisson-Germer sabemos que una partícula puede comportarse como una onda, y viceversa.
- A fin de encontrar la ecuación de ondas de una partícula podemos utilizar la relación de Broglie

$$\boxed{E = \hbar\omega} \tag{1}$$

$$\boxed{p = \hbar k} \tag{2}$$

y las relaciones de dispersión resultantes al sustituirlas en la relación energía-momento de una partícula.

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \text{ para el caso relativista} \tag{3}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ para el caso no relativista} \tag{4}$$

- Para obtener la ecuación de ondas correspondiente basta sustituir (1-2) en (3-4), obteniendo una relación de dispersión

$$f(k,\omega) = 0$$

que nos lleva a la ecuación en la onda $\Psi(x,t)$

$$f(-i\frac{\partial}{\partial x}, i\frac{\partial}{\partial t})\Psi(x,t) = 0$$

Ecuación de Klein-Gordon: caso relativista

- Es más conveniente trabajar con E y p, que son magnitudes dinámicas, que con ω y k.
- Por lo tanto en las ecuaciones energía-momento (3-4) aplicaríamos directamente la transformación

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{5}$$

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{6}$$

- Si sustituimos (8-9) en la ecuación relativista (3) tenemos la ecuación de ondas

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \Psi \tag{7}$$

- Esta sería la ecuación de ondas asociada a una partícula relativista de masa m.
- Queda por determinar el significado de Ψ.
- Desgraciadamente esta ecuación no puede ser interpretada adecuadamente dentro de la mecánica cuántica, según veremos más tarde.

Ecuación de Schrödinger: caso no relativista

- Si vamos al caso no relativista (4), aplicando las misma reglas que para el caso relativista

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{8}$$

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{9}$$

obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \tag{10}$$

- Esta sería la ecuación de ondas asociada a una partícula libre *no relativista* de masa m.
- Seguimos sin poder interpretar Ψ.
- En este caso sí es posible una interpretación adecuada y consistente de Ψ, y es lo que llamamos mecánica cuántica.

Ecuación de Schrödinger en 3D

- La ecuación de Schrödinger en 3D sigue pasos similares a los anteriores dando

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi$$

  Donde $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ es el operador laplaciano.
- Si la partícula está sometida a un potencial $V(\mathbf{r})$ entonces $E = p^2/2m + V$ y la ecuación de Schrödinger será

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\mathbf{r})\Psi \tag{11}$$

- Esta sería la ecuación de ondas asociada a una partícula *no relativista* de masa m sometida a un potencial V.
- La ecuación (11) es una ecuación lineal de ondas, y por lo tanto se puede aplicar superposición de soluciones y admitirá fenómenos de interferencia.
- $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es una función de variable real con valores en el campo complejo

$$\Psi : \mathcal{R}^3 \times \mathcal{R} \to \mathcal{C}$$

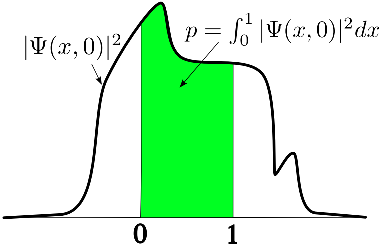
Condiciones de contorno e iniciales

Sobre las condiciones a aplicar a la ecuación de Schrödinger (11):

- Al ser de primer orden en el tiempo, basta dar los valores de Ψ en un instante para determinar su valor en cualquier tiempo.
- Al ser de segundo orden en el espacio, requerimos de dos condiciones de contorno, típicamente en la frontera de volumen físico considerado.
- Al ser de segundo orden en el espacio y primer orden en el tiempo, Ψ ha de ser continua en espacio y tiempo, con derivada continua en todo el espacio cuando V esté acotado.
- Ψ recibe el nombre de *función de onda* del sistema.
- Esta ecuación representa en la mecánica cuántica el equivalente a la ley de Newton en mecánica clásica. Toda la información dinámica del sistema se encuentra en dicha ecuación.

