FI34A-2 Física contemporánea

Semestre Primavera 2008
Profesor: Felipe Barra
Auxiliar: Ignacio Ortega

Guía de Mecánica Cuántica

Problema 1:

Sea una caja unidimensional de largo L con una partícula de masa m en su interior, libre de potencial. Se tiene por tanto la Ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = ih\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

La función de onda es nula en los bordes y cumple la condición inicial $\Psi(x, t=0) = \Psi_0(x)$.

a) Encontrar la función de onda $\Psi(x,t)$, los autoestados $(\psi_n(x))$ y las autoenergías (E_n).

Para el caso en que $\Psi_0(x)$ corresponde al Estado Fundamental: $\Psi_0(x) = \psi_1(x)$

b) Encontrar la función de onda del moméntum $\varphi(p,t)$.

c) Verificar que se cumple el Principio de Incertidumbre $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Puede que le sean útiles las siguientes integrales (Se recomienda calcularlas de todos modos):

$$\int_0^\pi \sin(n'\theta)\sin(n\theta)\,d\theta = \frac{\pi}{2}\delta_{n',n}$$

$$\int_0^\pi \cos(n'\theta)\cos(n\theta)\,d\theta = \frac{\pi}{2}\delta_{n',n}$$

$$\int_0^\pi \sin(n'\theta)\cos(n\theta)\,d\theta = 0$$

$\delta_{n',n}$ es la *Delta de Kronecker*:

$$\delta_{n',n} = \begin{cases} 1 & si\ n' = n \\ 0 & si\ n' \neq n \end{cases}$$

$$\int \theta\sin^2(\theta)\,d\theta = \frac{1}{4}\theta^2 - \frac{1}{8}\cos(2\theta) - \frac{1}{4}\theta\sin(2\theta)$$

$$\int \theta^2\sin^2(\theta)\,d\theta = \frac{1}{6}\theta^3 + \frac{1}{4}\theta\cos(2\theta) - \frac{1}{8}(2\theta^2 - 1)\sin(2\theta)$$

Problema 2:

Sea una caja bidimensional de dimensiones L_X, L_Y con una partícula de masa m en su interior, libre de potencial.

a) Plantee las condiciones de borde y encuentre los autoestados y las autoenergías. ¿Existe degeneración (autoestados diferentes con autoenergías iguales)? ¿Es degenerado el estado fundamental?

b) Para el estado fundamental, encuentre la función de onda de moméntum

c) Repita todo lo anterior para una caja tridimensional de dimensiones L_X, L_Y, L_Z.

Problema 3:

La generalización a la cuantización de la energía en el átomo de Niels Bohr corresponde a la llamada Cuantización de Bohr Sommerfeld. Plantea que en un sistema periódico unidimensional (Rotaciones, oscilaciones, etc) las cantidades conservadas sólo pueden tener ciertos valores discretos. Esto según:

$$\oint p\, dq = nh$$

Donde n es un número entero y h es la constante de Planck, y el dominio de integración es una trayectoria a lo largo de un periodo.

a) Para el átomo hidrogenoide con órbitas circulares, deduzca la cuantización del momento angular.

b) Encuentre la cuantización de la energía en un oscilador armónico.

c) El método de B-S no considera las fluctuaciones de la energía. Use el Principio de Incertidumbre para encontrar una cota para la fluctuación de la energía en el oscilador armónico en reposo. Sume este resultado a la energía cuantizada a modo de corrección.

d) Encuentre la cuantización de la energía en la caja unidimensional. Compare con el resultado del problema anterior. Intente acotar la fluctuación de la energía y comente.

