IFC Tarea Examen 4 Tomás Ricardo Basile Álvarez

1 Función de Onda y Ecuación de Schrödinger

a) Escriba las condiciones necesarias para que la función de onda Ψ sea aceptable en la teoría de Schrödinger.

1) Ψ es continua y univaluada, esto para que no de saltos y para que cada punto tenga una única probabilidad.

2) Las parciales $\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \frac{\partial \Psi}{\partial z}$ son continuas y univaluadas, esto para que Ψ sea suave

3) Ψ debe de ser normalizable, es decir $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\vec{x})|^2 dV < \infty$.

Para ello, es necesario que $\Psi \to 0$ conforme $x, y, z \to \pm\infty$

b) Una partícula está descrita por $\Psi(x,y,z)$. Escriba la expresión para la probabilidad de encontrarla en la región $x \in [x_1, x_2]$, $y \in [y_1, y_2]$ $z \in [z_1, z_2]$

La probabilidad es $\int_R |\Psi|^2 dV$ con R la región y dV el diferencial de volumen, que en coordenadas cartesianas es $dV = dx\,dy\,dz$

$$\rightarrow \text{Probabilidad} = \int_{z_1}^{z_2}\int_{y_1}^{y_2}\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x,y,z)|^2 \, dx\,dy\,dz$$

Siempre y cuando Ψ esté normalizada, sino hay que dividir por $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,y,z)|^2 \, dx\,dy\,dz$

c) Una partícula está descrita por la función de onda $\Psi(r,\theta,\phi)$. Escribe la probabilidad de encontrarla dentro de la región $r \in [r_1, r_2]$, $\theta \in [\theta_1, \theta_2]$, $\phi \in [\phi_1, \phi_2]$

La probabilidad es $\int_R |\Psi|^2 dV$ con R la región y dV el diferencial de volumen, que en coordenadas esféricas es $dV = r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr\,d\theta\,d\phi$

$$\Rightarrow \text{Probabilidad} = \int_{\phi_1}^{\phi_2}\int_{\theta_1}^{\theta_2}\int_{r_1}^{r_2} |\Psi(r,\theta,\phi)|^2 \, r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr\,d\theta\,d\phi$$

Integral en todo el espacio

Siempre y cuando Ψ esté normalizada, sino hay que dividir por $\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |\Psi(r,\theta,\phi)| \, r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr\,d\theta\,d\phi$

d) Demuestre que si Ψ_1 y Ψ_2 son soluciones de la ec. de Schrödinger dependiente del tiempo, entonces $\Psi_3 = a\Psi_1 + b\Psi_2$ también lo es, con $a, b \in \mathbb{R}$

Ec. de Schrödinger

Para que Ψ_3 sea solución, debe de cumplir $i\hbar \frac{\partial \Psi_3}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi_3 - U\Psi_3 = 0$

- $i\hbar \frac{\partial \Psi_3}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi_3 - U\Psi_3 =$

Porque $\Psi_3 = a\Psi_1 + b\Psi_2$

$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(a\Psi_1 + b\Psi_2) + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(a\Psi_1 + b\Psi_2) - U(a\Psi_1 + b\Psi_1)$

Porque los operadores $\frac{\partial}{\partial t}$, $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ son lineales

$= i\hbar \left[a\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1 + b\frac{\partial}{\partial t}\Psi_2\right] + \frac{\hbar^2}{2m}\left[a\nabla^2\Psi_1 + b\nabla^2\Psi_2\right] - U(a\Psi_1 + b\Psi_2)$

$= a\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1 + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_1 - U\Psi_1\right] + b\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_2 + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_2 - U\Psi_2\right]$

los corchetes valen 0 porque Ψ_1 y Ψ_2 son solución a la ec. diferencial

$= a(0) + b(0)$

$= \underline{0}$

Entonces Ψ_3 es una solución a la ec. diferencial

2, a) Escriba los operadores de las siguientes variables:

posición: Si la función de onda está en el espacio de las variables x, y, z entonces los operadores son sencillamente $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$

Si la función está en el espacio de los momentos p_x, p_y, p_z, entonces los operadores son:

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} \quad , \quad \hat{y} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y} \quad , \quad \hat{z} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_z}$$

momento lineal: En el espacio de variables x, y, z, los operadores son:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad , \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad , \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

