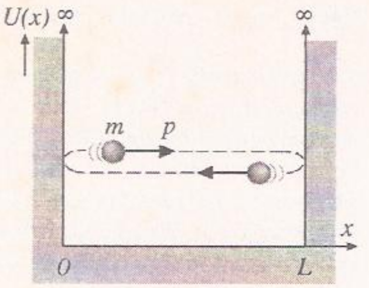
PR-6.17. *Partícula en un pozo de potencial infinito*

Resuelva la ecuación de Schrödinger para la partícula de masa m que se encuentra en una caja unidimensional de ancho L y paredes infinitamente altas para determinar:

a) Las funciones de onda permitidas.

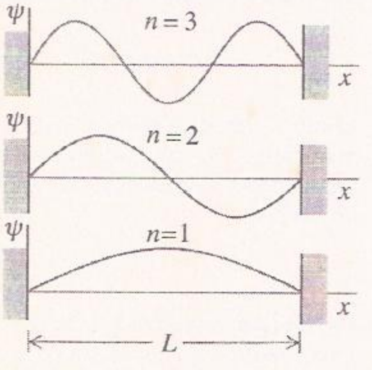
b) Los niveles de energía correspondientes.



Solución: Como las paredes son infinitamente altas, la energía potencial es infinita fuera de ellas, $U(x) = \infty$. En la región interna $0 < x < L$, la partícula solo tiene energía cinética, $U(x) = 0$ y podemos escribir la ecuación de Schrödinger en la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi=E\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-k^2\psi \qquad \text{donde} \qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



La solución general de esta ecuación puede escribirse como una combinación de ondas sinusoidales:

$$\psi(x)=A\,sen\,kx+B\cos kx$$

La partícula nunca puede existir fuera de la caja, y por lo tanto, la función $\psi(x)$ debe anularse en las fronteras $x = 0$ y $x = L$. De la condición $\psi(0)=0$ se obtiene:

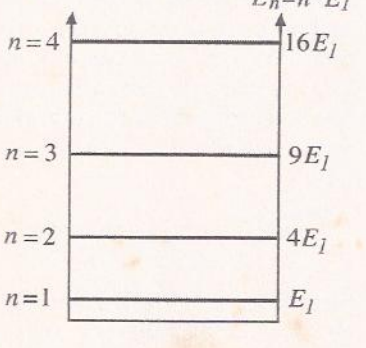
$$\psi(0)=0=A\,sen\,k0+B\cos k0=0+B \quad \Rightarrow \quad B=0$$

La otra condición de frontera $\psi(L)=0=A\,sen\,kL$ se satisface si:

$$kL=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L=n\pi \qquad n=1,2,3,\ldots$$

Por lo tanto, la función es:

$$\psi(x)=A\,sen(\frac{n\pi}{L}x)$$



La constante A es la amplitud de la onda y su valor, $A=\sqrt{2/L}$, se determina por la condición de normalización de $\psi(x)$, (Problema PR-6.19).

b) Las energías permitidas se obtienen a partir de los valores correspondientes de k:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = n^2 (\frac{h^2}{8mL^2}) \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

Estos resultados concuerdan con los obtenidos en el problema anterior.

$$E_n = n^2 E_1 \qquad E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

Respuesta:

a) $\psi(x) = Asen(\frac{n\pi}{L}x)$

b) $E_n = n^2(\frac{h^2}{8mL^2})$

$n = 1, 2, 3, \dots$

PR-6.18. *Principio de correspondencia en pozo infinito*

Para una partícula en una caja de paredes rígidas, evalúe el cambio fraccional de la energía, $\Delta E_n / E_n$, y verifique que el resultado debe estar de acuerdo con la teoría clásica en el limite de los números cuánticos grandes (principio de correspondencia).

Solución: Según el problema anterior, en un pozo infinito las energías de dos niveles adyacentes n y $(n+1)$ son, respectivamente:

$$E_n = n^2(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}) \qquad E_{n+1} = (n+1)^2(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2})$$

De modo que el cambio fraccional de la energía es:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2}$$

En el límite clásico ($n \to \infty$), se obtiene:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\Delta E_n}{E_n} = \lim_{n\to\infty} (\frac{2n+1}{n^2}) = 0$$

Esto significa que en el límite clásico, los niveles de energía están tan relativamente cercanos que son indistinguibles y por lo tanto, los efectos cuánticos no son apreciables. Esto es justamente lo que predice el *principio de correspondencia*, expuesto por Bohr, según el cual la mecánica cuántica debe concordar con la física clásica en los casos donde la diferencia entre los niveles cuantizados desaparece.

Respuesta:

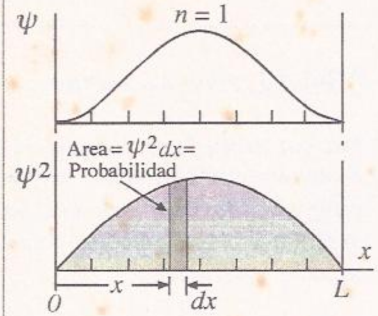
$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \to 0$$

PR-6.19. *Normalización de la función de onda*

Evalúe la constante A en la función de onda para una partícula atrapada en un pozo infinitamente profundo de anchura L.

$$\Psi(x) = A sen(\frac{n\pi}{L}x)$$

Solución: De acuerdo con Born, la relación entre la función de onda $\psi(x)$ y su partícula asociada, es de naturaleza estadística, de tal manera que $|\psi|^2$ se interpreta como una *densidad de probabilidad.* El producto $|\psi|^2\,dx$, es la probabilidad de que la partícula se encuentre dentro de un dado intervalo de longitud dx alrededor de x.

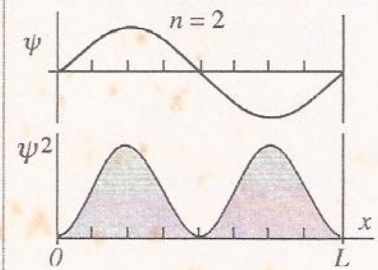


Normalizar la función ψ_n consiste en multiplicarla por algún factor constante, elegido de tal forma que la probabilidad de que la partícula existe en algún punto todo el tiempo, sea igual a la unidad:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(x)dx = 1 \qquad \text{(Condición de normalización)}$$

Como ψ_n es no nula solo en el intervalo $0 \le x \le L$, la integral es:

$$\int_0^L A^2 sen^2(\frac{n\pi}{L}x)dx = 1$$



Si llamamos $n\pi x / L = \theta$, resulta:

$$A^2\frac{L}{n\pi}\int_0^{n\pi} sen^2\theta d\theta = \frac{A^2L}{n\pi}(\frac{\theta}{2} - \frac{sen2\theta}{4})\Big|_0^{n\pi} = 1$$

$$\frac{A^2L}{n\pi}[(\frac{n\pi}{2} - \frac{sen2n\pi}{4}) - (0 - \frac{sen0^o}{4})] = \frac{A^2L}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

La constante A resulta la misma para todos los estados n.

