

Tarea I Mecánica Cuántica I



Thomas Gómez Serpa

5 de febrero de 2025

1. Ley de radiación de Planck

A partir de la ley de radiación de Planck:

$$I(\lambda, T) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/k\lambda T} - 1} \tag{1}$$

- a) Demuestre la ley de Wien
- b) Demuestre la ley de Stefan-Boltzmann, integrando con respecto a la longitud de onda. De un valor para la constante de Stefan-Boltzmann en términos de las otras constantes.
- c) Demuestre que es posible recuperar la ley de Rayleigh-Jeans para grandes longitudes de onda
- d) Realice gráficas de $I(\lambda,T)$ vs T para T=100K,5800K,120000K. Adjunte el código que utilizó para esto e identifique los máximos según la ley de Wien. Debe subir su código a GitHub y compartir el link del repositorio para compartir su código con el de otros estudiantes o con I.A. Nota: No se reciben códigos obtenidos por ChatGPT, Google Gemini, Blackbox AI, GitHub Copilot, etc.
- Solución 1. a) Demostración. En términos físicos, la expresión 1, indica la intensidad por longitud de onda, para λ, T fijos. Por otro lado, la ley de Wien, indica una relación entre la temperatura de un cuerpo negro y la longitud de onda $(\lambda_{max}T\approx 2,898mK)$ a la cual emite mayor radiación térmica (a través de ondas electromagnéticas) [7]. Para demostrar lo anterior, derive la ecuación 1 respecto a λ :

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/k\lambda T} - 1} \right] = 2\pi c^2 h \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\frac{1}{\lambda^5 (e^{hc/k\lambda T} - 1)} \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 2\pi c^2 h \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\lambda^{-5} (e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1} \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 2\pi c^2 h \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^{-5}) (e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1} + \frac{\partial}{\partial \lambda} ((e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1}) \lambda^{-5} \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 2\pi c^2 h \left[-5\lambda^{-6} (e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1} + \frac{\partial}{\partial \lambda} ((e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1}) \lambda^{-5} \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 2\pi c^2 h \lambda^{-6} \left[-5(e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1} + \frac{\partial}{\partial \lambda} ((e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1}) \lambda \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 2\pi c^2 h \lambda^{-5} \left[-5\lambda^{-1} (e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1} - (e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-2} e^{hc/k\lambda T} (-\frac{hc}{k\lambda^2 T}) \lambda \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^4} \left[-5(e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-1} - (e^{hc/k\lambda T} - 1)^{-2} e^{hc/k\lambda T} (-\frac{hc}{k\lambda^2 T}) \lambda \right]$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^4} \left[-5(e^{hc/k\lambda T} - 1) - e^{hc/k\lambda T} (-\frac{hc}{k\lambda T}) \right] \frac{1}{(e^{hc/k\lambda T} - 1)^2}$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^4} \left[-5(1 - e^{-hc/k\lambda T}) + \frac{hc}{k\lambda T} \right] \frac{e^{hc/k\lambda T}}{(e^{hc/k\lambda T} - 1)^2}$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = \frac{2\pi c^2 h e^{hc/k\lambda T} [-5(1 - e^{-hc/k\lambda T}) + \frac{hc}{k\lambda T}]}{\lambda^4 (e^{hc/k\lambda T} - 1)^2}$$

El punto estacionario λ_{max} con significado físico (quizás $\lambda \to \infty$ o $\lambda \to 0^+$ sean puntos estacionarios; en todo caso, aun si esta conjetura es cierta, estos valores no tienen significado en físico), satisface:

$$-5(1 - e^{-hc/k\lambda_{max}T}) + \frac{hc}{k\lambda_{max}T} = 0$$
(3)

Defina a u como $\frac{hc}{kT}$, y remplace en la relación 3:

$$-5(1 - e^{-u/\lambda_{max}}) + \frac{u}{\lambda_{max}} = 0 \tag{4}$$

Análogamente, defina a v como $\frac{u}{\lambda_{max}}$, así la relación 4, se reduce a la siguiente ecuación trascendental:

$$-5(1 - e^{-v}) + v = 0$$

$$-5 + 5e^{-v} + v = 0$$

$$f(v) = 5e^{-v} + v - 5 = 0 = f(v)$$
(5)

