Partícula en una caja

La función de onda de una partícula dentro de una caja de anchura $x = 0$ y $x = a$ viene dada por

$$u_n(x) = C \,\mathrm{sen}\,\frac{n\pi x}{a} \tag{1}$$

que responde a una de las soluciones de la ecuación de Schrödinger, siendo el potencial nulo en el interior de la caja e infinito en sus límites

$$\hat{H} u_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u_n(x)}{\mathrm{d}x^2} = E_n\ u_n(x) \tag{2}$$

sabemos que las funciones que buscamos tiene que cumplir la condición de que su segunda derivada coincida con la función inicial son e^{ikx}, e^{-ikx}, $\mathrm{sen}\,kx$ y $\cos kx$, que tiene que ser continua y nula en los límites, la única que se anula en $x = 0$ es la del seno y se anulará en $x = a$ si su argumento es un múltiplo entero de pi, es decir $n\pi x/a$. A cada función propia le corresponde un valor propio de la energía

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{3}$$

Las funciones propias deben estar normalizadas para representar a la partícula

$$\langle u_n \mid u_n \rangle = \int_0^a C^*\mathrm{sen}\,\frac{n\pi x}{a}\ C\ \mathrm{sen}\,\frac{n\pi x}{a}\ \mathrm{d}x = |C|^2 \int_0^a \mathrm{sen}^2\frac{n\pi x}{a}\ \mathrm{d}x = 1 \tag{4}$$

para conocer cual es la constante de integración resolvemos la integral de la derecha haciendo el cambio de variable

$$y = \frac{n\pi x}{a}\ ;\ \mathrm{d}y = \frac{n\pi}{a}\mathrm{d}x \tag{5}$$

$$\int_0^a \mathrm{sen}^2\frac{n\pi x}{a}\ \mathrm{d}x = \frac{a}{n\pi}\int_0^{n\pi} \mathrm{sen}^2 y\ \mathrm{d}y \tag{6}$$

integramos el segundo miembro de la ecuación (6) por partes

$$z = \mathrm{sen}\,y\ ;\ \mathrm{d}s = \mathrm{sen}\,y\ \mathrm{d}y \tag{7}$$

$$\mathrm{d}z = \cos y\ \mathrm{d}y\ ;\ s = -\cos y \tag{8}$$

$$\int_0^{n\pi} \mathrm{sen}^2 y\ \mathrm{d}y = [-\mathrm{sen}\,y\ \cos y]_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} -\cos^2 y\ \mathrm{d}y \tag{9}$$

en el segundo miembro de la última ecuación el primer sumando se anula y reescribimos de nuevo la ecuación haciendo uso de la relación trigonométrica entre los cuadrados del seno y coseno

$$\int_0^{n\pi} \mathrm{sen}^2 y\ \mathrm{d}y = \int_0^{n\pi} (1 - \mathrm{sen}^2 y)\ \mathrm{d}y = n\pi - \int_0^{n\pi} \mathrm{sen}^2 y\ \mathrm{d}y \tag{10}$$

$$\int_0^{n\pi} \mathrm{sen}^2 y\ \mathrm{d}y = \frac{n\pi}{2} \tag{11}$$

volvemos a la ecuación (6) y obtenemos

$$\int_0^a \mathrm{sen}^2\frac{n\pi x}{a}\ \mathrm{d}x = \frac{a}{2} \tag{12}$$

un resultado que llevado a la ecuación (4) permite conocer la constante de integración:

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{13}$$

y así la función de onda normalizada es

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \tag{14}$$