Interpretación de la ecuación de Schrödinger

- Para dar un significado a la función de onda $\Psi(x,t)$ de una partícula, utilizaremos $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$
- De acuerdo a la interpretación de Born (1928), $P(x,t)dx$ es la *probabilidad* de medir la posición de la partícula nos de una valor entre x y $x + dx$.



Interpretación de la ecuación de Schrödinger

Para que esta interpretación tenga sentido es necesario que se verifique

- $P(x,t)$ ha de ser siempre positiva o nula. Este requerimiento se cumple al ser $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$
- P ha de ser integrable en toda la recta, por lo que Ψ ha de tender a cero suficientemente rápido a fin de obtener una integral convergente.
- Se ha de cumplir que en todo instante $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$. Esta es una seria restricción al tipo de ecuaciones que puede verificar Ψ. Sin embargo la ecuación de Schrödinger admite esta propiedad. Derivando P

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \\ &= -i\hbar^{-1} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) + i\hbar^{-1}(V^* - V)\Psi^*\Psi = -\frac{\partial}{\partial x} J(x,t) \end{aligned}$$

donde hemos definido

$$J(x,t) = -i\frac{\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

por lo tanto P verifica una ecuación de continuidad, y se tiene

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial P}{\partial t} dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial J}{\partial x} dx = -J(\infty, t) + J(-\infty, t) = 0$$

por lo que $\int_{-\infty}^{\infty} P dx =$ constante, siendo este valor, por ejemplo, unidad.

Valores medios

Dado $P = |\Psi(x,t)|^2$ es la densidad de probabilidad, es de especial relevancia determinar las propiedades medias de distintas medidas.

- Por una parte, si la magnitud a medir es una función f de x, tendremos como valor medio de f, dependiente del tiempo,

$$\langle f\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, |\Psi(x,t)|^2\, dx$$

- Para el caso de la cantidad de movimiento tenemos algo equivalente para cualquier función $g(p)$, utilizando la transformada de Fourier de Ψ

$$\langle g\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(p)\, |\Phi(p,t)|^2\, dp$$

- Haciendo uso de la definición de transformada de Fourier, de la delta de Dirac y de la siguiente propiedad de la misma

$$\int f(x)\frac{d}{dx}\delta(x-y)dx = -\frac{d}{dy}f(y)$$

se demuestra que

$$\langle g\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* g(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi dx$$

es decir, se realiza el cambio, ya hecho anteriormente en la relación de dispersión, $p \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

Valores medios

- En general, dada una función $h(x, p)$ de la cantidad de movimiento y de la posición, se tiene el valor medio

$$\langle h\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) h(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x,t)dx$$

- Por ejemplo, el valor medio de la energía cinética $T = p^2/2m$ será

$$\langle\frac{p^2}{2m}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\Psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$$

- El valor medio de la energía potencial $V(x)$ será

$$\langle V\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\Psi^*(x,t)V(x)\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x)\left|\Psi(x,t)\right|^2$$

Valores medios: Ejemplos

- Por otra parte, si tenemos un paquete de ondas gaussiano (23)

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\beta}e^{-(x-p_0 t/m)^2/\beta^2}$$

- Entonces, después de algo de cálculo, obtenemos

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x\,|\Psi(x,t)|^2 = \frac{p_0}{m}t$$

- Para el caso de la cantidad de movimiento tenemos

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t) = p_0$$

- Si definimos $\Delta a = \sqrt{\langle a^2\rangle - \langle a\rangle^2}$ tenemos, después de algo de cálculo

$$\begin{aligned}\Delta x &= \frac{1}{\sqrt{2}}a\hbar\sqrt{1+\frac{t^2}{t_0^2}}\\ \Delta p &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{a}\end{aligned}$$

  de donde obtenemos

$$\Delta x\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

  este producto puede demostrarse que es el mínimo posible.

