Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Física
FIZ0322 Física Cuántica I

Ayudantía 1: Principios y descripción cuántica de una partícula libre

Fabián Cádiz

0.1. La función de Onda

0.1.1. Descripción del estado de una partícula

Principio I:
La descripción completa del estado de una partícula de masa m en el espacio al instante t se logra por medio de una función de onda compleja $\psi(\vec{x},t)$. La probabilidad de encontrar la partícula al instante t en un volumen d^3x en torno al punto $\vec{x}$ es:

$$d^3P(\vec{x}) = |\psi(\vec{x},t)|d^3x$$

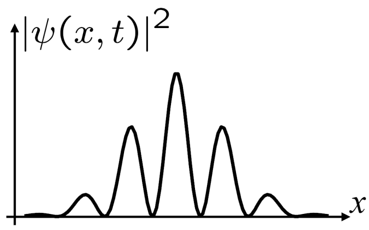


Figura 1: La función de onda es una amplitud de probabilidad, $|\psi(\vec{x},t)|^2$ es una densidad que determina la probabilidad de prescencia de una partícula en torno al punto $\vec{x}$ al instante t.

Nota:

1. La función de onda es de cuadrado sumable, y normalizada a uno. Es decir:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x\ |\psi(\vec{x},t)|^2 = 1$$

   Las funciones de cuadrado sumable forman un espacio vectorial llamado $L^2(\mathbb{R}^3)$.

2. El carácter aleatorio y probabilista no proviene de una falta de conocimiento de las condiciones iniciales (como en teoría cinética de los gases, por ejemplo), tampoco viene de una necesidad práctica (imposibilidad de tratar un sistema con 10^{23} partículas). Aquí, el carácter aleatorio forma parte integral del formalismo cuántico.

0.1.2. Medición de la posición de la partícula

Al efectuar una medida de la posición de una partícula al instante t, uno encuentra un cierto valor bien definido $\vec{x}$, con una precisión de d^3x. Imaginemos que uno prepara independientemente un gran número N de partículas en el **mismo estado**, es decir, las N partículas son descritas por estrictamente la misma función de onda al momento en que se efectúa una medida sobre la posición de cada una de ellas. Los N resultados de la medida no serán idénticos, pero estarán distribuídos según la ley de probabilidad $|\psi(\vec{x},t)|^2$. El valor medio de estos resultados es:

$$\langle \vec{x} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \vec{x} |\psi(\vec{x})|^2$$

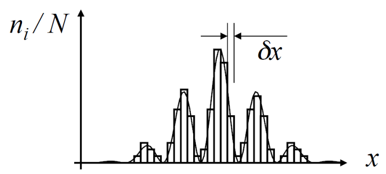


Figura 2: La medida de la posición de N partículas preparadas en el mismo estado permite de reconstruír la dependencia espacial de la ley de probabilidad $|\psi|^2$, si la precisión en la posición lo permite.

Se trata de un conjunto de tres valores, para las tres coordenadas $\{x, y, z\}$. La dispersión de estos resultados será caracterizada por una varianza. Sean Δx, Δy, Δz las varianzas sobre las 3 coordenadas, por definición:

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{\mathbb{R}} dx \, x^2 |\psi(\vec{x})|^2 - \langle x \rangle^2$$

E igualmente para y y z. Mientras más pequeñas sean estas varianzas, mejor será la localización de la partícula cuando ella está en el estado $\psi(\vec{x})$.

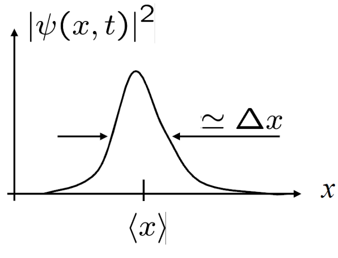


Figura 3: La figura muestra el valor medio de la variable aleatoria x, Δx mide que tan concentrada se encuentra la distribución de probabilidad en torno a $\langle x \rangle$.

0.2. Interferencia y principio de superposición

0.2.1. Ondas de de Broglie

La idea la más simple para caracterizar una partícula libre consiste en suponer que las partículas de velocidad $\vec{v}$ y de momentum $\vec{p} = m\vec{v}$ bien definidos, libres en el espacio, son descritas por una función de onda vecinda de una onda plana monocromática de la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0 e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x} - wt\right)}$$

donde ψ_0 es una constante. Para estas ondas, la longitud de onda λ y, de forma equivalente, el vector de onda $\vec{k}$ staisfacen las relaciones:

$$\lambda = h/p \qquad \vec{k} = \vec{p}/\hbar$$

como propuso de Broglie, en analogía a la relación de Einstein para el momentum de un fotón de vector de onda $\vec{k}$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Una experiencia de interferencia o de diffracción en un cristal no permite calcular la frecuencia de esta onda. En efecto, el factor de fase e^{-iwt} no juega ningún rol en $|\psi|^2$. La buena elección de de Broglie consiste en relacionar esta frecuencia a la energía de la partícula de la misma forma que para los fotones de Einstein:

$$\hbar w = E = p^2/2m$$

Uno obtiene así las ondas de de Broglie:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)/\hbar} \quad \text{con} \quad E = p^2/2m \tag{1}$$

0.2.2. Principio de superposición

Toda combinación lineal de funciones de onda es igualmente una función de onda posible. Dicho de otra forma, si $\psi_1(\vec{x}, t)$ y $\psi_2(\vec{x}, t)$ describen dos estados posibles , entonces la combinación lineal:

$$\psi(\vec{x}, t) = \alpha_1\psi_1(\vec{x}, t) + \alpha_2\psi_2(\vec{x}, t)$$

donde α_1, α_2 son complejos arbitrarios, representa también un estado posible (Se debe escoger α_1 y α_2 de manera que $|\psi|^2 = 1$). Se trata del principio fundamental de la teoría cuántica, la aditividad de amplitudes de probabilidad es la base de los fenómenos de interferencia. La ecuación que gobierna la función de onda ψ debe ser entonces lineal.