Respuesta:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}sen(\frac{n\pi}{L}x)}$$

PR-6.20. *Prefiere pasar mas tiempo en ciertos lugares*

Una partícula está confinada entre paredes rígidas, separadas por una distancia L. Calcule la probabilidad de que se encuentre dentro de una distancia $L/3$ de una pared.

a) Para los estados cuánticos $n = 1$, $n = 2$, y $n = 3$.

b) Según la física clásica.

Solución: a) Para cualquier estado n, la probabilidad por intervalo de longitud o densidad de probabilidad es:

$$|\psi_n|^2 = [\sqrt{\frac{2}{L}} sen(\frac{n\pi}{L}x)]^2$$

La probabilidad de que la partícula se encuentre dentro de una distancia $L/3$ de una pared es:

$$P_n = \int |\psi_n|^2\, dx = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} sen^2(\frac{n\pi}{L}x)dx$$

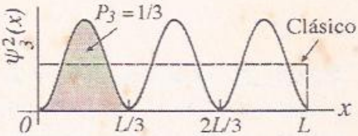
$$P_n = (\frac{2}{L})(\frac{L}{n\pi}) \int_0^{n\pi/3} sen^2\theta d\theta = \frac{2}{n\pi}(\frac{\theta}{2} - \frac{sen 2\theta}{4})\Big|_0^{n\pi/3}$$

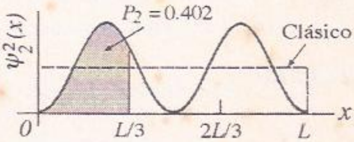
$$P_n = \frac{1}{3}(1 - \frac{sen(2n\pi/3)}{2n\pi/3})$$

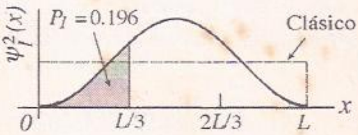
Para el estado $n = 1$: $\quad P_1 = \frac{1}{3}(1 - \frac{sen(2\pi/3)}{2\pi/3}) = 0.196$

Para el estado $n = 2$: $\quad P_2 = \frac{1}{3}(1 - \frac{sen(4\pi/3)}{4\pi/3}) = 0.402$

Para el estado $n = 3$: $\quad P_3 = \frac{1}{3}(1 - \frac{sen(6\pi/3)}{6\pi/3}) = 1/3$







b) Para una partícula clásica, todas las posiciones entre las paredes del pozo son igualmente probables, de modo que la probabilidad de que la partícula se encuentre dentro de un intervalo de longitud Δx es $P = \Delta x/L$ que, en este caso es 1/3.

De acuerdo al principio de correspondencia de Bohr, la teoría cuántica debe concordar con la teoría clásica en el limite de los números cuánticos grandes. Si tomamos el límite en la expresión P_n para $n \to \infty$, y recordando que $|sen(2n\pi/3)| \leq 1$, se tiene:

$$\lim_{n\to\infty} P_n = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{3}(1 - \frac{sen(2n\pi/3)}{2n\pi/3}) = \frac{1}{3}$$

Esta concordancia entre la física clásica y la cuántica, es consecuencia de que para números cuánticos grandes, la densidad de probabilidad $|\psi_n|^2$ tiende a ser cada vez mas uniforme.

Respuesta:

a) $P_n = \frac{1}{3}(1 - \frac{sen(2n\pi/3)}{2n\pi/3})$
$P_1 = 0.196, P_2 = 0.402, P_3 = 1/3$
b) Clásica: $P_C = 1/3$

PR-6.21. *El estado base del átomo de hidrógeno*

Las funciones de onda del átomo de hidrógeno se obtienen resolviendo la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones para la energía potencial electrostática: $U(r) = -ke^2/r$. En coordenadas esféricas, las funciones $\psi(r,\theta,\phi)$ son especificadas por tres números cuánticos que corresponden a los tres grados de libertad del electrón (ignorando el espín). Para el estado base, la función de onda es la mas sencilla, ya que depende solo de la distancia radial r:

$$\psi(r) = Ae^{-r/a_0}$$

Donde a_0 es el radio de Bohr y A es una constante.

Determine para el estado base:

a) La constante A.

b) La distancia mas probable entre el electrón y el núcleo.

c) El valor medio de la distancia entre el electrón y el núcleo.

d) La probabilidad de que el electrón se halle en una región esférica dentro del radio de Bohr.

Solución: Podemos definir la función de densidad de probabilidad radial $P(r)$ a la probabilidad de encontrar el electrón en un cascarón esférico de radio r y espesor dr. El volumen dV de dicho cascarón es igual al área de la superficie $4\pi r^2$ multiplicada por su espesor dr.

$$P(r)dr = |\psi(r)|^2\, dV = |\psi(r)|^2\, 4\pi r^2 dr$$

a) Recordando que la probabilidad de encontrar el electrón en cualquier parte debe ser igual a 1 y es la integral de $|\psi(r)|^2$ sobre todo el espacio, tenemos:

$$\int_0^{+\infty} \psi^2(r)dV = \int_0^{+\infty} [Ae^{-r/a_0}]^2 4\pi r^2 dr = 1$$

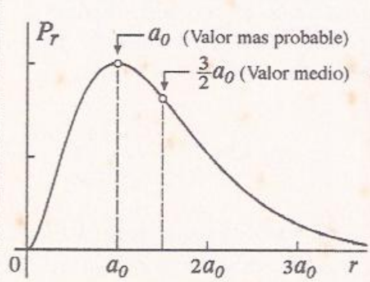
$$4\pi A^2 \left(\frac{a_0}{2}\right)^3 \int_0^{+\infty} u^2 e^{-u} du = \pi A^2 a_0^3 = 1 \quad \Rightarrow \quad A = 1/\sqrt{\pi}\, a_0^{3/2}$$

$$\int u^2 e^{-u} du = -(u^2 + 2u + 2)e^{-u}$$

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

b) El valor mas probable de r corresponde al pico de la gráfica de $P(r)$ en función del radio r:

$$P(r) = |\psi(r)|^2\, 4\pi r^2 = 4\pi A^2 e^{-2r/a_0} r^2 = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}$$