Note que f(4) es negativo y f(6) es positivo; por lo tanto, existe al menos una raíz de la ecuación 5 en el intervalo (-4,6) [4]. Por otro lado, $f''(v) = 5e^{-v}$, por lo tanto, la función es cóncava en el intervalo [-4,6], además no se tienen derivadas ni segundas derivadas nulas en ningún punto de

este intervalo, por ende, existe una única raíz en este intervalo y se tiene asegurada la convergencia del método de Newton Raphson al comenzar con v=5 como aproximación [4]. Ahora suponga que la anterior raíz se ha encontrado a través de lo ya discutido y defina esta misma como η ,bajo esta convención se llega a:

$$\eta = \frac{u}{\lambda_{max}} = \frac{hc}{kT\lambda_{max}} \longrightarrow \lambda_{max}T = \frac{hc}{k \cdot \eta} = b$$
(6)

La ecuación 6, es la expresión matemática para la ley de Wien, en cualquier sistema de unidades; sin embargo, para finalizar la demostración, y exhibir la ley en el sistema de unidades clásico, basta demostrar que el valor numérico de b en unidades de $m \cdot K$ es aproximadamente 2,898. Se invita al lector a comprobar lo anterior o consultar el siguiente repositorio en GitHub:

https://github.com/Ratabart666/Mecanica-Cuantica-I.

b) Demostración. Para obtener la intensidad total se debe integrar sobre todas las longitudes posibles la ecuación 1:

$$I_{tot} = \lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/k\lambda T} - 1} d\lambda$$

$$I_{tot} = \lim_{\epsilon \to 0^+} 2\pi c^2 h \int_0^{\infty} \frac{1}{\lambda^5 (e^{hc/k\lambda T} - 1)} d\lambda$$
(7)

Si se hace el cambio de variable $u=\frac{1}{\lambda}\to du=-\frac{1}{\lambda^2}d\lambda=-u^2d\lambda\to d\lambda=-\frac{du}{u^2},$ la ecuación 7 se reduce a:

$$I_{tot} = -2\pi c^2 h \int_{\infty}^{0} \frac{u^5}{u^2 (e^{uhc/kT} - 1)} du = 2\pi c^2 h \int_{0}^{\infty} \frac{u^5}{u^2 (e^{uhc/kT} - 1)} du$$
$$I_{tot} = 2\pi c^2 h \int_{0}^{\infty} \frac{u^3}{e^{uhc/kT} - 1} du$$
(8)

Si de nuevo se hace un cambio de variable $v=uhc/kT\to dv=\frac{hc}{kT}du\to\frac{kT}{hc}dv=du,\frac{kT}{hc}v=u,$ entonces la ecuación 8 se reduce a:

$$I_{tot} = 2\pi c^{2}h \int_{0}^{\infty} \frac{\left(\frac{kT}{hc}v\right)^{3}}{e^{v} - 1} \frac{kT}{hc} du = 2\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \int_{0}^{\infty} \frac{v^{3}}{e^{v} - 1} du$$

$$I_{tot} = 2\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-v}v^{3}}{1 - e^{-v}} du = 2\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \int_{0}^{\infty} e^{-v}v^{3} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nv} du$$

$$I_{tot} = 2\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \int_{0}^{\infty} v^{3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nv} du = 2\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_{0}^{\infty} v^{3}e^{-nv} du\right]$$

$$I_{tot} = 2\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \left[-\frac{1}{n}v^{3}e^{-nv}\right]_{0}^{\infty} + \int_{0}^{\infty} \frac{3}{n}v^{2}e^{-nv} du$$

$$I_{tot} = 6\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[\int_{0}^{\infty} v^{2}e^{-nv} du\right]$$

$$I_{tot} = 6\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[-\frac{1}{n}v^{2}e^{-nv}\right]_{0}^{\infty} + \int_{0}^{\infty} \frac{2}{n}ve^{-nv} du$$

$$I_{tot} = 12\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2}} \left[\int_{0}^{\infty} ve^{-nv} du\right] = 12\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2}} \left[-\frac{1}{n}ve^{-nv}\right]_{0}^{\infty} + \int_{0}^{\infty} \frac{1}{n}e^{-nv} du$$

$$I_{tot} = 12\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3}} \left[\int_{0}^{\infty} e^{-nv} du\right] = 12\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3}} \left[-\frac{1}{n}\left[e^{-nv}\right]_{0}^{\infty} du\right]$$

$$I_{to} = 12\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{4}} = 12\pi c^{2}h \left(\frac{kT}{hc}\right)^{4} \frac{\pi^{4}}{90} = \left(\frac{2\pi^{5}k^{4}}{15h^{3}c^{2}}\right) \cdot T^{4} = \sigma T^{4}$$

$$(9)$$

El valor de la constante de Stefan-Boltzmann en función de las constantes fundamentales es $\frac{2\pi^5 k^4}{15h^3c^2}$, más aún el valor numérico de esta misma en W/m^2k^4 es aproximadamente $5.67 \cdot 10^{-8}W/m^2k^4$. Se invita al lector a comprobar lo anterior o consultar el siguiente repositorio en GitHub: https://github.com/Ratabart666/Mecanica-Cuantica-I.

