8.4 La función de onda del estado fundamental de una partícula confinada en una caja unidimensional de longitud *L* es

$$\boldsymbol{\psi = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)}$$

Suponga que la caja tiene 10,0 nm de longitud. Calcule la probabilidad de que la partícula esta (a) entre x = 4,95 nm y 5,05 nm, (b) entre x = 1,95 nm y 2,05 nm, (c) entre x = 9,90 nm y 10,00 nm, (d) en la mitad derecha de la caja, (e) en el tercio central de la caja.

Solución: La probabilidad se calcula directamente como la integral de la densidad de probabilidad ψ^2 sobre el intervalo que se pide:

$$P_{[a,b]} = \int_a^b \psi^* \psi d\tau = \int_a^b \left(\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right)^* \left(\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right) dx$$

$$P_{[a,b]} = \frac{2}{L}\int_a^b \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

Recordemos que: $\int (ax)^2\, dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$ así que:

$$P_{[a,b]} = \frac{2}{L}\left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4\pi} Sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right]_a^b = \frac{b-a}{L} - \frac{1}{2\pi} Sin\left(\frac{2\pi b}{L}\right) + \frac{1}{2\pi} Sin\left(\frac{2\pi a}{L}\right)$$

a) $$P_{[4.95,5.05]} = \frac{5.05nm - 4.95nm}{10nm} - \frac{1}{2\pi} Sin\left(\frac{2\pi(5.05nm)}{10nm}\right) + \frac{1}{2\pi} Sin\left(\frac{2\pi(4.95nm)}{10nm}\right) = 0.02$$

8.6 Las funciones de onda normalizadas de una partícula confinada a moverse en una circunferencia son $\boldsymbol{\psi(\phi)} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{e^{-im\phi}}$ donde $\boldsymbol{m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \dots}$ y $\boldsymbol{0 \le \phi \le 2\pi}$. Determine $\boldsymbol{< \phi >}$

Solución: El valor esperado de una variable dinámica ϕ es:

$$< \phi > = \int \psi^* \phi \psi d\tau = \int \left(\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{e^{-im\phi}} \right)^* \phi \left(\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{e^{-im\phi}} \right) d\phi$$

$$< \phi > = \int \left(\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{e^{im\phi}} \right) \phi \left(\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{e^{-im\phi}} \right) d\phi = \int \frac{1}{2\pi} \phi d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi d\phi$$

$$< \phi > = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\phi^2}{2} \right]_0^{2\pi} = \pi$$

8.14 (a) Dos funciones de onda de estados excitados (no normalizadas) del átomo de H son

$$(i)\ \psi = \left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-r/a_0} \qquad\qquad (ii)\psi = r \sin\theta \cos\phi\, e^{-r/a_0}$$

(a) Normalice ambas funciones a 1. (b) Verifique si esas dos funciones son mutuamente ortogonales.

Solución: i) Para normalizar la función de onda ψ debemos encontrar $N = Q^{-\frac{1}{2}}$

$$Q = <\psi|\psi> = \int \psi^* \psi d\tau = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-\frac{r}{a_0}}\right)^* \left(\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-\frac{r}{a_0}}\right) r^2 sin(\theta) d\phi\, d\theta\, dr$$

$$Q = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(2 - \frac{r}{a_o}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 sin(\theta) d\phi\, d\theta\, dr$$

$$Q = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(4 - \frac{2r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 sin(\theta) d\phi\, d\theta\, dr$$

$$Q = \int_0^\infty \left(4r^2 - \frac{2r^3}{a_0} + \frac{r^4}{a_0^2}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \int_0^\pi sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$Q = \left[\int_0^\infty (4r^2) e^{-\frac{2r}{a_0}} dr - \int_0^\infty \left(\frac{2r^3}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} dr + \int_0^\infty \left(\frac{r^4}{a_0^2}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}} dr\right] (2)(2\pi)$$