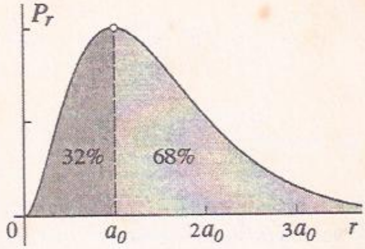
En ese punto, la pendiente de la curva es cero:

$$\frac{dP(r)}{dr} = \frac{4}{a_0^3}(2r)e^{-2r/a_0} + \frac{4}{a_0^3} r^2 \left(-\frac{2}{a_0}\right)e^{-2r/a_0} = 0$$

Esta expresión se satisface para:

$$\frac{8r}{a_0^3}e^{-2r/a_0}\left(1-\frac{r}{a_0}\right)=0 \qquad \Rightarrow \qquad r=a_0$$

Vemos que la distancia mas probable del electrón al núcleo es justamente el radio de Bohr.



c) El valor medio de la distancia del electrón al núcleo es:

$$<r>=\int_0^{+\infty} rP(r)dr=\int_0^{+\infty}\frac{4}{a_0^3}r^3e^{-2r/a_0}dr=4a_0\int_0^{+\infty}x^3e^{-2x}dx$$

$$P=4a_0\frac{3!}{2^4}=\frac{3}{2}a_0$$

Vemos que el *valor medio* de r es 50% mayor que el valor mas probable (radio de Bohr a_0), y se debe a la gran asimetría en la función de distribución ya que el electrón puede existir a distancias muy grandes.

d) La probabilidad total de que el electrón se encuentre entre $r=0$ y $r=a_0$ es:

$$P(r\leq a_0)=\int_0^{a_0}P(r)dr=\int_0^{a_0}\frac{4}{a_0^3}r^2e^{-2r/a_0}dr$$

$$P(r\leq a_0)=\frac{4}{a_0^3}\left(\frac{a_0}{2}\right)^3\int_0^2 u^2e^{-u}du=-\frac{1}{2}(u^2+2u+2)e^{-u}\Big|_0^2$$

$$P(r<a_0)=1-5e^{-2}=0{,}323$$

Respuesta:

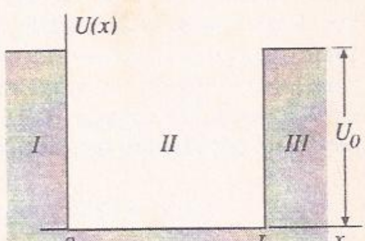
a) $A=\dfrac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}$

b) Valor mas probable: $r=a_0$

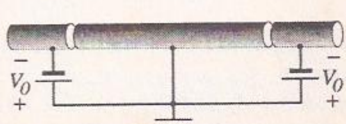
c) Valor medio: $<r>=\dfrac{3}{2}a_0$

d) $P(r\leq a_0)=0{,}323$

PR-6.22. *Partícula en un pozo de altura finita*



Una partícula de masa m tiene una energía potencial cero en la región: $0\leq x\leq L$ y una energía potencial U_0, fuera de esta región (esto es conocido como un potencial de pozo cuadrado). Si la energía E de la partícula es menor que U_0, determine las funciones de onda dentro del pozo (Región II) y fuera del pozo (Regiones I y III).



Esta es una situación que se podría simular mediante un dispositivo donde se confina un electrón en un tubo metálico hueco y delgado de longitud L, que está conectado a un potencial V_0 respecto a dos tubos adyacentes muy próximos.

Solución: En la región II $(0 < x < L)$, la partícula solo tiene energía cinética, $U(x) = 0$ y podemos escribir la ecuación de Schrödinger en la forma:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \qquad \text{donde} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Esta ecuación es idéntica a la del pozo infinito y las soluciones son funciones sinusoidales. Sin embargo aquí no se requiere que $\Psi(x)$ se anule en las fronteras $x = 0$ y $x = L$, por lo tanto escribiremos la solución mas general:

$$\psi_{II}(x) = A\,sen\,kx + B\cos kx \qquad \text{(dentro del pozo)}$$

Donde A y B son constantes.

En las regiones I $(x < 0)$ y III $(x > L)$, escribimos la ecuación de Schrödinger con $U = U_0$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi \qquad \text{siendo} \qquad k^2 = \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$$

Como $U_0 > E$ la cantidad k^2 es positiva, por lo que las soluciones de esta ecuación son del tipo exponencial:

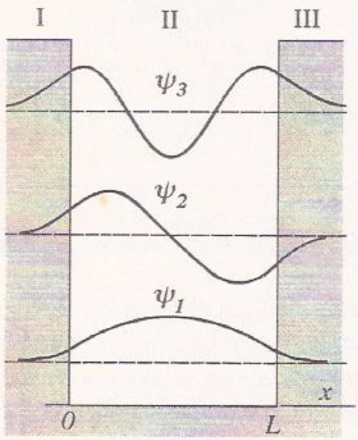
$$\psi(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}$$

Las constantes C y D son diferentes para las dos regiones. Pero la función $\psi(x)$ debe tender a cero tanto para $x \to -\infty$ como para $x \to +\infty$, requerimiento que debe cumplirse para que pueda ser satisfecha la condición de normalización. Esto implica que $C = 0$ para $x > L$ y $D = 0$ para $x < 0$, por lo tanto, las soluciones son:

$$\psi_I(x) = Ce^{kx} \qquad \text{para } x < 0$$

$$\psi_{III}(x) = De^{-kx} \qquad \text{para } x > L$$

Es decir, dentro del pozo las funciones son sinusoidales y fuera de él, son exponenciales decrecientes. Las cuatro constantes A, B, C y D se determinan por la continuidad de $\Psi(x)$ y su derivada en los puntos limites $x = 0$ y $x = L$.



$$\psi_I\big|_{x=0} = \psi_{II}\big|_{x=0} \qquad \psi_{II}\big|_{x=L} = \psi_{III}\big|_{x=L}$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \qquad \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=L} = \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=L}$$

Si $d\Psi/dx$ no fuera continua, entonces la segunda derivada $d^2\psi/dx^2$ sería infinita, lo que violaría la ecuación de Schrödinger que establece que $d^2\psi/dx^2 \propto (V-E)$, que en este caso es finita. En la grafica se muestran las funciones de onda para las tres regiones que se enlaza suavemente en las fronteras.