En el espacio de momentos p_x, p_y, p_z, los operadores son $\hat{p}_x = p_x$, $\hat{p}_y = p_y$, $\hat{p}_z = p_z$

Energía Cinética (3 dimensiones, cartesianas)

$$\hat{KE} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2}{\partial^2 z}\right] = \underline{\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2}$$

Energía total:

$$\hat{H} = \hat{KE} + \hat{U}_{(x,y,z)} = \underline{\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}_{(x,y,z)}}$$

Energía potencial

b) Esriba la forma de calcular los valores esperados de los siguientes operadores:

Componente x de la posición:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \left|\psi_{(x,y,z)}\right|^2 dx$$

Componente x del momento lineal:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{(x,y,z)} \, \hat{p}_x \, \psi_{(x,y,z)} \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{(x,y,z)} \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_{(x,y,z)} \, dx = \underline{\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{(x,y,z)} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{(x,y,z)} \, dx}$$

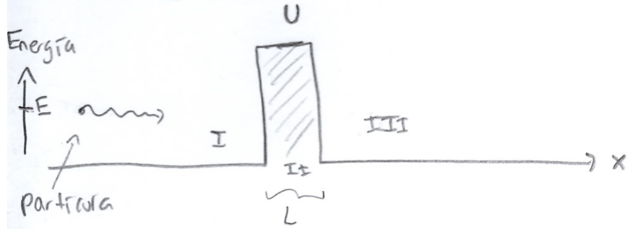
Energía cinética:

$$\langle KE \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \, \hat{KE} \, \psi \, dV = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\right) \psi \, dV$$

$$= \underline{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\right) \psi \, dx\, dy\, dz}$$

3, a) ¿En qué consiste el efecto túnel?

Consiste en tener una partícula atrapada por una pared de potencial mayor a su energía



Como se ve en la imagen, la partícula se encuentra en la zona I. La zona II es una zona de ancho L en la que la energía potencial es $U > E$. Por lo que la partícula no puede pasar a la zona II porque no tiene la energía suficiente.

La zona III sí es accesible (porque ahí el potencial necesario es $U=0$ y la partícula tiene suficiente energía para estar ahí)

Sin embargo, clásicamente, la partícula no puede llegar a III porque eso implicaría pasar por la zona II que es inaccesible.

El efecto túnel indica que en realidad hay una pequeña probabilidad de que la partícula cuántica sea encontrada en la zona III. Es decir, como si tunelear por la zona II para llegar directo a la III y eso que no tiene la energía necesaria para estar en II

b) Mencione 3 fenómenos físicos explicados por el efecto tunel.

• Enlaces covalentes:

En un enlace covalente, tenemos un electrón "compartido" entre dos átomos. El electrón pasa cierto tiempo en un átomo y cierto tiempo en el otro y va saltando así de uno a otro.

Sin embargo, sin el efecto túnel, esto sería imposible ya que el electrón no puede estar en la zona enmedio de los átomos (porque la energía no se lo permite, ya que el electrón "quiere" estar cerca de un núcleo positivo y no tiene energía suficiente para estar en medio de ambos)

La explicación del enlace es que el electrón puede tunelear de un átomo a otro sin necesidad de tener la energía suficiente para estar a la mitad.

• Fusión Nuclear:

Para fusionar dos núcleos como sucede en el centro de las estrellas es necesario juntar mucho los núcleos hasta convertirlos en uno solo y que se unan por la fuerza nuclear que los atrae a pequeñas escalas.

Juntar lo suficiente a los núcleos como para que la fuerza nuclear los una es muy difícil porque se requiere superar la repulsión de la fuerza de Coulumb entre ellos.

Sin embargo, se puede superar esta barrera de Coulumb si un núcleo se tunelea hacia el otro, brincando la zona en la que se repelen y llegando a la cercanía en la que actúa la fuerza nuclear.

• Biología Cuántica

El efecto túnel puede explicar algunas mutaciones en la replicación de ADN.

Dos nucleobases en el ADN se unen por un hidrógeno. Este hidrógeno suele tener un potencial con dos pozos, con uno de estos pozos más profundo que el otro.

El hidrógeno suele estar en el pozo de menor potencial (el profundo) pero puede repentinamente tunelear al otro pozo.