0.2.3. Ecuación de onda en el vacío

Consideremos las ondas de de Broglie (Eq **??**). Estas ondas planas describen partículas de momentum bien definido $\vec{p}$ y de energía $E = p^2/2m$. Derivando respecto al tiempo por un lado, y tomando el laplaciano por otro, vemos que las ondas de de Broglie satisfacen la ecuación a derivadas parciales:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x}, t) \tag{2}$$

Podemos considerar esta ecuación como un principio que dicta la propagación de partículas en el vacío, en ausencia de interacción.

Principio II
Si la partícula está en el vacio y no sufre ninguna interacción, la función de onda satisface la ecuación a derivadas parciales:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x},t)$$

que es la ecuación de Schrodinguer en el vacío.

0.2.4. Paquetes de onda libres

Una onda plana monocromática no puede representar el estado de una partícula, ya que ella no es normalizable. Un estado físico aceptable es un paquete de ondas: superposición lineal a coeficientes complejos de ondas planas monocromáticas:

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3p\ \varphi(\vec{p})e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}, \quad E = p^2/2m$$

La expresión es la solución general de la ecuación de onda (**??**). Notar que las funciones $\psi(\vec{x},t)$ y $\psi(\vec{p},t) = \varphi(\vec{p})e^{-iEt\hbar}$ son transformadas de Fourier una de la otra.

0.2.5. Transformada de Fourier

1. Dos funciones $f(\vec{x})$ y $g(\vec{p})$ son transformadas de Fourier una de la otra si:

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3p\ e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}g(\vec{p})$$

2. La transformación inversa es:

$$g(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3x\ e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}f(\vec{x})$$

3. Diferenciando respecto a x_j obtenemos:

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3p\ e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}\frac{ip_j}{\hbar}g(\vec{p})$$

   En consecuencia:

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} \quad \leftrightarrow \quad i/\hbar p_j g(\vec{p})$$

4. La transformada de Fourier es una isometría: Si $f_1(\vec{p})$ y $f_2(\vec{p})$ son respectivamente transformadas de Fourier de $g_1(\vec{x})$, $g_2(\vec{x})$, se tiene el teorema de Parseval- Plancherel:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x\ f_1^*(\vec{x})f_2(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p\ g_1(\vec{p})^* g_2(\vec{p})$$

5. Mientras más concentrado está el soporte de $|g(\vec{p})|^2$ en la vecindad de algún valor $\vec{p}_0$, más extendido será $|f(\vec{x})|$, y vice-versa. En particular, si f y g están normalizados a uno (y entonces son leyes de probabilidad), y si definimos:

$$(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$$

y al igual para x, el producto de las dispersiones Δx y Δp_x está restringido por la desigualdad:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

E igual para las componentes y y z.

0.2.6. Estructura del paquete de ondas

Gracias al hecho de que la transformada de Fourier es una isometría, el paquete de ondas de de Broglie satisface:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \; |\psi(\vec{x},t)|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \; |\varphi(p)|^2$$

Luego, $\psi(\vec{x},t)$ es de cuadrado sumable y normalizable a uno si y solo sí $\varphi(p)$ lo es igualmente: la construcción de un paquete de ondas consiste a escoger $\varphi(p)$ de cuadrado sumable y normalizada. La función resultante $\psi(\vec{x},t)$ lo es igualmente a todo instante. Además, se interpreta la transformada de Fourier $\psi(\vec{p})$ como la amplitud de probabilidad del momentum: $|\varphi(\vec{p})|^2$ es la ley de probabilidad para $\vec{p}$.

1. Es posible demostrar a partir de la ecuación de Schrodinguer (**??**) que $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \; |\psi(\vec{x},t)|^2 = 1$ para todo t. Esto es fundamental: la interpretación probabilista de la función de onda es válida aún cuando el paquete de ondas evoluciona en el tiempo.

2. La ley de probabilidad para el momentum es independiente del tiempo:

$$\psi(\vec{p},t) = \varphi(p) e^{-iEt/\hbar}, \quad |\psi(\vec{p},t)|^2 = |\varphi(p)|^2$$

Problema 1: Efecto fotoeléctrico sobre los metales

Se envía sobre un fotocátodo de potasio una radiación ultravioleta (línea de mercurio) de longitud de onda $\lambda = 253{,}7\ nm$, y se constata que la energía maxima de los fotoelectrones expulsados es de $3{,}14\ eV$. Si en cambio se utiliza radiación visible de longitud $\lambda = 589\ nm$ (línea amarilla de sodio), la energía maxima es entonces de $0{,}36\ eV$.

a) Encuentre el valor de la constante de Planck.
b) Calcule la energía mínima requerida para extraer los electrones de la superficie de potasio.
c) Calcule la longitud de onda maxima de radiación que puede producir un efecto fotoeléctrico sobre el potasio.