Observe que todas las funciones Ψ son no nulas en las regiones exteriores a las paredes. Esto significa que existe una probabilidad finita de encontrar la partícula fuera de las paredes, una región que está prohibida por la física newtoniana, ya que allí la energía cinética $K = E - U_0$, sería negativa.

Respuesta:

a) Para $x < 0$: $\psi_I(x) = Ce^{kx}$

$k = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$

b) Para $0 < x < L$:

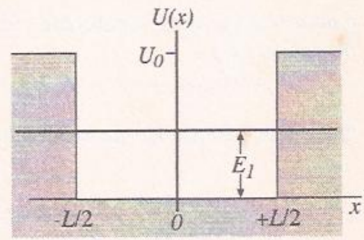
$\psi_{II}(x) = A\,sen\,kx + B\cos kx$

$k = \sqrt{2mE}/\hbar$

c) Para $x > L$: $\psi_{III}(x) = De^{-kx}$

$k = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$

PR-6.23. *Energía mínima en un pozo de altura finita*



Una partícula de masa m tiene una energía potencial nula en la región: $-L/2 \leq x \leq L/2$ y una energía potencial U_0, fuera de esta región. Halle la energía en el estado fundamental si en las paredes del pozo la función Ψ tiene una amplitud que es la mitad que en el medio del pozo.

Solución: En el problema anterior vimos que en la región dentro del pozo, la ecuación de Schrödinger es:

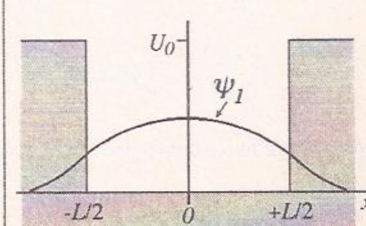
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \qquad \text{donde} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Cuya solución general es:

$$\psi(x) = A\,sen\,kx + B\cos kx \qquad -L/2 \leq x \leq L/2$$

Para las condiciones del problema: $\psi(-L/2) = \psi(+L/2)$ y como: $sen(-\theta) = -sen(\theta)$ y $cos(-\theta) = +cos(\theta)$, se tiene:

$$A\,sen\frac{kL}{2} + B\cos\frac{kL}{2} = -A\,sen\frac{kL}{2} + B\cos\frac{kL}{2} \quad \Rightarrow \quad A = 0$$



Luego la función buscada es: $\psi(x) = B\cos kx$ y teniendo en cuenta la condición de frontera, se obtiene:

$$\psi(\frac{L}{2})=\frac{1}{2}\psi(0) \qquad \Rightarrow \qquad B\cos\frac{kL}{2}=\frac{1}{2}B\cos 0=\frac{1}{2}B$$

La solución de k que corresponde al mínimo de energía es:

$$\cos\frac{kL}{2}=\frac{1}{2} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{kL}{2}=\frac{\pi}{3} \qquad\qquad k_1=\frac{2\pi}{3L}$$

Luego la energía del estado fundamental es:

$$E_1=\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{2\pi}{3L})^2=\frac{2\hbar^2\pi^2}{9mL^2}$$

Respuesta:

$$\boxed{E_1=\frac{2\hbar^2\pi^2}{9mL^2}}$$

PR-6.24. *Halle el potencial para esta función de onda*

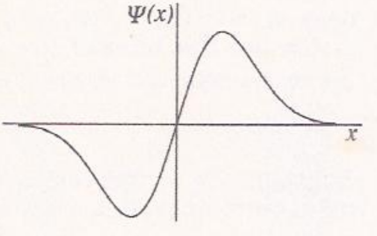
En una región del espacio, una partícula con energía total cero tiene una función de onda:

$$\psi(x)=Axe^{-x^2/a^2}$$

Encuentre la energía potencial de la partícula en función de la distancia x.

Solución: Partiendo de la ecuación de Schrödinger:

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



Como $E=0$, la energía potencial es:

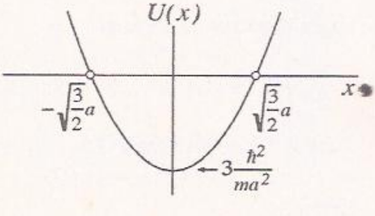
$$U(x)=\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2})$$

Las derivadas de $\psi(x)$ son:

$$\frac{d\psi}{dx}=Ax(-\frac{2x}{a^2})e^{-x^2/a^2}+Ae^{-x^2/a^2}=(-\frac{2x^2}{a^2}+1)Ae^{-x^2/a^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{4x}{a^2}Ae^{-x^2/a^2}+(-\frac{2x^2}{a^2}+1)(-\frac{2x}{a^2})Ae^{-x^2/a^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=(\frac{4x^2}{a^4}-\frac{6}{a^2})Axe^{-x^2/a^2}=(\frac{4x^2}{a^4}-\frac{6}{a^2})\psi(x)$$



Sustituyendo, encontramos la energía potencial:

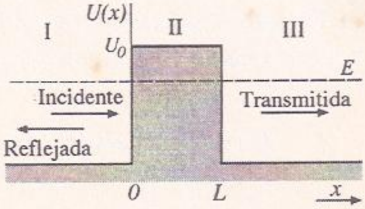
$$U(x)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}(\frac{4x^2}{a^4}-\frac{6}{a^2})\psi=\frac{\hbar^2}{2ma^2}(\frac{4x^2}{a^2}-6)$$

Respuesta:

$$\boxed{U(x)=\frac{\hbar^2}{2ma^2}(\frac{4x^2}{a^2}-6)}$$

PR-6.25. *Barreras de Potencial y Efecto Túnel*

Considere una partícula que incide sobre una barrera rectangular de altura U_0 y ancho L, siendo la energía total de la partícula, menor que la altura de la barrera, $E < U_0$.
a) Halle las funciones de onda en las regiones I, II y III.
b) Demuestre que existe una posibilidad de que la partícula penetre la barrera, la atraviese y luego emerja por el otro lado, aun cuando no tenga suficiente energía cinética. La penetración de barrera se conoce como *efecto túnel* y no es concebible en la mecánica newtoniana.



