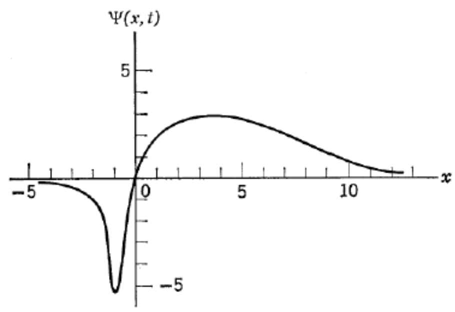
Introducción a la Física Moderna - Edición 2024

Práctico 7: Función de onda y ecuación de Schrödinger

Ejercicio 1. Muestre que si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger, entonces $\Psi(x,t) = \alpha\Psi_1(x,t) + \beta\Psi_2(x,t)$, con α y β complejos, también es solución. ¿Qué cualidad de la ecuación es responsable de dicho comportamiento? Explique por qué es un requerimiento esencial que la ecuación satisfaga esta propiedad.

Ejercicio 2. La figura adjunta muestra la dependencia de la función de onda de una partícula con la posición en cierto instante de tiempo.



(a) Si se hace una medida de la posición de la partícula, indique cualitativamente en qué regiones es más probable encontrarla. ¿En qué regiones es menos probable?

(b) Indique si es más probable encontrar a la partícula en cualquier posicion $x > 0$ o en cualquier posición $x < 0$.

Ejercicio 3. Sea $\Psi(x,t)$ la función de onda de asociada a una partícula.

(a) Demuestre a partir de la ecuación de Schrödinger que $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx$ es constante, e interprete el resultado.

(b) Considere la cantidad:

$$J(x,t) = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} - \Psi(x,t)\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial x}\right]$$

Muestre que

$$\frac{d}{dt}\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx = J(a,t) - J(b,t)$$

e interprete el resultado. La cantidad $J(x,t)$ se denomina *flujo de probabilidad*.

Ejercicio 4. Muestre que si en lugar de emplear la expresión clásica para la energía se utiliza la expresión relativista, argumentos similares a los desarrollados en clase conducen a la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi,$$

El resultado anterior se denomina *ecuación de Klein-Gordon*, y describe el comportamiento de la función de onda asociada a una partícula sin espín en el límite relativista. Schrödinger obtuvo esta ecuación y luego la descartó por su incapacidad de predecir correctamente la estructura fina del espectro del hidrógeno (el problema radicaba en que el electrón es una partícula con espín).

Ejercicio 5. Considere el operador $\hat{O} = \frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx}$.

(a) Investigue si alguna de las siguientes funciones es autofunción de $\hat{O}$. En caso afirmativo, indique el autovalor asociado:

(i) $\varphi = 2x^2 + 1$

(ii) $\varphi = 4x^4 - 12x^2 + 3$

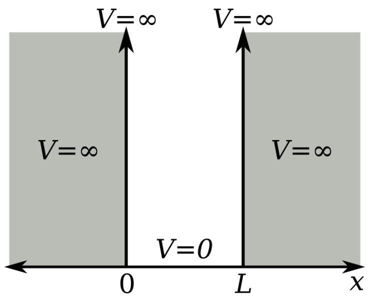
(b) Halle la familia de autofunciones de los siguientes operadores:

(i) $\hat{O}_1 = \dfrac{d}{dx}$

(ii) $\hat{O}_2 = x\dfrac{d}{dx}$

(iii) $\hat{O}_3 = \dfrac{d^2}{dx^2} + \alpha, \quad \alpha \in R$

Ejercicio 6. Considere una partícula en un pozo de potencial infinito:



$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & x < 0, x > L \end{cases}$$

Este potencial modela el comportamiento de una partícula encerrada en una caja unidimensional, rebotando elásticamente contra sus paredes.

(a) Muestre que las autofunciones del Hamiltoniano son de la forma:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n \in N$$

y que los correspondientes autovalores de energía son

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}.$$

Nota: estas energías son predichas correctamente por la teoría de Wilson y Sommerfeld para sistemas periódicos (verificarlo!)

(b) Para cada una de las autofunciones anteriores evalúe $\Delta\hat{X}$, $\Delta\hat{P}$ y su producto.

(c) Muestre que las autofunciones $\varphi_n(x)$ satisfacen la condición de ortonormalidad:

$$\int_0^L \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)dx = \delta_{mn}$$

(d) Indique cómo se expresa una solución general de la ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo) en términos de las funciones y energías anteriores.

(e) Asumiendo conocida la función de onda en el estado inicial, obtenga expresiones teóricas para los coeficientes del desarrollo obtenido en la parte anterior. ¿Qué condición deben satisfacer los coeficientes si la función de onda está normalizada?

