C.Física Moderna: Solución Taller 10

Introducción a la ecuación de Schrödinger 2

1 Normalización y valores esperados en 1D

Se tiene la siguiente función de onda para un partícula:

$$\psi(x,t) = A\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + \frac{ip_0x}{\hbar} + i\omega_0 t\right)$$

1. Calcule la constante de normalización A.
2. Calcule el valor esperado de la posición.
3. Calcule el valor esperado del momento.

SOLUCIÓN

1.1 La condición de normalización es:

$$\int_{\mathbb{R}} \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = 1 \tag{1}$$

Se calcula el conjugado complejo de ψ:

$$\psi(x,t)^* = A\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} - \frac{ip_0x}{\hbar} - i\omega_0 t\right) \tag{2}$$

Por lo que:

$$\psi^*(x,t)\psi(x,t) = A^2\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) \tag{3}$$

Se inserta la expresión anterior en la condición de normalización. Luego se hace el cambio de variable $u = (x-x_0)/\sqrt{2}a$ y por tanto el diferencial transforma como $du = dx/\sqrt{2}a$. El resultado es:

$$\int_{\mathbb{R}} A^2\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right)dx = A^2\sqrt{2}a\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-u^2}du \tag{4}$$

La integral que queda es conocida (integral gaussiana) y da $\sqrt{\pi}$. Por lo que la constante de normalización es:

$$A^2 = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \tag{5}$$

1.2 Para calcular el valor esperado se calcula la siguiente integral:

$$\langle x\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} x\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right)dx \tag{6}$$

Para ello se hace nuevamente el cambio de variable $u = (x-x_0)/\sqrt{2}a$, de donde se despeja $x = \sqrt{2}au + x_0$. La integral es:

$$\frac{1}{a\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} x\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right)dx = \frac{\sqrt{2}a}{a\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} (\sqrt{2}au + x_0)\mathrm{e}^{-u^2}du \tag{7}$$

La integral $\int u\mathrm{e}^{-u^2}du$ es de una función impar por lo que es cero. La integral que falta es la guassiana por lo que:

$$\langle x\rangle = x_0 \tag{8}$$

1.3

$$\langle p \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x,t) p \psi(x,t) dx = -i\hbar \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x,t) \frac{d}{dx} \psi(x,t) dx \tag{9}$$

$$\frac{d}{dx}\psi(x,t) = A\left(-\frac{x-x_0}{2a^2} - \frac{ip_0}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} - \frac{ip_0 x}{\hbar} - i\omega_0 t\right) \tag{10}$$

$$\langle p \rangle = -\frac{i\hbar}{a\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \, \left(-\frac{x-x_0}{2a^2} - \frac{ip_0}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) \tag{11}$$

Ambas integrales se hacen con la misma sustitución u que se usó en los incisos anteriores. La primera integral da cero y la segunda es una guassiana.

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, \frac{x-x_0}{2a^2} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) = 0 \tag{12}$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) = a\sqrt{2\pi} \tag{13}$$

Con los resultado anteriores se tiene:

$$\langle p \rangle = p_0 \tag{14}$$

---

2 Valor esperado en 3D

Una electrón está sujeto a la siguiente energía potencial:

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} \tag{15}$$

Donde $r = |\vec{r}|$. En su estado base el electrón tiene la siguiente función de onda definida sobre todo $\mathbb{R}^3$:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}$$

Donde $a = \hbar^2/(m_e e^2)$. Calcule $\langle V \rangle$, el valor esperado de la energía potencial en el estado base.

SOLUCIÓN

El valor esperado de V se obtiene calculando la siguiente integral:

$$\langle V \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3 r \tag{16}$$

Es conveniente realizar esta integral en coordenadas esféricas. El diferencial de volumen en coordenadas esféricas es $d^3r = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$, donde θ es el ángulo polar y φ el azimutal. Con esto:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3 r = \frac{e^2}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \int_0^{\infty} r\mathrm{e}^{-2r/a} \, dr \tag{17}$$

Las primeras dos integrales son básicas y dan en total 4π. La integral radial se hace por método de sustitución. El resultado es:

$$\langle V \rangle = -\frac{e^2}{a} = -\frac{m_e e^2}{\hbar^2} \tag{18}$$

---

3 Valor esperado del momento

Una partícula atrapada en un pozo de potencial infinito tiene la siguiente función de onda:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) & x \in [0, L] \\ 0 & x \notin [0, L] \end{cases} \tag{19}$$

1. Calcule Δp.
2. Calcule Δx.
3. Calcule $\Delta x \Delta p$. ¿Se cumple el principio de incertidumbre $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$?.

SOLUCIÓN

3.1 La desviación estándar se calcula con la siguiente relación:

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \tag{20}$$

Entonces lo que se debe hacer es calcular las siguientes integrales:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) p^2 \psi(x) dx = -\hbar^2 \int_0^L \psi^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx \tag{21}$$

$$\langle p \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) p \psi(x) dx = -i\hbar \int_0^L \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx \tag{22}$$

donde se usó que $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Estas dan:

$$\langle p^2 \rangle = \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^2 \left(\frac{2}{L} \int_{\mathbb{R}} dx \ \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right) \tag{23}$$

$$\langle p \rangle = -\frac{4\pi i\hbar}{L} \int_{\mathbb{R}} dx \ \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \tag{24}$$

Las integrales que quedan se pueden hacer por inspección. La primera entre parentesis esta dada por la condición de normalización y la segunda al integral $\sin(\alpha x)\cos(\alpha x)$ sobre un periodo es cero. Por lo que:

$$\langle p^2 \rangle = \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^2 \tag{25}$$

$$\langle p \rangle = 0 \tag{26}$$

Por lo que la desviación estándar es:

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L} \tag{27}$$

3.2 La desviación estándar se calcula con la siguiente relación:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \tag{28}$$

Entonces lo que se debe hacer es calcular las siguientes integrales:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = \int_0^L \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx \tag{29}$$

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_0^L \psi^*(x) x \psi(x) dx \tag{30}$$

Estas dan:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_{\mathbb{R}} dx \; x^2 \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \tag{31}$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L} \int_{\mathbb{R}} dx \; x \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \tag{32}$$

Las integrales se calculan integrando por partes:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \frac{(8\pi^2 - 3)L^3}{48\pi^2} = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{8\pi^2}\right) \tag{33}$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{L} \frac{L^2}{4} = \frac{L}{2} \tag{34}$$

Con esto la desviación estándar es:

$$\Delta x = \frac{L}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}} \tag{35}$$

3.3 El producto de las incertidumbres es:

$$\Delta x \Delta p = \pi\hbar \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}} \tag{36}$$

El principio de incertidumbre de Heisenberg ya que el producto de las varianzas es mayor a $\hbar/2$:

$$\Delta x \Delta p \approx \frac{\pi\hbar}{2} > \frac{\hbar}{2} \tag{37}$$