Solución
a) Si T es la energía necesaria para arrancar un electrón del fotocátodo de potasio, la energía cinética máxima que adquieren después de la incidencia de un fotón de energía $h\nu$ está dada por:

$$E_{max} = h\nu - T = \frac{hc}{\lambda} - T$$

Para $\lambda_1 = 253{,}7\ nm$ se tiene $E_{max_1} = 3{,}14\ eV$, y para $\lambda_2 = 589\ nm$, $E_{max_2} = 0{,}36\ eV$, a partir de estos datos:

$$E_{max_1} - E_{max_2} = 2{,}78\ eV = hc\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right)$$

$$2{,}78\ eV = h\left(\frac{1}{253{,}7} - \frac{1}{589}\right) \times 3 \times 10^8 \times 10^9\ \ s^{-1}$$

$$2{,}78\ eV = h \times 2{,}25 \times 10^{-3} \times 3 \times 10^8 \times 10^9\ \ s^{-1}$$

Se obtiene finalmente:

$$h = \frac{2{,}78}{2{,}25 \times 3 \times 10^{14}}\ \ eVs = 4{,}1 \times 10^{-15}\ \ eVs$$

Recordando que $1\ eV = 1{,}6 \times 10^{-19}\ J$, se obtiene también:

$$h = 4{,}1 \times 1{,}6 \times 10^{-34}\ \ Js \sim 6{,}6 \times 10^{-34}\ \ Js$$

b) La energía mínima que se puede aplicar para extraer a un electrón corresponde a T. Podemos calcularla a partir de

$$E_{max_1} = \frac{hc}{\lambda_1} - T$$

$$T = \frac{hc}{\lambda} - E_{max_1} = \frac{4{,}1 \times 10^{-15} \times 3 \times 10^17}{253{,}7} - 3{,}14\ \ eV$$

$$T = \frac{4{,}1 \times 3 \times 10^2}{253{,}7} - 3{,}14\ \ eV = 1{,}7\ \ eV$$

c) Se debe tener:

$$\frac{hc}{\lambda} - T \geq 0$$

Es decir:

$$\frac{hc}{T} \geq \lambda$$

La máxima longitud de onda permitida es:

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{T} = \frac{4{,}1 \times 10^{-15} \ \ eVs \ \ 3 \times 10^{8} \ \ ms^{-1}}{1{,}7 \ eV} = \frac{12{,}3}{1{,}7} \times 10^{-7} \ m$$

$$\lambda_{max} = 7{,}24 \times 10^{-7} \ m = 0{,}72 \ \ \mu m$$

Problema 2: Flujo de fotones

a) Una antena de radio emite en la frecuencia de 1 Mhz con una potencia de 1 kW, ¿cual es el número de fotones emitidos por segundo?.
b) Una estrella de magnitud 1 emite un flujo luminoso sobre la tierra de $S = 1{,}6 \times 10^{-10} \ Wm^{-2}$ a una longitud de onda media de 556 nm. ¿Cuántos fotones por segundo atraviesan una pupila de 12 mm^2?

Solución
a) La energía de cada fotón emitido es

$$E_{ph} = h\nu = 6{,}6 \times 10^{-34} \times 10^{6} = 6{,}6 \times 10^{-28} \ J$$

El número de fotones emitidos por segundo es:

$$N = \frac{P}{E_{ph}} = \frac{10^{3}}{6{,}6 \times 10^{-28}} \ s^{-1} = 1{,}5 \times 10^{30} \ s^{-1}$$

b) Cada fotón de 556 nm tiene una energía:

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6{,}6 \times 10^{-34} \times 3 \ 10^{8}}{556 \times 10^{-9}} = 3{,}56 \times 10^{-19} \ \ J$$

De forma que el flujo de fotones por unidad de área y tiempo es:

$$\Phi = \frac{S}{E_{ph}} = \frac{1{,}6}{3{,}56} \times 10^{9} \sim 4{,}5 \times 10^{8} \ \ s^{-1}m^{2}$$

Finalmente, el número de fotones que atraviesa una pupila de 12 mm^2 es:

$$N = A\Phi = 12 \times 10^{-6} \times 4{,}5 \times 10^{8} = 5400$$

Problema 3: Ordenes de magnitud y longitud de onda de de Broglie

Calcule la longitud de onda de de Broglie de:
a) Un electrón de 100 eV.
b) Un neutrón térmico. Compare con las dimensiones atómicas.

Solución
a) Un electrón de 100 eV tiene un momentum de magnitud:

$$p = \sqrt{2mE} = \frac{h}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Considerando que $m = 9 \times 10^{-31}\ kg$:

$$\lambda = \frac{6{,}6 \times 10^{-34}}{\sqrt{18 \times 10^{-31} \times 1{,}6 \times 10^{-17}}} = \frac{6{,}6 \times 10^{-10}}{\sqrt{18 \times 1{,}6}} = 1{,}2 \times 10^{-10}\ m = 0{,}12\ nm$$

b) Un neutrón térmico posee una energía igual a $kT = 25\ \ meV$ a $T = 300K$. Además, $m_n \approx 2000 m_e$:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6{,}6 \times 10^{-34}}{\sqrt{36 \times 10^{-28} \times 25 \times 1{,}6 \times 10^{-22}}} = \frac{6{,}6 \times 10^{-9}}{\sqrt{36 \times 25 \times 1{,}6}} = 0{,}17\ nm$$

Ambas longitudes de onda son comparables con las distancias atómicas y pueden ser utilizadas en experiencias de difracción de átomos y moléculas.

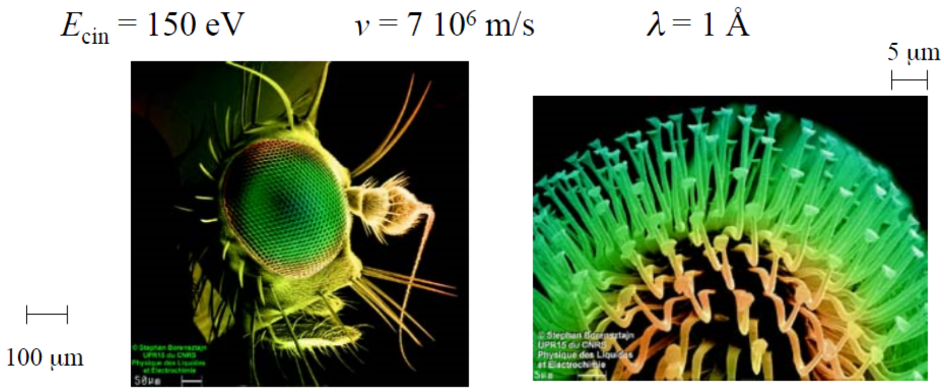


Figura 4: Utilización de ondas de de Broglie en un microscopio electrónico. Con longitudes de onda suficientemente cortas, se pueden ver detalles muchos más finos que con un microscopio óptico.