Si la replicación de ADN se lleva a cabo en este estado, puede producirse un error y por tanto una mutación.

4. Encuentre el valor de la constante de normalización A en la función de onda $\psi = Axe^{-x^2/2}$

Queremos que ψ esté normalizada, es decir, que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi\,\psi^* \, dx = 1$

$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} (Axe^{-x^2/2})(Axe^{-x^2/2})\, dx = 1$ $\longleftarrow$ como $\psi = Axe^{-x^2/2}$ es real $\Rightarrow \psi = \psi^*$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} A^2 x^2 e^{-x^2} dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A^2 = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx} \qquad (1)$$

Calculamos esa integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = -\frac{xe^{-x^2}}{2}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{e^{-x^2}}{2} dx$$

$\longleftarrow$ Por partes, $\int u\,dv = uv - \int v\,du$ con $u = x \rightarrow du = dx$, $dv = xe^{-x^2} \rightarrow v = -\frac{e^{-x^2}}{2}$

$$= 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2}}{2} dx$$

$\longleftarrow$ porque $-\frac{xe^{-x^2}}{2}\Big|_{-\infty}^{\infty} = \lim_{x\to\infty}\left(-\frac{xe^{-x^2}}{2}\right) - \lim_{x\to-\infty}\left(-\frac{xe^{-x^2}}{2}\right)$

$=0$ porque $e^{-x^2} \to 0$ conforme $x \to \infty$ y decrece más rápido de lo que x crece

$=0$ porque también $e^{-x^2} \to 0$ conforme $x \to -\infty$ y lo hace más rápido de lo que x crece

$$= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \quad *$$

Entonces, regresando a (1) tenemos que:

$$A^2 = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx} = \frac{1}{\frac{1}{2}\sqrt{\pi}} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} = \boxed{\left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/4}}$$

$*$ Esto se debe a la famosa integral Gaussiana $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$

Que se puede demostrar como sigue: Definimos $I := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy$ $\longleftarrow$ Porque no importa la variable de integración, es "muda"

Entonces: $I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx\,dy$$

$$= \int_{0}^{2\pi}\int_{0}^{\infty} e^{-r^2}\, r\, dr\, d\theta$$

$\longleftarrow$ hacemos el cambio de variable a polares, $r^2 = x^2+y^2$, $\tan\theta = \frac{y}{x}$ y ahora el diferencial de volumen es $dx\,dy \rightarrow r\,dr\,d\theta$ y para parametrizar todo el plano $x \in (-\infty, \infty)$, $y \in (-\infty, \infty)$ necesitamos $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, 2\pi]$

$$= \int_{0}^{2\pi} \frac{e^{-r^2}}{2}\Big|_{0}^{\infty} d\theta$$

$$= \int_{0}^{2\pi} \frac{1}{2}\, d\theta$$

$$= \pi$$

$$\Rightarrow I^2 = \pi \quad \Rightarrow I = \sqrt{\pi}$$

5. La función de onda de una partícula es $\Psi(x) = A\cos^2 x$, para $x \in [-\pi, \pi]$

a) Encuentre el valor de la constante de normalización A

Queremos que A sea tal que: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\Psi^*(x)\, dx = 1$

$\Rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} (A\cos^2 x)(A\cos^2 x) = 1$ $\longleftarrow$ $\Psi = \Psi^*$ porque $A\cos^2 x$ es real $\forall x$

$\Rightarrow A^2 \int_{-\pi}^{\pi} \cos^4 x\, dx = 1 \Rightarrow A^2 = \dfrac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} \cos^4 x\, dx}$ (1)

Calculamos la integral:

$\int_{-\pi}^{\pi} \cos^4 x\, dx = 2\int_0^{\pi} \cos^4 x\, dx$ $\leftarrow$ porque $\cos^4 x$ es par, ya que $\cos^4(x) = \cos^4(-x)$ por propiedad del coseno

$= 2\int_0^{\pi} (\cos^2(x))^2 dx$

$= 2\int_0^{\pi} \left(\frac{1}{2}\cos(2x) + \frac{1}{2}\right)^2 dx$ $\leftarrow$ por la identidad $\cos^2 x = \frac{1}{2}\cos(2x) + \frac{1}{2}$

