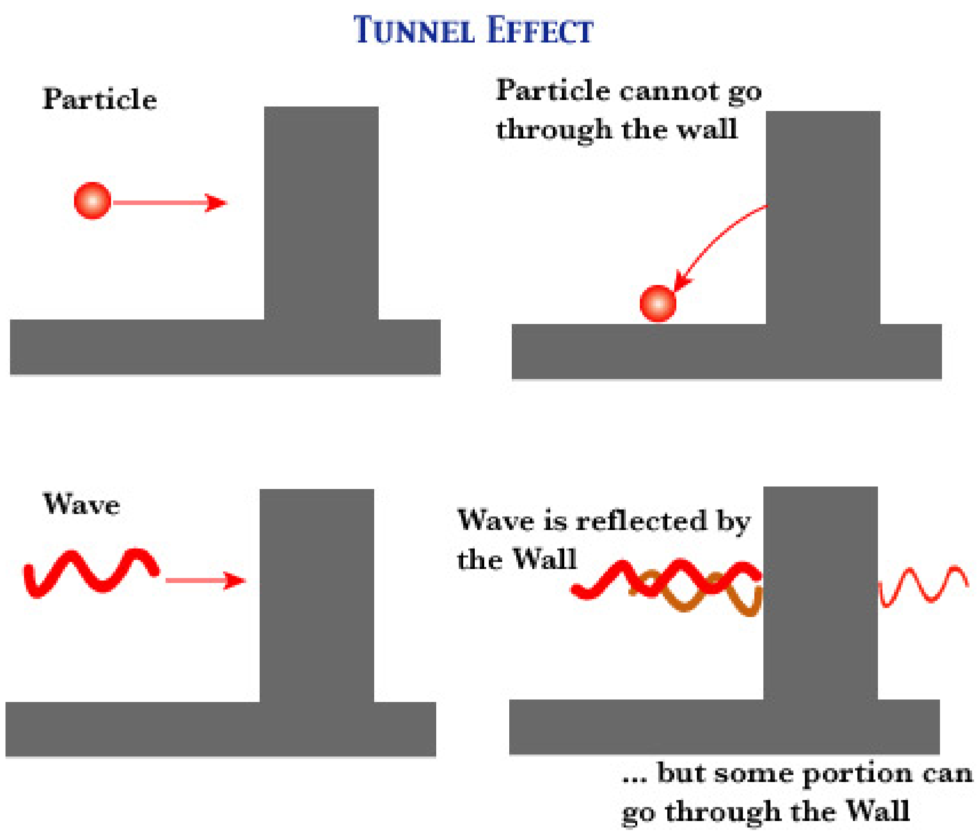
- **Unidad** 04 – Aplicación a sistemas simples
- **Clase** U04C03
- **Fecha** 23 Mayo 2017
- **Cont** Oscilador Armónico
- **Cátedra** Asorey
- **Web**