Demostración.

Considere una expansión en serie de la exponencial involuc
rada en la ecuación ${\bf 1}$:

$$I(\lambda, T) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\sum_{0}^{\infty} \frac{(hc/k\lambda T)^n}{n!} - 1}$$

$$\tag{10}$$

Para $\lambda \to \infty$, la ecuación 10 se reduce:

$$I(\lambda, T) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \cdot \frac{k\lambda T}{hc} = \frac{2\pi c}{\lambda^4} kT$$
 (11)

Por otro lado, dado que $I_{\lambda}=\frac{u_{\lambda}c}{4}$ (relación dada por el libro del profesor Carlos Andres Florez Bustos , actual miembro del departamento de física

de la Universidad de los Andes y director de este curso, el libro actualmente aún se encuentra en edición), entonces al despejar en la ecuación 11 a u_{λ} (densidad de energía de Rayleigh-Jeans) se obtiene:

$$u(\lambda, T) = \frac{4I_{\lambda}}{c} = \frac{8\pi}{\lambda^4} kT \tag{12}$$

Por otro lado, recuerde que u_{λ} (representación en longitud de onda) y u (representación en frecuencia) están relacionados mediante $u_{\lambda}=u|\frac{d\nu}{d\lambda}|$ (relación dada por el libro del profesor Carlos Andres Florez Bustos , actual miembro del departamento de física de la Universidad de los Andes y director de este curso, el libro actualmente aún se encuentra en edición), donde $|\frac{d\nu}{d\lambda}|$ es el Jacobiano y permite pasar de energía por unidad de frecuencia a energía por unidad de longitud. Si se tiene en cuenta que $\nu(\lambda)=\frac{c}{\lambda}\to |\frac{d\nu}{d\lambda}|=\frac{c}{\lambda^2}$ se remplaza en la relación ya discutida, se obtiene de nuevo la Ley de Rayleigh-Jeans:

$$u = \frac{u_{\lambda}}{\left|\frac{d\nu}{d\lambda}\right|} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \frac{\lambda^2}{c} kT = \frac{8\pi}{\lambda^2 c} kT = \frac{8\pi\nu^2}{c^2 c} kT = \frac{8\pi}{\lambda^2 c} kT = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \qquad (13)$$

- c) A continuación se adjuntan las gráficas, de este inciso. Se invita al lector a realizarlas o consultar el siguiente repositorio en GitHub: https://github.com/Ratabart666/Mecanica-Cuantica-I.
 - Como se ve en la figura 1, el cuerpo negro a temperatura de 100K, que sería una temperatura extremadamente caliente en el día a día, emite radiación electromagnética (térmica) en la zona del infrarrojo, por lo que la radiación de los cuerpos reales a temperaturas ambientes o no muy altas temperaturas comparadas con el ambiente, no son apreciables por nuestros ojos y por ende no afectan cómo vemos los objetos. Por otro lado, dado que los cuerpos a nuestro alrededor generalmente están a temperaturas aproximadamente iguales, no sentimos en la práctica la radiación térmica, ya que estamos aproximadamente en equilibrio termodinámico (la tasa de emisión absorción de radiación térmica es aproximadamente igual), sin embargo, para cuerpos con temperatura ligeramente más alta que el ambiente, a pesar de que no veamos su radiación térmica, sentimos la radiación térmica que emiten con nuestra o piel o en el caso totalmente opuesto sentimos la radiación térmica perdida y transferida hacia el ambiente cuando estamos a temperatura ambiente muy baja, más aún dado que por lo general nuestra temperatura está más alta que el ambiente, siempre emitimos radiación térmica hacia el ambiente con picos en el infrarrojo, por lo tanto, la radiación del cuerpo negro ayuda a entender la base para la detección de cámaras infrarrojas que puedan detectar personas o sacar perfiles de temperatura.
 - Como se ve en la figura 2, el cuerpo negro, a temperatura de 5800K, emite radiación electromagnética (térmica) en el visible. Lo anterior

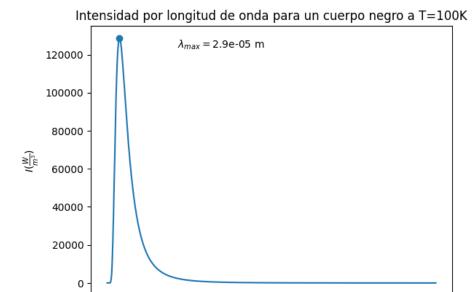


Figura 1: Gráfica de Intensidad por longitud de onda contra longitud de onda para un cuerpo negro a 100K

explica por qué las estrellas, como el sol, serían vistas como blancas si las viéramos desde una estación aeroespacial y sin la dispersión ocasionada por la atmósfera [6]. Por otro lado, como dato curioso, note que la radiación térmica del sol, es la responsable de la vida y la responsable de mantener una temperatura aproximadamente estable en nuestro planeta.