Solución: Esta barrera de potencial es lo opuesto al pozo de potencial estudiado en el problema anterior. En las regiones a cada lado: $x < 0$ y $x > L$, donde $U(x) = 0$, la ecuación de Schrödinger es:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi \qquad \text{donde} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}$$

y la solución es del tipo sinusoidal:

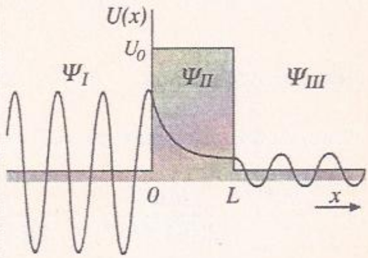
$$\psi(x) = A\,\mathrm{sen}\,kx + B\cos kx \qquad \text{(fuera de la barrera)}$$

Las constantes A y B son diferentes para las dos regiones. En la región II intermedia: $0 < x < L$, donde $U = U_0$, la ecuación de Schrödinger es:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\psi = +k^2\psi \qquad k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

y la solución es del tipo exponencial:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-kx} \qquad \text{(dentro de la barrera)}$$



Es decir, la función ψ decae exponencialmente en la barrera y continúa en la región III con la misma forma de la onda incidente pero con una amplitud menor. Las amplitudes se determinan igualando las ψ's y sus derivadas en los puntos limites, $x = 0$ y $x = L$. De acuerdo a la mecánica newtoniana, si $E < U_0$ la partícula no podría penetrar esta región, porque su *energía cinética:* $K = E - U_0 = mv^2/2$, sería *negativa*, lo cual requeriría una *masa negativa* o una *velocidad imaginaria*.

En la mecánica cuántica la probabilidad de que la partícula atraviese la barrera de potencial, llamada coeficiente T de *transmisión*, es proporcional al cuadrado de la razón de amplitudes de ψ en ambos lados de la barrera. Cuando $T << 1$ su expresión aproximada* es:

$$T \approx e^{-2kL} \qquad \text{donde} \qquad k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

También se define un coeficiente de *reflexión, R,* como la probabilidad de que la partícula se devuelva después de interaccionar con la barrera. La suma de estas probabilidades debe ser igual a la unidad: $R + T = 1$.

* *Quantum Physics:* R. Eisberg y R. Resnick, 1974.

Respuesta:

a) Para $x < 0$ y para $x > L$:

$$\psi_{II}(x) = A sen kx + B \cos kx$$
$$k = \sqrt{2mE} / \hbar^2$$

b) Para $0 < x < L$:

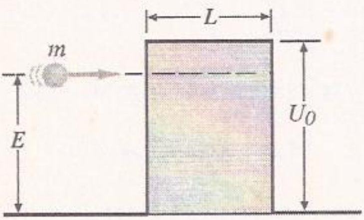
$$\psi_{II}(x) = Ce^{-kx}$$
$$k = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar^2$$

c) Coeficiente de transmisión:

$$T \approx e^{-2kL}$$
$$k = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar^2$$

PR-6.26. *Uno de cada 1000 electrones pasa la barrera*

Se lanza un chorro de electrones hacia una barrera de potencial de espesor $L = 0{,}70$ nm y de altura $U_0 = 5{,}93$ eV. Calcule la energía E con que deben incidir los electrones para que la probabilidad de transmisión sea de uno en 1000.



Solución: La probabilidad de que un electrón atraviese la barrera es:

$$T = e^{-2kL} \qquad \text{donde:} \qquad k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

Tomando logaritmos: $\quad \ln T = -2kL$

Despejando, obtenemos el valor de k:

$$k = -\frac{\ln T}{2L} = -\frac{\ln 10^{-3}}{2(0{,}7\text{x}10^{-9})} = -\frac{-6{,}91}{2(0{,}7\text{x}10^{-9})} = 4{,}93\text{x}10^{9}\,\text{m}^{-1}$$

$$\frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{(4{,}93\text{x}10^{9})^2(6{,}63\text{x}10^{-34})^2}{2(9{,}11\text{x}10^{-31})(2\pi)^2} = 1{,}48\text{x}10^{-19}\,\text{J}$$

$$\frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{1{,}48\text{x}10^{-19}\,\text{J}}{1{,}60\text{x}10^{-19}\,\text{J/eV}} = 0{,}93\text{eV}$$

Por lo tanto, la energía de los electrones incidentes es:

$$k = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \qquad \Rightarrow \qquad E = U_0 - \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

$$E = U_0 - \frac{k^2\hbar^2}{2m} = 5{,}93e\text{V} - 0{,}93e\text{V} = 5{,}0e\text{V}$$

Respuesta:

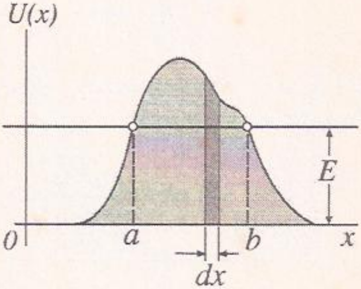
$$\boxed{E = 5{,}0e\text{V}}$$

PR-6.27. *Efecto túnel en barreras de forma arbitraria*

a) A partir del coeficiente T para la barrera rectangular del problema anterior, demuestre la siguiente expresión para el caso de una partícula de energía $E < U_0$, que atraviesa una barrera unidimensional $U(x)$ de forma arbitraria:

$$T \cong exp[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(U(x)-E)}dx]$$

b) Calcule el coeficiente de transmisión para una barrera triangular: $U(x) = (U_0/L)x \qquad 0 < x < L$



Solución: a) Si dividimos la barrera en una serie de barreras de espesor Δx_i, el coeficiente de transmisión en cada una de ellas es:

$$T(x_i) \cong exp[-2k_i\Delta x_i]$$

donde: $$k_i = \frac{\sqrt{2m[U(x_i)-E]}}{\hbar}$$

La probabilidad de penetración de cada barrera es independiente de las otras barreras, de modo que para la secuencia de n barreras, tenemos:

$$T \cong T(x_1)T(x_2)T(x_3)....$$

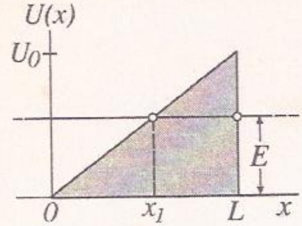
$$T \cong exp[-2k_1\Delta x_1].exp[-2k_2\Delta x_2].exp[-2k_3\Delta x_3]...$$

$$T \cong exp[-2(k_1\Delta x_1 + k_2\Delta x_2 + ...)] \cong exp[-2\sum_{i=1}^{n} k_i\Delta x_i]$$