Problema 4:

Encuentre la función de onda del oscilador armónico en el estado fundamental $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Para ello use un cambio de variables lineal ($\theta \sim x$) para deshacerse de todos los parámetros.

a) Estime la solución como $\psi(x) = e^{y(\theta)}$. Escriba la ecuación para $y(\theta)$. Justifique por qué podría ser un polinomio. ¿Cuál es el menor orden que puede tener?

b) Encuentre la probabilidad de que la partícula esté más allá de los límites clásicos. Comente.

c) Encuentre la función de onda del moméntum y verifique que se satisface el Principio de Incertidumbre. Para ello tenga en cuenta la siguiente integral compleja:

$$\int_{L(y)} e^{-\alpha z^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

α es un número complejo con parte real positiva y $L(y)$ es una recta en al plano complejo paralela al eje real:

$$L(y) = \{z = x + iy \in \mathbb{C} \ / \ x \in [-\infty, +\infty], \quad y \text{ es fijo}\}$$

Considere también el siguiente teorema:

$$F(\alpha) = \int_a^b f(x,\alpha)dx \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{dF}{d\alpha} = \int_a^b \frac{\partial f}{\partial \alpha} dx$$

Problema 5:

Considere el siguiente potencial: $V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U, & x > 0 \end{cases}$

Una partícula incide desde el lado izquierdo con energía cinética $E > 0$. Nos interesa saber qué tan probable es que la partícula atraviese esta barrera de potencial.

a) ¿Qué sucede según la Mecánica clásica? Tenga en cuenta la conservación de la energía.

b) Cuánticamente, la partícula está descrita por una función de onda $\psi(x)$ que satisface la Ecuación de Schrödinger:

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Encuentre una solución general de esta ecuación en la que pueda reconocer una onda incidente, una onda transmitida y una onda reflejada (¿Qué representan?). Asuma que ψ y su derivada son continuas en todo el espacio y que $E > U$.

c) Calcule los coeficientes de transmisión y reflexión, definidos según:

$$T(E) = \left|\frac{[\psi^* p \psi]_{\text{Transmitida}}}{[\psi^* p \psi]_{\text{Incidente}}}\right| \qquad R(E) = \left|\frac{[\psi^* p \psi]_{\text{Reflejada}}}{[\psi^* p \psi]_{\text{Incidente}}}\right|$$

Verifique que $T + R = 1$. Compare con la Mecánica Clásica.

d) Para el caso $0 < E < U$ calcule los coeficientes de reflexión y transmisión. Verifique que $R = 1$ y que T es función de x. Analice la convergencia de T en función de x e interprete este resultado.

Problema 6:

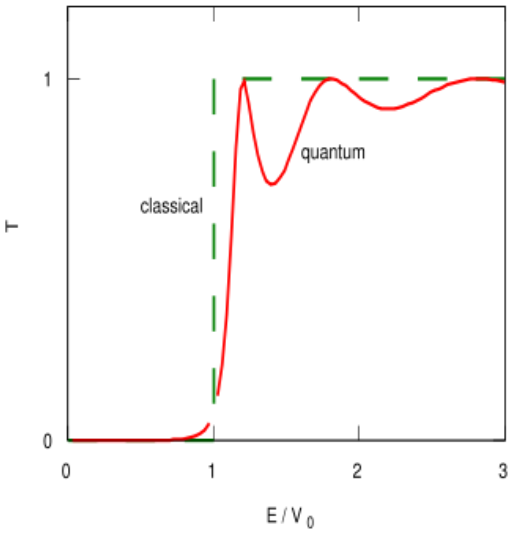
Una partícula con energía cinética E incide sobre una barrera de potencial $U > 0$ y ancho L.

a) ¿Qué sucede según la Mecánica clásica? Tenga en cuenta la conservación de la energía.

b) Demuestre que los coeficientes de reflexión y transmisión del sistema valen:

$$T(E) = \begin{cases} \dfrac{1}{1 + \dfrac{U^2 \sinh^2\left(\frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right)}{4E(U-E)}} & E < U \\ \dfrac{1}{1 + \dfrac{U^2 \sin^2\left(\frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)}\right)}{4E(E-U)}} & E > U \end{cases}$$

$$R(E) = \begin{cases} \dfrac{1}{1 + \dfrac{4E(U-E)}{U^2 \sinh^2\left(\frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right)}} & E < U \\ \dfrac{1}{1 + \dfrac{4E(E-U)}{U^2 \sin^2\left(\frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)}\right)}} & E > U \end{cases}$$



(Asuma que la función de onda y su derivada son continuas) Verifique que $T + R = 1$.

c) La figura muestra el coeficiente de transmisión como función de $\frac{E}{U}$. Apóyese en este gráfico para comparar los resultados obtenidos según la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica.

