Potencial De Pozo Cuadrado

Iharob Al Asimi

19 de noviembre de 2008

1. El Potencial de Pozo Cuadrado

1.1. El Potencial

El potencial de pozo cuadrado, se describe matemáticamente por una función a trozos, es decir

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si} \quad x \in [-\infty,\, 0] \cup [a,\, \infty] \\ 0 & \text{si} \quad x \in [0,\, a] \end{cases}$$

la representación gráfica de esta función se puede ver en la Figura [1], sin embargo se debe notar que el potencial es constante en las tres regiones del eje x, por ello se puede resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial constante cualquiera, digamos V, y despues aplicar la solución en cada región.

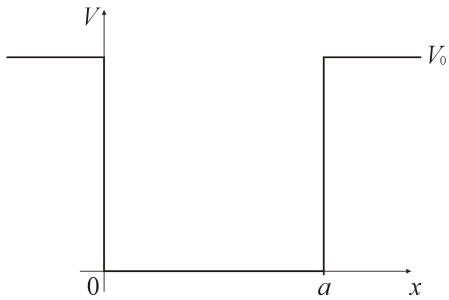

Figura 1: Potencial de Pozo Cuadrado

1.2. La Ecuación y su solución

Para un potencial constante V la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se escribe

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \tag{1}$$

si tomamos en cuenta que estamos considerando sólo el eje x entonces, podemos reescribir [1] así

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\psi(x) = 0 \tag{2}$$

la solución a ésta ecuación para $V = 0$, es decir en la región $0 < x < a$ es

$$\psi(x) = A\cos\kappa_1 x + B\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 x \tag{3}$$

donde $\kappa_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, en la región externa del pozo, tendremos que para $E < V_0$, la solución será

$$\psi(x) = C_1 e^{\kappa_2 x} + C_2 e^{-\kappa_2 x}$$

donde $\kappa_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

2. La Eigenfunción

Luego, debemos tener en cuenta que la solución en la región externa del pozo, nos proporciona un problema al querer mantener la función de onda finita en el eje x, para resloverlo, debemos hacer $C_1 = 0$, para $x > a$ y $C_2 = 0$ para $x < a$, de esta manera la función permanece finita para todo x, entonces nuestra función de onda queda

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1\, e^{\kappa_2 x} & \text{si} \quad x < 0 \\ A\cos\kappa_1 x \,+\, B\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 x & \text{si} \quad 0 < x < a \\ C_2\, e^{-\kappa_2 x} & \text{si} \quad x > a \end{cases}$$

lo siguiente es que nuestra función sea continua, al igual que su derivada, calculando los límites cuando $x \to a$ y $x \to 0$ de la función y su derivada, e igualandolos en las posibles discontinuidades tendríamos el siguiente sistema de ecuaciones

$$A = C_1 \tag{4}$$

$$\kappa_1 B = \kappa_2 C_1 \tag{5}$$

$$A\cos\kappa_1 a \,+\, B\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a = C_2 e^{-\kappa_2 a} \tag{6}$$

$$-\kappa_1 A\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a \,+\, \kappa_1 B\cos\kappa_1 a = -\kappa_2 C_2 e^{-\kappa_2 a} \tag{7}$$

entonces de [5] tenemos que

$$B = \frac{\kappa_2}{\kappa_1} C_1 \tag{8}$$

ahora sustituyendo los valores de [4] y [8] en [6] y [7] queda

$$C_1\cos\kappa_1 a \,+\, \frac{\kappa_2}{\kappa_1} C_1\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a = C_2 e^{-\kappa_2 a} \tag{9}$$

$$-\kappa_1 C_1\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a \,+\, \kappa_2 C_1\cos\kappa_1 a = -\kappa_2 C_2 e^{-\kappa_2 a} \tag{10}$$

luego dividimos [10] entre κ_2 y obtenemos

$$-\frac{\kappa_1}{\kappa_2} C_1\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a \,+\, C_1\cos\kappa_1 a = -C_2 e^{-\kappa_2 a} \tag{11}$$

luego sumando [9] y [11] queda

$$\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} - \frac{\kappa_2}{\kappa_1}\right)\mathrm{sen}\,\kappa_1 a = 2\cos\kappa_1 a$$

de donde

$$\cot\kappa_1 a = \frac{1}{2}\left(\frac{\kappa_1}{\kappa_2} - \frac{\kappa_2}{\kappa_1}\right) \tag{12}$$

esta ecuación, limíta los valores permitidos para la energía de la partícula, de tal manera que quede ligada al pozo para ciertos valores, y para otros no.
Por otro lado, de las ecuaciones [7], [8], [9] y [10]

$$C_1 = A \qquad\qquad B = \tfrac{\kappa_2}{\kappa_1} A \qquad\qquad C_2 = A\left(\cos\kappa_1 a + \tfrac{\kappa_2}{\kappa_1}\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a\right) e^{\kappa_2 a}$$

de modo que la eigenfunción la escribimos

$$\psi(x) = \begin{cases} A\, e^{\kappa_2 x} & \text{si} \quad x < 0 \\ A\left(\cos\kappa_1 x \,+\, \tfrac{\kappa_2}{\kappa_1}\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 x\right) & \text{si} \quad 0 < x < a \\ A\left(\cos\kappa_1 a + \tfrac{\kappa_2}{\kappa_1}\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a\right) e^{\kappa_2 (a-x)} & \text{si} \quad x > a \end{cases}$$