Problema 4: Longitudes de onda de de Broglie en el dominio relativista

En física de altas energías, se construyen aceleradores de electrones de energía superior a los 100 GeV. ¿Cuál es la longitud de onda de de Broglie de estos electrones? ¿Por qué energías tan altas son necesarias? Recuerde que la relación relativista entre energía y momentum es $E = \left(p^2c^2 + m^2c^4\right)^{1/2}$.

Solución

Se tiene:

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

$$\frac{h^2}{\lambda^2}c^2 = E^2 - m^2c^4$$

Notar que $mc^2 = 9 \times 10^{-31} \times 9 \times 10^16 \ \ J = 8{,}1 \times 10^{-14} \ J \sim 5 \times 10^5 eV << 100 GeV$. De esta forma, podemos despreciar la energía en reposo del electrón y escribir:

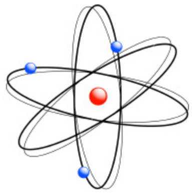
$$c^2p^2 = \frac{h^2}{\lambda^2}c^2 \approx E^2 \rightarrow \lambda = \frac{hc}{E}$$

$$\lambda = 6{,}6 \times 10^{-34} \frac{3 \times 10^8}{10^{11} \times 1{,}6 \times 10^{-19}} = \frac{6{,}6 \times 3}{1{,}6} \times 10^{-18} = 1{,}2 \times 10^{-17} \ m$$

Para estudiar la materia a escalas inferiores al fermi ($10^{-15} \ m$) son necesarias longitudes de onda mucho más pequeñas, como las de un electrón ultra-relativista.

Problema 5: Átomo Clásico: Inestabilidad de la materia

La visión clásica del átomo consiste en electrones orbitando un núcleo de carga positiva. El caso más simple es el del átomo de Hidrógeno, donde se tiene un protón en el núcleo, y un único electrón. Consideraremos el caso en que inicialmente el electrón se encuentra en una órbita circular en torno al protón. Como el electrón se encuentra sometido a una aceleración, la electrodinámica clásica predice que éste radiará energía, de forma que la órbita es **inestable** y el electrón finalmente colapsará hacia el centro del núcleo. Estime el tiempo que demora el electrón en decaer.



Solución

Sea $\vec{r}(t)$ la posición del electrón al instante t respecto al origen. De esta forma, el momento dipolar de esta distribución de carga es:

$$\vec{p}(t) = -e\vec{r}(t)$$

y entonces

$$\frac{d^2\vec{p}(t)}{dt^2} = -e\vec{a}(t) = -\frac{e}{m}\vec{F}(t)$$

donde $\vec{F}(t)$ es la fuerza electrostática:

$$\vec{F}(t) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r(t)^2}\hat{r}$$

$$\frac{d^2\vec{p}(t)}{dt^2} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)\left(\frac{e}{m}\right)\frac{e^2}{r(t)^2}\hat{r}(t)$$

La potencia emitida por el electrón está dada por la fórmula de Larmor:

$$P = \left(\frac{\mu_0}{6\pi c}\right)\left|\frac{d\vec{p}}{dt^2}\right|^2$$

$$P = \left(\frac{\mu_0}{6\pi c}\right)\frac{e^6}{\left(4\pi\epsilon_0\right)^2 m^2 r(t)^4}$$

Esta potencia corresponde a la tasa de pérdida de energía mecánica, es decir:

$$\frac{dE}{dt} = -P$$

donde la energía de la órbita está dada por:

$$E(t) = -\frac{1}{2}\left\{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r(t)}\right\}$$

Entonces:

$$\frac{dE(t)}{dt} = \frac{dE}{dr}\frac{dr}{dt} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r^2}\right)\frac{dr}{dt} = -P$$

Esto da:

$$\left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r^2}\right)\frac{dr}{dt} = -\left(\frac{\mu_0}{6\pi c}\right)\frac{e^6}{\left(4\pi\epsilon_0\right)^2 m^2 r(t)^4}$$

$$\frac{dr(t)}{dt} = -\left(\frac{\mu_0}{6\pi c}\right)\frac{e^4}{2\pi\epsilon_0 m^2 r(t)^2} = -\left(4\frac{\mu_0\epsilon_0}{6c}\right)\frac{e^4}{8\pi^2\epsilon_0^2 m^2 r(t)^2} = -\frac{4}{3}\frac{e^4}{\left(4\pi\epsilon_0\right)^2 m^2 c^3 r(t)^2}$$

Diremos que inicialmente la distancia electrón-protón es el **radio de Bohr**:

$$r(0) = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \sim 5\times 10^{-11}\ \ m$$

Se tiene entonces

$$\int_{a_0}^{0} dr\ r^2 = -\frac{4}{3}\frac{e^4}{\left(4\pi\epsilon_0\right)^2 m^2 c^3}\int_0^{\tau} dt$$

donde τ es el tiempo de decaimiento. Se obtiene:

$$\frac{1}{3}a_0^3 = \frac{4}{3}\frac{e^4}{\left(4\pi\epsilon_0\right)^2 m^2 c^3}\tau$$

$$\tau = \frac{1}{4}a_0^3\frac{\left(4\pi\epsilon_0\right)^2 m^2 c^3}{e^4} = \frac{\left(4\pi\epsilon_0\right)^5 \hbar^6 c^3}{4me^{10}}$$

El factor $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \sim \frac{1}{137}$ se llama **Constante de estructura fina**, y entonces:

$$\tau = \frac{1}{8\pi\alpha^5}\left(\frac{2\pi\hbar}{mc^2}\right) \approx 1{,}6\times 10^{-11}\ s$$

