Universidad de Chile
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Departamento de Física
FI3102-1 Física Moderna

Auxiliar 9

Mecánica cuántica: ecuación de Schrödinger

Profesor: Álvaro Núñez
Auxiliar: Daniel Lobos
Ayudante: Felipe Cárdenas

19 de octubre de 2023

Estados ligados y espectro discreto

Los **estados ligados** corresponden a aquellos donde la partícula no puede moverse al infinito, o sea, ella está confinada (o ligada), a cualquier energía, a moverse en una región finita y limitada determinada por dos *puntos de retorno*. Acá la ecuación de Schrödinger admite soluciones discretas.

Los estados ligados tienen funciones de onda que se anulan en el infinito, y usualmente tienen energías menores al potencial. Para que existan estados ligados el potencial debe tener al menos un mínimo.

Dos resultados importantes se obtienen sobre los estados ligados:

a) En un problema de una dimensión, los niveles de energía de un sistema con estados ligados son discretos y no degenerados.

b) La función de onda $\psi_n(x)$ de un sistema con estados ligados tiene n nodos si $n = 0$ es el estado base, y $n - 1$ si $n = 1$ es el estado base.

Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger en una dimensión dependiente del tiempo es

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \tag{1}$$

y la independiente

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

donde se usó que $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$, $E = \hbar\omega$, y donde $\hat{H}$ es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{3}$$

Problema 1: extendiendo la caja

Un electrón se mueve libremente dentro de una caja potencial unidimensional de altura infinita, con paredes en $x = 0$ y $x = L$. Si el electrón está inicialmente en el estado base $n = 1$ de la caja e instantáneamente la caja aumenta su tamaño a αL (es decir, la pared derecha se mueve instantáneamente desde $x = L$ a $x = \alpha L$), calcule la probabilidad de encontrar al electrón en el estado base de la nueva caja.

Problema 2: ecuación de Schrödinger en forma matricial

El estado del espín (momento angular intrínseco) del electrón puede ser descrito con una función de onda $\chi(t)$ con dos componentes:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} \tag{4}$$

Al aplicar un campo magnético $\mathbf{B} = B_0\hat{\mathbf{z}}$ al electrón, el estado del espín se verá afectado. La evolución del estado del espín viene descrita mediante la ecuación de Schrödinger con un hamiltoniano dado por $\hat{H} = -\mu_B\hat{\mathbf{B}}\cdot\vec{\sigma}$, donde $\mu_B > 0$ es el magnetón de Bohr. Suponga que en $t = 0$ el estado del espín del electrón viene dado por

$$\chi_1(0) = \sqrt{\frac{2}{3}}i \qquad \text{y} \qquad \chi_2(0) = \sqrt{\frac{1}{3}} \tag{5}$$

y que las matrices de Pauli son:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Encuentre el estado del espín $\chi(t)$ para todo $t > 0$.

Problema 3: efecto Landau-Zener

Para el hamiltoniano dependiente del tiempo sin acoplamiento

$$H_0(t) = \begin{pmatrix} \alpha t/2 & 0 \\ 0 & -\alpha t/2 \end{pmatrix} \tag{7}$$

encuentre los estados y energías permitidas, y grafique estas últimas en función del tiempo. Considere ahora que existe acoplamiento y que el hamiltoniano es

$$H(t) = \begin{pmatrix} \alpha t/2 & \Delta \\ \Delta^* & -\alpha t/2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

donde Δ es constante y pequeño. Encuentre las energías permitidas y grafíquelas. Comente sobre los gráficos.

Ejercicio propuesto 1: potencial gravitatorio y funciones de Airy

Considere una partícula de masa m que está rebotando de manera vertical y elástica en una superficie reflectante bajo el campo gravitacional terrestre

$$V(z) = \begin{cases} mgz & \text{si } z > 0; \\ \infty & \text{si } z \leq 0 \end{cases} \tag{9}$$

donde g es la aceleración debido a la gravedad. Encuentre los niveles de energía y la función de onda de esta partícula.
Indicación: necesitará funciones especiales para resolver la ecuación diferencial, y realizar un cambio de variables para simplificar el cálculo:

$$x = \left(\frac{\hbar^2}{2m^2 g}\right)^{2/3} \frac{2m}{\hbar^2}(mgz - E) \tag{10}$$