$= 2\int_0^{\pi} \frac{1}{4}\cos^2(2x) + \frac{1}{2}\cos(2x) + \frac{1}{4}\, dx$

$= 2\int_0^{\pi} \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2}\cos(4x) + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\cos(2x) + \frac{1}{4}\, dx$ $\leftarrow$ por la misma identidad pero con $x \to 2x$

$= \int_0^{\pi} \frac{1}{4}\cos(4x) + \cos(2x) + \frac{3}{4}\, dx$

$= \frac{1}{16}\operatorname{sen}(4x)\Big|_0^{\pi} + \frac{1}{2}\operatorname{sen}(2x)\Big|_0^{\pi} + \frac{3}{4}x\Big|_0^{\pi} = \frac{1}{16}(\overset{0}{\cancel{\operatorname{sen}(4\pi)}} - \overset{0}{\cancel{\operatorname{sen}(0)}}) + \frac{1}{2}(\overset{0}{\cancel{\operatorname{sen}(2\pi)}} - \overset{0}{\cancel{\operatorname{sen}(0)}}) + \frac{3}{4}\pi = \underline{3/4\,\pi}$

Entonces, por (1) tenemos: $A^2 = \dfrac{1}{\int_{-\pi}^{\pi}\cos^4(x)\, dx} = \dfrac{1}{\frac{3}{4}\pi} \Rightarrow A = \dfrac{2}{\sqrt{3\pi}}$

b) Probabilidad de que la partícula se encuentre entre $x = -\pi/4$, $x = \pi/4$

Como ya está normalizada sólo hay que calcular $\int_{-\pi/4}^{\pi/4} |\Psi(x)|^2 dx$

$= \int_{-\pi/4}^{\pi/4} A^2 \cos^4 x\, dx$

$= A^2 \int_{-\pi/4}^{\pi/4} \cos^4 x\, dx = 2A^2 \int_0^{\pi/4} \cos^4 x\, dx$

Es la misma integral de antes pero con otro límite

$= A^2 \left[\frac{1}{16}\operatorname{sen}(4x)\Big|_0^{\pi/4} + \frac{1}{2}\operatorname{sen}(2x)\Big|_0^{\pi/4} + \frac{3}{4}x\Big|_0^{\pi/4}\right]$

$= A^2\left[\frac{1}{16}\overset{0}{\cancel{(\operatorname{sen}(\pi) - \operatorname{sen}(0))}} + \frac{1}{2}(\operatorname{sen}(\frac{\pi}{2}) - \overset{0}{\cancel{\operatorname{sen}(0)}}) + \frac{3\pi}{16}\right]$

$= A^2\left[\frac{1}{2} + \frac{3\pi}{16}\right]$

por el resultado de A^2 de antes

$= \frac{4}{3\pi}\left[\frac{1}{2} + \frac{3\pi}{16}\right]$

$= \frac{1}{4} + \frac{2}{3\pi}$ $\approx \underline{0.4622}$

6. Encuentre la probabilidad de que una partícula en una caja unidimensional de ancho L sea encontrada entre $x=0$ y $x=L/n$ cuando está en el n-ésimo estado.

Como vimos en clase, la función de onda para una partícula en una caja es

$$\psi_n = A \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}$$ ← en el n-ésimo estado

la función de onda es sólo en $[0,L]$, afuera vale 0

Primero la normalizamos. Buscamos que cumpla $\int_0^L \psi_n \psi_n^* = 1$

$$\Rightarrow \int_0^L \left(A \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}\right)\left(A \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1$$ ← como $\psi_n = A \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}$ es real $\Rightarrow \psi_n = \psi_n^*$

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

$$\Rightarrow A^2 \int_0^L \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx = 1$$ ← por la propiedad $\operatorname{sen}^2(a) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2a)$

$$\Rightarrow A^2 \left[\frac{1}{2}x \Big|_0^L - \frac{L}{4n\pi} \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\Big|_0^L \right] = 1$$

$$\Rightarrow A^2 \left[\frac{1}{2}L - \frac{L}{4n\pi}\left(\cancel{\operatorname{sen}(2\pi n)}^{\,0} - \cancel{\operatorname{sen}(0)}^{\,0}\right) \right] = 1 \Rightarrow \frac{A^2}{2} L = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

porque $n \in \mathbb{N}$

Ahora sí, con la función ya normalizada, la probabilidad en cuestión es:

Probabilidad entre 0 y L/n:

$$\int_0^{L/n} \psi_n \psi_n^* \, dx = \int_0^{L/n} A^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$ Es la misma integral de arriba, con otros límites

$$= A^2 \left[\frac{1}{2}x \Big|_0^{L/n} - \frac{L}{4n\pi} \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\Big|_0^{L/n} \right]$$

$$= A^2 \left[\frac{1}{2}\frac{L}{n} - \frac{L}{4n\pi}\left(\cancel{\operatorname{sen}(2\pi)}^{\,0} - \cancel{\operatorname{sen}(0)}^{\,0}\right) \right]$$

$$= A^2 \frac{1}{2}\frac{L}{n}$$ ← porque $A^2 = \frac{2}{L}$

$$= \frac{2}{L} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{L}{n}$$

$$= \frac{1}{n}$$

Entonces la probabilidad es $1/n$

7. Considere el oscilado armónico cuántico unidimensional.

a) Escriba la ecuación de Schrödinger para este problema en términos de $\omega = \sqrt{k/m}$

La ecuación de Schrödinger estacionaria es: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_{(x)})\psi = 0$

y la energía potencial de un oscilador es $U(x) = \frac{1}{2}Kx^2$ $\hookrightarrow$ $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{1}{2}Kx^2)\psi = 0$

y ahora sustituimos $\omega = \sqrt{k/m}$ $\rightarrow$ $\omega^2 = k/m$ $\Rightarrow$ $k = \omega^2 m$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}\omega^2 m x^2\right)\psi = 0$$

b) A partir de la función de onda del estado base $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$. Encuentre la energía de este estado usando la ec. de Schrödinger.

Despejamos E de la ec. de Schrödinger $\rightarrow$ $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\psi = 0$

$$\Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\psi - \frac{d^2\psi}{dx^2}$$

$$\Rightarrow E = \frac{m\omega^2}{2}x^2 - \frac{\hbar^2}{2m\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} \qquad (1)$$

Luego, como ψ_0 es una solución a la ecuación (por hipótesis es la función de onda del estado base y entonces debe cumplir la ecuación (1)).
Entonces, al reemplazar en (1), nos debe de dar la energía. Antes de reemplazar, calculamos:

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\right)2x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) = -\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right) x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_0}{dx^2} = -\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) - \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right) x \left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\right)2x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

usamos regla del producto de derivada

$$= -\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) + \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$= -\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)\left[1 - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right]$$

$$= -\psi_0\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\left[1 - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right]$$

Ahora ya sustituimos esto en (1):

$$E_0 = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \psi_0 - \frac{\hbar^2}{2m\psi_0}\frac{d^2\psi_0}{dx^2}$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}x^2 \psi_0 - \frac{\hbar^2}{2m\psi_0}\left(-\psi_0\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)\left[1 - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right]\right)$$ ← por lo que calculamos antes

$$= \frac{m\omega^2}{2}x^2 \psi_0 + \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\cancel{\hbar^2}}{2m\cancel{\psi_0}}\cancel{\psi_0}\left(\frac{m\omega}{\cancel{\hbar}}\right)\left(\frac{m\omega}{\cancel{\hbar}}\right)x^2$$

$$= \cancel{\frac{m\omega^2}{2}x^2} + \frac{\hbar\omega}{2} - \cancel{\frac{m\omega^2}{2}x^2}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}$$

Es decir, la energía es $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

8) Un haz de electrones incide sobre una barrera de 7.00 eV de alto y 0.250 nm de ancho. ¿Qué energía deben tener si se requiere que el 2.00% pase la barrera?

En clase vimos que la probabilidad aproximada de que una partícula atraviese una barrera de potencial U si los electrones tienen energía E es:

$$T = e^{-2k_2 L}$$

con L = longitud de la barrera

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}, \quad U = 7.00 \text{ eV}$$

$\Rightarrow$ Despejamos k_2

$$\ln(T) = -2k_2 L \quad \Rightarrow \quad k_2 = -\frac{\ln(T)}{2L}$$

Sustituimos k_2 y despejamos E

$$\Rightarrow \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} = \frac{-\ln(T)}{2L}$$

$$\Rightarrow 2m(U-E) = \frac{\hbar^2 (\ln(T))^2}{4L^2}$$

$$\Rightarrow U-E = \frac{\hbar^2 (\ln(T))^2}{8mL^2}$$

$$\Rightarrow E = U - \frac{\hbar^2 (\ln(T))^2}{8mL^2}$$

Sustituimos los datos:

Queremos que la probabilidad sea 2% por lo que $T = 0.02$

$$E = 7.00 \text{ eV} - \frac{(1.0546 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2 (\ln(0.02))^2}{8(9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg})(0.25 \cdot 10^{-9} \text{ m})^2}$$

$$= 7.00 \text{ eV} - 3.7371 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

$$= 7.00 \text{ eV} - 2.336 \text{ eV}$$

$$= \underline{4.6643 \text{ eV}}$$

$\therefore$ Necesitan una energía de $\underline{4.664 \text{ eV}}$

Problema optativo

Considere una partícula dentro de un paralelepípedo con paredes infinitamente rígidas de largo L_x, L_y, L_z

$x \in [0, L_x]$, $y \in [0, L_y]$, $z \in [0, L_z]$

a) Escriba la ecuación de Schrödinger para el problema.

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

En este caso $U = 0$ (la partícula es libre, no tiene potencial)

$$\Rightarrow \nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

con la condición que ψ vale 0 si

$$\left\{\begin{array}{lll} x \leq 0 & ó & x \geq L_x \\ y \leq 0 & ó & y \geq L_y \\ z \leq 0 & ó & z \geq L_z \end{array}\right\}$$

Fuera de la caja

Porque la partícula tiene que estar atrapada en la caja y entonces ψ vale 0 fuera de la caja

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

b) Resuelva la ecuación para encontrar $\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$ con n_x, n_y, n_z los números cuánticos.

Proponemos una solución separable de la forma $\psi(x,y,z) = X(x)\, Y(y)\, Z(z)$ y sustituimos

$$\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}(X(x) Y(y) Z(z)) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}(X(x) Y(y) Z(z)) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}(X(x) Y(y) Z(z)) + \frac{2m}{\hbar^2} E X(x) Y(y) Z(z) = 0$$

$$\Rightarrow YZ \frac{d^2}{dx} X + XZ \frac{d^2}{dy^2} Y + XY \frac{d^2}{dz^2} Z + \frac{2m}{\hbar^2} E XYZ = 0$$

Dividimos por XYZ

$$\frac{1}{X}\frac{d^2}{dx^2}X + \frac{1}{Y}\frac{d^2}{dy^2}Y + \frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z + \frac{2m}{\hbar^2}E = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{X}\frac{d^2}{dx^2}X = -\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{1}{Y}\frac{d^2}{dy^2}Y - \frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z$$

como ambos lados son iguales pero dependen de distintas variables, la única posibilidad es que ambos lados sean iguales a una constante $-K_x^2$

primera ecuación

$$\rightarrow \frac{1}{X}\frac{d^2}{dx^2}X = -K_x^2 \quad (1)$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{1}{Y}\frac{d^2}{dy^2}Y - \frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z = -K_x^2$$

$$\hookrightarrow \frac{1}{Y}\frac{d^2}{dy^2}Y = K_x^2 - \frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z$$

como ambos lados son iguales pero dependen de distintas variables, deben de ser iguales a una cte $-K_y^2$

$$\Rightarrow \frac{1}{Y}\frac{d^2}{dy^2}Y = -K_y^2 \quad (2)$$

$$K_x^2 - \frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z = -K_y^2$$

$$\Rightarrow \frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z = -\frac{2m}{\hbar^2}E + K_y^2 + K_x^2 \quad (3)$$

Definimos $-K_z^2 = K_x^2 + K_y^2 - \frac{2m}{\hbar^2}E \Rightarrow E = \frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$

Escogimos las constantes de separación $-K_x^2$, $-K_y^2$ así justo para que esta ecuación sea un oscilador.

