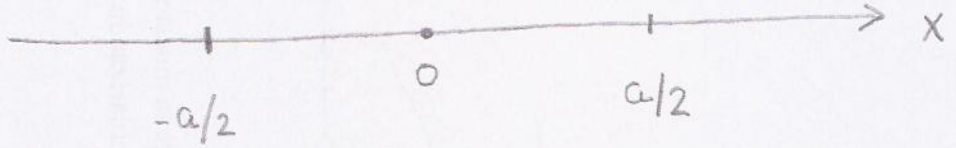
Ejemplo : Partícula en caja 1-D



La partícula existe entre $-a/2 < x < a/2$. La función de onda del estado base es:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & x \leq -a/2 \ \text{y} \ x \geq a/2 \ \left(|x| \geq a/2\right) \end{cases} \quad (1)$$

a) Usando la ecuación de Schrödinger, encontrar E (Energía de la partícula)

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

$U(x,t) = \text{constante} = 0$ en $-a/2 < x < a/2$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \quad (3)$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} = -\frac{\pi}{a} A\,\mathrm{Sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 A\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (5)$$

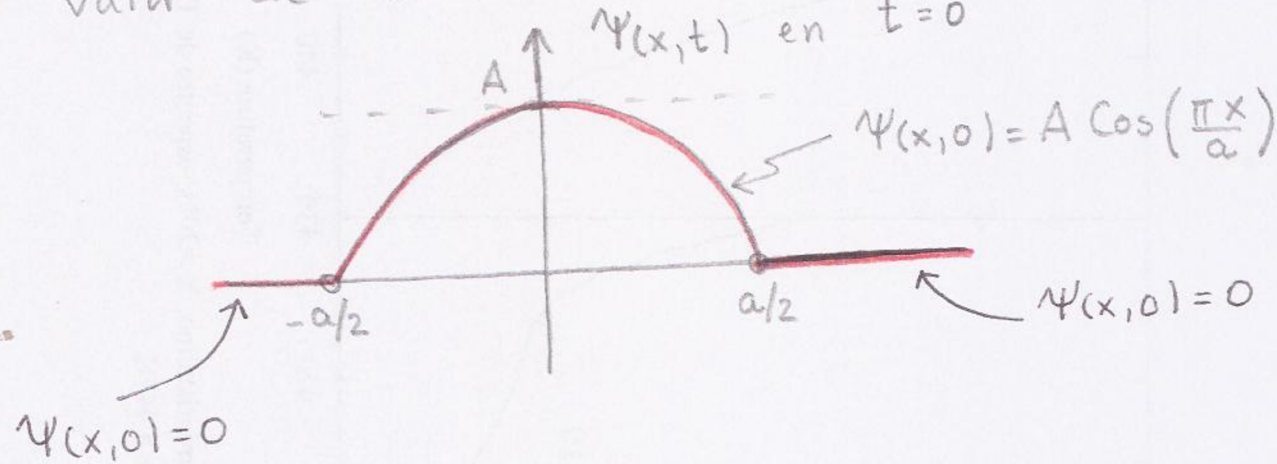
$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar} A\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (6)$$

(5) y (6) en (3):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 A \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right) = i\hbar\left(-i\frac{E}{\hbar} A \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right)$$

$$\Rightarrow \qquad E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \qquad (7)$$

El cálculo hecho comprueba que la función de onda $\Psi(x,t)$ es solución de la ecuación de Schrödinger con E, la energía de la partícula, siendo igual al valor de la ecuación (7).

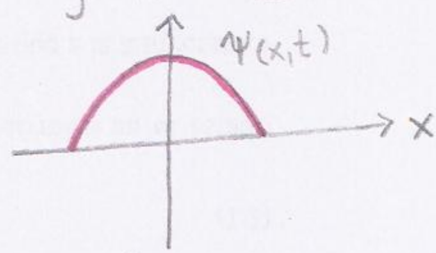


b) Usando la función de onda de la partícula en una caja 1-D, obtenga los valores esperados de: la posición de la partícula ($\bar{x}$), el momento lineal de la partícula ($\bar{p}$), el cuadrado de la posición de la partícula ($\overline{x^2}$) y el cuadrado del momento lineal de la partícula ($\overline{p^2}$). $\Psi(x,t) = A\,\mathrm{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ $\quad -a/2 < x < a/2$

