

Física III A - Guía N° 4

Cuántica formal

- 1) Escriba y explique los postulados de la Teoría Cuántica.

Solución :

Los postulados de la teoría cuántica pueden expresarse como:

- i) El estado de una partícula se representa mediante una función de onda normalizada $\psi(x, t)$.
- ii) Las magnitudes observables $Q(x, p, t)$ se representan mediante operadores hermíticos, $\hat{Q}(\hat{x}, \hat{p}, t)$. El valor medio en el estado $\psi(x, t)$ es

$$\int \psi^*(x, t) \hat{Q} \psi(x, t) dx$$

- iii) En la medición de un observable Q se tendrá la certeza de obtener el valor q si, y solo si, $\psi(x, t)$ es una autofunción de $\hat{Q}$ con autovalor q . Si $\psi(x, t)$ no es autofunción de $\hat{Q}$, la probabilidad de obtener el autovalor q en una medición es $|\lambda|^2$, donde λ es la componente de $\psi(x, t)$, expresada esta en la base ortonormal de autofunciones de $\hat{Q}$.
-

- 2) Basándose en los postulados de la mecánica cuántica, obtenga los operadores asociados con las siguientes magnitudes físicas:

- a) La posición.
- b) La cantidad de movimiento.
- c) La energía cinética.
- d) La energía total.
- e) El momento angular.

Solución :

- a) $\hat{x} = x$
- b) $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$
- c) Clásicamente, $E_c = \frac{p^2}{2m}$. Entonces,

$$\hat{E}_c = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

- d) La energía total es, en física clásica

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

de manera que

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

3) El estado de una partícula en un pozo infinito de longitud a está dado por

$$\Psi_n(x, t) = \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

donde

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

- a) Calcular el valor medio de la energía, $\langle \hat{H} \rangle$.
- b) Calcular la dispersión de la energía, σ_H .
- c) ¿Que características tiene el estado?

Solución:

- a) Valor medio de la energía:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \hat{H} \Psi_n(x, t) dx \\ &= \int_0^a \varphi_n^*(x) e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \hat{H} \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} dx \\ &= \int_0^a \varphi_n^*(x) e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \hat{H} \varphi_n(x) dx \\ &= \int_0^a \varphi_n^*(x) \hat{H} \varphi_n(x) dx \end{aligned}$$

pero como $\varphi_n(x)$ es solución de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, se cumple que $\hat{H} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$ de manera que se puede escribir

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \int_0^a \varphi_n^*(x) \hat{H} \varphi_n(x) dx = \int_0^a \varphi_n^*(x) E_n \varphi_n(x) dx \\ &= E_n \int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx = E_n \int_0^a |\varphi_n(x)|^2 dx \\ &= E_n \end{aligned}$$

- b) La dispersión en la energía se puede calcular como

$$\sigma_H^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2$$

donde

$$\langle \hat{H} \rangle^2 = \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{H} \rangle = E_n^2$$

y

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \hat{H}^2 \Psi_n(x, t) dx = \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \hat{H} [\hat{H} \Psi_n(x, t)] dx$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^a \varphi_n^*(x) e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \hat{H} \left[\hat{H} \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \right] dx = \int_0^a \varphi_n^*(x) e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \hat{H} [E_n \varphi_n(x)] dx \\
&= \int_0^a \varphi_n^*(x) E_n \hat{H} [\varphi_n(x)] dx = \int_0^a \varphi_n^*(x) E_n^2 \varphi_n(x) dx = E_n^2 \int_0^a \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx \\
&= E_n^2
\end{aligned}$$

Así,

$$\sigma_H^2 = E_n^2 - E_n^2 = 0$$

4) El estado de un electrón en un pozo infinito de longitud $a = 3\text{\AA}$ está dado por

$$\Psi(x, t) = c_1 \varphi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t}$$

donde

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

- a) Calcular c_1 .
- b) Calcular el valor medio de la energía, $\langle \hat{H} \rangle$.
- c) Calcular la dispersión de la energía, σ_H .
- d) ¿Que características tiene el estado?