2.1. Energías y Estados ligados.

La ecuación [12], es una ecuación trascendental, para resolverla haremos un cambio, y es

$$\kappa_1 a = \alpha \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a \tag{13}$$

de donde

$$\kappa_2 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \Rightarrow \qquad \kappa_2 = \frac{1}{a}\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}$$

con

$$\beta = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} \tag{14}$$

con lo cual reescribimos [12]

$$\underbrace{\cot\alpha}_{f(\alpha)} = \underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{2\alpha^2 - \beta^2}{\alpha\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}\right)}_{g(\alpha)} \tag{15}$$

esta ecuación se resuelve numéricamente, para resolverla notemos primero que sólo buscaremos valores de α que sean menores que β, de modo que rastrearemos los α desde $\alpha = 0$ hasta $\alpha = \beta$, entonces nuestro algoritmo será simple.

1. Se definen las funciones $f(\alpha)$ y $g(\alpha)$.
2. Se define una función, tal que, dado β, halle las raíces de la ecuación $f(\alpha) = g(\alpha)$ y devuelva la raíz *i-esima* α_i, para realizarlo, una vez obtenido el valor de β, entonces:
   - Creamos una repetición para $\alpha = A$, hasta $\alpha = \beta$ y que incremente $(\beta/1 \cdot 10^8)$ al valor de α.
   - Evaluamos $|f(\alpha) - g(\alpha)| < \beta/1 \cdot 10^4$, si se cumple, devolver $\alpha(i)$ y asignar a A el valor de $\alpha(i) + \beta/1 \cdot 10^3$, y reiniciar para ver si existe otra raíz.
   - Repetir hasta que $\alpha = \beta$.
3. Se pide el valor de β.
4. Se evalúa entonces la función que halla las raíces.
5. Se muestran las raíces obtenidas, mas algunos otros datos si se desea.

Entonces conociendo el valor de β, se pueden obtener las soluciones de [15] para α, numéricamente, en el Eisberg-Resnick, hay un ejemplo para $\beta = 8$, y se obtuvo

$$\alpha_1 = 2{,}50443 \qquad \alpha_2 = 4{,}94844 \qquad \alpha_3 = 7{,}19022$$

luego despejando a en [14] y sustituyendola en [13] tenemos

$$E = \frac{\alpha^2}{\beta^2} V_0$$

así que para $\beta = 8$, una partícula tendrá tres estados ligados, con energías

$$\begin{aligned} E_1 &= 0{,}0980\, V_0 \\ E_2 &= 0{,}3826\, V_0 \\ E_3 &= 0{,}8078\, V_0 \end{aligned}$$

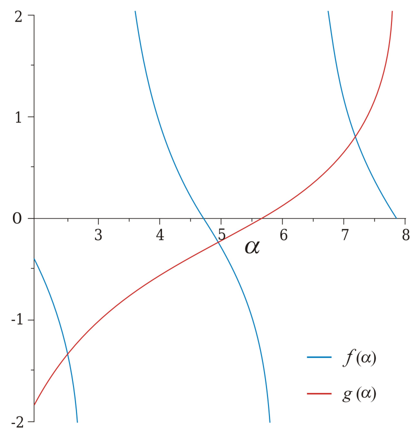

Figura 2: Solución gráfica de la ecuación, los cortes de las curvas corresponden a α_1, α_2 y α_3. [15]

de modo que para $\beta = 8$ las eigenfunciones sólo serán aceptables para estos valores de la energía, y con estas energías la partícula queda ligada al pozo cuadrado de potencial.

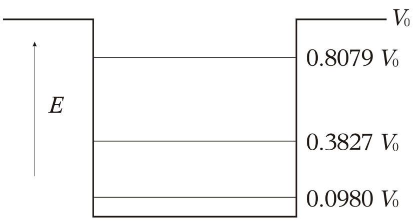

Figura 3: Diagrama de niveles de energía dentro del pozo cuadrado.

En la figura [3] se ilustran los niveles de energía correspondientes a los estados permitidos para la partícula ligada a este potencial.

Notese que $E \propto V_0$ y además, $E < V_0$, como lo habíamos establecido al resolver la ecuación de Schrödinger, dado que la constante de proporcionalidad $(\alpha/\beta)^2$ será simpre menor a uno, puesto que siempre $\beta > \alpha$.