Hamiltoniano y operadores autoadjuntos

- El operador $H = T + V = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$ recibe el nombre de operador *Hamiltoniano*, y representa el operador asociado a la energía total de la partícula
- x, p y H son ejemplos de operadores Hermíticos.
- Dado operador $A(x,p) = A(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$, el adjunto A^+ de A está definido por

$$\langle\Psi|A|\Phi\rangle = \left(\langle\Phi|A^+|\Psi\rangle\right)^*$$

- Un operador hermítico es el que verifica

$$\langle\Psi|A|\Phi\rangle = (\langle\Phi|A|\Psi\rangle)^*$$

  por lo que los vectores propios de A son *reales*.
- Si el dominio de un operador *hermítico* A es igual al de A^+, y dicho dominio es denso en el espacio vectorial donde están definidos, entonces reciben el nombre de *operadores autoadjuntos* y decimos que $A = A^+$.
- Del conjunto de vectores propios de un operador autoadjunto, siempre se puede escoger un subconjunto que es base del espacio vectorial.
- La composición, combinación lineal, y la inversa (si existe) de un operador autoadjunto es también un operador autoadjunto.

Estados estacionarios

- El Hamiltoniano $H = T + V$ no depende del tiempo, luego la ecuación de Schrödinger

  $$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \tag{12}$$

  es separable en t y x. Esto nos permite buscar soluciones de la forma

  $$\Psi(x,t) = \chi(t)\psi(x)$$

  que sustituido en (12) daría

  $$i\hbar \frac{1}{\chi}\frac{d}{dt}\chi = \frac{1}{\psi}H\psi$$

  como ambos lados de la igualdad dependen de variables distintas, t y x respectivamente, ambos lados han de ser constantes. Denominamos E dicha constante, y tenemos

  $$i\hbar \frac{d}{dt}\chi = E\chi \tag{13}$$

  $$H\psi = E\psi \tag{14}$$

- La ecuación (13) tiene como solución

  $$\chi(t) = e^{-i\hbar^{-1}Et}$$

- La ecuación (14) es la ecuación de valores propios de H.

Estados estacionarios

- Al ser H autoadjunto
  1. E es real
  2. Las funciones propias ψ_E pueden escogerse ortogonales entre sí, algo que supondremos siempre.
  3. De entre las funciones propias ψ_E se puede escoger una base, de tal forma que cualquier función continua (y alguna propiedad más) se puede expresar como combinación lineal de estas funciones ψ_E
- La solución general de la ecuación de Schrödinger es combinación lineal de las soluciones $\chi\psi$

$$\Psi(x,t) = \sum_E \chi_E(t)\psi_E(x) = \sum_E e^{-i\hbar^{-1}Et}\psi_E(x) \qquad (15)$$

- Si los valores de E son continuos, entonces sustituimos la suma en (15) por integrales

$$\Psi(x,t) = \int dE e^{-i\hbar^{-1}Et}\psi_E(x) \qquad (16)$$

- Siempre que el potencial V sea independiente del tiempo, la ecuación de Schrödinger se reduce a una ecuación de valores propios del Hamiltoniano.

Estados estacionarios

- Las combinaciones lineales anteriores pueden dar lugar a comportamientos en Ψ complejos. Por ejemplo, si consideramos dos estados definidos por E_1 y E_2, tenemos

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{E_1} e^{-i\hbar^{-1} E_1 t} + \psi_{E_2} e^{-i\hbar^{-1} E_2 t} \right)$$

la densidad de probabilidad es, supuesto por simplificación que ψ_{E_1} y ψ_{E_2} son reales,

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2} \left(\psi_{E_1}^2 + \psi_{E_2}^2 \right) + \psi_{E_1} \psi_{E_2} \cos(\hbar^{-1}(E_2 - E_2)t)$$

y se puede calcular rápidamente que

$$\langle H \rangle = \int dx \Psi(x,t)^* \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x,t) = \frac{1}{2}(E_1 + E_2)$$

que tiene un periodo característico de $\Delta t = 2\pi\hbar / |E_2 - E_1|$

- De forma similar

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \frac{1}{2} |E_2 - E_1|$$

con lo que tenemos $\Delta E \Delta t = \pi\hbar$

Partícula libre: ondas planas

Consideremos el caso de partícula libre de masa m, con $V = 0$, con movimiento en 1D, cuya función de onda Ψ verifica la ecuación (10)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