https://github.com/asoreyh/unrn-moderna-a

"Los átomos se comportan como átomos, nada más".
John Gribbin

Unidad 4: Aplicación a sistemas simples
Martes 02 de mayo al Jueves 18 de mayo

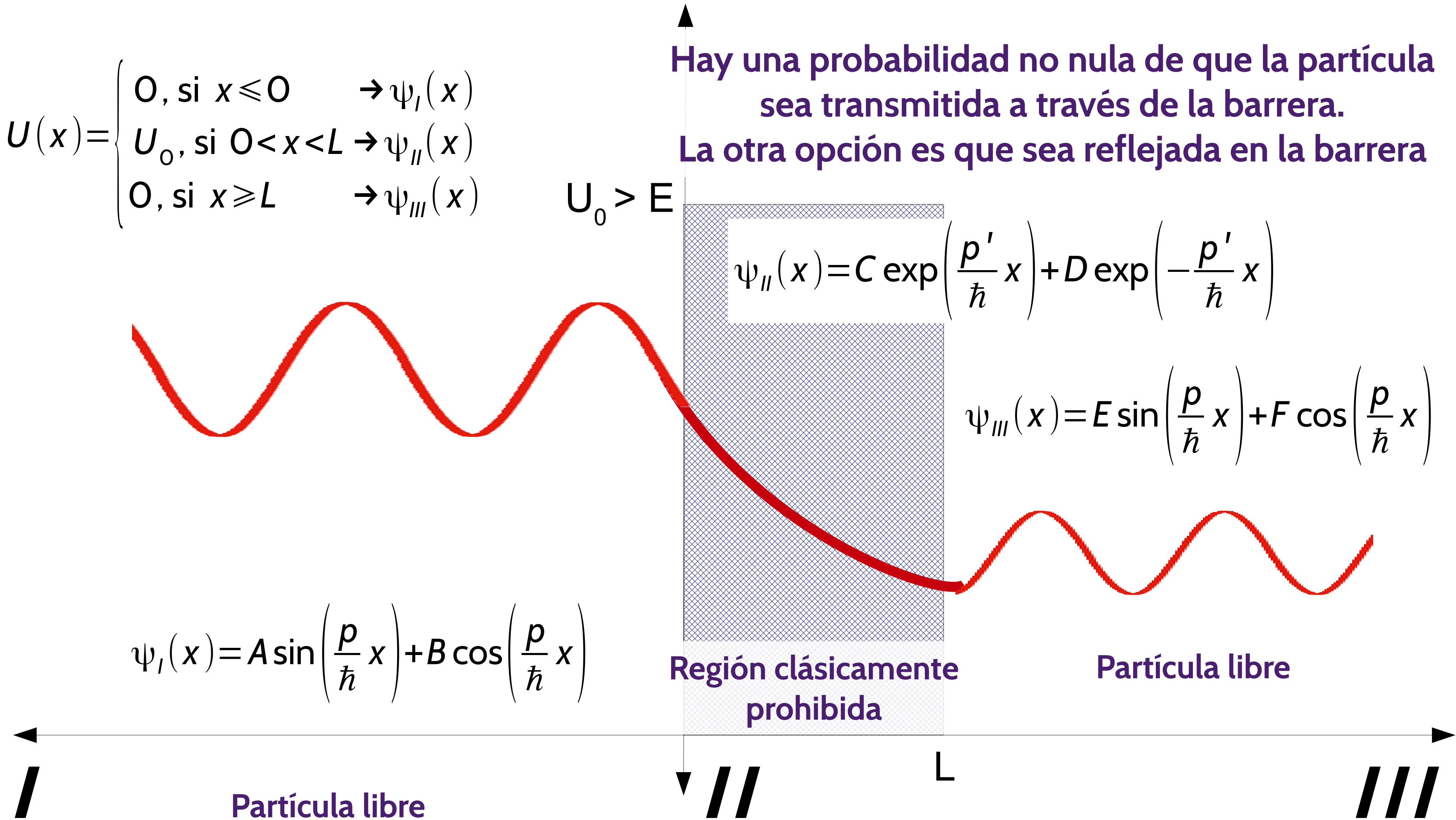


- Pozos y barreras de potencial infinitos y finitos. Estado estacionario. La densidad de probabilidad. Corriente de probabilidad. Efecto túnel. Aplicaciones tecnológicas del efecto túnel. El oscilador armónico. Cuantización del oscilador armónico. Autovalores y autofunciones. Reinterpretación del principio de correspondencia

Barrera de potencial, simplifiquemos

$$U(x)=\begin{cases} 0, \text{ si } x \leqslant 0 & \rightarrow \psi_I(x) \\ U_0, \text{ si } 0<x<L & \rightarrow \psi_{II}(x) \\ 0, \text{ si } x \geqslant L & \rightarrow \psi_{III}(x) \end{cases}$$

Hay una probabilidad no nula de que la partícula sea transmitida a través de la barrera.
La otra opción es que sea reflejada en la barrera



$$\psi_{II}(x)=C\exp\left(\frac{p'}{\hbar}x\right)+D\exp\left(-\frac{p'}{\hbar}x\right)$$

$$\psi_{III}(x)=E\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)+F\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$

$$\psi_I(x)=A\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)+B\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$

Transmisión y reflexión

- **Hay una probabilidad no nula** (aunque puede ser muy pequeña) **de que una partícula con energía *E* atraviese una barrera de ancho *L* y altura U_0>*E*.**