Solución:

- a) Se calcula c_1 a partir de la condición de normalización:

$$\int_0^a |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Entonces

$$\begin{aligned}
\int_0^a |\Psi(x, t)|^2 dx &= \int_0^a \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \\
&= \int_0^a \left[c_1^* \varphi_1^*(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} \right] \left[c_1 \varphi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \right] dx \\
&= \int_0^a [c_1^* \varphi_1^*(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} c_1 \varphi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + c_1^* \varphi_1^*(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} c_1 \varphi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t}] dx \\
&= \int_0^a c_1^* \varphi_1^*(x) c_1 \varphi_1(x) dx + e^{i(\frac{E_1 - E_2}{\hbar} t)} \int_0^a c_1^* \varphi_1^*(x) \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) dx + \\
&\quad + e^{i(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t)} \int_0^a \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) c_1 \varphi_1(x) dx + \int_0^a \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= |c_1|^2 \int_0^a \varphi_1^*(x) \varphi_1(x) dx + e^{i(\frac{E_1-E_2}{\hbar})t} c_1^* \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^a \varphi_1^*(x) \varphi_2(x) dx + \\
&+ e^{i(\frac{E_2-E_1}{\hbar})t} \frac{1}{\sqrt{3}} c_1 \int_0^a \varphi_2^*(x) \varphi_1(x) dx + \frac{1}{3} \int_0^a \varphi_2^*(x) \varphi_2(x) dx \\
&= |c_1|^2 \delta_{11} + e^{i(\frac{E_1-E_2}{\hbar})t} c_1^* \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{12} + e^{i(\frac{E_2-E_1}{\hbar})t} \frac{1}{\sqrt{3}} c_1 \delta_{21} + \frac{1}{3} \delta_{22} \\
&= |c_1|^2 + \frac{1}{3} \\
&= 1
\end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned}
|c_1|^2 &= \frac{2}{3} \\
c_1 &= \sqrt{\frac{2}{3}}
\end{aligned}$$

b) El valor medio de la energía es (muchas cuentas son similares a las de a))

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \int_0^a \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) dx \\
&= \int_0^a \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) e^{i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i\frac{E_2}{\hbar}t} \right] \hat{H} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \right] dx \\
&= \int_0^a \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) e^{i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i\frac{E_2}{\hbar}t} \right] \left[\sqrt{\frac{2}{3}} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \hat{H} \varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \hat{H} \varphi_2(x) \right] dx \\
&= \int_0^a \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) e^{i\frac{E_1}{\hbar}t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i\frac{E_2}{\hbar}t} \right] \left[\sqrt{\frac{2}{3}} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} E_1 \varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} E_2 \varphi_2(x) \right] dx \\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) \sqrt{\frac{2}{3}} E_1 \varphi_1(x) dx + e^{i(\frac{E_1-E_2}{\hbar})t} \int_0^a \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) \frac{1}{\sqrt{3}} E_2 \varphi_2(x) dx \\
&+ e^{i(\frac{E_2-E_1}{\hbar})t} \int_0^a \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) \sqrt{\frac{2}{3}} E_1 \varphi_1(x) dx + \int_0^a \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) E_2 \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) dx \\
&= \frac{2}{3} E_1 \delta_{11} + e^{i(\frac{E_1-E_2}{\hbar})t} \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} E_1 \delta_{12} + e^{i(\frac{E_2-E_1}{\hbar})t} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{2}{3}} E_2 \delta_{21} + \frac{1}{3} E_2 \delta_{22} \\
&= \frac{2}{3} E_1 + \frac{1}{3} E_2
\end{aligned}$$

c) Como en el ejercicio anterior,

$$\sigma_H^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2$$

donde

$$\langle \hat{H} \rangle^2 = \left(\frac{2}{3} E_1 + \frac{1}{3} E_2 \right)^2$$

y (de nuevo, muchas cuentas son similares a las anteriores)