Luego, las tres ecuaciones y sus soluciones son:

•) $\frac{1}{X}\frac{d^2}{dx^2}X = -K_x^2 \rightarrow \frac{d^2}{dx^2}X = -K_x^2 X \xrightarrow{\text{Solución}} X(x) = A_1 \cos(K_x x) + A_2 \text{sen}(K_x x)$

••) $\frac{1}{Y}\frac{d^2}{dy^2}Y = -K_y^2 \rightarrow \frac{d^2}{dy^2}Y = -K_y^2 Y \longrightarrow Y(y) = B_1 \cos(K_y y) + B_2 \text{sen}(K_y y)$

•••) $\frac{1}{Z}\frac{d^2}{dz^2}Z = -K_z^2 \rightarrow \frac{d^2}{dz^2}Z = -K_z^2 Z \longrightarrow Z(z) = C_1 \cos(K_z z) + C_2 \text{sen}(K_z z)$

Y la solución más general es $\Psi(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$

• Condiciones de frontera:

•) Como dijimos antes $\Psi(x=0,y,z) = 0$ porque $x=0$ es una pared

$\Rightarrow X(0)\,Y(y)\,Z(z) = 0 \rightarrow X(0) = 0$ (porque $Y(y)\,Z(z) \neq 0$)

$\Rightarrow A_1 \cos(K_x(0)) + A_2 \text{sen}(K_x(0)) \Rightarrow A_1 = 0 \quad \therefore X(x) = A_2 \text{sen}(K_x x)$

••) $\Psi(x=L_x, y, z) = 0$

$\rightarrow X(L_x)\,Y(y)\,Z(z) = 0 \rightarrow X(L) = 0 \rightarrow A_2 \text{sen}(K_x L_x) = 0$

Para que esto sea sero, se debe de tener $K_x L_x = n_x\pi \Rightarrow K_x = \frac{n_x \pi}{L_x}$, con $n_x \in \mathbb{Z}$ ✓ para que $\text{Sen}(n_x\pi) = 0$

•••) $\Psi(x, y=0, z) = 0$

$\rightarrow X(x)\,Y(0)\,Z(z) = 0 \rightarrow Y(0) = 0 \Rightarrow B_1 \cos(K_y(0)) + B_2 \text{sen}(K_y(0)) = 0 \Rightarrow B_1 = 0 \quad \therefore Y(y) = B_2 \text{sen}(K_y y)$

••••) $\Psi(x, y=L_y, z) = 0$

$\Rightarrow X(x)\,Y(L_y)\,Z(z) = 0 \rightarrow Y(L_y) = 0 \Rightarrow B_2 \text{sen}(K_y L_y) = 0$

$\therefore$ se debe de tener $K_y L_y = n_y \pi \rightarrow K_y = \frac{n_y \pi}{L_y}$ con $n_y \in \mathbb{Z}$

-) $\Psi(x,y,z=0) = 0$

$\rightarrow X(x)\,Y(y)\,Z(0) = 0 \rightarrow Z(0) = 0 \Rightarrow C_1 \cos(K_z(0)) + C_2 \text{sen}(K_z(0)) = 0 \Rightarrow C_1 = 0 \quad \therefore Z(z) = C_2 \text{sen}(K_z z)$

=) $\Psi(x,y,z=L_z) = 0$

$\rightarrow X(x)\,Y(y)\,Z(L_z) = 0 \rightarrow Z(L_z) = 0 \rightarrow C_2 \text{sen}(K_z L_z) = 0$

$\therefore$ se debe de tener $K_z L_z = n_z \pi \rightarrow K_z = \frac{n_z \pi}{L_z}$ con $n_z \in \mathbb{Z}$

Entonces ahora sí la solución es: $\psi_{(x,y,z)} = X_{(x)} Y_{(y)} Z_{(z)}$

$$= A_z \,\text{sen}(k_x x) \cdot B_z \,\text{sen}(k_y y) \cdot C_z \,\text{sen}(k_z z)$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = A \,\text{Sen}\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \text{sen}\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \text{sen}\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right)}$$

juntamos las constantes A_z, B_z, C_z en una $A = A_z B_z C_z$

Donde $E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$

y donde $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$

c) Especifique qué valores pueden tomar los números cuánticos.

Como vimos antes, $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$.

Sin embargo, como seno es impar, cambiar n_x por $-n_x$ sólo cambia el signo de ψ pero no da una nueva solución L.I.

Además, si alguno $n_x, n_y, n_z = 0$ entonces $\psi_{(x,y,z)} = 0$ que es una solución trivial que no nos interesa

Entonces, tenemos en realidad que:
$$n_x = 1, 2, 3, \ldots$$
$$n_y = 1, 2, 3, \ldots$$
$$n_z = 1, 2, 3, \ldots$$

d) Normalice la función de onda obtenida.