2.2. Normalización

Para normalizar la eigenfunción debemos tener en cuenta que la probabilidad total de encontrar a la partícula en cualquier lugar sobre el eje x es igual a la unidad, de tal manera que para poder obtener el valor de A se debe calcular lo siguente

$$A^2\left[\int_{-\infty}^{0} e^{2\kappa_2 x}\,\mathrm{d}x + \int_0^a \left(\cos\kappa_1 x + \frac{\kappa_2}{\kappa_1}\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 x\right)^2 \mathrm{d}x + \left(\cos\kappa_1 a + \frac{\kappa_2}{\kappa_1}\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 a\right)^2 \int_a^{\infty} e^{2\kappa_2(a-x)}\mathrm{d}x\right] = 1$$

de esta ecuacion se determinará A para que la eigenfunción esté normalizada.
La solucion a la ecuación anterior, nos dará la constante A que normalice la función de onda, empecemos con el primer término, llamemoslo I_1

$$I_1 = A^2 \int_{-\infty}^{0} e^{2\kappa_2 x}\,\mathrm{d}x$$

si hacemos el cambio

$$2\kappa_2 x = u \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{d}x = \frac{1}{2\kappa_2}\mathrm{d}u$$

de modo que

$$I_1 \;=\; \frac{A^2}{2\kappa_2}\int\limits_{-\infty}^{0} e^u \,\mathrm{d}u \;=\; \frac{A^2}{2\kappa_2}\, e^u\Big|_{-\infty}^{0} \;=\; \frac{A^2}{2\kappa_2}$$

y en términos de α y β

$$I_1 \;=\; \frac{A^2 a}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}\right)$$

para el segundo término la integral es un poco más complicada, llamemosla I_2 entonces

$$I_2 \;=\; A^2\int\limits_0^a \left(\cos\kappa_1 x \;+\; \frac{\kappa_2}{\kappa_1}\,\mathrm{sen}\,\kappa_1 x\right)^2 \,\mathrm{d}x$$

primero hagamos dos cambios de variable uno para la integral y el otro para una constante, es decir

$$\kappa_1 x \;=\; u \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{d}x \;=\; \frac{\mathrm{d}u}{\kappa_1} \qquad\qquad \text{y} \qquad\qquad \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \;=\; k \;=\; \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha}$$

entonces reescribiendo, como $\alpha = \kappa_1 a$ tenemos

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\int\limits_0^{\alpha} (\cos u \;+\; k\,\mathrm{sen}\,u)^2 \,\mathrm{d}u$$

desarrollando el producto notable, queda

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\int\limits_0^{\alpha} \left(\cos^2 u \;+\; k\,\mathrm{sen}\,2u \;+\; k^2\,\mathrm{sen}^2\,u\right) \mathrm{d}u$$

luego usando $\cos^2 u \;=\; 1-\mathrm{sen}^2\,u$ tenemos

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\int\limits_0^{\alpha} \left(1-\mathrm{sen}^2\,u \;+\; k\,\mathrm{sen}\,2u \;+\; k^2\,\mathrm{sen}^2\,u\right) \mathrm{d}u$$

reordenando queda

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\int\limits_0^{\alpha} \left(1+(k^2-1)\,\mathrm{sen}^2\,u \;+\; k\,\mathrm{sen}\,2u\right) \mathrm{d}u$$

y si volvemos a usar una identidad, ahora $\mathrm{sen}^2\,u \;=\; \frac{1}{2}(1-\cos 2u)$ entonces

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\int\limits_0^{\alpha} \left(1+\frac{1}{2}(k^2-1)\,(1-\cos 2u) \;+\; k\,\mathrm{sen}\,2u\right) \mathrm{d}u$$

integrando término a término

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\left(u+\frac{1}{2}(k^2-1)\left(u-\frac{1}{2}\,\mathrm{sen}\,2u\right) \;-\; \frac{k}{2}\cos 2u\right)\Bigg|_0^{\alpha}$$

finalmente evaluando

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{\alpha}\left(\alpha + \frac{1}{2}(k^2-1)\left(\alpha - \frac{1}{2}\operatorname{sen}2\alpha\right) \;+\; \frac{k}{2}\;(1 - \;\cos 2\alpha)\right)$$

si sustituimos el valor de k, sacamos $\frac{1}{2}$ factor común, y metemos α dentro del paréntesis tendremos

$$I_2 \;=\; \frac{A^2 a}{2}\left(2 + \left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(1 - \frac{\operatorname{sen}2\alpha}{2\alpha}\right) \;+\; \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha^2}\;(1 - \;\cos 2\alpha)\right)$$

para el tercer término, llamemoslo I_3

$$I_3 \;=\; A^2\left(\cos\kappa_1 a \;+\; \frac{\kappa_2}{\kappa_1}\operatorname{sen}\kappa_1 a\right)^2 \int_a^{\infty} e^{2\kappa_2(a-x)}\mathrm{d}x$$

y para simplificar más, notemos que de nuevo $\alpha = \kappa_1 a$, aparece en la constante, así que hagamos dos cambios

$$2\kappa_2(a-x) \;=\; u \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{d}x \;=\; -\frac{1}{2\kappa_2}\mathrm{d}u \qquad \text{y} \qquad A^2\left(\cos\alpha \;+\; \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha}\operatorname{sen}\alpha\right)^2 \;=\; G^2$$

