FISICA GENERAL IV – Curso 2022

Práctica 4. Mecánica Cuántica: Ecuación de Schrödinger.

1. (a) A partir de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo derive la correspondiente ecuación independiente del tiempo indicando cuál es la hipótesis subyacente.

   (b) Verificar que la ecuación de Schrödinger es lineal en la función de onda $\Psi(x,t)$, es decir que si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son soluciones de la ecuación para un dado potencial $V(x,t)$, también lo será una combinación lineal de ambas funciones de la forma $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$, con c_1 y c_2 constantes arbitrarias.

   (c) Derive la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \vec{J} + \partial_t \rho = 0$, dónde $\rho = \phi^*\phi$ y $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}(\phi\nabla\phi^* - \phi^*\nabla\phi)$. ¿A qué se reduce dicha ecuación en el caso de que H sea independiente del tiempo?.

2. Considere una partícula en un estado tal que una medida de su energía total pudiera conducir a dos posibles resultados (E_1 o E_2), por ejemplo un electrón que está a punto de realizar una transición desde un estado excitado al estado fundamental. La función de onda que describe a dicha partícula está dada por:

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

   Demostrar que la función densidad de probabilidad es una función oscilatoria en el tiempo y calcular la frecuencia de las oscilaciones.

3. Sea una partícula de masa m que puede moverse libremente en un segmento a lo largo del eje x definido por el intervalo $[-a,a]$. Se supone que los extremos son completamente impenetrables. Demostrar que la función de onda que describe el movimiento de esta partícula está dada por

$$\Psi_n(x,t) = \begin{cases} A\cos(\frac{n\pi x}{2a})e^{-iE_nt/\hbar} & \text{si } |x| < a/2 \text{ y } n \text{ impar} \\ B\sin(\frac{n\pi x}{2a})e^{-iE_nt/\hbar} & \text{si } |x| < a/2 \text{ y } n \text{ par} \\ 0 & \text{si } |x| \geq a/2 \end{cases}$$

   con A y B constantes arbitrarias y E_n la energía total de la partícula.

   Hallar el valor de A y B a partir de la normalización adecuada de la densidad de probabilidad y determinar el valor de E_n.

4. A partir de la función de onda para una partícula en un segmento dada en el problema anterior:

   (a) Calcule los valores de expectación de x, p, x^2 y p^2 para la partícula asociada con la función de onda.[1]

   (b) Teniendo en cuenta que la incerteza para una magnitud g es $\Delta g = \sqrt{\langle(g - \langle g\rangle)^2\rangle}$, verificar que se cumple la relación de incertidumbre de Heisenberg: $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

5. Considere una partícula de masa m y energía E que incide desde la izquierda ($x < 0$) sobre un potencial escalón de la forma:

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

[1] Recordar que el valor de expectación para cualquier función $f(x,t)$ está dado por

$$\langle f(x,t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)^* f(x,t)\Psi(x,t)dx$$

donde V_0 es constante.

(a) Encuentre la función de onda $\psi(x)$, solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el caso en que la energía de la partícula es $E < V_0$.

(b) Teniendo en cuenta que la función de onda es $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, halle la densidad de probabilidad $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ para la región $x > 0$. Interprete el resultado obtenido.

(c) Estimar la distancia de penetración de una partícula de polvo pequeña de masa $m = 4\times 10^{-14}$ kg que se mueve con velocidad $v = 10^{-2}$ m/s desde la izquierda y hacia un potencial escalón. Suponga que en el momento del "impacto" la energía cinética de la partícula es igual a la mitad de la altura V_0 del escalón.

6. (a) Resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el caso de una partícula que se mueve desde $x < 0$ e incide sobre un potencial escalón como el del problema anterior pero donde la energía de la partícula es $E > V_0$.

   (b) Hallar los coeficientes de transmisión y reflexión en este caso.

7. Considere una partícula de masa m y energía E que incide desde la izquierda ($x < 0$) sobre una barrera de potencial de la forma:

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

donde V_0 es constante.

(a) Estudie el comportamiento de las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para $E > V_0$: escriba la forma general de las soluciones, las condiciones de contorno correspondientes y determine los coeficientes de reflexión y transmisión de la barrera.

(b) Obtenga las expresiones de los coeficientes de reflexión y transmisión en el límite $E \to V_0$.

(c) Determine la condición que ha de cumplirse para que la barrera sea transparente ($T = 1$, $R = 0$). Este tipo de fenómeno de resonancia que se produce cuando partículas atraviesan una barrera es desconocido desde el punto de vista clásico.