Problema 7:

Sea una barrera de potencial infinito y ancho nulo, descrita por la función *Delta de Dirac*: $V(x) = W\delta(x)$.

$$\text{Donde } \delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ \infty & \text{si } x = 0 \end{cases} \qquad \text{Además, } \int_a^b \delta(x) f(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \notin [a,b] \\ f(0) & \text{si } 0 \in [a,b] \end{cases}$$

a) Demuestre que la derivada de la función de onda satisface la siguiente condición en el origen:

$$\frac{d\psi}{dx}(0^+) - \frac{d\psi}{dx}(0^-) = \frac{2mW}{\hbar^2}\psi(0)$$

Para ello asuma que la función de onda sí es continua, integre la ecuación de Schrödinger en un intervalo $[-X, X]$ y analice el límite cuando $X \to 0$. Asuma que puede usar el T.F.C.

b) Encuentre los coeficientes de reflexión y transmisión y grafíquelos como función de E.

c) Compare este resultado con la barrera de potencial U y ancho L, en el límite: $U \to \infty$, $L \to 0$, $UL = W$.

Problema 8:

Sea una partícula de masa m en una caja de volumen $V = L_X L_Y L_Z$ sin potencial.

Mediante separación de variables demuestre que los autoestados y las autoenergías tienen la forma:

$$\psi_{n_X,n_Y,n_Z}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin\left(\frac{n_X \pi}{L_X} x\right) \sin\left(\frac{n_Y \pi}{L_Y} y\right) \sin\left(\frac{n_Z \pi}{L_Z} z\right)$$

$$E_{n_X,n_Y,n_Z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\left(\frac{n_X}{L_X}\right)^2 + \left(\frac{n_Y}{L_Y}\right)^2 + \left(\frac{n_Z}{L_Z}\right)^2\right)$$

Se pretende estimar la *densidad* de estados que tienen una misma autoenergía E. Para ello *estime* el número de estados (n_X, n_Y, n_Z) que tienen una energía menor que una cantidad E cualquiera y derive esa función de E.

Problema 9:

Sea una partícula de masa m en una caja bidimensional de superficie $A = L_X L_Y$ sin potencial.

Encuentre los autoestados y las autoenergías, y estime la densidad de estados que tienen una misma autoenergía E. El resultado le sorprenderá.

Problema 10:

Sabiendo que las energías del oscilador armónico unidimensional son de la forma $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, encuentre las autoenergías del oscilador armónico tridimensional mediante separación de variables.

Encuentre el número de autoestados con energía E, donde E es una autoenergía permitida.

Problema 11:

Considere un átomo de hidrógeno: un electrón moviéndose en torno a un protón.

Escriba la Ecuación de Schrödinger para este problema.

Es sabido que, al resolver el problema en coordenadas esféricas, se encuentran autoestados de la forma $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$, donde $n \in \mathbb{N}$, $l \in \{0, \dots, n-1\}$, $m \in \{-l \dots l\}$. Estas funciones están definidas mediante los *esféricos armónicos* y los *polinomios de Legendre*.

Las autoenergías son precisamente las energías permitidas predichas por Bohr:

$$E = \frac{E_1}{n^2}$$

Encuentre el número de autoestados con energía E, donde E es una autoenergía permitida.

Problema 12:

Considere un medio unidimensional infinito bajo un potencial $U(x)$. Este medio está gobernado por la Ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

La función de onda satisface la condición de borde usual: $\Psi(x,t) \longrightarrow 0$ si $x \longrightarrow \pm\infty$.

En Mecánica Cuántica, las cantidades físicas tienen asociados operadores que actúan sobre la función de onda, y retornan una nueva función dependiente de la posición y el tiempo. Ejemplos de ello son los operadores posición, moméntum y hamiltoniano. La idea de estos operadores es describir la evolución de las cantidades físicas en medida que la partícula recorre una trayectoria que, recordemos, es errática (o probabilística) y ya no únicamente determinada.

Dado un operador A, se define su valor esperado como: $\langle \mathrm{A} \rangle = \int \Psi^* \cdot \mathrm{A}\Psi \ dx$

Haciendo uso de todo lo anterior demuestre que:

a) $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})|^2 dx$ es constante.