de modo que tenemos

$$I_3 \;=\; -\frac{G^2}{2\kappa_2}\int_0^{-\infty} e^u\,\mathrm{d}u$$

integrando queda

$$I_3 \;=\; -\frac{G^2}{2\kappa_2}\,e^u\Bigg|_0^{-\infty} \;=\; \frac{G^2}{2\kappa_2}$$

notemos que podemos escribir I_3 así

$$I_3 \;=\; \frac{G^2 a}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}\right)$$

y finalmente sustituyendo G

$$I_3 \;=\; \frac{A^2 a}{2}\left[\frac{\left(\cos\alpha \;+\; \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha}\operatorname{sen}\alpha\right)^2}{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}\right]$$

podemos darnos cuenta que I_1, I_2 e I_3, todas se pueden escribir como

$$I_n \;=\; \frac{A^2 a}{2}\,F_n$$

con

$$F_1 = \frac{1}{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}$$

$$F_2 = 2 + \left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(1 - \frac{\operatorname{sen} 2\alpha}{2\alpha}\right) + \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha^2}\,(1 - \cos 2\alpha)$$

$$F_3 = \frac{\left(\cos\alpha + \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha}\operatorname{sen}\alpha\right)^2}{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}$$

de modo que la ecuación que nos dará el valor de A es

$$\frac{A^2 a}{2}\left(\sum_{n=1}^{3} F_n\right) = 1$$

y despejando A finalmente queda

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}\left(\sum_{n=1}^{3} F_n\right)^{-1/2} \tag{16}$$

2.3. Algunos ejemplos

Con un programa de computadora, hecho en C++[1], podemos obtener los estados para cualquier β por ejemplo, para $\beta = 4$, que resulta muy útil a la hora de querer comprar las predicciones clásicas con las cuánticas.

A continucaión se muestra la salida del programa, y se ven los valores relevantes correspondientes a cada estado para $\beta = 4$

```
Resultados :
------------

Estado n = 1:

*************************************************************
El valor de la energia          |  E1     = 0.265152 Vo
La constante de normalizacion   |  A      = 0.58213/a^(1/2)
La solucion de la ET            |  alpha1 = 2.05972
*************************************************************

Estado n = 2:

*************************************************************
El valor de la energia          |  E2     = 0.898222 Vo
La constante de normalizacion   |  A      = 0.941557/a^(1/2)
La solucion de la ET            |  alpha2 = 3.79098
*************************************************************
```

[1]El programa calcula las raíces de la ecuación [15] para β dado, usando el procedimiento anteriormente explicado, y después usa la ecuación [16] para hallar los demás datos.

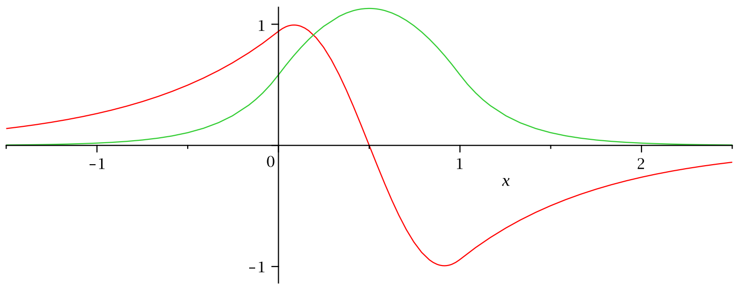

Figura 4: Primeros 4 estados ligados para $\beta = 20$.

En la figura [4], se ven los estados ligados para $\beta = 4$, la gráfica fue elaborada con los datos que dió el programa.

No es dificil darse cuenta, que la probabilidad de encontrar a la partícula fuera del pozo es alta, pese a que está ligada para estas energías.

Un caso interesante, sería ver que pasa si β es grande, en realidad sería lo mismo que decir que la altura del pozo es grande, en ese caso deberíamos tener un resultado parecido al del pozo cuadrado infinito, para ilustrar un poco, hallemos los tres primeros estados para $\beta = 500$, aunque no es muy grande será útil para ilustrar lo que ocurre, utilizando de nuevo el programa se obtienen los datos del cuadro [1], y en la figura [5], se ilustran los resultados

n	A	α	E
1	$\frac{0{,}00883}{\sqrt{a}}$	3,1291	$3{,}9164 \cdot 10^{-5} V_0$
2	$\frac{0{,}01766}{\sqrt{a}}$	6,2581	$0{,}0001566 V_0$
3	$\frac{0{,}02649}{\sqrt{a}}$	9,3872	$0{,}0003524 V_0$

Cuadro 1: Tres primeros estados para $\beta = 500$

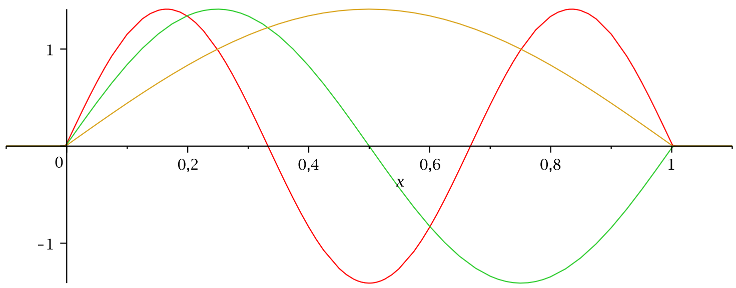

Figura 5: Primeros tres estados para $\beta = 500$

es claro que la probabilidad de que la partícula esté en cualquier lugar fuera del pozo de potencial, es casi nula, de hecho en la figura vemos que para la región externa del pozo $\psi(x) = 0$, y por supuesto la probabilidad de hallar a la partícula $|\psi(x)^* \psi(x)| = 0$.