(d) Repita lo hecho en el inciso (a) para el caso en que $E < V_0$. (*Hint: note que la única diferencia con el caso anterior estará en que para $E < V_0$ el número de onda de la partícula dentro de la barrera, sea k, se vuelve imaginario. A partir de esto puede traducir los resultados ya obtenidos a la nueva situación.*)

(e) Demuestre que cuando la barrera es muy ancha y muy alta, es decir, en el límite $ka >> 1$, donde k es el número de onda en la barrera, el coeficiente de transimisión T se reduce a:

$$T \simeq 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2ka}$$

El hecho de que $T \neq 0$ para $E < V_0$, da cuenta de que existe una cierta probabilidad, dada por el coeficiente de transmisión, de que la partícula incidente pueda penetrar la barrera y emerger del otro lado de la misma. Este fenómeno, prohibido desde el punto de vista clásico, se conoce como *Efecto Túnel*. Este efecto decrece rápidamente cuando la barrera se hace alta y ancha, como lo manifiesta el factor exponencial decreciente.

Compruebe que en el límite clásico, $\hbar \to 0$, el coeficiente de transmisión tiende a cero (el efecto túnel es un fenómeno puramente cuántico).

Problemas auxiliares (A) y de repaso (R)

R1. (a) Extienda el problema 3 al caso de una partícula confinada a una caja de potencial cúbica de lado a, es decir, determine la función de onda y los niveles de energía.

(b) Determine el número de niveles de energía en un pequeño intervalo de energía dE si la caja es muy grande.

(c) A partir del resultado anterior obtenga también el número de niveles en el intervalo dp.

R2. Una partícula de masa m se mueve en el interior de un pozo de potencial de ancho $2L$, de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{-\hbar^2 x^2}{mL^2(L^2-x^2)} & \text{si } |x| < L \\ \infty & \text{si } |x| > L \end{cases}$$

La partícula se encuentra en un estado estacionario descripto por la función de onda $\psi(x) = A(1 - x^2/L^2)$ cuando $x \,\epsilon\, (-L, L)$ y $\psi(x) = 0$ para el resto de los valores de x.

(a) A partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, calcule la energía de la partícula en términos de $\hbar, m$ y L.

(b) Demuestre que $A^2 = 15/16L$.

(c) Calcule la probabilidad de encontrar a la partícula entre $x = -L/3$ y $x = L/3$.

R3. Un electrón de energía 5 eV incide sobre una barrera de potencial de altura $V_0 = 10$ eV y espesor $a = 0.2$ nm.

(a) Calcule la probabilidad de que el electrón atraviese la barrera.

(b) Calcule la probabilidad de que el electrón sea reflejado (en este último caso tenga en cuenta que la relación entre los coeficientes de transmisión y reflexión es: $T + R = 1$).

R3. Para la barrera de potencial del problema 7, obtenga la expresión del coeficiente de transmisión cuando $E = V_0$ y verifique que coincide con la expresión correspondiente que obtuvo en el inciso (b).

A1. A partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo mostrar que para todo punto de discontuinidad del potencial $V(x)$ (*Nota: sin pérdida de generalidad, y por simplicidad, tome* $x = 0$ *como el punto de discontinuidad del potencial*) :

(a) la derivada primera de la función de onda, $\psi'(x)$, debe ser continua si la discontinuidad en el potencial es finita.

(b) la discontinuidad en la derivada primera viene dada por:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x)dx,$$

cuando la discontinuidad en el potencial es infinita.

A2. Calcule la disontinuidad en la derivada de la función de onda para el potencial $V(x) = g\delta(x)$, con g una constante (con unidades de energía $\times$ distancia) y $\delta(x)$ es la función delta de Dirac[2].

[2] La función $\delta(x)$ puede pensarse intuitivamente como una función que es infinita en $x = 0$ y nula en cualquier otro punto. Su definición formal es en el sentido de las distribuciones y excede este curso. Baste para el presente ejercicio tener en cuenta la siguiente fórmula integral:

$$\int_a^b \delta(x - x_0)f(x) = \begin{cases} f(x_0) & \text{si } a < x_0 < b \\ 0 & \text{si } x_0 < a \text{ o } x_0 > b \end{cases}$$

A3. Calcule los coeficientes de reflexión y de transmisión para un potencial de la forma $V(x) = g\,\delta(x)$. (*Nota: este potencial, pese a no ser realista, es útil como primera aproximación a potenciales que se vuelven muy grandes abruptamente.*)