Problema 6: Principio de incertidumbre

Considere una función $f(k)$ y suponga que $|f(k)|^2$ es la lei de probabilidad de la variable aleatoria k, luego está normalizada a 1:

$$\int_{\mathbb{R}} dk \; |f(k)|^2 = 1$$

Con esta ley de probabilidad, uno puede definir el valor medio $\langle k \rangle$ de k. Mediante un cambio de variable, $k = q + \langle k \rangle$ uno puede pasar a la variable centrada q de media nula. Supondremos que esto ya ha sido hecho y seguiremos llamando k a la variable centrada. La varianza de k será entonces

$$\Delta k^2 = \int_{\mathbb{R}} dk \; k^2 |f(k)|^2$$

A causa del teorema de la isometría, la transformada de Fourier $g(x)$ de $f(k)$ verifica $\int_{\mathbb{R}} dx \;\; |g(x)|^2 = 1$. La función $|g(x)|^2$ puede ser entonces considerada como la ley de probabilidad de la variable x, que será centrada $\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \; x|g(x)|^2 = 0$, de lo contrario, por un cambio de variable uno puede pasar a una variable centrada (una traslación en x no afecta $|f(k)|^2$). La varianza de x es entonces

$$\Delta x^2 = \int_{\mathbb{R}} dx \; x^2 |f(x)|^2$$

Demuestre el siguiente teorema:

Para toda ley de probabilidad f, se tiene la desigualdad:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

Solución

Consideremos la integral:

$$I = \int_{\mathbb{R}} dk \; |kf(k) + \lambda \frac{df}{dk}|^2, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Se tiene:

$$I = \int_{\mathbb{R}} dk \; k^2 |f(k)|^2 + \lambda \int_{\mathbb{R}} dk \; k \left(f^* \frac{df}{dk} + \frac{df^*}{dk} f \right) + \lambda^2 \int_{\mathbb{R}} dk \; |\frac{df}{dk}|^2$$

El primer término es igual a Δk^2, el segundo, después de una integración por partes da:

$$\int_{\mathbb{R}} dk \; k \frac{d|f|^2}{dk} = \left(k|f|^2 \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{\mathbb{R}} dk \; |f|^2 = -1$$

Finalmente, para el tercer término, se debe notar que df/dk es la transformada de Fourier de $-ixg(x)$. Entonces:

$$\int_{\mathbb{R}} dk \; |\frac{df}{dk}|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx \; x^2 |g(x)|^2 = \Delta x^2$$

Así:

$$I = \Delta k^2 - \lambda + \lambda^2 \Delta x^2$$

Y se tiene $I \geq 0, \ \ \forall \lambda \in \mathbb{R}$, es decir:

$$1 - 4\Delta x^2 \Delta k^2 \leq 0 \ \ \rightarrow \ \ \Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

Esta relación de incertidumbre muestra que mientras más concentrado sea el soporte de una función, más extendido será el soporte de su transformada de Fourier. Se puede mostrar que la igualdad se obtiene para el caso en que ambas funciones son una gaussiana.

Problema 7: Transformadas de Fourier

Definimos el paquete de ondas a $t = 0$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp \ \varphi(p) e^{ipx/\hbar}$$

donde $\varphi(p)$ corresponde a la función de onda en el espacio de momentum. Calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, Δx, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ y Δp para el sistema descrito por la función de onda:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{x^2 + a^2}, \quad a \in \mathbb{R}^+$$

Obtenga $\Delta x \Delta p$.

Solución

Calculamos en primer lugar:

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \ x|\psi(x)|^2 = \frac{2a^3}{\pi} \int_{\mathbb{R}} dx \ \frac{x}{(x^2 + a^2)^2} = 0$$

Es claro pues $|\psi|^2$ es simétrica en torno al origen. Además:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \ x^2|\psi(x)|^2 = \frac{2a^3}{\pi} \int_{\mathbb{R}} dx \ \frac{x^2}{(x^2 + a^2)^2} = \frac{2a^2}{\pi} \int_{\mathbb{R}} du \ \frac{u^2}{(u^2 + 1)^2}$$

Consideremos la siguiente función de $\lambda \in \mathbb{R}$:

$$I(\lambda) := \int_{\mathbb{R}} du \frac{1}{(\lambda u^2 + 1)}$$

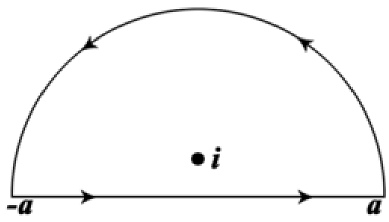
Se tiene:

$$\frac{dI(\lambda)}{d\lambda} = -\int_{\mathbb{R}} du \frac{u^2}{(\lambda u^2 + 1)^2}$$

Por otro lado:

$$I(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_{\mathbb{R}} d\mu \frac{1}{(\mu^2 + 1)}$$

Consideremos la integral de la función $\mathbb{C} \to 1/(1+z^2)$ sobre una curva cerrada Γ consistente del intervalo $[-R, R]$ en $\mathbb{R}$ y de un semicírculo de radio R, con $R > 1$.