Esto no es sorprendente, ya que las eigenfunciones fuera del pozo, son exponenciales decrecientes, y cuyo exponente depende de β es decir, de V_0, de modo que si V_0 se hace grande, las eigenfunciones de la parte externa del pozo, se van a cero, exponencialmente.

2.4. Caso Límite, Pozo Cuadrado Infinito

Para el caso límite, cuando la pared del pozo es infinita, la situación es simple, ya que la ecuación de Schrödinger es sólo la de la parte interna del pozo, de hecho, la partícula nunca podrá salir del pozo, entonces la ecuación es

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

y haciendo $\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, queda

$$\psi(x)'' + \kappa^2\psi(x) = 0$$

la solución general a ésta ecuación es

$$\psi(x) = A \operatorname{sen} \kappa x + B \cos \kappa x$$

pero, debemos notar de la figura [5] que

$$\psi(0) = 0 \qquad\qquad \psi(a) = 0 \tag{17}$$

de donde se obtiene claramente que $B = 0$, y por otro lado

$$A \operatorname{sen} \kappa x = 0$$

dado que $A \neq 0$[2], entonces lo anterior se cumple para

$$\kappa a = n\pi$$

y sustituyendo κ tenemos

$$\sqrt{2mE}a = n\pi\hbar$$

y finalmente la energía

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

es simple demostrar que al normalizar la eigenfunción se obtiene[3]

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

de modo que la eigenfunción es

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{a} x \qquad \text{con} \qquad 0 < x < a$$

que proporciona analíticamente, una función cuya representación gráfica es idéntica a la de la figura [5], por lo cual es claro, que para un potencial grande con la energía total de la partícula, es preferible la descripción del pozo cuadrado infinito.

[2]Si lo fuera no habría función de onda
[3]Además de su similitud con la constante de normalización del pozo cuadrado finito.

3. Física Clásica vs Física Cuántica

3.1. Potencial de Pozo Cuadrado Clásico

Otra cosa relevante, es comparar el comportamiento de una partícula sometida a éste potencial según la física clásica, sí la partícula tiene energía menor que las paredes del pozo, se quedará ligada, para todos los valores de energía posibles, es decir todos los valores, ya que en la física clásica una partícula puede tener cualquier energía.

En nuestro enfoque, al aplicar los conceptos de la física cuántica al problema del movimiento de una partícula en este potencial, obtenemos un resultado, drásticamente diferente al que nos proporciona la física clásica.

Para que una partícula salga de la región del pozo de potencial en física clásica su energía total debe ser mayor a la de las paredes del pozo, de lo contrario tendría energía cinética negativa, cosa que es imposible, si consideramos que una partícula de energía total E, se encuentra sometida a un potencial V, y que en cierto punto en el espacio, su energía potencial es mayor que su energía total, es decir

$$V > E$$

pero $E = T + V$, con T la energía cinética, entonces

$$V > T + V \qquad \Rightarrow \qquad T < 0$$

pero $T \propto v^2$, donde la constante de proporcionalidad siempre es positiva, por esta contradicción, para que la partícula salga de las paredes del pozo su energía total debe ser mayor que la altura de la pared.

3.2. Contradicción de la Física Clásica

Anteriormente obtuvimos el estado base para $\beta = 4$

$$E_1 = 0{,}265107\, V_0 \qquad\qquad A = \frac{0{,}582058}{\sqrt{a}} \qquad\qquad \alpha = 2{,}05954$$

entonces usando la eigenfunción en la región $-\infty < x < 0$ y calculando la probabilidad de encontrar una partícula a la izquierda del pozo es

$$P(x,\, t) = \frac{0{,}34}{a} \int\limits_{-\infty}^{0} e^{(3{,}33/a)\, x}\, \mathrm{d}x = 0{,}102$$

luego por simetría, es obvio que la porbabilidad de encontrar a la partícula a la derecha del pozo es igual a esta, de modo que la probabilidad de que la partícula esté fuera del pozo es

$$P(x,\, t) = 0{,}204$$

esto está en desacuerdo drástico con la física clásica.

Hemos visto que para $\beta = 4$, la probabilidad de encontrar a la pratícula fuera de la región del pozo de potencial en el estado base[4] es un poco más del 20 % de la probabilidad total, entonces queda claro, que los conceptos de física clásica que bien conocemos y que aunque útiles en muchos campos de aplicación, no funcionan al querer aplicarlos a dimensiones pequeñas.