✓ $$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx} = \frac{\int_{-a/2}^{a/2} A^* \mathrm{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{i\frac{Et}{\hbar}}\, x\, A\,\mathrm{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\, dx}{\int_{-a/2}^{a/2} A^* \mathrm{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{i\frac{Et}{\hbar}}\, A\,\mathrm{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\, dx}$$

$$\bar{x} = \frac{\int_{-a/2}^{a/2} x\, \mathrm{Cos}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx}{\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{Cos}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx} = \frac{0}{\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{Cos}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx}$$

Integral de una función impar entre $x = -a/2$ y $x = +a/2$



$$\bar{x} = 0 \qquad (7)$$

✓ $$\bar{p} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, p\, \Psi(x,t)\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx} \qquad p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\bar{p} = \frac{\int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(x,t)\, dx}{\int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx} = \frac{-i\hbar \int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\, dx}{\int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx}$$

$$\bar{p} = \frac{-i\hbar \int_{-a/2}^{a/2} A^* \mathrm{Cos}\left(\pi \frac{x}{a}\right) e^{i\frac{Et}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial x}\left(A\,\mathrm{Cos}\left(\frac{\pi x}{a} x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right) dx}{A^* A \int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{Cos}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx}$$

$$\bar{p} = \frac{-i\hbar \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\left(-\frac{\pi}{a}\right)\operatorname{Sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx}{\int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx} = \frac{+i\hbar\frac{\pi}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\operatorname{Sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx}{\int_{-a/2}^{a/2}\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx}$$

$$\int_{-a/2}^{a/2} \underbrace{\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)}_{\text{función par}} \underbrace{\operatorname{Sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right)}_{\text{función impar}} dx = 0 \qquad (8)$$

$$\bar{p} = 0 \qquad (9)$$

Este valor se debe a que la partícula tiene una energía E constante que de acuerdo a (7) es $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$, además

$$E = \frac{p^2}{2m} + \cancelto{0}{V(x,t)} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow$$

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \Rightarrow p = \pm\frac{\hbar\pi}{a} \qquad (10)$$

Cuando la partícula se mueve en la caja 1-D hacia la derecha, $p = +\frac{\hbar\pi}{a}$. Cuando "choca" con la pared de la caja localizada en $x = a/2$, "rebota" elástica mente porque E = constante pero invierte su movimiento y entonces, después del choque con la pared, empieza a moverse hacia la izquierda con momento lineal $p = -\frac{\hbar\pi}{a}$. Ya que la partícula, en promedio, se mueve tantas veces hacia la derecha como veces hacia la izquierda, en promedio, el valor de su momento lineal p es cero, esto es, $\bar{p} = 0$.

$\overline{x^2} = ?$

Podríamos seguir el mismo procedimiento que usamos para calcular $\bar{x}$ y $\bar{p}$, pero vamos a hacerlo de una forma un poco diferente.

Cuando se conoce la constante de normalización A no hace falta utilizar la fórmula

$$\overline{x^2} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*_{(x,t)}\, x^2\, \Psi(x,t)\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*_{(x,t)}\, \Psi(x,t)\, dx} \qquad (11).$$

¿Por qué? Calculemos primero la constante A

¿Cómo?
$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx = 1 \qquad (12)$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A^* \cos\left(\tfrac{\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{Et}{\hbar}}\, A \cos\left(\tfrac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\, dx = 1$$

$$\Rightarrow A^*A \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\tfrac{\pi}{a}x\right) dx = |A|^2 \frac{a}{\pi} \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\tfrac{\pi}{a}x\right) d\left(\tfrac{\pi}{a}x\right)$$

$$= |A|^2 \frac{a}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 y\, dy = |A|^2 \frac{a}{\pi}\left(\frac{1}{2}\right) \int_{-\pi/2}^{\pi/2} (1 + \cos 2y)\, dy$$

$$= |A|^2 \frac{a}{2\pi}\left(y\Big|_{-\pi/2}^{\pi/2} + \underbrace{\cancel{\frac{\operatorname{Sen} 2y}{2}\Big|_{-\pi/2}^{\pi/2}}}_{0} \right) = |A|^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$\Rightarrow |A|^2 = \frac{2}{a} \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}} \qquad (13)$$