0.0001 0.0002 0.0003 0.0004 0.0005 0.0006 0.0007 $\lambda(m)$

■ Como se ve en la figura 3, el cuerpo negro a temperatura de 12000K, que sería más o menos del orden de temperatura de algunas estrellas lejanas, emite radiación en el ultravioleta y en rayos X de baja energía. Lo anterior explica por qué las estrellas más energéticas son percibidas o descritas de color violeta azulado, tendiendo a blanco, empiezan, dado que en estas condiciones el violeta y el azul son los colores que más emiten en el visible, estas estrellas a través de radiación. Por otro lado, la tasa de emisión de radiación térmica de estas estrellas es gigantesca, por lo que podemos apreciarlas a grandes distancias, más aún si estuviéramos lo suficientemente cerca de alguna de estas estrellas, su radiación al ser ionizante podría en el peor de los casos incinerar la tierra o si se es menos pesimista romper estructuras químicas de nuestro cuerpo causando problemas de salud, hay que estar agradecidos entonces por la estrella que tenemos, el Sol [2].

 $\lambda_{max} = 2.41e-08 \text{ m}$ 3.0 2.5 2.0 1.5 1.0 0.5 0.0 0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0 1e-7 $\lambda(m)$

Intensidad por longitud de onda para un cuerpo negro a T=120000K

Figura 2: Gráfica de Intensidad por longitud de onda contra longitud de onda para un cuerpo negro a 5800K

2. Partícula libre y mínima incertidumbre

Suponga que una solución a la ecuación de Schrödinger, para la partícula libre, está dada por:

$$\psi(x,0) = Ae^{-x^2/a^2} \tag{14}$$

- a) ¿Cuáles son las unidades de a?
- b) Encuentre σ_x y σ_p . Interprete físicamente sus resultados.
 - Solución 2. a) Dado que el argumento de la función exponencial, dada en la ecuación 14, no debe tener unidades, es decir debe ser adimensional (ya que al expandir en serie a la exponencial, se puede demostrar que sus unidades no quedan bien definidas), entonces se tiene que las unidades de a corresponden a [L]⁻¹.
 - b) En primer lugar, se define a σ_x como el valor tal que, cuando 0 varía en el rango $\pm \sigma_x$, la función $|\psi(\sigma_x,0)|^2$ es $e^{-1/2}$ de $|\psi(x,0)|$. Físicamente, esto nos da una un rango $[-\sigma_x,\sigma_x]$ donde la densidad de probabilidad es considerable, más aún, esta definición da una manera más sencilla de calcular σ y puede ser justificada rigurosamente a través de la teoría de la probabilidad y la distribución normal [3]. Afuera de este intervalo, la probabilidad es baja. Por ende lo anterior define la concentración espacial del paquete de onda, en especial para

Intensidad por longitud de onda para un cuerpo negro a T=5800K

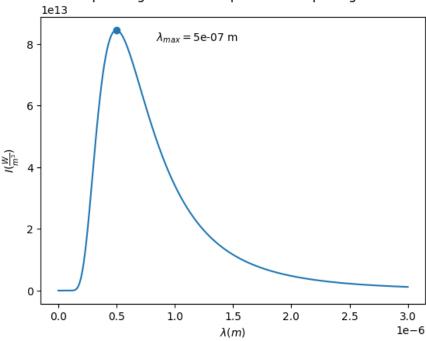


Figura 3: Gráfica de Intensidad por longitud de onda contra longitud de onda para un cuerpo negro a 120000K

este caso de un paquete de onda gaussiano. De lo anterior, se sigue que:

$$\frac{|\psi(\sigma_x, 0)|^2}{|\psi(0, 0)|^2} = e^{-1/2} = \frac{A^2 e^{-2\sigma_x^2/a^2}}{A^2} = e^{-2\sigma_x^2/a^2} = e^{-1/2} \to \sigma_x = \frac{a}{2}$$
(15)

Por otro lado, de la teoría de Fourier y usando la relación de Broglie, se pueden demostrar las siguientes relaciones, que son transformadas y cotransformadas de Fourier habituales, pero con factor multiplicativo adecuado para que sean simétricas y representen una realidad física [1] [7]:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p,0)e^{ipx/\hbar} dp$$

$$\phi(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)e^{-ipx/\hbar} dx$$
(16)