Recordemos que:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$Q = \left[4 * \frac{2!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3} - \frac{2}{a_0} * \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} + \frac{1}{a_0^2} * \frac{4!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^5}\right] (2)(2\pi)$$

$$Q = 4\pi \left(a_0^3 - \frac{3}{4} a_0^3 + \frac{3}{4} a_0^3\right)$$

$$Q = 4\pi a_0^3$$

La función de onda normalizada será:

$$\boldsymbol{\psi' = Q^{-\frac{1}{2}}\psi = (4\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}}$$

ii) Para verificar ortogonalidad debemos evaluar el braket $< \psi_1 | \psi_2 >$ si es cero son ortogonales y si no es que son linealmente dependientes.

$$< \boldsymbol{\psi_1} | \boldsymbol{\psi_2} > = \int \left(\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-\frac{r}{a_0}}\right)^* \left(r \sin\theta \cos\phi \, e^{-\frac{r}{a_0}}\right) d\tau$$

$$< \psi_1|\psi_2 > = \int\int\int\left(\left(2-\frac{r}{a_o}\right)e^{-\frac{r}{a_0}}\right)^*\left(r\,sin\,\theta\cos\phi\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right)r^2 sin(\theta)d\phi\,d\theta\,dr$$

$$< \psi_1|\psi_2 > = \int_0^\infty\left(2-\frac{r}{a_o}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}r^3dr\int_0^\pi \sin^2(\theta)\,d\theta\int_0^{2\pi}\cos(\phi)\,d\phi$$

La integral en ϕ se anula y por lo tanto las funciones son ortogonales

$$< \psi_1|\psi_2 > = 0$$

8.16 Determine cuales de las siguientes funciones son auto funciones del operador inversión $\hat{\imath}$ (que tiene el efecto de hacer el cambio x → -x): (a) x^3 - kx, (b) cos kx, (c) x^2 + 3x-1. Establezca el autovalor de $\hat{\imath}$ cuando sea relevante.

Solución: Debemos de aplicar el operador sobre las funciones que nos dan:

a) $\hat{\imath}(x^3 - kx) = (-x)^3 - k(-x) = -x^3 + kx$ **, no es autofunción del operador.**

b) $\hat{\imath}(cos(kx)) = cos(k(-x)) = cos(-kx) = cos(kx)$**, sí es autofunción y el autovalor asociado es 1.**

c) $\hat{\imath}(x^2 + 3x - 1) = (-x)^2 + 3(-x) - 1 = x^2 - 3x - 1$ **, no es autofunción del operador.**

TAREA PARA EL EXAMEN (PARTE 2)

8.5 La función de onda del estado fundamental de un átomo de hidrogeno es

$$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

donde a_0 = 53 pm (el radio de Bohr). (a) Calcule la probabilidad de que el electrón se encuentre en algún lugar dentro de una esfera pequeña de radio 1,0 pm centrada en el núcleo. (b) Suponga ahora que la misma esfera se coloca *$r= a_o$*. ¿Cuál es la probabilidad de que el electrón se encuentre en su interior?

8.8 Una partícula está en un estado descrito por la función de onda $\psi(x) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-ax^2}$ donde *a* es una constante y $0 \leq x < \infty$. Determine el valor esperado del conmutador de los operadores de posición y de momento.

8.13 Normalice las siguientes funciones de onda: (a) $sin(\frac{n\pi x}{L})$ en el intervalo $0 \leq x \leq L$, donde *n= 1, 2, 3, ...* (b) una constante en el intervalo $-L \leq x \leq L$, (c) $e^{-r/a}$ en el espacio tridimensional, *(d)* $xe^{-\frac{r}{2a}}$ en el espacio tridimensional. *Sugerencia:* el elemento de volumen en tres dimensiones es $d\tau = r^2 dr sin\theta d\theta d\phi$, con $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Utilice la integral del ejemplo 8.4.

8.15 Identifique cuál de las siguientes funciones son auto funciones del operador *d/dx: (a) e^{ikx}, (b) cos kx, (c) k, (d) kx, (e)* $e^{-\alpha x^2}$. Dé el correspondiente autovalor cuando corresponda.