(Esto significa que basta exigir que la condición inicial sea normalizada para que la función de onda siempre lo sea).

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

c) $\frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \frac{dU}{dx} \rangle$

d) $\langle \mathrm{H} \rangle$ es conservado.

Comente.

Problema 13:

Considere un medio tridimensional cualquiera, sometido a un potencial $U(\vec{r})$. El movimiento de una partícula en este medio queda gobernado por la función de onda, la cual satisface la Ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Como siempre, la función de onda se anula en el borde de su dominio.

Ahora, si hay una gran cantidad de estas partículas, podemos estimar la densidad de este fluido con la densidad de probabilidad: $m\rho(\vec{r},t) = m|\Psi(\vec{r},t)|^2$. Sin embargo, no podemos definir un flujo tan simplemente como $m\vec{J} = m\rho\vec{v}$, que es lo que se hace en la dinámica de fluidos usual. Explique por qué.

Entonces, queremos definir correctamente un flujo $\vec{J}(\vec{r},t)$. Este flujo debe ser tal que se relacione con $\rho(\vec{r},t)$ según la *Ecuación de Continuidad*:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{J} = 0$$

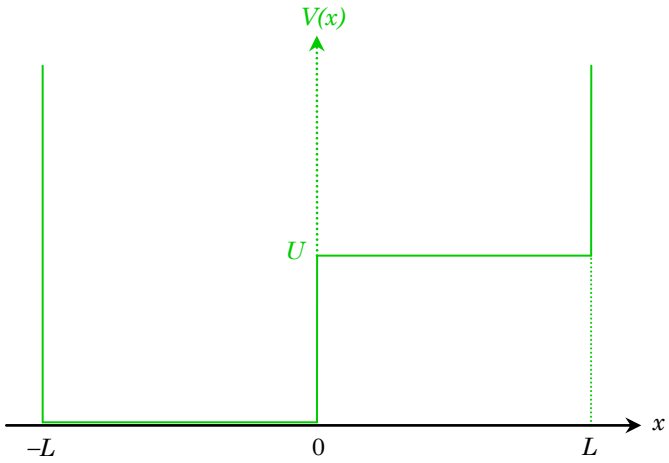
Explique el porqué de esto.

Encuentre el flujo $\vec{J}(\vec{r},t)$. Note que así como ρ corresponde a la densidad de probabilidad, $\vec{J}$ representa un *flujo de probabilidad*.

Problema 14:

Considere la caja unidimensional de largo $2L$ que muestra la figura.

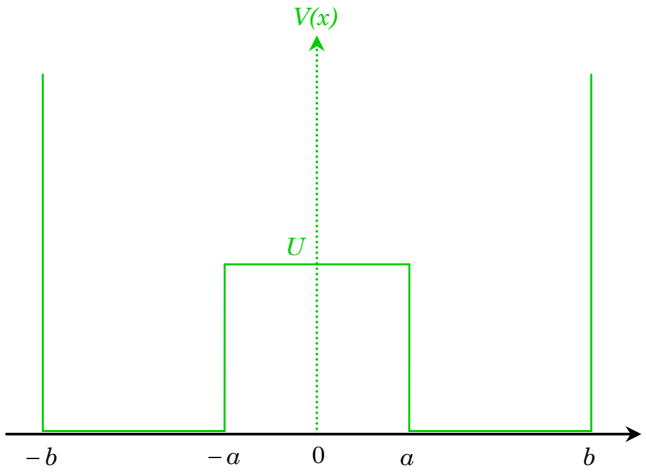
Encuentre la ecuación trascendental que permite encontrar las autoenergías del sistema.



Problema 15:

Considere la caja unidimensional de largo $2b$ que muestra la figura.

Encuentre la ecuación trascendental que permite encontrar las autoenergías del sistema.



Problema 16:

Considere un oscilador armónico en su estado fundamental, en un medio infinito unidimensional. En un instante t=0 el resorte cuántico se "corta" (es decir, el potencial se desvanece). Encuentre la evolución de la función de onda $\Psi(x,t)$ para instantes posteriores a cero y verifique que se satisface el Principio de Incertidumbre.