El teorema de Cauchy da:

$$\oint_\Gamma \frac{dz}{1+z^2} = \oint_\Gamma \frac{dz}{(z-i)(z+i)} = 2\pi i \left\{\frac{1}{z+i}\right\}\Big|_{z=i} = \pi$$

Es decir:

$$\int_{[-R,R]} \frac{d\mu}{1+\mu^2} + \int_0^\pi d\vartheta\ \frac{iRe^{i\vartheta}}{1+R^2e^{2i\vartheta}} = \pi$$

y

$$|\int_0^\pi d\vartheta\ \frac{iRe^{i\vartheta}}{1+R^2e^{2i\vartheta}}| \leq \int_0^\pi d\vartheta\ \frac{R}{|1+R^2e^{i2\vartheta}|} \leq \int_0^\pi d\vartheta\ \frac{R}{R^2-1} = \frac{\pi R}{R^2-1}$$

Tomando el límite cuando $R \to 0$ obtenemos:

$$I(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \int_\mathbb{R} d\mu \frac{1}{(\mu^2+1)} = \frac{\pi}{\sqrt{\lambda}}$$

Luego

$$\frac{dI(\lambda)}{d\lambda} = -\frac{\pi}{2\lambda^3} = -\int_\mathbb{R} du \frac{u^2}{(\lambda u^2+1)^2}$$

Se obtiene elegantemente:

$$\frac{\pi}{2\lambda^3} = \int_\mathbb{R} du \frac{u^2}{(\lambda u^2+1)^2}$$

Finalmente:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{2a^2}{\pi} \int_\mathbb{R} du \frac{u^2}{(\lambda u^2+1)^2}\Big|_{\lambda=1} = a^2$$

Ahora, una forma de obtener $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ y Δp consiste en obtener la ley de probabilidad $|\varphi(p)|^2$:

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_\mathbb{R} dx\ \psi(x) e^{-ipx/\hbar} = \sqrt{\frac{a^3}{\pi^2\hbar}} \int_\mathbb{R} dx\ \frac{e^{-ipx/\hbar}}{x^2+a^2}$$

Para ello, calculemos la transformada de Fourier de $f(k) = e^{-a|k|}$:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_\mathbb{R} dk\ e^{-a|k|} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{\int_{-\infty}^0 dk\ e^{k(a+ix)} + \int_0^\infty dk\ e^{-k(a-ix)}\right\}$$

Dado que $a > 0$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{1}{(a+ix)} + \frac{1}{(a-ix)} \right\} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{(a^2+x^2)}$$

De forma que:

$$f(k) = e^{-a|k|} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx\ e^{-ikx} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{a}{(a^2+x^2)} = \frac{a}{\pi} \int_{\mathbb{R}} dx\ \frac{e^{-ikx}}{(a^2+x^2)}$$

Con esto:

$$\int_{\mathbb{R}} dx\ \frac{e^{-ipx/\hbar}}{(a^2+x^2)} = \frac{\pi}{a} e^{-a|p|/\hbar}$$

y se obtiene

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{a}{\hbar}} e^{-a|p|/\hbar}$$

claramente $|\varphi(p)|^2$ es simétrica en torno al origen, de manera que:

$$\langle p \rangle = \int_{\mathbb{R}} dp\ p |\varphi(p)|^2 = 0$$

Por último:

$$\langle p^2 \rangle = \frac{a}{\hbar} \int_{\mathbb{R}} dp\ p^2 e^{-2a|p|/\hbar} = \frac{\hbar^2}{8a^2} \int_{\mathbb{R}} du\ u^2 e^{-|u|}$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{8a^2} \left\{ \int_{-\infty}^{0} du\ u^2 e^{u} + \int_{0}^{\infty} du\ u^2 e^{-u} \right\}$$

Las dos integrales del último término son iguales y valen 2, de forma que:

$$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}$$

Finalmente:

$$\Delta x \Delta p = a \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}$$

Problema 8: Evolución de un paquete de ondas libre

Sea $\psi(x,t)$ el paquete de ondas de una partícula libre que se desplaza a lo largo del eje x.

a) Si $\langle x\rangle_t$ es el valor medio de la posición al instante t, demuestre que:

$$\langle x\rangle_t = \langle x\rangle_0 + v_0 t$$

donde

$$v_0 = -\frac{i\hbar}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\, \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x}$$

es una constante que tiene dimensiones de velocidad.

b) Muestre que la derivada temporal de $\langle x^2\rangle_t$ se escribe:

$$\frac{d\langle x^2\rangle_t}{dt} = A(t) \quad \text{con} \quad A(t) = \frac{i\hbar}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\, x\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

c) Calcule la derivada temporal de $A(t)$ y muestre que:

$$\frac{dA}{dt} = B(t) \quad \text{con} \quad B(t) = \frac{2\hbar^2}{m^2}\int_{\mathbb{R}} dx\, \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

d) Muestre que $B(t)$ es constante.

e) Definiendo

$$v_1^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}\int_{\mathbb{R}} dx\, \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

y $\zeta_0 = A(0)$, muestre que:

$$\langle x^2\rangle_t = \langle x^2\rangle_0 + \zeta_0 t + v_1^2 t^2$$

f) Muestre que se satisface:

$$\Delta x_t^2 = \Delta x_0^2 + \zeta_1 t + \Delta v^2 t^2$$

con

$$\zeta_1 = \zeta_0 - 2x_0 v_0$$

g) Sea ahora $\psi(p,t)$ la amplitud de probabilidad del momentum del paquete de ondas. Muestre que $\langle p\rangle = mv_0$, reinterprete el resultado encontrado en la parte a).

h) Demuestre que $(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = m^2\Delta v^2$, y reinterprete el resultado de la parte f).

i) **Aplicación numérica**: Note que a partir del resultado encontrado en f), para valores de t suficientemente grandes, $\Delta x_t \approx t\frac{\Delta p}{m}$. Suponga que en $t=0$, un electrón se encuentra localizado en un volumen de la talla de 1 átomo, es decir $\Delta x_0 \approx 10^{-10}$ m. Calcule Δx después de 1 segundo. Para una masa de 10^{-3} g de agua, localizada con una precisión de $\Delta x \approx 1$ mm, ¿cuánto tiempo debe transcurrir para que $\Delta x \approx 2mm$?. Interprete !