En el limite en que cada barrera es infinitamente delgada, $\Delta x_i \to dx$ y $n \to \infty$ y la suma se convierte en una integral:

$$T \cong exp[-2\int_a^b k(x)dx] \cong exp[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m[U(x)-E]}dx]$$

b) Para la barrera triangular: $U(x)=(U_0/L)x$



$$T \cong exp[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{L}\sqrt{2m(\frac{U_0}{L}x-E)}dx]$$

La integral es del tipo:

$$\int\sqrt{ax-b}dx=\frac{2}{3a}(ax-b)^{3/2}$$

En el punto límite inferior: $U(x_1)=E$ y $x_1=EL/U_0$. Integrando, se obtiene:

$$T \cong exp[-\frac{4L\sqrt{2m}}{3\hbar U_0}(U_0-E)^{3/2}]$$

Respuesta:

$$T \cong exp[-\frac{2}{\hbar}\int_{a}^{b}\sqrt{2m(U-E)}dx]$$

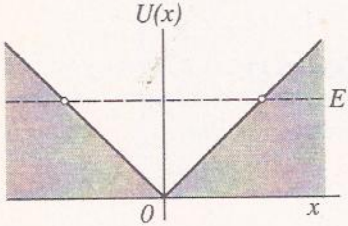
b)

$$T \cong exp[-\frac{4L\sqrt{2m}}{3\hbar U_0}(U_0-E)^{3/2}]$$

PR-6.28. *La menor energía en un pozo triangular*

Un partícula de masa m está atrapada en un pozo con una energía potencial:

$$U(x)=U_0\frac{|x|}{a}$$

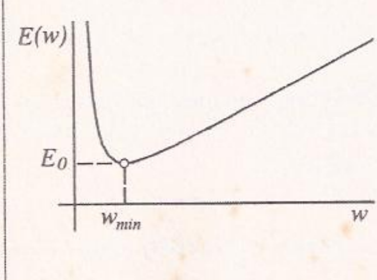


Con las relaciones de incertidumbre, obtenga un estimado la menor energía que puede tener la partícula.

Solución: Supongamos que la posición de la partícula esta indeterminada por una cantidad $\Delta x=w$. Usando la relación $\Delta x\Delta p\geq\hbar$, la indeterminación en el momentum debe ser: $\Delta p\geq\hbar/w$. Este lo tomamos como el mínimo momentum p de la partícula La energía total es:

$$E(w)=\frac{p^2}{2m}+U=\frac{(\hbar/w)^2}{2m}+U_0\frac{w}{a}$$

De la condición $dE/dw=0$ hallamos el valor de w que corresponde al mínimo de esta función:



$$\frac{dE}{dw}=-\frac{2\hbar^2}{2mw^3}+\frac{U_0}{a}=0$$

$$w_{min}=(\frac{\hbar^2a}{mU_0})^{1/3}$$

Sustituyendo w_{min}, encontramos el valor mínimo de la energía:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m(\hbar^2 a/mU_0)^{2/3}} + U_0\frac{(\hbar^2 a/mU_0)^{1/3}}{a}$$

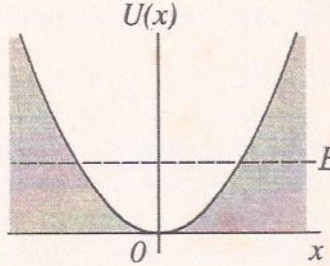
$$E_0 = \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2 U_0^2}{ma^2}\right)^{1/3}$$

Respuesta:

$$\boxed{E_0 = \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2 U_0^2}{ma^2}\right)^{1/3}}$$

PR-6.29. *La menor energía del oscilador cuántico*

Un partícula de masa m está sujeta a una fuerza restauradora lineal $F = -kx$, donde x es el desplazamiento a partir del equilibrio y k la constante elástica. En la teoría clásica, el sistema oscila con una frecuencia $\omega_0 = \sqrt{k/m}$. Utilice el principio de incertidumbre para obtener un estimado de la menor energía posible del oscilador cuántico (esta se denomina energía del punto cero).

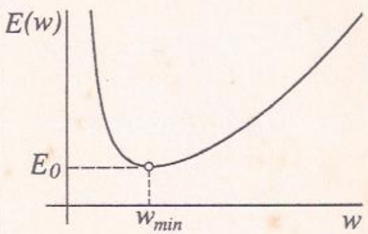


Solución: Una fuerza del tipo elástico $F = -kx$ tiene asociada una energía potencial $U(x) = kx^2/2$, de modo que la energía total de la partícula es:

$$E = K + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Si suponemos que la incertidumbre en la posición de la partícula es: $\Delta x = w$, y usando la relación $\Delta x \Delta p \geq \hbar$, la incertidumbre en el momentum debe ser: $\Delta p \geq \hbar/w$. El valor mínimo de la energía debe cumplir la relación:

$$E(w) = \frac{(\hbar/w)^2}{2m} + \frac{1}{2}kw^2$$



De la condición $dE/dw = 0$ hallamos el valor de w que corresponde al mínimo de esta función:

$$\frac{dE}{dw} = -\frac{2\hbar^2}{2mw^3} + kw = 0 \qquad \Rightarrow \qquad w^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}$$

Sustituyendo w^2, encontramos el valor mínimo de la energía:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} + \frac{1}{2}k\frac{\hbar}{\sqrt{mk}} = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \hbar\omega_0$$

Este es tan solo un valor estimado, ya que el valor exacto es la mitad de este valor ($E_0 = \hbar\omega_0/2$) y se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger para el estado base del oscilador (ver el siguiente problema). Esta energía mínima (que no es cero), se llama energía del punto cero y ocurre en todos los casos en que una partícula está restringida a moverse en una región limitada.

Respuesta:

$$\boxed{E_0 = \hbar\omega_0}$$

PR-6.30. *Una función de onda del oscilador armónico*

Un partícula de masa m está sujeta a una fuerza restauradora lineal $F = -kx$, donde x es el desplazamiento a partir del equilibrio y k la constante elástica. En la teoría clásica, el sistema oscila con una frecuencia $\omega_0 = \sqrt{k/m}$.