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H}^2 \rangle &= \int_0^a \Psi^*(x, t) \hat{H}^2 \Psi(x, t) dx = \int_0^a \Psi^*(x, t) \hat{H} [\hat{H} \Psi(x, t)] dx \\
&= \int_0^a \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} \right] \hat{H} \left\{ \hat{H} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \right] \right\} dx \\
&= \int_0^a \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} \right] \hat{H} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} E_1 \varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} E_2 \varphi_2(x) \right] dx \\
&= \int_0^a \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_1^*(x) e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} + \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_2^*(x) e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} \right] \left[\sqrt{\frac{2}{3}} e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} E_1^2 \varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} E_2^2 \varphi_2(x) \right] dx \\
&= \frac{2}{3} E_1 \delta_{11} + e^{i(\frac{E_1 - E_2}{\hbar})t} \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} E_1 \delta_{12} + e^{i(\frac{E_2 - E_1}{\hbar})t} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{2}{3}} E_2 \delta_{21} + \frac{1}{3} E_2 \delta_{22} \\
&= \frac{2}{3} E_1^2 + \frac{1}{3} E_2^2
\end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned}
\sigma_H^2 &= \frac{2}{3} E_1^2 + \frac{1}{3} E_2^2 - \left(\frac{2}{3} E_1 + \frac{1}{3} E_2 \right)^2 \\
&= \frac{2}{3} E_1^2 + \frac{1}{3} E_2^2 - \left(\frac{4}{9} E_1^2 + \frac{2}{3} E_1 \frac{1}{3} E_2 + \frac{1}{9} E_2^2 \right) \\
&= \frac{2}{9} E_1^2 - \frac{2}{9} E_1 E_2 + \frac{2}{9} E_2^2 \\
&= \frac{2}{9} (E_1^2 - E_1 E_2 + E_2^2) = \frac{2}{9} (E_1^2 - 2 E_1 E_2 + E_2^2 + E_1 E_2) \\
&= \frac{2}{9} [(E_1 - E_2)^2 + E_1 E_2]
\end{aligned}$$

- 5) (Optativo) En la Teoría Cuántica el Principio de Incerteza entre dos magnitudes físicas (observables) A y B se expresa como

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2$$

donde $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ es el conmutador entre $\hat{A}$ y $\hat{B}$.

- a) Exprese el Principio de Incerteza para x y p_x . Interprete.
b) Exprese el Principio de Incerteza para x y p_y . Interprete.

Solución :

- a) Para expresar según la fórmula anterior, es necesario escribir el conmutador:

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}_x] f(x) &= \left[x \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) - \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) x \right] f(x) \\
&= -i\hbar x \frac{d[f(x)]}{dx} + i\hbar \frac{d[xf(x)]}{dx} \\
&= -i\hbar x \frac{df}{dx} + i\hbar x \frac{df}{dx} + i\hbar f(x) \\
&= i\hbar f(x)
\end{aligned}$$

de modo que $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ y $\langle [\hat{x}, \hat{p}_x] \rangle = i\hbar$ (es solo un número, igual a su valor medio). Luego,

$$\sigma_x^2 \sigma_{p_x}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

o bien

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}$$

b) Ahora tendremos

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_y] f(x, y) &= \left[x \left(-i\hbar \frac{d}{dy} \right) - \left(-i\hbar \frac{d}{dy} \right) x \right] f(x, y) \\ &= -i\hbar x \frac{d[f(x, y)]}{dy} + i\hbar \frac{d[x f(x, y)]}{dy} \\ &= -i\hbar x \frac{df}{dy} + i\hbar x \frac{df}{dy} \\ &= 0 \end{aligned}$$

de modo que $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$ y $\langle [\hat{x}, \hat{p}_y] \rangle = 0$. Luego,

$$\sigma_x^2 \sigma_{p_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} 0 \right)^2 = 0$$

o bien

$$\sigma_x \sigma_{p_y} \geq 0$$

6) ¿Cuáles de las siguientes funciones son autofunciones del momento $\hat{p}_x$?

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= A \sin(kx) \\ \varphi(x) &= A [\cos(kx) + i \sin(kx)] \\ \varphi(x) &= A [e^{ikx} + e^{-ikx}] \\ \varphi(x) &= A [\cos(kx) + \sin(kx)] \\ \varphi(x) &= A e^{ik(x-a)} \\ \varphi(x) &= A [e^{ikx} + i e^{-ikx}] \end{aligned}$$

Solución :

Una función $\varphi(x)$ es autofunción de operador $\hat{p}_x$ si $\hat{p}_x \varphi(x) = p \varphi(x)$. Veamos en cada caso si esto se cumple o no.

i)

$$\hat{p}_x \varphi(x) = -i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx} [A \sin(kx)] = -i\hbar A k \cos(kx)$$

de modo que no es autofunción.

ii)

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \varphi(x) &= -i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx} \{A [\cos(kx) + i \sin(kx)]\} \\ &= i\hbar A k \sin(kx) + \hbar A k \cos(kx) \\ &= \hbar k A [\cos(kx) + i \sin(kx)] \end{aligned}$$

de modo que es autofunción con autovalor $\hbar k$.