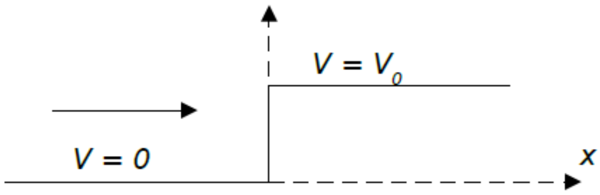
Ejercicio 7. Un electrón está confinado en un pozo infinito unidimensional de ancho $0{,}1\,\mathrm{nm}$.

(a) Calcule los niveles de energía para el electrón hasta $n = 4$.

(b) Halle las longitudes de onda de todos los fotones que pueden ser emitidos en transiciones que involucren hasta el cuarto nivel energético.

Ejercicio 8. Considere el potencial de escalón dado por la expresión:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$



Suponga que una partícula de masa m (descrita por una onda plana) incide desde la izquierda con energía $E = V_0$.

(a) Calcule la función de onda de la partícula (debe suponer el experimento en una región acotada del espacio para verificar la normalización de la función de onda).

(b) Calcule los coeficientes de reflexión y transmisión para la partícula.

Ejercicio 9. Un partícula de masa m y energía E incide desde la izquierda sobre una barrera de potencial de ancho a y altura $V_0 < E$.

(a) Escriba la solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en las tres regiones definidas por el potencial (asuma que la barrera se ubica entre $x = 0$ y $x = a$).

(b) Imponiendo condiciones de borde adecuadas, obtenga el sistema de cuatro ecuaciones algebraicas que involucra a los 5 coeficientes que definen la función de onda. ¿Cuál sería la quinta ecuación?

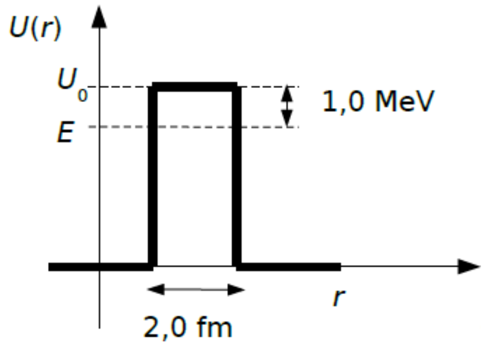
(c) A partir de las ecuaciones anteriores, demuestre que el coeficiente de trasmisión al lado opuesto de la barrera está dado por la expresión:

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_2 a)}{\frac{4E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

donde $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, y comente el resultado. *Sugerencia: elimine primero los coeficientes vinculados a la región central.*

(d) Cuando la energía de la partícula es mayor que la barrera, el coeficiente de trasmisión adopta la misma forma que en el caso anterior, pero con un seno ocupando el lugar del seno hiperbólico. Verifique esta afirmación y demuestre que, si bien T en general es menor que uno (aunque muy próximo), existe un conjunto de energías para las cuales la partícula siempre atraviesa la barrera. ¿Qué relación existe entre el ancho de la barrera y la longitud de onda de de Broglie en esos casos? ¿A partir de lo anterior, qué tipo de fenómeno cree que subyasce a ese comportamiento?

Ejercicio 10. En un modelo sencillo de un núcleo radioactivo, una partícula alfa ($m = 6{,}64 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$) queda atrapada por una barrera cuadrada de $2\,\mathrm{fm}$ de ancho y $30\,\mathrm{MeV}$ de altura.



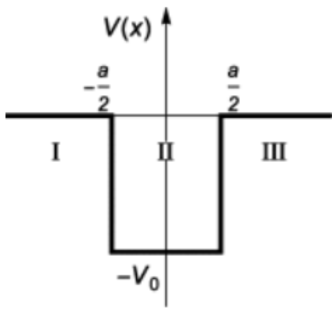
(a) ¿Cuál es la probabilidad de tunelamiento cuando la partícula alfa incide sobre la barrera, si su energía cinética es $1\,\mathrm{MeV}$ menor que la barrera?

(b) Obtenga nuevamente la probabilidad de tunelamiento si ahora la energía de la partícula es $10\,\mathrm{MeV}$ menor que la barrera.

Ejercicio 11. Considere una partícula sometida a un potencial en forma de pozo finito:

$$V_0 = \begin{cases} 0, & x < -a/2 \\ -V_0, & -a/2 < x < a/2 \\ 0, & x > a/2 \end{cases}$$

donde $V_0 > 0$.



(a) Explique en detalle las evoluciones posibles del movimiento de la partícula desde la perspectiva clásica, dicutiendo en función de su ubicación inicial y de la relación entre su energía E y V_0.

En las partes siguientes nos enfocaremos en el caso $-V_0 < E < 0$.

