Evaluación II. Mecánica Cuántica

Rubén Carrión Castro

Octubre 2024

1. **Considera una partícula confinada en un pozo de potencial 1-dim de anchura a y altura infinita.**

   (a) **Encuentra los valores posibles de la energía de la partícula y sus autoestados correspondiente.**

   (b) **Halla el valor esperado de la posición X y su incertidumbre ΔX en cualquier estado de energía bien definida.**

   (c) **Encuentra los valores máximo y mínimo de la incertidumbre en la posición de la partícula en cualquier estado de energía bien definida.**

   (d) **Halla el valor esperado del momento P y su incertidumbre ΔP en cualquier estado de energía bien definida.**

   (e) **Encuentra el producto de incertidumbre $\Delta X \Delta P$ para el estado fundamental y para todos los estados excitados. ¿Se cumple el principio de incertidumbre de Heisenberg?**

Tenemos el problema de una partícula encerrada en un pozo de potencial infinito de anchura a. Ver Figure 1.

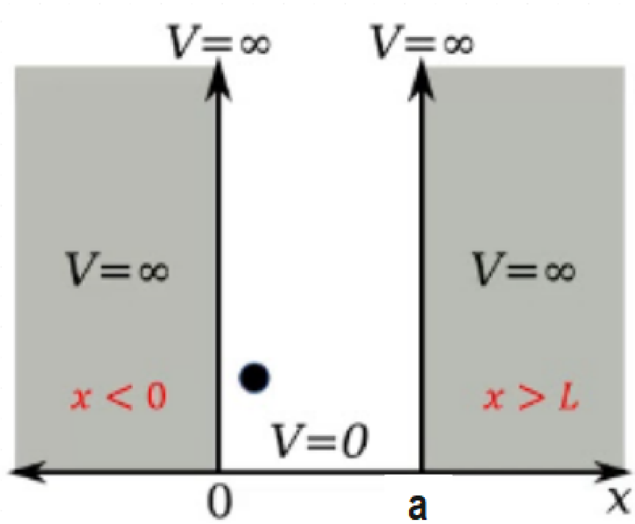

Figure 1: Pozo de potencial infinito de anchura a.

donde se considera que el valor mínimo del potencial es $V = 0$, pues no nos dicen nada.

Sabemos que el Hamiltoniano de una partícula libre sometida a un potencial 1-dim es,

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

El potencial lo podemos ver como una función a trozos, tal que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 < x < a \\ \infty & \text{si no} \end{cases}$$

Apartado (a)

Una vez visto el potencial, tenemos que el Hamiltoniano diverge fuera del pozo, por tanto vamos a trabajar dentro de este, así tenemos que

$$H = \frac{P^2}{2m} \qquad \text{si } 0 < x < a$$

Sabemos que la energía son los autovalores del Hamiltoniano, por tanto, deberemos de resolver la ecuación de autovalores siguiente,

$$H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$$

donde los $|\Psi_n\rangle$ son los autoestados de las energías.

Debemos pasar a representación de coordenadas para poder trabajar más fácilmente, para ello hacemos los cambios siguientes,

$$\begin{cases} |\Psi_n\rangle & \rightarrow & \Psi_n(x) \\ P & \rightarrow & i\hbar\frac{d}{dx} \\ P^2 & \rightarrow & -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} \end{cases}$$

Por tanto, tenemos la ecuación de autovalores como,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_n(x)}{dx^2} = E_n\Psi_n(x)$$

Tenemos una ecuación diferencial cuya solución es

$$\Psi_n(x) = Ae^{\pm ikx} = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx}$$

donde $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Imponemos las condiciones de contorno, que son

$$\begin{cases} (i) & \Psi(x=0) = 0 \\ (ii) & \Psi(x=a) = 0 \end{cases}$$

Por tanto,

$$\Psi(x=0) = A_1 + A_2 = 0 \Longrightarrow A_1 = -A_2$$

y también

$$\Psi(x=a) = A_1e^{ika} + A_2e^{-ika} = A_1e^{ika} - A_1e^{-ika} = 2iA_1\sin(ka) = 0 \Longrightarrow \sin(ka) = 0 \Longrightarrow ka = n\pi, \ \ n \in \mathbb{Z}$$

Por tanto, $k = \frac{n\pi}{a}$, pero sabemos que $k = \sqrt{2mE_n}/\hbar$, por tanto los posibles valores de la energía serán,