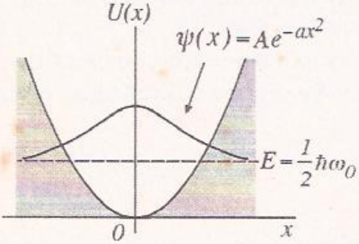
a) Compruebe que la función: $\psi(x) = A\,exp(-ax^2)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger.

b) Encuentre la energía correspondiente a este estado.

c) Halle la constante A de la condición de normalización.

Solución: Una fuerza $F = -kx$ tiene asociada una energía potencial $U(x) = kx^2/2$ y la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x)$$



La primera y segunda derivada de la función $\psi(x)$ son, respectivamente:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d}{dx}Ae^{-ax^2} = -2axAe^{-ax^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -2aAe^{-ax^2} + 2ax(2ax)Ae^{-ax^2} = 2aA(2ax^2-1)Ae^{-ax^2}$$

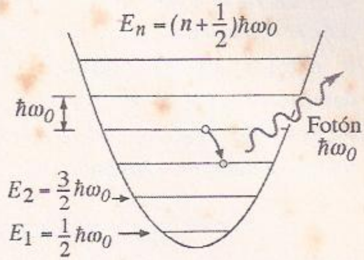
Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}2a(2ax^2-1)Ae^{-ax^2} + \frac{1}{2}kx^2Ae^{-ax^2} = EAe^{-ax^2}$$

Cancelando el factor común Ae^{-ax^2}, se obtiene:

$$\frac{\hbar^2 a}{m} - \frac{2\hbar^2 a^2}{m}x^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$$

Para que esta ecuación sea valida para todo valor de x, los coeficientes de los términos en x^2 deben cancelarse:



$$-\frac{2\hbar^2 a^2}{m}+\frac{1}{2}k=0 \qquad \Rightarrow \qquad a=\frac{\sqrt{km}}{2\hbar}$$

La energía es:

$$\frac{\hbar^2 a}{m}=E \qquad \Rightarrow \qquad E=\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

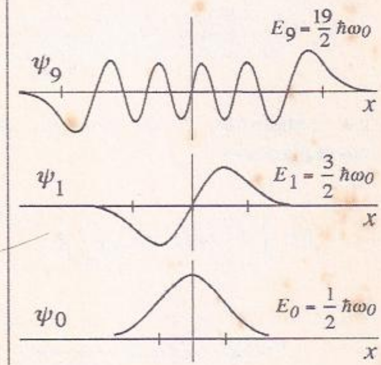
c) La constante A se obtiene de la normalización de $\psi(x)$:

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)^2\,dx=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2ax^2}\,dx$$

$$\int_0^{+\infty}e^{-\alpha x^2}\,dx=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$2A^2\int_0^{+\infty}e^{-2ax^2}\,dx=2A^2\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2a}}=1$$

$$A=\left(\frac{2\sqrt{km}/2\hbar}{\pi}\right)^{1/4}=\frac{(km)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}$$



En general, la función de onda para los diferentes estados del oscilador armónico es una función de la forma:

$$\psi_n(x)=Af_n(x)e^{-ax^2}$$

donde $f_n(x)$ es un polinomio cuya mayor potencia es x^n. La función que hemos considerado (Ae^{-ax^2}) corresponde al estado base ($n = 0$). Las energías correspondientes a los diferentes estados son:

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0 \qquad n=0,\,1,\,2,\,\ldots$$

Estos niveles de energía están uniformemente separados, con intervalos constantes: $\Delta E=\hbar\omega_0$.

Respuesta:

b) $E=\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$

c) $A=\frac{(km)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}$

PR-6.31. *Probabilidad cuántica vs clásica del oscilador*

a) Calcule la densidad de probabilidad para la partícula del oscilador armónico de acuerdo a la mecánica clásica.
b) Compare la densidad de probabilidad cuántica para el estado de menor energía con la predicción clásica.

$$\psi(x)=A\,exp(-ax^2)$$

Solución: a) Según la mecánica clásica, en cada punto del eje x la partícula tiene una velocidad bien definida $v(x) = dx/dt$ y la probabilidad de encontrarla en una determinada región dx es proporcional al intervalo de tiempo que pasa en esa región, el cual a su vez es inversamente proporcional a su velocidad:

$$P(x) = c/v(x), \text{ siendo } c \text{ una constante.}$$

La velocidad se obtiene a partir de la energía total E:

$$E = K + U = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

$$v(x) = \sqrt{\frac{2E - kx^2}{m}} = \sqrt{\frac{k}{m}}\sqrt{2E/k - x^2}$$

La densidad de probabilidad clásica es:

$$P(x) = \frac{c}{v(x)} = \frac{c}{\sqrt{\frac{k}{m}}\sqrt{2E/k - x^2}}$$

La constante c se obtiene de la condición de normalización:

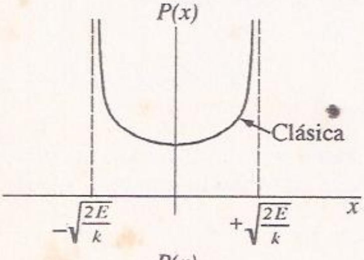
$$1 = \int_{-x_m}^{+x_m} P(x)dx = 2c\sqrt{\frac{m}{k}}\int_0^{\sqrt{2E/k}} \frac{dx}{\sqrt{2E/k - x^2}} =$$

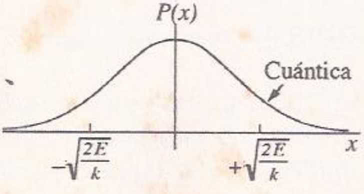
$$\int \frac{dx}{\sqrt{a^2 - x^2}} = arcsen\frac{x}{a}$$

$$1 = 2c\sqrt{\frac{m}{k}} arcsen \frac{x}{\sqrt{2E/k}}\Bigg|_0^{\sqrt{2E/k}} = c\pi\sqrt{\frac{m}{k}}$$

$$c = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

Según la grafica, la densidad de probabilidad clásica, $P(x)$, presenta un mínimo en la posición de equilibrio $x = 0$, como se muestra en la gráfica, y aumenta rápidamente hacia las fronteras $x = \pm x_m$.





