Solución Problema 3

Ayudantía 6 — Iván Gallo

Problema

Aplique la cuantización de Bohr-Sommerfeld para el caso de un electrón de masa m encerrada en un potencial de la forma $U(x) = \alpha|x|$ y halle las energías permitidas. Exprese sus resultados en la forma $E_n = E_0 n^\beta$. Halle β y E_0. Exprese E_0 en términos de h, α y m. NOTA: Haga un tratamiento unidimensional.

Solución

Para resolver el problema debemos partir del postulado de Bohr-Sommerfeld,

$$nh = \oint p \; \mathrm{d}q \ ,$$

el cual cuantiza una cantidad algo más general que solo el momentum angular (como lo hace el modelo de Bohr), y a partir de ello permite calcular las energías permitidas en un átomo. Notemos que si el momentum generalizado p fuera L, tendríamos que su coordenada generalizada asociada, q, sería ϕ. Luego, reobtendríamos la regla de cuantización de Bohr. Hay que decir que la integral cerrada anterior representa una integral sobre una oscilación. Notemos que en un régimen no relativista tendremos que $p = mv$ y el diferencial de coordenada generalizada asociada al momentum generalizado es $\mathrm{d}q = v\ \mathrm{d}t$. Luego,

$$nh = \oint mv^2 \ \mathrm{d}t = 2\oint \frac{1}{2}mv^2 \ \mathrm{d}t = \frac{2\tau}{\tau}\oint K \ \mathrm{d}t = 2\langle K\rangle\,\tau \ , \tag{1}$$

donde τ es el tiempo característico de una vuelta (periodo) y $\langle K\rangle$ es el promedio de energía cinética sobre una vuelta.

Ahora, recordemos un poco el capítulo de teoría cinética. Sabemos que los grados de libertad cuadráticos en el hamiltoniano de un sistema producen un promedio de energía de $\frac{1}{2}kT$. Un ejemplo de ello es la energía cinética en una de sus dimensiones, $K = \frac{1}{2}mv_x^2 = \frac{1}{2m}p_x^2$, razón por la cual la energía media de un gas ideal de 3-dimensiones ($H = \frac{1}{2}m[v_x^2 + v_y^2 + v_z^2]$) es de $\frac{3}{2}kT$. Una generalización de lo anterior, es hacer un tratamiento para hamiltonianos con grados de libertad ya no cuadráticos, sino elevados a alguna potencia arbitraria, digamos s, de manera que $H = Aq^s$, donde A es alguna constante de unidades correspondientes. Para este tipo de hamiltonianos, el promedio de energía que se logra obtener es $\frac{1}{s}kT$.
Sabiendo lo anterior, supongamos ahora un hamiltoniano que contenga un término de energía cinética y otro de energía potencial (U) de la siguiente forma,

$$H = K + U = \frac{p^2}{2m} + Aq^s \ .$$

Con esto tendremos que

$$E = \langle K\rangle + \langle U\rangle = \frac{1}{2}kT + \frac{1}{s}kT = \frac{s+2}{2s}kT = \frac{s+2}{s}\cdot\frac{1}{2}kT = \frac{s+2}{s}\langle K\rangle \ .$$

Luego,

$$\langle K\rangle = \frac{s}{s+2}E \ . \tag{2}$$

Ahora, haciendo uso de (1) y (2), obtenemos

$$E = \frac{s+2}{s}\frac{nh}{2\tau} \ ,$$

pero debemos considerar que nuestro caso es $U = \alpha|x|$, esto es $s = 1$, por lo tanto lo anterior resulta

$$E = \frac{3}{2}\frac{nh}{\tau} \ . \tag{3}$$

Notemos que hasta el momento todo marcha como quisiéramos, excepto por el hecho que no sabemos el tiempo τ de una oscilación. Para esto, usemos la conservación de la energía E en el sistema atómico en todo tiempo, esto es

$$E = \frac{1}{2}mv_x^2 + \alpha|x| \ ,$$
$$\implies v_x = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \alpha|x|\right)} \ .$$

Recordemos que por definición

$$v_x = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \alpha|x|\right)} \ ,$$

luego,

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \alpha|x|\right)}}$$

Debemos darnos cuenta que lo anterior basta integrarlo desde que el electron se encuentre en $x = 0$, hasta la posición en que este ya no tiene energía cinética,

$$E = \alpha|x| \implies x = \frac{E}{\alpha} \ ,$$

que dicho de otras formas es analizar un cuarto de vuelta. Por lo tanto[1]

$$\tau = \int \mathrm{d}t = 4\int_0^{E/\alpha} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \alpha x\right)}} \ .$$

En el caso de no saber resolver la integral anterior, por lo menos hay que ser capaz de reemplazar todas las variables físicas (dentro de la integral) por variables adimensionales. Esto es,

$$\tau = 4\sqrt{\frac{m}{2E}}\int_0^{E/\alpha} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1 - \frac{\alpha x}{E}}} \ ,$$

y diremos que $u = \alpha x$, con lo que obtendremos

$$\tau = \frac{4E}{\alpha}\sqrt{\frac{m}{2E}}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}u}{\sqrt{1-u}} = \frac{4}{\alpha}\sqrt{\frac{mE}{2}}\left[-2\sqrt{1-u}\right]_{u=0}^{u=1} \ ,$$

y finalmente,

$$\tau = \frac{8}{\alpha}\sqrt{\frac{mE}{2}} = \sqrt{\frac{32mE}{\alpha^2}} \ . \tag{4}$$

Por último, reemplazando (4) en (3), y despejando E, tendremos que

$$E = \left(\frac{3}{2}\right)^{2/3}\left(\frac{\alpha^2 h^2}{32m}\right)^{1/3} n^{2/3} \ ,$$

donde claramente lo anterior tiene la forma $E = E_0 n^{\beta}$.

[1]Notemos que en este rango de x podemos ignorar el valor absoluto.