- 7) Determine los valores promedio de $\hat{x}$, $\hat{x}^2$, $\hat{p}$ y $\hat{p}^2$ para el estado fundamental y el primer estado excitado de un electrón confinado en un pozo de potencial infinito de ancho a .

Solución :

- i) Valor medio de $\hat{x}$:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \rangle_n &= \int v_n^*(x, t) \hat{x} v_n(x, t) dx \\
 &= \int \varphi_n^*(x) e^{iE_n t/\hbar} \hat{x} \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} dx \\
 &= \int \varphi_n^*(x) \hat{x} \varphi_n(x) dx \\
 &= \int \varphi_n^*(x) x \varphi_n(x) dx \\
 &= \int x |\varphi_n(x)|^2 dx \\
 &= \int_0^a x \left| \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right|^2 dx \\
 &= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx
 \end{aligned}$$

Para calcular esta integral cambio variable: $u = \frac{n\pi}{a}x \Rightarrow du = \frac{n\pi}{a}dx$, $x = 0 \Rightarrow u = 0$ y $x = a \Rightarrow u = n\pi$, de modo que

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{x} \rangle_n &= \frac{2}{a} \int_0^{n\pi} \frac{a}{n\pi} u \sin^2(u) \frac{a}{n\pi} du \\
 &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \left\{ \left[\frac{u^2}{4} - \frac{u \sin(2u)}{4} - \frac{\cos(2u)}{8} \right]_0^{n\pi} \right\} \\
 &= \frac{2a}{(n\pi)^2} \left\{ \left[\frac{(n\pi)^2}{4} - \frac{n\pi \sin(2n\pi)}{4} - \frac{\cos(2n\pi)}{8} \right] - \left[0 - 0 - \frac{\cos(0)}{8} \right] \right\} \\
 &= \frac{2a}{(n\pi)^2} \left\{ \left[\frac{(n\pi)^2}{4} - \frac{1}{8} \right] - \left[-\frac{1}{8} \right] \right\} \\
 &= \frac{a}{2}
 \end{aligned}$$

no depende de n .

- 8) Si $\psi(x)$ es una función de onda normalizada y continua, puede escribirse en términos de las autofunciones $\varphi_j(x)$ de un operador hermítico $\hat{A}$ de la siguiente manera:

$$\psi(x) = \sum_j c_j \varphi_j(x)$$

- a) Obtenga una expresión para los coeficientes c_j .
b) Calcule $\langle \hat{A} \rangle$. Interprete físicamente la cantidad $|c_j|^2$.

Solución :

- a) Como las $\varphi_j(x)$ son autofunciones del operador hermítico $\hat{A}$, forman una base ortonormal (se las puede buscar de tal manera) del espacio de las funciones de onda, de manera que se puede escribir

$$\psi(x) = \sum_j c_j \varphi_j(x)$$

con (ortonormalidad)

$$\int \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) dx = \delta_{ij}$$

Entonces, para obtener el coeficiente c_i del desarrollo puedo hacer

$$\begin{aligned} \int \varphi_i^*(x) \left[\sum_j c_j \varphi_j(x) \right] dx &= \sum_j c_j \left[\int \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) dx \right] \\ &= \sum_j c_j \delta_{ij} \\ &= c_i \end{aligned}$$

- b) El valor medio es

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx \\ &= \int \left[\sum_i c_i^* \varphi_i^*(x) \right] \hat{A} \left[\sum_j c_j \varphi_j(x) \right] dx \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j \left[\int \varphi_i^*(x) \hat{A} \varphi_j(x) dx \right] \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j \left[\int \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) dx \right] \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j a_i \left[\int \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) dx \right] \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j a_i \delta_{ij} = \sum_i c_i^* c_i a_i \\ &= \sum_i |c_i|^2 a_i \end{aligned}$$

- 9) El estado de una partícula, en un pozo de potencial de ancho $a = 3$ nm, y a un instante t , está descrito por la función de onda:

$$\psi(x) = 0.829\varphi_1(x) + 0.518\varphi_2(x) + 0.207\varphi_3(x)$$

- a) Calcule el valor medio de la energía, expresado en eV, y el valor medio de $\hat{p}^2$.
b) Si existen 10^7 sistemas idénticos del tipo descrito ¿Cuántos estarán en el estado $n = 1$?
c) ¿Cuál es el valor de energía más probable en una medición?