El desplazamiento máximo, x_m, se alcanza cuando la energía cinética es nula y la energía total es igual a la energía potencial:

$$E = \frac{1}{2}kx^2 \quad \Rightarrow \quad x_m = \pm\sqrt{\frac{2E}{k}}$$

La densidad de probabilidad cuántica para el estado de menor energía del oscilador armónico es:

$$P(x)=|\psi(x)|^2=A^2 exp(-2ax^2)=\frac{(km)^{1/4}}{(\pi\hbar)^{1/2}}exp(-2ax^2)$$

Según la gráfica esta densidad de probabilidad presenta un máximo en el punto de equilibrio $x = 0$ y se extiende mas allá del limite establecido por la mecánica clásica.

Respuesta:

Densidad de Probab. Clásica:

$$P(x)=\frac{1}{\pi\sqrt{2E/k-x^2}}$$

Densidad de Probab. cuántica:

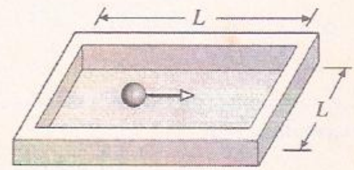
$$P(x)=\frac{(km)^{1/4}}{(\pi\hbar)^{1/2}}exp(-2ax^2)$$

PR-6.32. *Degeneración en el billar cuántico*

Una partícula se encuentra en una caja bidimensional de paredes impenetrables, que se representa por la energía potencial:

$U(x, y) = 0$ para: $0 < x < L, \quad 0 < y < L$

$U(x, y) = \infty$ para: $x < 0, x > L \quad y < 0, y > L$



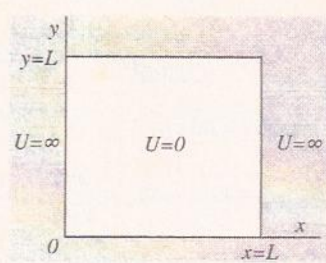
a) Determine las funciones de onda $\psi(x,y)$.

b) Determine las expresiones para los niveles de energía.

c) Cuando diferentes funciones de onda están asociadas con el mismo nivel de energía, se dice que existe degeneración. Identifique los primeros estados que son *degenerados*.

Solución: En la región: $0 < x < L, \ 0 < y < L$, donde $U = 0$, podemos escribir, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para dos dimensiones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2}\right)=E\psi(x,y)$$



Si insertamos en esta ecuación una función que es el producto de dos funciones, una que depende de x y la otra que depende de y: $\psi(x,y)=\phi(x)\varphi(y)$, al derivar y luego dividir por $\phi(x)\varphi(y)$, se obtiene:

$$\frac{\partial^2\phi/\partial x^2}{\phi}+\frac{\partial^2\varphi/\partial y^2}{\varphi}=-\frac{2mE}{\hbar^2}$$

En el lado izquierdo de esta ecuación, cada término de la suma es independiente del otro y ambos deben ser constantes por separado. Por lo tanto, si llamamos $E_x + E_y = E$, podemos escribir:

$$\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2}=-\frac{2mE_x}{\hbar^2}\phi(x)=-k_x^2\phi(x) \qquad k_x=\frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2\varphi(y)}{\partial y^2}=-\frac{2mE_y}{\hbar^2}\varphi(y)=-k_y^2\varphi(y) \qquad k_y=\frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar}$$

Teniendo en cuenta que, tanto estas ecuaciones como las respectivas condiciones de frontera son las mismas que para el caso que hemos estudiado del pozo infinito en una dimensión, las soluciones serán del tipo sinusoidal:

$$\phi(x)=A_x sen(kx) \qquad \text{y} \qquad \varphi(y)=A_y sen(ky)$$

La función completa será:

$$\psi(x,y)=A' sen\frac{n_x\pi x}{L} sen\frac{n_y\pi y}{L} \qquad n_x=1,2,.. \; n_y=1,2,..$$

La constante global A' se obtiene de la condición de normalización:

$$\iint \psi^2 dxdy=1$$

$$\int_0^L dy\int_0^L A'^2 sen^2\frac{n_x\pi x}{L} sen^2\frac{n_y\pi y}{L}=1 \qquad \Rightarrow \qquad A'=\frac{2}{L}$$

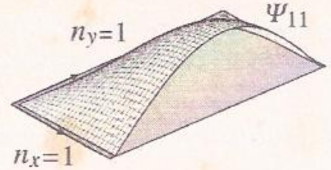
b) Como en el caso del pozo unidimensional, la condición de que ambas funciones $\phi(x)$ y $\varphi(y)$ se anulan en $x=L$ se satisface si se cumple para cada una: $k_nL=n\pi$. Por lo tanto, la energías respectivas son:

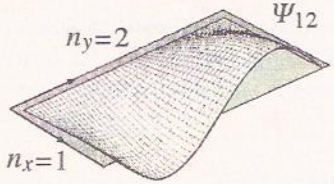
$$E_{n_x}=(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2})n_x^2 \qquad E_{n_y}=(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2})n_y^2$$

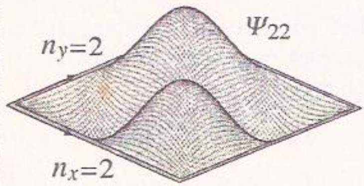
La energía total es:

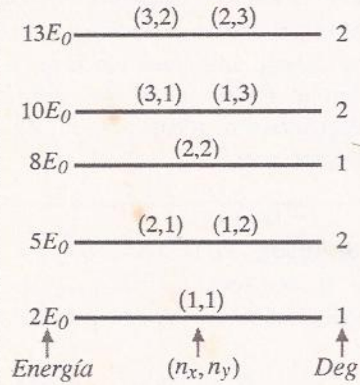
$$E_{n_xn_y}=E_{n_x}+E_{n_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2)=E_0(n_x^2+n_y^2)$$

c) En la gráfica se muestran los cinco primeros niveles de energía y se observa que algunos de ellos son estados *degenerados*, porque son comunes a diferentes conjuntos de números cuánticos (n_x,n_y). En la mecánica cuántica, la degeneración es una característica que normalmente está asociada con alguna simetría espacial del sistema.









$$E_0=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

Respuesta:

$$\psi(x,y)=A' sen\frac{n_x\pi x}{L} sen\frac{n_y\pi y}{L}$$

$$n_x=1,2,3,.. \qquad n_y=1,2,3,..$$

$$E_{n_xn_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2)$$