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2}, \qquad n \in \mathbb{N}$$

donde ahora n pertenece a los naturales (sin el cero), puesto que si n fuera entero, tendríamos valores dobles de la energía y si fuera cero, tendríamos energía igual a cero, cosa que carece de sentido físico, ya que, de algún modo, violaría el Principio de Incertidumbre, pues tendríamos la posición y la velocidad de la partícula bien definidas.
Tenemos que

$$\Psi(x) = 2iA\sin(kx) \equiv B\sin(kx)$$

Como debe estar normalizada,

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 = B^2 \int_0^a dx \sin^2(kx) = B^2 \left\{ \int_0^a dx \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2}\int_0^a dx\cos(2kx) \right\} =$$

$$= B^2 \left\{ \tfrac{a}{2} - \tfrac{1}{2}\left[\cancelto{0}{\sin(2ka)} - \cancelto{0}{\sin(0)} \right] \right\} = B^2 \tfrac{a}{2} = 1$$

Por tanto, $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Luego, los autoestados de la energía son,

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(kx)$$

Apartado (b)

Como estamos en representación de coordenadas, el valor esperado de X vendrá dado por

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\Psi(x)|^2 x = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x) x \Psi(x)$$

Por tanto, el valor esperado de la posición será

$$\begin{aligned}
\langle X \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x) x \Psi(x) = \tfrac{2}{a}\int_0^a dx \sin^2(kx) x = \tfrac{1}{a}\left[\int_0^a x dx - \int_0^a x\cos(2kx) dx \right] = \\
&= \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^2}{2} - \int_0^a x\cos(2kx)dx \right] = \left\{ \begin{matrix} u = x & \to & du = dx \\ dv = \cos(2kx)dx & \to & v = \frac{\sin(2kx)}{2k} \end{matrix} \right\} = \\
&= \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^2}{2} - \left(\left[x\tfrac{\sin(2kx)}{2k} \right|_0^a - \int_0^a \tfrac{\sin(2kx)}{2k} dx \right) \right] = \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^2}{2} - \left(a\tfrac{\sin(2ka)}{2k} + \tfrac{\cos(2ka)}{4k^2} - \tfrac{1}{4k^2} \right) \right] = \\
&= \tfrac{a}{2} - \tfrac{\sin(2ka)}{2k} + \tfrac{\cos(2ka)}{4k^2 a} - \tfrac{1}{4k^2 a}
\end{aligned}$$

Usando la condición de contorno, $ka = n\pi$, tenemos que

$$\langle X \rangle = \frac{a}{2} - \cancelto{0}{\frac{\sin(2n\pi)}{2k}} + \cancelto{0}{\frac{\cos(2n\pi)}{4k^2 a} - \frac{1}{4k^2 a}} = \frac{a}{2}$$

Una vez obtenido el valor esperado de X, calculamos su incertidumbre usando que

$$\Delta X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

Para calcularla, debemos calcular el valor esperado de X^2, tal que

$$\begin{aligned}\langle X^2\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\Psi^*(x)x^2\Psi(x) = \tfrac{2}{a}\int_0^a dx\sin^2(kx)x^2 = \tfrac{1}{a}\left[\int_0^a x^2dx - \int_0^a x^2\cos(2kx)dx\right] = \\
&= \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^3}{3} - \int_0^a x^2\cos(2kx)dx\right] = \begin{Bmatrix} u = x^2 & \rightarrow & du = 2xdx \\ dv = \cos(2kx)dx & \rightarrow & v = \frac{\sin(2kx)}{2k}\end{Bmatrix} = \\
&= \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^3}{3} - \left(\left[x^2\tfrac{\sin(2kx)}{2k}\right|_0^a - \int_0^a \tfrac{\sin(2kx)}{2k}2xdx\right)\right] = \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^3}{3} - a^2\tfrac{\sin(2ka)}{2k} + \int_0^a \tfrac{\sin(2kx)}{2k}2xdx\right] = \\
&= \begin{Bmatrix} u = 2x & \rightarrow & du = 2dx \\ dv = \sin(2kx)dx & \rightarrow & v = -\frac{\cos(2kx)}{2k}\end{Bmatrix} = \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^3}{3} - -a^2\tfrac{\sin(2ka)}{2k} + \tfrac{1}{2k}\left(-2x\tfrac{\cos(2kx)}{2k}\Big|_0^a + \int_0^a \tfrac{\cos(2kx)}{2k}2dx\right)\right] = \\
&= \tfrac{1}{a}\left[\tfrac{a^3}{3} - a^2\tfrac{\sin(2ka)}{2k} - 2a\tfrac{\cos(2ka)}{4k^2} + \tfrac{\sin(2ka)}{4k^3} - 0\right] = \tfrac{a^2}{3} - a\tfrac{\sin(2ka)}{2k} - \tfrac{\cos(2ka)}{2k^2} + \tfrac{\sin(2ka)}{4k^3a}\end{aligned}$$

Usando la condición de contorno, $ka = n\pi$, tenemos que

$$\langle X^2\rangle = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2k^2}\frac{a^2}{a^2} = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)$$

Por tanto, la incertidumbre queda

$$\Delta X = \sqrt{a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right) - \frac{a^2}{4}} = a\sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)}$$

Apartado (c)

Sabemos que

$$\Delta X = a\sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)}$$

con $n \in \mathbb{N}$.