Solución

a) Tenemos:

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

Luego:

$$\frac{d\langle x\rangle_t}{dt} = \int_{\mathbb{R}} dx\ x\left\{\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\psi(x,t)^* + \psi(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)^*}{\partial t}\right\}$$

A partir de la ecuación de Schrodinguer obtenemos:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{3}$$

y

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)^*}{\partial x^2} \tag{4}$$

De forma que:

$$\frac{d\langle x\rangle_t}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathbb{R}} dx\ x\left\{\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\psi(x,t)^* - \psi(x,t)\frac{\partial^2\psi(x,t)^*}{\partial x^2}\right\}$$

Pero:

$$x\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^* - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right\} = \frac{d}{dx}\left(x\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)\right) - \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Suponiendo que el término de borde se anula,

$$\frac{d\langle x\rangle_t}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathbb{R}} dx\ \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -\frac{i\hbar}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\ \frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* = v_0$$

Falta mostrar que v_0 es constante. Para ello:

$$\frac{dv_0}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathbb{R}} dx\ \left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\psi + \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\right\}$$

$$\frac{dv_0}{dt} = \frac{\hbar^2}{4m^2}\int_{\mathbb{R}} dx\ \left\{\frac{\partial^3\psi^*}{\partial x^3}\psi - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right\}$$

Los dos términos del medio forman una derivada total. Luego:

$$\frac{dv_0}{dt} = \frac{\hbar^2}{4m^2}\int_{\mathbb{R}} dx\ \left\{\frac{\partial^3\psi^*}{\partial x^3}\psi + \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right\}$$

Y

$$\left\{\frac{\partial^3\psi^*}{\partial x^3}\psi + \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right\} = \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi + \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

$$= \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi + \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

Y se deduce que v_0 es una constante.

b) Se tiene:

$$\langle x^2\rangle_t = \int_{\mathbb{R}} dx\ x^2\psi(x,t)\psi^*(x,t)$$

de forma que:

$$\frac{d\langle x^2\rangle_t}{dt} = \int_{\mathbb{R}} dx\ x^2\left(\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\psi^*(x,t) + \psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}\right) \tag{5}$$

Introduciendo (**??**) y (**??**) en (**??**) se obtiene:

$$\frac{d\langle x^2\rangle_t}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{\mathbb{R}} dx\ x^2\left\{\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\psi^*(x,t) - \psi(x,t)\frac{\partial^2\psi(x,t)^*}{\partial x^2}\right\}$$

Por otro lado, se tiene:

$$\frac{d}{dx}\left(x^2\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi - x^2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = 2x\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + x^2\left\{\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right\}$$

El segundo término del lado derecho es igual al integrando (salvo por un signo). Luego, suponiendo que el término de borde se anula:

$$\frac{d\langle x^2\rangle_t}{dt} = \frac{i\hbar}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\ x\left\{\psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\psi^*(x,t)\right\} = A(t)$$

c) La derivada temporal de A está dada por:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i\hbar}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\ x\left\{\frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial\psi^*}{\partial x} + \psi\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\right\}$$

Nuevamente se utiliza las ecuaciones (**??**) y (**??**) para reemplazar las derivadas temporales:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m^2}\int_{\mathbb{R}} dx\ x\left\{-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\frac{\partial^3\psi^*}{\partial x^3} + \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right\}$$

Notando que

$$x\left\{\psi\frac{\partial^3\psi^*}{\partial x^3} + \psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\right\} = \frac{d}{dx}\left(x\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x^2} + x\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x^2} - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} - x\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Y suponiendo que la derivada total no contribuye a la integral:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{-\hbar^2}{m^2}\int_{\mathbb{R}} dx\ x\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x} + \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\} + \frac{1}{2}\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Pero

$$x\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}+\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}=\frac{d}{dx}\left(x\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

y

$$\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{d}{dx}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)-2\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

Así:

$$\frac{dA}{dt}=\frac{2\hbar^2}{m^2}\int_{\mathbb{R}}dx\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}=B(t)$$

d) Ahora se debe mostrar que B es una constante. Para ello evaluamos:

$$\frac{dB}{dt}=\frac{2\hbar^2}{m^2}\int_{\mathbb{R}}dx\,\left\{\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\frac{\partial\psi^*}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)\right\}$$

$$\frac{dB}{dt}=\frac{i\hbar^3}{m^3}\int_{\mathbb{R}}dx\,\left\{\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\frac{\partial^3\psi^*}{\partial x^3}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}=\frac{i\hbar^3}{m^3}\int_{\mathbb{R}}dx\,\frac{d}{dx}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}=0$$

$B(t)$ es una constante.

e) Si ahora se define $v_1^2=\frac{1}{2}B$, y $\zeta_0=A(0)$, se cumple:

$$\frac{d^2\langle x^2\rangle_t}{dt^2}=\frac{dA(t)}{dt}=2v_1^2$$

Entonces:

$$\frac{d\langle x^2\rangle_t}{dt}=2tv_1^2+\underbrace{\frac{d\langle x^2\rangle_0}{dt}}_{\zeta_0}$$

Finalmente:

$$\langle x^2\rangle_t=\langle x^2\rangle_0+\zeta_0 t+t^2v_1^2$$

f) Tenemos:

$$\Delta x_t^2=\langle x^2\rangle_t-\langle x\rangle_t^2$$

De a) y e), se obtiene:

$$\Delta x_t^2=\langle x^2\rangle_0+\zeta_0 t+t^2v_1^2-\left(\langle x\rangle_0+v_0\,t\right)^2$$

$$\Delta x_t^2=\underbrace{\langle x^2\rangle_0-\langle x\rangle_0^2}_{\Delta x_0^2}+\underbrace{(\zeta_0-2\langle x\rangle_0 v_0)}_{\zeta_1}t+t^2\underbrace{\left(v_1^2-v_0^2\right)}_{\Delta v^2}$$

Es decir, la varianza de la posición depende cuadráticamente del tiempo:

$$\Delta x_t^2=\Delta x_0^2+\zeta_1 t+\Delta v^2 t^2$$

Δx_t alcanza un valor mínimo para un cierto valor de t, para después crecer en función del tiempo de forma aproximadamente lineal para t suficientemente grande.