Se pueden definir relaciones similares para un tiempo t como $\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p,0)e^{i(px-E(p)t)/\hbar}dp, \phi(p,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)e^{-i(px+E(p)t)/\hbar}dx$ [7], esta solución solo es válida para la partícula libre, ya que la base

de soluciones son ondas planas que satisfacen $\psi(x,t) = e^{(px-iEt)/\hbar}$ y no tienen cuantización en el momento [7]. A pesar de lo anterior, solo estamos interesados en t=0. Por otro lado, note que se cumple (bajo el espacio de Hilbert de funciones L_2 bajo el producto escalar habitual $< f, f> = \int_R ff *dx$), la relación de Parseval (las transformaciones entre el espacio de momento y posición son transformaciones unitarias, es decir preservan la estructura del espacio de Hilbert, físicamente quiere decir que representan la misma información [1] [1]):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(p,t)|^2 dp$$
 (17)

Por lo que ambos espacios representan la misma realidad física, pero en representaciones de momento o de posición, entonces es claro que $|\psi(p,t)|^2 dp$ representan la probabilidad de encontrar la partícula con momento entre p y p + dp en el instante de tiempo t [1].

Finalmente, hallemos para t = 0 la representación en momento:

$$\phi(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ipx/\hbar} dx$$

$$\phi(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} A e^{-x^2/a^2} e^{-ipx/\hbar} dx = A \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2 - ipx/\hbar} dx$$

$$\phi(p,0) = A \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2/a^2 + ipx/\hbar + (\frac{ipa}{2\hbar})^2)} \cdot e^{(\frac{ipa}{2\hbar})^2} dx$$

$$\phi(p,0) = \frac{A e^{(\frac{ipa}{2\hbar})^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2/a^2 + ipx/\hbar + (\frac{ipa}{2\hbar})^2)} dx$$

$$(18)$$

Utilizando la clásica integral gaussiana $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+bx+c)} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}-c}$ [1], se llega a:

$$\phi(p,0) = \frac{Ae^{(\frac{ipa}{2\hbar})^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\pi}{1/a^2}} e^{\frac{(ip/\hbar)^2}{4(1/a^2)} - \frac{ipa}{2\hbar}} = \frac{Ae^{(\frac{ipa}{2\hbar})^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\pi a^2} e^{(\frac{ipa}{2\hbar})^2 - \frac{ipa}{2\hbar}}$$

$$\phi(p,0) = \frac{Ae^{-p^2/(\frac{2\hbar}{a})^2}}{\sqrt{2\hbar}} ae^{-p^2/(\frac{2\hbar}{a})^2 - \frac{ipa}{2\hbar}} = \frac{Ae^{-\frac{ipa}{2\hbar}}}{\sqrt{2\hbar}} ae^{-2p^2/(\frac{2\hbar}{a})^2} = \frac{Ae^{-\frac{ipa}{2\hbar}}}{\sqrt{2\hbar}} ae^{-2p^2/(\frac{2\hbar}{a})^2}$$

$$(19)$$

La ecuación 19, indica que σ_p debe cumplir:

$$\frac{2\sigma_p^2}{\left(\frac{2\hbar}{a}\right)^2} = \frac{1}{2}$$

$$\frac{\sigma_p^2}{\left(\frac{2\hbar}{a}\right)^2} = \left(\frac{1}{2}\right)^2$$

$$\left(\frac{\sigma_p}{\left(\frac{2\hbar}{a}\right)}\right)^2 = \left(\frac{1}{2}\right)^2$$

$$\frac{\sigma_p}{\left(\frac{2\hbar}{a}\right)} = \left(\frac{1}{2}\right)$$

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{a}$$
(20)

Si se iguala a a partir de las ecuaciones 15,20, se llega a que se cumple la cota mínima de incertidumbre, dada por el principio de incertidumbre de Werner Heisenberg [7]:

$$a = \frac{\hbar}{\sigma_p} = 2\sigma_x \to \sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \tag{21}$$

Por lo anterior, los paquetes gaussianos son nombrados como los paquetes de onda en mecánica cuántica que cuentan con menor incertidumbre [7]. Por otro lado, físicamente σ_x, σ_p representan la incertidumbre del paquete de onda, más aún están relacionados con el rango en espacio y momento donde es más probable realizar una medición sobre la partícula, respectivamente $[-\sigma_x, \sigma_x], [-\sigma_p, \sigma_p]$. En concordancia con lo anterior, el resultado de la relación dada por 21, indica que la incertidumbre del momento y la posición de una partícula no son independientes, más ambas son inversamente proporcionales, por lo que si se mide una con precisión en la otra variable se perderá casi completamente la información. Esto nos indica la restricción que nos da la naturaleza para hacer mediciones a nivel cuántico y la no definición a escalas microscópicas de estas variables.