Por tanto, el valor mínimo de la incertidumbre será para n=1, pues el segundo término está restando, quedando como resultado,

$$\Delta X_{min} = a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} \approx 0.18a$$

El valor máximo será para $n \to \infty$, tal que

$$\Delta X_{max} = \lim_{n\to\infty} a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}} = a\sqrt{\frac{1}{12}} \approx 0.29a$$

Apartado (d)

El valor esperado del momento viene dado por

$$\langle P\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p|\overline{\Psi}(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi}^*(p) p \overline{\Psi}(p) dp$$

donde $\overline{\Psi}(p)$ es la función de ondas en la representación de momentos. Podemos pasar a representación de coordenadas, tal que

$$\langle P\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi}^*(p) p \overline{\Psi}(p) dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi(x) dx$$

Usando que $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(kx)$, calculamos el valor esperado del momento,

$$\begin{aligned} \langle P\rangle &= \textstyle\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi(x) dx = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a \sin(kx) \frac{d}{dx}(\sin(kx)) dx = \\ &= \textstyle -i\hbar \frac{2k}{a} \int_0^a \sin(kx)\cos(kx) dx = -i\hbar \frac{2k}{a} \frac{\sin^2(ka)}{k} = 0 \end{aligned}$$

donde hemos usado que $ka = n\pi$. Así tenemos que $\langle P\rangle = 0$.

Ahora calculamos la incertidumbre de P, que viene dada por

$$\Delta P = \sqrt{\langle P^2\rangle - \langle P\rangle^2} = \sqrt{\langle P^2\rangle}$$

Por tanto, calculamos el valor esperado de P^2,

$$\begin{aligned} \langle P\rangle &= \textstyle\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \left(\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \Psi(x) dx = \hbar^2 \frac{2}{a} \int_0^a \sin(kx) \frac{d^2}{dx^2}(\sin(kx)) dx = \\ &= \textstyle\hbar^2 \frac{2k}{a} \int_0^a \sin(kx) \frac{d}{dx} \cos(kx) dx = -\hbar^2 \frac{2k^2}{a} \int_0^a \sin^2(kx) dx = \\ &= \textstyle -\frac{2k^2\hbar^2}{a} \int_0^a \left[\frac{1}{2} - \frac{\cos(2kx)}{2}\right] dx = -\frac{2k^2\hbar^2}{a} \left[\frac{a}{2} - \frac{\sin(2ka)}{2k}\right] = k^2\hbar^2 = 2mE_n \end{aligned}$$

donde hemos usado que $ka = n\pi$ y $k = \sqrt{2mE_n}/\hbar$. Por tanto, la incertidumbre del momento es

$$\Delta P = \sqrt{2mE_n} = k\hbar$$

Apartado (e)

Ahora nos piden hacer el producto de ambas incertidumbres para el estado fundamental, es decir, para $n = 1$, que sabemos que $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. Así tenemos,

$$\Delta X \Delta P = \cancel{a}\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}\sqrt{\cancel{2m}\frac{\pi^2\hbar^2}{\cancel{2m}\cancel{a^2}}} = \sqrt{\frac{\pi^2\hbar^2}{12} - \frac{\cancel{\pi^2}\hbar^2}{2\cancel{\pi^2}}} = \hbar\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} \approx 0.56\hbar$$

que como es del orden de $\hbar$ se cumple el Principio de Incertidumbre.

Veamos el producto en general,

$$\Delta X \Delta P = \cancel{a}\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}\sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{\cancel{a^2}}} = \sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{12} - \frac{\cancel{n^2}\cancel{\pi^2}\hbar^2}{2\cancel{n^2}\cancel{\pi^2}}} = \hbar\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}}$$

Es claro ver, que para cualquier $n \in \mathbb{N}$ (sin el cero) se va a cumplir el Principio de Incertidumbre de Heisenberg. Además, podemos ver que si $n \to \infty$, el producto se va al infinito. Esto tiene sentido, ya que, al considerar un estado tan altamente excitado, o bien la posición se encuentra en el infinito, o bien el momento se vuelve infinito, o incluso ambos.