- Utilizamos el desarrollo de Fourier con funciones que satisfacen esta ecuación

$$\Psi_p(x,t) = e^{i\hbar^{-1}(px - p^2 t/2m)} \tag{17}$$

  con p un número real que, como veremos, corresponde a la cantidad de movimiento. En este caso la energía es $E = p^2/2m$. Cualquier combinación lineal de funciones (17) será una solución válida. Esto lo podemos expresar como

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p,t) e^{i\hbar^{-1}(px - p^2 t/2m)} \tag{18}$$

  cada onda Ψ_p contribuye a la función de onda Ψ con un peso $\Phi(p,t)$.
- Este tipo de soluciones recibe el nombre de *paquete de ondas*.

Partícula libre: Dirección de propagación

Veamos en mas detalle la solución prototipo anterior

$$\Psi_p(x,t) = Ae^{i\hbar^{-1}(px-Et)} \text{ con } E = \frac{p^2}{2m} \tag{19}$$

donde A es un factor de normalización. Entonces la densidad de probabilidad es

$$\rho(x,t) = |\Psi_p(x,t)|^2 = |A|^2$$

y la corriente será, con $p = \hbar k$

$$\begin{aligned}
J(x,t) &= -i\frac{\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) \\
&= -i\frac{\hbar}{2m}\Big((A^*e^{-ikx})(ikAe^{ikx}) - (Ae^{ikx})(-ikA^*e^{-ikx})\Big) \\
&= \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = \frac{p}{m}\rho(x,t)
\end{aligned}$$

es decir, la onda (20) se mueve con velocidad p/m en la dirección de p.

Partícula libre: Dirección de propagación 3D

En el caso de la ecuación tridimensional de Schrödinger para una partícula libre tenemos una solución prototipo

$$\Psi_p(\mathbf{r},t) = Ae^{i\hbar^{-1}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)} \text{ con } E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{20}$$

donde A es un factor de normalización. Entonces la densidad de probabilidad es

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\Psi_p(\mathbf{r},t)|^2 = |A|^2$$

y la corriente será, con $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

$$\begin{aligned}
J(x,t) &= -i\frac{\hbar}{2m}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) \\
&= -i\frac{\hbar}{2m}\left((A^*e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})(i\mathbf{k}Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) - (Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})(-i\mathbf{k}A^*e^{-ikx})\right) \\
&= \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}|A|^2 = \frac{\mathbf{p}}{m}\rho(\mathbf{r},t)
\end{aligned}$$

es decir, la onda (20) se mueve con velocidad p/m en la dirección de $\mathbf{p}$.

Partícula libre: Onda inicial

¿Cómo expresamos una onda inicial propagándose con cantidad de movimiento p?.

$$\Psi_p(\mathbf{r},0) = Ae^{i\hbar^{-1}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}\phi(\mathbf{r}) \text{ con } E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{21}$$

donde A es un factor de normalización y ϕ es una función evaluada *real*. Entonces la densidad de probabilidad es

$$\rho(\mathbf{r},0) = |\Psi_p(\mathbf{r},0)|^2 = |A|^2\,\phi(\mathbf{r})^2$$

y la corriente será, con $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

$$\begin{aligned} J(x,0) &= -i\frac{\hbar}{2m}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) \\ &= -i\frac{\hbar}{2m}\Big((A^*e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})(i\mathbf{k}\phi + \nabla\phi)(Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) - (Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})(-i\mathbf{k}\phi + \nabla\phi)(A^*e^{-ikx})\Big) \\ &= \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\,|A|^2\,\phi(\mathbf{r})^2 = \frac{\mathbf{p}}{m}\rho(\mathbf{r},0) \end{aligned}$$

es decir, la onda (21), de amplitud arbitraria ϕ, sería una moviéndose en dirección de $\mathbf{p}$ con velocidad $\mathbf{p}/m$.