Calculamos la norma de $\psi_{(x,y,z)}$:

Estos límites porque ψ sólo es distinta de 0 aquí

Como ψ es real $\Rightarrow \psi = \psi^*$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \,dx\,dy\,dz = \int_0^{L_z}\int_0^{L_y}\int_0^{L_x} \left[A \,\text{sen}\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)\text{sen}\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right)\text{sen}\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right)\right]\left[A\,\text{sen}\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)\text{sen}\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)\text{sen}\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)\right] dx\,dy\,dz$$

$$= A^2 \int_0^{L_z}\int_0^{L_y}\int_0^{L_x} \text{sen}^2\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)\text{sen}^2\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right)\text{sen}^2\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right) dx\,dy\,dz$$

$$= A^2 \int_0^{L_x} \text{sen}^2\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right) dx \int_0^{L_y} \text{sen}^2\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right) dy \int_0^{L_z} \text{sen}^2\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right) dz$$

$$= A^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{L_x \,\text{sen}\left(\frac{2n_x\pi}{L_x}x\right)}{4\pi n_x}\right]_0^{L_x} \left[\frac{y}{2} - \frac{L_y \,\text{sen}\left(\frac{2n_y\pi}{L_y}y\right)}{4\pi n_y}\right]_0^{L_y} \left[\frac{z}{2} - \frac{L_z \,\text{sen}\left(\frac{2n_z\pi}{L_z}z\right)}{4\pi n_z}\right]_0^{L_z}$$

$$= A^2 \left[\frac{L_x}{2} - \frac{L_x \overbrace{\text{sen}(2n_x\pi)}^{0}}{4\pi n_x}\right]\left[\frac{L_y}{2} - \frac{L_y \overbrace{\text{sen}(2n_y\pi)}^{0}}{4\pi n_y}\right]\left[\frac{L_z}{2} - \frac{L_z \overbrace{\text{sen}(2n_z\pi)}^{0}}{4\pi n_z}\right]$$

$$= \frac{A^2}{8} L_x L_y L_z$$

Pero queremos que esta norma sea 1 $\Rightarrow \frac{A^2}{8} L_x L_y L_z = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}}$

∴ La solución normalizada es:
$$\boxed{\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \,\text{sen}\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)\text{sen}\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right)\text{sen}\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right)}$$

e) Encuentre la expresión para las energías permitidas.

Ya habíamos encontrado esta expresión antes:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \quad \text{con } n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}$$

F) ¿Qué conjunto de números cuánticos representa el estado base y cuál es la energía?

Como dijimos antes, ningún n_x, n_y, n_z puede ser 0. Pues en ese caso $\psi = 0$ y la solución se reduce a 0.

Entonces el valor mínimo de los números es $n_x = n_y = n_z = 1$ ← Estado base

Y entonces la energía es:

$$E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$
$$= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2}\right)$$

g) ¿Cuál es la energía del primer estado excitado y cuáles números cuánticos corresponden a este estado?

Ya vimos que el estado base es $n_x = n_y = n_z = 1$. Para el primer estado excitado, alguna de estas constantes tiene que ser 2. Tenemos 3 opciones

i) $n_x = 2$, $n_y = n_z = 1$, $\rightarrow E_{2,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{4}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2}\right)$

ii) $n_x = 1 = n_z$, $n_y = 2$, $\rightarrow E_{1,2,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{4}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2}\right)$

iii) $n_x = n_y = 1$, $n_z = 2$, $\rightarrow E_{1,1,2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{4}{L_z^2}\right)$

El primer estado excitado corresponderá a la menor de estas energías, que depende de los valores L_x, L_y, L_z.

La menor energía se consigue cuando se considera el L_i más grande (con $i = x, y, z$) y se toma el estado $n_i = 2$ y las otras n igualadas a 1

Si es una caja cuadrada $\rightarrow L_x = L_y = L_z \equiv L$

Entonces la energía de este estado es $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{6}{L^2}\right)$

y es un estado degenerado porque se consigue para cualquier caso de n_x, n_y, n_z tal que dos de éstos valen 1 y el otro vale 2 (3 opciones distintas)