3. Valores esperados y constante de normalización

Una partícula se encuentra representada por la función de onda:

$$\psi(x,0) = A(a^2 - x^2) \text{ si } x \in [-a,a] \text{ y 0 fuera del intervalo}$$
 (22)

- a) Encuentre la constante de normalización
- b) ¿Cuál es el valor esperado de x?
- c) ¿Cuál es el valor esperado de p?
- d) ¿Cuál es el valor esperado de x^2 y de p^2 ?
- e) ¿Encuentre el producto de $\sigma_x\sigma_p$. ¿Se cumple el principio de incertidumbre?

Solución 3. a) Para empezar, integre la densidad de probabilidad sobre todo el espacio e iguálela a una (la probabilidad acumulada en el espacio es 1 [7]), es decir:

$$\int_{-a}^{a} |A(a^{2} - x^{2})|^{2} dx = 2A^{2} \int_{-a}^{a} (a^{2} - x^{2})^{2} dx = 2A^{2} \int_{0}^{a} (a^{4} - 2a^{2}x^{2} + x^{4}) dx$$

$$\int_{-a}^{a} |A(a^{2} - x^{2})|^{2} dx = \int_{-a}^{a} |A(a^{2} - x^{2})|^{2} dx$$

$$\int_{-a}^{a} |A(a^{2} - x^{2})|^{2} dx = 2A^{2} [a^{5} - 2a^{2} \frac{1}{3} a^{3} + \frac{1}{5} a^{5}]$$

$$\int_{-a}^{a} |A(a^{2} - x^{2})|^{2} dx = 2A^{2} a^{5} [1 - \frac{2}{3} + \frac{1}{5} = \frac{2}{15} A^{2} a^{5} [15 - 10 + 3] = \frac{16}{15} A^{2} a^{5} = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{15}{16a^{5}}}$$

$$(23)$$

b) A cada observable, se le asocia un operador lineal hermético, en este caso el observable posición está relacionado con el operador x [7]. Utilizando la definición de valor esperado, dada por la mecánica cuántica, se obtiene que [7]:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)x\psi(x,0)dx = A^2 \int_{-a}^{a} (a^2 - x^2)^2 x dx$$
 (24)

Note que $(a^2-x^2)^2x$, es una función impar por lo tanto la parte derecha de la ecuación 24 es 0 y en consecuencia < x > es 0.

c) A cada observable, se le asocia un operador lineal hermético, en este caso el observable momento está relacionado con el operador x [7]. Utilizando la definición de valor esperado, dada por la mecánica cuántica, se obtiene que [7]:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi(x,0)dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)(\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,0)dx$$

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)(\frac{\partial \psi(x,0)}{\partial x})dx = -i\hbar \int_{-a}^{a} A(a^2 - x^2)(\frac{\partial A(a^2 - x^2)}{\partial x})dx =$$

$$\langle p \rangle = -i\hbar A^2 \int_{-a}^{a} (a^2 - x^2)(\frac{\partial (a^2 - x^2)}{\partial x})dx = -i\hbar A^2 \int_{-a}^{a} (a^2 - x^2) - 2xdx$$

$$(25)$$

Note que $(a^2-x^2)-2x$, es una función impar por lo tanto la parte derecha de la ecuación 25 es 0 y en consecuencia es 0.

d) De manera trivial, $\langle x^2 \rangle$ obedece:

$$< x^2> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x^2 \psi(x,0) dx = \int_{-a}^{a} A^2 [a^2-x^2]^2 x^2 dx = 2 \int_{0}^{a} A^2 [a^2-x^2]^2 x^2 dx \\ < x^2> = \int_{-a}^{a} A^2 [a^2-x^2]^2 x^2 dx = 2 A^2 \int_{0}^{a} [a^4-2a^2x^2+x^4] x^2 dx = 2 A^2 \int_{0}^{a} [a^4x^2-2a^2x^4+x^6] dx \\ < x^2> = 2 A^2 [a^4 \frac{1}{3}a^3-2a^2 \frac{1}{5}a^5+\frac{1}{7}a^7] = 2 A^2 a^7 [\frac{1}{3}-\frac{2}{5}+\frac{1}{7}] = 2 A^2 a^7 [\frac{7\cdot 5-3\cdot 2\cdot 7+3\cdot 5}{3\cdot 5\cdot 7}] \\ < x^2> = 2 A^2 a^7 \cdot \frac{35-42+15}{105} = 2 A^2 a^7 \cdot \frac{8}{105} = \frac{16}{105} A^2 a^7 = \frac{16}{105} \frac{15}{16a^5} a^7 = \frac{1}{7}a^2$$