[4] Para un estado mayor la probabilidad será mas grande.

4. Valores de Expectación

4.1. Algunos Cálculos interesantes

Ahora podemos hacer uso de nuestros resultados, para calcular por ejemplo, el promedio de la posición más probable de la partícula ligada al pozo, para ello debemos resolver la siguiente integral

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \, x \, \Psi \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} x \, \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x \tag{18}$$

vamos a calcular el valor de expectación de x, dentro del pozo, la razón es que una partícula ligada tendrá mayor probabilidad de estar dentro del pozo. En la sección [2.2] hallamos el valor de

$$\underbrace{\int \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x}_{S} = \frac{A^2 a}{\alpha} \left(\kappa_1 x + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2} - 1 \right) \left(\kappa_1 x - \frac{1}{2} \operatorname{sen} 2\kappa_1 x \right) - \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{2\alpha} \cos 2\kappa_1 x \right)$$

entonces integremos [18] por partes

$$\begin{aligned} x &= u & \Rightarrow \quad \mathrm{d}x &= \mathrm{d}u \\ \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x &= \mathrm{d}v & \Rightarrow \quad v &= \int \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x \end{aligned}$$

luego

$$\int_0^a x \, \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x = x \underbrace{\int \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x}_{S} \Bigg|_0^a - \int_0^a \underbrace{\left[\int \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x \right]}_{S} \mathrm{d}x$$

reescribiendo

$$\int_0^a x \, \psi(x)^2 \, \mathrm{d}x = xS \Bigg|_0^a - \int_0^a S \, \mathrm{d}x \tag{19}$$

entonces, podemos integrar directamente S, es decir

$$\int_0^a S \, \mathrm{d}x = \frac{A^2 a}{\alpha} \left(\frac{\kappa_1}{2} x^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2} - 1 \right) \left(\frac{\kappa_1}{2} x^2 + \frac{\cos 2\kappa_1 x}{4\kappa_1} \right) - \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{4\alpha\kappa_1} \operatorname{sen} 2\kappa_1 x \right) \Bigg|_0^a$$

recordemos que $\kappa_1 a = \alpha$, entonces

$$\int_0^a S \, \mathrm{d}x = \frac{A^2 a}{\alpha} \left(\frac{\alpha}{2} a + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2} - 1 \right) \left(\frac{\alpha}{2} a + \frac{a(\cos 2\alpha - 1)}{4\alpha} \right) - \frac{a\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{4\alpha^2} \operatorname{sen} 2\alpha \right)$$

si sacamos a factor común

$$\int_0^a S \, \mathrm{d}x = \frac{A^2 a^2}{\alpha} \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2} - 1 \right) \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{(\cos 2\alpha - 1)}{4\alpha} \right) - \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{4\alpha^2} \operatorname{sen} 2\alpha \right)$$

luego, es claro que $xS\Big|_0^a = xS\Big|_a$, ya que al evaluar en $x = 0 \Rightarrow xS = 0$, entonces

$$xS \Bigg|_0^a = \frac{A^2 a^2}{\alpha} \left(\alpha + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2} - 1 \right) \left(\alpha - \frac{1}{2} \operatorname{sen} 2\alpha \right) - \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{2\alpha} \cos 2\alpha \right)$$

efectuando la resta de [19], finalmente queda

$$\bar{x} = \frac{A^2a^2}{2\alpha}\left[\alpha + \left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(\frac{\alpha - \operatorname{sen} 2\alpha}{2} - \frac{(\cos 2\alpha - 1)}{4\alpha}\right) + \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{\alpha}\left(\frac{\operatorname{sen} 2\alpha}{2\alpha} - \cos 2\alpha\right)\right]$$

Ahora vamos a calcular $\overline{x^2}$, que viene dado por

$$\overline{x^2} \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\, x^2\, \Psi \,\mathrm{d}x \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2\, \psi(x)^2 \,\mathrm{d}x$$

de nuevo vamos a enfocarnos en la parte de adentro del pozo, de modo que integraremos entre 0 y a, si integramos por partes una vez queda

$$\begin{aligned} x^2 \;&=\; u \qquad \Rightarrow \qquad 2x\,\mathrm{d}x \;=\; \mathrm{d}u \\ \psi(x)^2\,\mathrm{d}x \;&=\; \mathrm{d}v \qquad \Rightarrow \qquad v \;=\; \int \psi(x)^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x \end{aligned}$$

de modo que

$$\overline{x^2} \;=\; x^2 \underbrace{\int \psi(x)^2\,\mathrm{d}x}_{S} - 2\int x \underbrace{\left[\int \psi(x)^2\,\mathrm{d}x\right]}_{S} \mathrm{d}x$$

donde S fue definida en la parte anterior, luego reescribiendo

$$\overline{x^2} \;=\; x^2 S \;-\; 2\int xS\,\mathrm{d}x$$

después, volvemos a integrar por partes y tenemos

$$\begin{aligned} x \;&=\; u \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{d}x \;=\; \mathrm{d}u \\ S\,\mathrm{d}x \;&=\; \mathrm{d}v \qquad \Rightarrow \qquad v \;=\; \int S\,\mathrm{d}x \end{aligned}$$