Conociendo A, entonces tenemos la función de onda normalizada $\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ (14)

y al estar normalizada, quiere decir que $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx = 1$ y en ese caso, y en cualquier caso en que la función de onda esté normalizada, el denominador de la ecuación (11) no hace falta porque es igual a 1.

$$\Rightarrow \quad \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x^2\, \Psi(x,t)\, dx \qquad (15)$$

$$= \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) x^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \underbrace{x^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)}_{\text{función par}} dx = \frac{4}{a} \int_{0}^{2a} x^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx$$

$$= \frac{4}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \int_0^{2a} \left(\frac{\pi x}{a}\right)^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) d\left(\frac{\pi}{a}x\right) = \frac{4}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \int_0^{2\pi} y^2 \cos^2 y\, dy$$

Después de encontrar la integral en tablas

$$\overline{x^2} = \frac{a^2}{2\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) = 0.033\, a^2 \qquad (16)$$

$\overline{x^2}$ es diferente de cero a pesar de que $\bar{x} = 0$ porque cualquier medición que se haga de x^2 es positiva.

$\overline{p^2} = ?$

Como ya conocemos la función de onda normalizada, entonces podemos escribir $\overline{p^2}$ como

$$\overline{p^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\, p^2\, \psi(x,t)\, dx \qquad (17)$$

$$= \int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x,t)\, dx$$

$$= \int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x,t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) dx$$

$$= -\hbar^2 \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\tfrac{2}{a}} \operatorname{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right) \frac{\partial^2 \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{Cos}\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right)}{\partial x^2}\, dx$$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{2}{a}\right) \int_{-a/2}^{a/2} \operatorname{Cos}\left(\frac{\pi}{a}x\right) \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\pi}{a} \operatorname{Sen}\left(\frac{\pi}{a}x\right)\right) dx$$

$$= \hbar^2 \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \int_{-a/2}^{a/2} \operatorname{Cos}^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = \hbar^2 \left(\frac{\cancel{2}}{a}\right)\left(\frac{\pi}{\cancel{a}}\right)^2 \left(\frac{\cancel{a}}{\cancel{\pi}}\right) \frac{\cancel{\pi}}{\cancel{2}}$$

$$\overline{p^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} = \left(\frac{\hbar \pi}{a}\right)^2 \qquad (18)$$

La raíz cuadrada de (18) $\sqrt{\overline{p^2}} \neq 0$ a pesar de que $\bar{p} = 0$. Anteriormente se explicó por qué físicamente $\bar{p} = 0$. En relación a que $\sqrt{\overline{p^2}} \neq 0$, sabemos que p, por lo que se obtuvo en la ecuación (10) puede tener valores $p = \pm \frac{\hbar\pi}{a}$. De esta forma entonces se entiende que $\overline{p^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{a^2}$ lo cual es consistente con el cálculo obtenido en (18).

✓ ROOT - MEAN - SQUARE - DEVIATION $\longleftrightarrow \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}$

es una medida o forma de calcular la incertidumbre Δx de la posición de una partícula si se conoce su función de onda. Lo mismo ocurre con

$$\Delta p = \sqrt{\overline{(p-\bar{p})^2}}.$$

✓ En el ejemplo de la partícula en una caja 1-D

(7) $\Rightarrow \bar{x} = 0$; (16) $\Rightarrow \overline{x^2} = 0.033\,a^2$

(9) $\Rightarrow \bar{p} = 0$; (18) $\Rightarrow \overline{p^2} = \left(\frac{\hbar\pi}{a}\right)^2$

Desarrollemos ; $(x-\bar{x})^2 = (x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2)$

$$\Rightarrow \overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{(x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2)} = \overline{x^2} - 2\bar{x}\bar{x} + \bar{x}^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2$$

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} \quad (19)$$

De la misma forma $\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \bar{p}^2}$ (20)

Para la partícula en la caja 1D

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{0.033\,a^2} = 0.18\,a \quad (21)$$

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2}} = \frac{\hbar\pi}{a} \quad (22)$$

$$\Rightarrow \Delta x\,\Delta p = (0.18\,\cancel{a})\frac{\hbar\pi}{\cancel{a}} = 0.57\,\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

✓✓✓