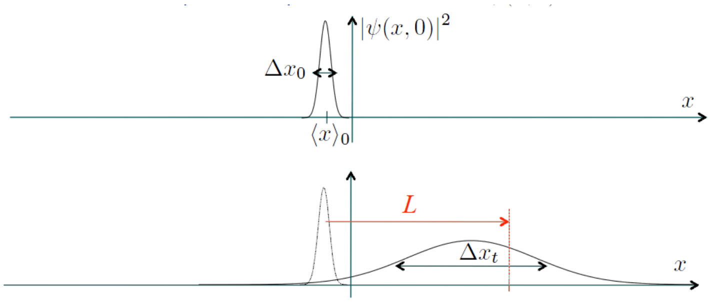


Figura 5: La dispersión Δx en la posición crece en el tiempo de forma lineal para valores de t suficientemente grandes.

g) Se tiene :

$$v_0 = -\frac{i\hbar}{m}\int_{\mathbb{R}} dx\ \psi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Considerando que la transformada de Fourier de $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$ es $i\frac{p}{\hbar}\varphi(p)e^{-iEt/\hbar}$, y utilizando el hecho de que la transformada de Fourier es una isometría :

$$v_0 = \frac{1}{m}\int_{\mathbb{R}} dp\ p\varphi(p)e^{-iEt/\hbar}\varphi(p)^* e^{iEt\hbar} = \frac{1}{m}\int_{\mathbb{R}} dp\ p|\varphi(p)|^2$$

Finalmente,

$$v_0 = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

Es decir, el centro del paquete de ondas descibre un movimiento uniforme, con un momentum $\langle p \rangle$:

$$\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 + \frac{\langle p \rangle}{m} t$$

Escrito de otra manera:

$$m\frac{d\langle x \rangle_t}{dt} = \langle p \rangle$$

donde el valor esperado del momentum es constante en el tiempo (como podría esperarse de una partícula libre).

h) Se tiene

$$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle - m^2 v_0^2$$

$$= \int_{\mathbb{R}} dp\, p^2|\varphi(p)|^2 - m^2v_0^2 = \hbar^2 \int_{\mathbb{R}} dx\, \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \psi^*}{\partial x} - m^2v_0^2 = m^2(v_1^2 - v_0^2) = m^2\Delta v^2$$

Es decir, la evolución de la varianza de la posición se escribe:

$$\Delta x_t^2 = \Delta x_0^2 + \zeta_1 t + \frac{\Delta p^2}{m^2}t^2$$

i) Para valores de t suficientemente grandes, $\Delta x \approx \frac{1}{m}\Delta p$. Supongamos un electrón localizado en $t = 0$ en una región de tamaño

$$\Delta x_0 = 10^{-10} \;\; m$$

El principio de incertidumbre establece:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x_0}$$

De forma que después de 1 segundo:

$$\Delta x_{t=1} \geq \frac{\hbar}{2\Delta x_0 m} = \frac{6{,}6 \times 10^{-34}}{2 \times \pi \times 2 \times 9 \times 10^{-31} \times 10^{-10}} \sim 600 \; km$$

Es decir, luego de un segundo la función de onda ha literalmente explotado, un segundo es un tiempo extremadamente largo en la escala atómica. Un electrón se deslocaliza en un tiempo mucho más pequeno sobre distancias macroscópicas en un cristal, como ocurre en el caso de fenómenos de conducción électrica en semiconductores.

Si ahora consideramos una masa de $m = 10^{-3}\; g$, localizada con una precisión $\Delta x_0 = 1 \;\; mm$, la incertidumbre en el momentum cumple:

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{2\Delta x_0}$$

Para que $\Delta x_t \sim 2 \;\; mm$, se debe tener:

$$2 \times 10^{-3} = t\frac{\Delta p}{m}$$

$$t = \frac{2 \times 10^{-3} \times m}{\Delta p} = \frac{4\Delta x_0 \times 10^{-3} \times m}{\hbar}$$

$$t = \frac{4 \times 10^{-12}}{\hbar} \sim 4 \times 10^{22} \;\; s \;\sim 10^{15} \;\; \text{años}$$

Los efectos cuánticos son despreciables en este caso.

Resumen

1. Una partícula libre se caracteriza por una función de onda $\psi(\vec{x},t)$, cuyo módulo cuadrado $|\psi(\vec{x},t)|^2$ es una distribución de probabilidad para la posición, que es una variable aleatoria en mecánica cuántica.

2. En general, la función de onda es una superposición de ondas de de Broglie, que son solución de la ecuación de Schrodinguer libre. El módulo de la transformada de Fourier de ψ se interpreta como la distribución de probabilidad del momentum, que también es una variable aleatoria. El principio de incertidumbre es visto aquí como una propiedad de la transformada de Fourier:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

3. La ley de probabilidades del momentum $|\varphi(p)|^2$ es estacionaria, no evoluciona en el tiempo. De esta forma, un paquete de ondas libre tiene un momentum medio $\langle p \rangle$ fijo en el tiempo, con una varianza Δp igualmente fija.

4. El valor medio de la posición del paquete de ondas describe una trayectoria con momentum constante e igual a $\langle p \rangle$. La varianza de x para t suficientemente grande aumenta de forma lineal $\Delta x_t \sim \Delta p/m\ t$. Una partícula cuántica libre se deslocaliza a medida que el tiempo aumenta. A escalas macroscópicas, este aumento en el tiempo es suficientemente lento como para no ser percibido, y las imprecisiones experimentales superan largamente las varianzas cuánticas en posición y momentum: la mecánica clásica no percibe estas incertidumbres.