(b) Para un valor fijo de $E \in (-V_0, 0)$, halle la forma general de la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en las tres regiones definidas por el potencial. Indique qué términos permanecen una vez que se exige que la función de onda se mantenga finita.

(c) Es posible mostrar que si el potencial es una función par ($\forall x, V(x) = V(-x)$), entonces las soluciones de la ecuación tienen paridad definida: esto es, o bien son funciones pares, o bien impares (una función es impar si, $\forall x, V(x) = -V(-x)$). Identifique cuál de las contribuciones a la solución general en la región central da lugar a funciones de onda pares, y cuál a impares. Bosqueje tentativamente algunas soluciones en ambos casos.

(d) Imponiendo condiciones de borde adecuadas, demuestre que existen soluciones pares solo para el conjunto de energías que satisface la ecuación trascendente

$$k_2 \tan\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = k_1,$$

donde $k_1 = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$, y $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$

(e) Razonando análogamente, muestre que existen soluciones impares solo para las energías tales que

$$k_1 \tan\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = -k_2.$$

(f) El objetivo de esta parte es mostrar que **la energía de una partícula clásicamente confinada en el pozo de potencial solo puede tomar un conjunto discreto de valores**. Para ello:

(i) Defina las variables $x = k_2 a/2$ e $y = k_1 a/2$, muestre que $x^2 + y^2$ es independiente de la energía e interprete el resultado geométricamente.

(ii) Exprese la condición de la parte (d) en términos de x e y.

(iii) A partir de los resultados anteriores, demuestre que las energías asociadas a las funciones de onda pares pueden obtenerse como los puntos de corte de la función $f(x) = x\tan(x)$ con una circunferencia cuyo radio es función de V_0.

(iv) Resolviendo geométricamente la ecuación anterior, muestre que la energía del sistema está cuantizada.

(g) Argumente geométricamente que, aunque el pozo sea poco profundo, siempre existe al menos un estado localizado.

(h) Argumente geométricamente que, en el caso $V_0 \to \infty$, las energías tienen a las del pozo infinito analizado en un problema anterior.

Ejercicio 12. Sabiendo que el estado fundamental de una partícula de masa m que oscila armónicamente bajo el potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ es de la forma $\Psi_0 = a_0 e^{-b_0 x^2}$:

(a) Calcule los valores de a_0, b_0, y la energía asociada a ese estado.

(b) Calcule $\Delta\hat{X}$, $\Delta\hat{P}$, y su producto.

(c) Repita las partes anteriores para el primer estado excitado sabiendo que adopta la forma $\Psi_1 = a_1 x e^{-b_1 x^2}$

Ejercicio 13. A partir de las relaciones que definen las funciones radiales R_{nl} y los armónicos esféricos Y_l^m, obtenga todas las autofunciones normalizadas del electrón en un átomo de hidrógeno hasta $n = 2$.

Ejercicio 14. La función de onda asociada al estado base del electrón en un átomo de hidrógeno (estado *1s*) es de la forma

$$\Psi_{100}(r,\theta,\phi) = Ae^{-r/a_0},$$

donde r es la coordenada radial del electrón, y $a_0 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$ es el radio de Bohr.

(a) Halle A en función de a_0.

(b) Por sustitución directa en la ecuación de Schrödinger, halle la autoenergía asociada a ese estado. Compare con las energías predichas por el modelo de Bohr.

(c) Obtenga una expresión para la probabilidad de encontrar al electrón entre r y $r + dr$. Grafique dicha probabilidad y obtenga el radio en el cual es es máxima.

(d) Calcule $\langle r \rangle$ y compárelo con el radio obtenido en la parte anterior.

(e) Calcule la probabilidad de que el electrón se encuentre a una distancia menor que R del núcleo, y estime R en términos de a_0 para que el electrón se encuentre en esa región con un 90 % de probabilidad.

Ejercicio 15. Demuestre que la degeneración del nivel energético n (cantidad de autofunciones ortonogonales con energía E_n) es n^2.

Ejercicio 16. El presente ejercicio tiene por objetivo justificar la regla de cuantización de Bohr para el átomo de hidrógeno a partir de la teoría de Schrödinger.

(a) A partir de los operadores posición y momento en dimensión tres: $\hat{\vec{R}} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ y $\hat{\vec{P}} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$, muestre que, si se acepta la definición clásica, el operador que describe el momento angular está dado por la siguiente expresión:

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}, z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}, x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$$

(b) A partir de las relaciones que definen las coordenadas esféricas muestre que la componente z del momento angular adopta la forma

$$\hat{L_z} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

(c) Si Ψ_{nlm} es una autofunción del Hamiltoniano del electrón en un átomo de hidrógeno, demuestre que

$$\hat{L_z}\Psi_{nlm} = m\hbar\Psi_{nlm}, \quad m \in Z$$

y extraiga conclusiones.