entonces $\overline{x^2}$ queda, evaluada en los límites

$$\overline{x^2} \;=\; x^2 S\Bigg|_0^a \;-\; 2x\int S\,\mathrm{d}x\Bigg|_0^a \;+\; 2\underbrace{\int\limits_0^a \left[\int S\,\mathrm{d}x\right]\mathrm{d}x}_{M} \tag{20}$$

ya vimos antes que $xS\big|_0^a = aS\big|_a$, entonces por analogía $x^2S\big|_0^a = a^2S\big|_a$, es decir

$$x^2 S\Bigg|_0^a \;=\; \frac{A^2a^3}{\alpha}\left(\alpha + \frac{1}{2}\left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(\alpha - \frac{1}{2}\operatorname{sen} 2\alpha\right) - \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{2\alpha}\cos 2\alpha\right)$$

luego es fácil ver que

$$2x\int S\,\mathrm{d}x\Bigg|_0^a \;=\; \frac{A^2a^3}{\alpha}\left(\alpha + \frac{1}{2}\left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(\alpha + \frac{\cos 2\alpha}{2\alpha}\right) - \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{2\alpha^2}\operatorname{sen} 2\alpha\right)$$

el último término, por integración directa, es

$$M \;=\; \frac{A^2a}{\alpha}\left(\frac{\kappa_1}{6}x^3 + \frac{1}{2}\left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(\frac{\kappa_1}{6}x^3 + \frac{\operatorname{sen} 2\kappa_1 x}{8{\kappa_1}^2}\right) + \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{8\alpha{\kappa_1}^2}\cos 2\kappa_1 x\right)\Bigg|_0^a$$

es muy fácil verificar, que al evaluar en los límites, queda

$$M \;=\; \frac{A^2a^3}{\alpha}\left(\frac{\alpha}{6} + \frac{1}{2}\left(\frac{\beta^2-\alpha^2}{\alpha^2} - 1\right)\left(\frac{\alpha}{6} + \frac{\operatorname{sen} 2\alpha}{8\alpha^2}\right) + \frac{\sqrt{\beta^2-\alpha^2}}{8\alpha^3}(\cos 2\alpha - 1)\right)$$

al efectuar la resta de [20], tenemos[5]

$$\overline{x^2} = \frac{A^2 a^3}{\alpha}\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{1}{2}\left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha^2} - 1\right) N - \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{2\alpha} L\right)$$

donde

$$N \;=\; \frac{\alpha}{3} + \left[\frac{1}{4\alpha^2} - \frac{1}{2}\right] \operatorname{sen} 2\alpha - \frac{\cos 2\alpha}{2\alpha}$$

$$L \;=\; \cos 2\alpha - \frac{\operatorname{sen} 2\alpha}{\alpha} - \frac{(\cos 2\alpha - 1)}{2\alpha^2}$$

Ahora vamos a calcular, $\bar{p}$, el promedio del impulso más probable, para ello usaremos el operador impulso

$$\hat{p} \;=\; -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

de tal manera que $\bar{p}$ viene dado por

$$\bar{p} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p}\, \Psi \,\mathrm{d}x \;=\; -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \,\mathrm{d}x$$

de nuevo vamos a restringir los cálculos a la región interna del pozo, de modo que

$$\bar{p} \;=\; -i\hbar A^2 \int_0^a \left(\cos \kappa_1 x + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \operatorname{sen} \kappa_1 x\right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\cos \kappa_1 x + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \operatorname{sen} \kappa_1 x\right) \mathrm{d}x$$

derivando tenemos

$$\bar{p} \;=\; -i\hbar A^2 \int_0^a \left(\cos \kappa_1 x + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \operatorname{sen} \kappa_1 x\right) \left(-\kappa_1 \operatorname{sen} \kappa_1 x + \kappa_2 \cos \kappa_1 x\right) \mathrm{d}x$$

luego efectuando la multiplicación

$$\bar{p} \;=\; -i\hbar A^2 \int_0^a \left(-\kappa_1 \cos \kappa_1 x \operatorname{sen} \kappa_1 x \;+\; \kappa_2 \left(\cos^2 \kappa_1 x - \operatorname{sen}^2 \kappa_1 x\right) \;+\; \frac{{\kappa_2}^2}{\kappa_1} \cos \kappa_1 x \operatorname{sen} \kappa_1 x\right) \mathrm{d}x$$

usando identidades trigonométricas y simplificando queda

$$\bar{p} \;=\; -i\hbar A^2 \int_0^a \left(\frac{{\kappa_2}^2 - {\kappa_1}^2}{2\kappa_1}\right) \operatorname{sen} 2\kappa_1 x \;+\; \kappa_2 \cos 2\kappa_1 x \,\mathrm{d}x$$