Se obtiene por ende que $< x^2 > es \frac{1}{7}a^2$. Por otro lado, utilizando teoría básica de operadores, se obtiene que $\lceil 7 \rceil < px^2 >$ obedece:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})^2 \psi(x,0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)(-i^2\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}) \psi(x,0) dx$$

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0)(\frac{\partial^2}{\partial x^2}) \psi(x,0) dx = -\hbar^2 \int_{-a}^{a} A(a^2 - x^2) - 2A dx =$$

$$2A^2\hbar^2 \int_{-a}^{a} (a^2 - x^2) dx = 4A^2\hbar^2 \int_{0}^{a} (a^2 - x^2) dx = 4A^2\hbar^2 [a^3 - \frac{1}{3}a^3] = \frac{8\hbar^2 a^3}{3} \cdot \frac{15}{16a^5} = \frac{5}{2} (\frac{\hbar}{a})^2$$

$$(27)$$

Se obtiene por ende que $< p^2 > es \frac{5}{2} (\frac{\hbar}{a})^2$.

e) Utilizando el hecho de que $\sigma_z = \sqrt{\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2}$, donde σ_z es una medida de incertidumbre de un observable asociado al operador z [7]. Se obtiene de manera trivial que la dispersión de los observables, posición y momento son:

$$\sigma_x = \frac{1}{\sqrt{7}}a$$

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{5}{2}}\frac{\hbar}{a}$$
(28)

Más aún se cumple la relación de incertidumbre (como lo esperado) [7]:

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{1}{\sqrt{7}} \sqrt{\frac{5}{2}} \frac{\hbar}{a} = \sqrt{\frac{5}{14}} \hbar \approx 0.597 \hbar > \frac{\hbar}{2}$$
 (29)

4. Modelo de Bohr y átomos hidrogenoides

Usando el modelo de Bohr para átomos hidrogenoides, encuentre la constante de Rydberg y compare la energía del estado base con aquella del átomo de hidrógeno:

- a) Li^{+2}
- b) He^+
- c) Átomo positrónico(cambiar el protón por un positrón en el átomo de hidrógeno)

Solución 4. Deduzcamos, en primera instancia, una expresión cuantitativa para el modelo de Bohr. Para realizar lo anterior, considere en primer lugar los postulados del modelo de Bohr [7]:

- En vez de órbitas continuas, las cuales son permitidas en la mecánica clásica, solo ciertas órbitas circulares y discretas, llamadas estados estacionarios, están permitidas. Los átomos pueden existir solo en ciertos estados estables con energías definidas: E₁, E₂, E₃... etc.
- Las órbitas permitidas (estacionarias) corresponden a aquellas para las cuales el momento angular del electrón es un múltiplo entero de ħ:

$$L = n\hbar \tag{30}$$

Estas relaciones son conocidas como las reglas de cuantización del momento angular de Bohr

■ Mientras un electrón permanezca en una órbita estacionaria, no irradia energía electromagnética. La emisión o absorción de radiación puede tomar lugar solo cuando un electrón salta desde una órbita permitida hacia otra. La radiación correspondiente emitida por la transición del electrón desde una órbita de energía E_n permitida hacia otra E_m es transmitida a través de un fotón de energía:

$$h\nu = E_n - E_m \tag{31}$$

Partiendo de estos postulados físicos, deduzcamos un modelo para cuantificar la energía. Para esto, note que se cumple la siguiente relación:

$$F_e = m_e a_r = m_e v^2 / r = \frac{e \cdot Ze}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$
 (32)

Donde se ha supuesto que la única fuerza de interacción entre el núcleo (positivo) y el único electrón orbitando alrededor de este mismo (el átomo es hidrogenoide), es la fuerza electro-estática de interacción entre el núcleo y el electrón (se ha despreciado la gravedad, ya que esta misma es despreciable a estas escalas), más aún se ha supuesto que la masa del núcleo es muchísimo mayor que la del electrón (aproximación altamente válida) y que se ha omitido la notación vectorial de la fuerza, dado que la aceleración y la fuerza tienen el mismo sentido, dado que las cargas son opuestas [7]. Ahora, si se utiliza el postulado de la cuantización del momento angular, $L=n\hbar=m_e v r$, más aún $m_e v^2/r=n^2\hbar^2/(m_e r^3)$, que combinados con la ecuación

anterior, resulta en la siguiente regla de cuantización para el radio del electrón (distancia del núcleo atómico al electrón):

$$r_n = (\frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2 Z})n^2 = n^2 a_0 \tag{33}$$

Donde a_0 se define como el radio de Bohr y es aproximadamente a $a_0 = 0.053nm$ [7]. La velocidad del electrón puede ser obtenida a través de la relación anterior y de la cuantización del momento angular, dando como resultado:

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{1}{n\hbar} \tag{34}$$

La energía total del electrón está dada entonces por:

$$E_n = \frac{1}{2}m_e v_n^2 - \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{35}$$

Note que la fuerza electrostática se puede igualar a la energía cinética como $\frac{e^2Z}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n} \to \frac{e^2Z}{4\pi\epsilon_0 r_n} = m_e v_n^2 \to K = \frac{\frac{e^2Z}{4\pi\epsilon_0 r_n}}{r_n}$, por ende:

$$E_n = -Z\frac{1}{2}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}) = -(\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0})\frac{1}{r_n} = -(\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0})\cdot(\frac{m_e e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}) = -Z^2\cdot\frac{m_e}{2\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0})^2\cdot\frac{1}{n^2} = \frac{-RZ^2}{n^2}$$

Donde R es la constante de Rydberg [7]. El significado físico de R es el valor de energía en el estado base (n=1) para el átomo de hidrógeno. Por otro lado, el signo negativo indica que el sistema está ligado, más aún el hecho de que la energía escale de acuerdo a Z^2 indica que a mayor carga tenga el núcleo, más ligado estará el electrón hacia el núcleo. Por último, se puede demostrar que la constante de Rydberg es 13.6eV [7].

- a) El núcleo del litio, L_i^{2+} (núcleo con carga 3e+y electrón girando alrededor del núcleo), tiene carga 3e, por ende $E_1=-3^2R\approx -9\cdot 13, 6=-122eV$
- b) El núcleo de Helio, He^+ (núcleo con carga 2e+ y electrón girando alrededor del núcleo), tiene carga 2e, por ende $E_1=-2^2R\approx -4\cdot 13=-54,4eV$
- c) En este caso, la deducción anterior no es válida, ya que el núcleo, no en este caso, se debe remplazar la masa del electrón por la masa reducida μ del sistema, dado que la masa del núcleo y la del electrón son comparables. Lo anterior es justificado por la teoría de la mecánica clásica [7] [5]. Aplicando lo anterior, se puede demostrar (se invita al lector hacerlo) que la fórmula se modifica de la siguiente manera:

$$E_n = -\frac{Z^2}{1 + m_e/M} \frac{R}{n^2} \tag{37}$$

Donde M corresponde a la masa del núcleo, en este caso la masa del núcleo es la misma masa del electrón, por lo tanto, $E_1 = -\frac{R}{1+1} = -\frac{R}{2} \approx$

-6,80eV. Note que la fórmula anterior se reduce a la encontrada originalmente cuando M^{*}m_e, hipótesis válida para la deducción anterior, ya que m_p m_e . Por otro lado, que la energía base sea la mitad de la del átomo de hidrógeno, nos indica que este sistema está menos ligado, por lo tanto, de cierta manera, el átomo positrónico es menos estable. Por otro lado, en este sistema semi-clásico, tanto el positrón como el electrón estarían girando alrededor del centro de masa (específicamente ambos están separados a₀ del núcleo como se justificará más adelante), más aún el hecho de que la energía de ligadura sea menor es consecuencia de que los átomos estén más separados entre sí, específicamente el doble, es decir, 2 veces el radio de Bohr. Lo anterior se justifica por la fórmula $r_n = (1 + \frac{m_e}{M}) \frac{a_0}{Z} n^2$, que al considerar $Z=1, n=1, M=m_e$ nos da $2a_0$ (separación entre e^+ $y e^{-}$). Por último, note que los átomos hidrogenoides Li^{+2} , He^{+} , tienen una energía de ligadura mayor a la del átomo de hidrógeno, físicamente esto significa que estos estados son más estables, más aún este hecho se justifica por la mayor interacción electroestática entre el núcleo y su electrón asociado.

Referencias

- [1] G. B. Arfken, H. J. Weber, and F. E. Harris. *Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide*. Academic press, 2011.
- [2] M. Church and M. Bałucińska-Church. Results of a lmxb survey: Variation in the height of the neutron star blackbody emission region. Astronomy & Astrophysics, 369(3):915-924, 2001.
- [3] R. Durrett. *Probability: theory and examples*, volume 49. Cambridge university press, 2019.
- [4] R. H. Landau, M. J. Páez, and C. C. Bordeianu. *Computational physics: Problem solving with Python*. John Wiley & Sons, 2024.
- [5] E. Moulton. H. goldstein, classical mechanics. 1952.
- [6] N. Suzuki and M. Fukugita. Blackbody stars. *The Astronomical Journal*, 156(5):219, 2018.
- [7] N. Zettili. Quantum mechanics: concepts and applications. 2009.