Partícula libre: Ondas Esféricas

Podemos considerar partículas en otros sistemas de coordenadas. Por ejemplo, partículas emanando de un núcleo tendrán predominantemente simetría esférica, no plana. En este caso tenemos la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi)$$

cuya solución estacionaria es $\Psi = e^{-i\hbar^{-1}Et}\psi$, con $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ y ψ solución de la ecuación de valores propios

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) = -k^2 \psi$$

cuya solución es

$$\psi(r) = \frac{e^{ikr}}{r}$$

que son ondas esféricas radiando desde el origen. Su propagación puede ser hacia o desde dicho origen.

Paquete de ondas Gaussiano

Un caso particularmente interesante es el caso de una distribución gaussiana de las ondas Ψ_p, que corresponde a

$$\Phi(p,0) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}} e^{-a^2(p-p_0)^2/2} \tag{22}$$

sustituyendo esto en (18), con $q = p - p_0$, tenemos

$$\Psi = \sqrt{\frac{a}{2\pi\hbar\sqrt{\pi}}} e^{i\hbar^{-1}(p_0 x - p_0^2 t/2m)} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2(a^2/2 + it/2m\hbar)} e^{i(qx - qp_0 t/m)/\hbar}$$

utilizando $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 - bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}$ lo que nos daría

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{a\hbar\alpha\sqrt{\pi}}} e^{i\hbar^{-1}(p_0 x - p_0^2 t/2m)} e^{-(x - p_0 t/m)^2/2a^2\hbar^2\alpha}$$

con $\alpha = 1 + it/t_0$ y $t_0 = ma^2\hbar$. El módulo de esta función es

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\beta} e^{-(x - p_0 t/m)^2/\beta^2} \tag{23}$$

con $\beta = a\hbar\sqrt{1 + t^2/t_0^2}$

Características del paquete de ondas Gaussiano

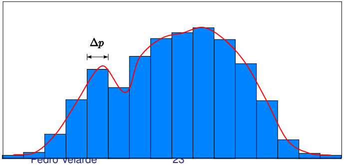
- El ancho de la distribución en p, según (22), es $\Delta p = 1/a$
- El ancho de la distribución en x, según (23), es $\Delta x = \beta$
- Por lo tanto $\Delta x \Delta p = \beta/a \geq \hbar$
- Centro del paquete de ondas en x se mueve con velocidad $v = p_0/m$ que era lo que uno esperaría de una partícula clásica.
- El paquete de ondas se mueve en el espacio ensanchándose paulatinamente

$$\sigma \approx a\hbar \frac{t}{t_0} = \frac{t}{ma}$$

- El cálculo directo sería

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \Phi(p,t) e^{i\hbar^{-1}(px - p^2 t/2m)} \\
&\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{k=-N}^{N} \Delta p \Phi(p_k,t) e^{i\hbar^{-1}(p_k x - p_k^2 t/2m)}
\end{aligned}$$

con $p_k = k\Delta p$



FFT

- La forma óptima de calcular la integral anterior sería con la *Fast Fourier Transform* (FFT), aunque se puede calcular directamente para N pequeño.
- Dado una secuencia de n números complejos x_k, la transformada rápida de Fourier calcula

$$y_s = \sum_{k=0}^{n-1} x_k e^{-2\pi iks/n}$$

donde y_s corresponde a la frecuencia s/n, y la reversa

$$y_s = \sum_{k=0}^{n-1} x_k e^{2\pi iks/n}$$

sin normalizar, es decir, aplicando la directa y reversa se obtiene nx_s.
- Es el algoritmo lo que importa, el cálculo es el mismo que hacer la suma directamente.
- Los $s \leq n/2$ corresponden a frecuencias positivas s/n, los $(n-s)/n$ para $s > n/2$ corresponden a frecuencias negativas $-s/n$ (almacenamiento inverso de las frecuencias negativas)