- 10) ¿Pueden las ondas planas representar a una partícula libre? Justifique. ¿Que es un paquete de ondas?

11) El estado de una partícula de masa m en un pozo infinito esta dado, a $t = 0$, por

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_1(x) + c_4\varphi_4(x)$$

a) Hallar c_4 .

b) Calcular $\langle E \rangle$ y σ_E . Interprete.

Solución :

a) Sabemos que si $\varphi_j(x)$ son autofunciones del operador de energía $\hat{H}$, y

$$\psi(x) = \sum_j c_j \varphi_j(x)$$

se puede calcular

$$\langle E \rangle = \sum_j |c_j|^2 E_j$$

Entonces, en este caso,

$$\langle E \rangle = (0.829)^2 E_1 + (0.518)^2 E_2 + (0.207)^2 E_3$$

donde

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 = \frac{h^2}{8ma} n^2 = \frac{(6.625 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{8 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} (3 \cdot 10^{-9} \text{ m})^2} n^2 \\ &= \frac{4.9 \cdot 10^{-68}}{655.9 \cdot 10^{-49}} n^2 \frac{\text{kg}^2 \frac{\text{m}^4}{\text{s}^4} \text{s}^2}{\text{kg} \cdot \text{m}^2} = 7.47 \cdot 10^{-22} \text{ J} \cdot n^2 = \frac{7.47 \cdot 10^{-22}}{1.6 \cdot 10^{-19}} \text{ eV} \cdot n^2 \\ &= 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot n^2 \end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned} E_1 &= 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot 1^2 = 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \\ E_2 &= 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot 2^2 = 18.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \\ E_3 &= 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \cdot 3^2 = 42.0 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= (0.829)^2 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} + (0.518)^2 18.7 \cdot 10^{-3} \text{ eV} + (0.207)^2 42.0 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \\ &= [0.6872 \cdot 4.7 + 0.2683 \cdot 18.7 + 0.0428 \cdot 42.0] \cdot 10^{-3} \text{ eV} \\ &= 10.05 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \end{aligned}$$

b) En el estado $n = 1$ estarán

$$(0.829)^2 10^7 = 6.87 \cdot 10^6$$

sistemas.

c) Dado que $|c_1|^2 > |c_2|^2 > |c_3|^2$ el estado mas probable es el 1.

12) Una partícula se mueve con energía potencial $V(x) = -V_0 e^{-\alpha x^2}$.

- a) Haga el gráfico de $V(x)$.
b) Haga un bosquejo de las funciones de onda cuando la energía total es > 0 o < 0 .
c) ¿Espera tener niveles de energía cuantificados en determinados rangos de energía?
d) Estime la energía del punto cero (la energía más baja, E_0). Se sugiere observar que para energías próximas a E_0 la partícula oscila con una frecuencia $\omega = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{d^2V}{dx^2}} \Big|_0$

Solucion:

- d) El potencial $V(x)$ tiene un mínimo en $x = 0$. Desarrollando en torno al mínimo resulta

$$V(x) = V(0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_0 x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_0 x^2 + \dots$$

si x es pequeño, será una buena aproximación

$$V(x) \simeq V(0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_0 x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_0 x^2$$

donde, por tratarse $x = 0$ de un mínimo,

$$\left. \frac{dV}{dx} \right|_0 = 0$$

con lo cual

$$V(x) - V(0) \simeq \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_0 x^2$$

Luego, podemos comparar con el potencial de un oscilador armónico

$$V_{oa}(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

de manera que

$$\left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_0 = m\omega^2$$

o bien

$$\omega = \sqrt{\left. \frac{1}{m} \frac{d^2V}{dx^2} \right|_0}$$

Entonces, podemos estimar las energías mas bajas del potencial $V(x)$ mediante el resultado conocido de las energías del oscilador armónico

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

En este caso, será

$$\begin{aligned} \omega &= \sqrt{\left. \frac{1}{m} (2\alpha V_0 e^{-\alpha x^2} - 4\alpha^2 x^2 V_0 e^{-\alpha x^2}) \right|_0} \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha V_0}{m}} \end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned} E_0 &= \left(0 + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + V(0) \\ &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{2\alpha V_0}{m}} - V_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_1 &= \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + V(0) \\
&= \frac{3\hbar}{2} \sqrt{\frac{2\alpha V_0}{m}} - V_0
\end{aligned}$$