por integración directa tenemos

$$\bar{p} \;=\; i\hbar A^2 \left[\left(\frac{{\kappa_2}^2 - {\kappa_1}^2}{4{\kappa_1}^2}\right) \cos 2\kappa_1 x - \frac{\kappa_2}{2\kappa_1} \operatorname{sen} 2\kappa_1 x\right] \Bigg|_0^a$$

en términos de α y β

$$\bar{p} \;=\; i\hbar A^2 \left(\frac{\beta^2 - 2\alpha^2}{4\alpha^2} (\cos 2\alpha - 1) - \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{2\alpha} \operatorname{sen} 2\alpha\right)$$

finalmente calculemos $\overline{p^2}$, donde el operador $\hat{p}^2$ es

$$\hat{p}^2 \;=\; -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

[5]Dado que la expresión es muy larga, conviene escribirla de forma compacata haciendo los cambios señalados.

así que ya está claro que

$$\overline{p^2} \;=\; -\hbar^2 \int_0^a \psi(x)\, \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)\, \mathrm{d}x$$

la segunda derivada será

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-\kappa_1 \operatorname{sen} \kappa_1 x + \kappa_2 \cos \kappa_1\right) \;=\; -{\kappa_1}^2 \cos \kappa_1 x \;-\; \kappa_1 \kappa_2 \operatorname{sen} \kappa_1 x$$

y la integral

$$\overline{p^2} \;=\; -\hbar^2 A^2 \int_0^a \left(\cos \kappa_1 x + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \operatorname{sen} \kappa_1 x\right) \left(-{\kappa_1}^2 \cos \kappa_1 x \;-\; \kappa_1 \kappa_2 \operatorname{sen} \kappa_1 x\right)\, \mathrm{d}x$$

efectuando la multiplicación

$$\overline{p^2} \;=\; -\hbar^2 A^2 \int_0^a \left(-{\kappa_1}^2 \cos^2 \kappa_1 x - {\kappa_2}^2 \operatorname{sen}^2 \kappa_1 x - \kappa_1 \kappa_2 \cos \kappa_1 x \operatorname{sen} \kappa_1 x - \kappa_1 \kappa_2 \cos \kappa_1 x \operatorname{sen} \kappa_1 x\right)\, \mathrm{d}x$$

que se puede simplificar a

$$\overline{p^2} \;=\; \hbar^2 A^2 \int_0^a \left({\kappa_1}^2 + \left({\kappa_2}^2 - {\kappa_1}^2\right) \operatorname{sen}^2 \kappa_1 x + \kappa_1 \kappa_2 \operatorname{sen} 2\kappa_1 x\right)\, \mathrm{d}x$$

y luego a

$$\overline{p^2} \;=\; \hbar^2 A^2 \int_0^a {\kappa_1}^2 + \frac{1}{2} \left({\kappa_2}^2 - {\kappa_1}^2\right) (1 - \cos 2\kappa_1 x) + \kappa_1 \kappa_2 \operatorname{sen} 2\kappa_1 x \, \mathrm{d}x$$

que integrando directamente queda

$$\overline{p^2} \;=\; \hbar^2 A^2 \left({\kappa_1}^2 x + \frac{1}{2} \left({\kappa_2}^2 - {\kappa_1}^2\right) \left(x - \frac{1}{2\kappa_1} \operatorname{sen} 2\kappa_1 x\right) - \frac{\kappa_2}{2} \cos \kappa_1 x\right) \Bigg|_0^a$$

y evaluando, se obtiene

$$\overline{p^2} \;=\; \frac{A^2 \hbar^2}{a} \left(\alpha^2 + \frac{1}{2} \left(\beta^2 - 2\alpha^2\right) \left(1 - \frac{\operatorname{sen} 2\alpha}{2\alpha}\right) + \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{2} (1 - \cos 2\alpha)\right)$$

Sí calculamos los valores de expectación para el estado base con $\beta = 4$, tendremos

$$\bar{x} \;=\; 0{,}46\, a \qquad \overline{x^2} \;=\; 0{,}28\, a^2$$

$$\bar{p} \;=\; -1{,}72 \cdot 10^{-4}\, i\, \frac{\hbar}{a} \qquad \overline{p^2} \;=\; 3{,}87\, \frac{\hbar^2}{a^2}$$

tenemos entonces

$$\Delta x \;=\; \sqrt{\bar{x}^2 + \overline{x^2}} \;=\; 0{,}70\, a$$

$$\Delta p \;=\; \sqrt{\bar{p}^2 + \overline{p^2}} \;=\; 1{,}96\, \frac{\hbar}{a}\, a$$

de modo que

$$\Delta x \Delta p \;=\; 1{,}37\, \hbar$$

que está dentro del límite establecido por el principio de incerteza.

Debemos notar, que en física clásica las partículas estan localizadas, las ondas no, por lo cual no debe ser sorprendente que según la física cuántica las partículas no esten localizadas, debido a su comportamiento ondulatorio, es bastante natural que las partículas no esten localizadas, así que el principio de incerteza es una consecuencia directa de la naturaleza ondulatoria de la materia.