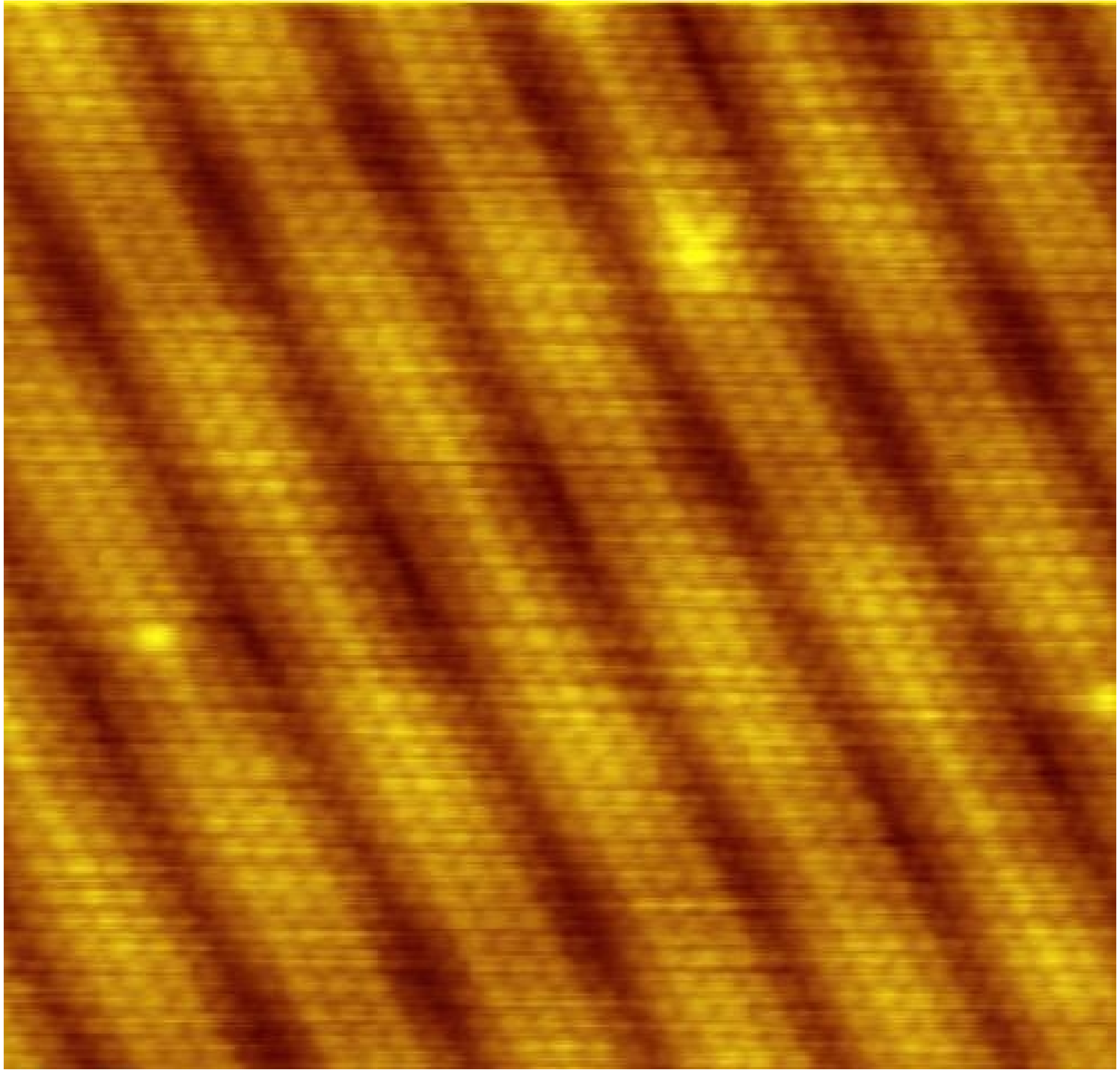
- La probabilidad de transmisión es:

$$T(L,E)=\frac{\left|\psi_{III}^{2}\right|}{\left|\psi_{I}(x)^{2}\right|}=\frac{F^{*}F}{A^{*}A}=T_0 e^{-2\beta L}\approx e^{-2\beta L}$$

$$T_0(U_{0,E},L)=\left[16\frac{E}{U_0}\left(1-\frac{E}{U_0}\right)\right],\ \text{y}\ \beta=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}$$

- **La dependencia es muy fuerte con el ancho *L*** → dispositivos tecnológicos: diodos, transistores (TFET, MOSFET), microscopio de efecto túnel

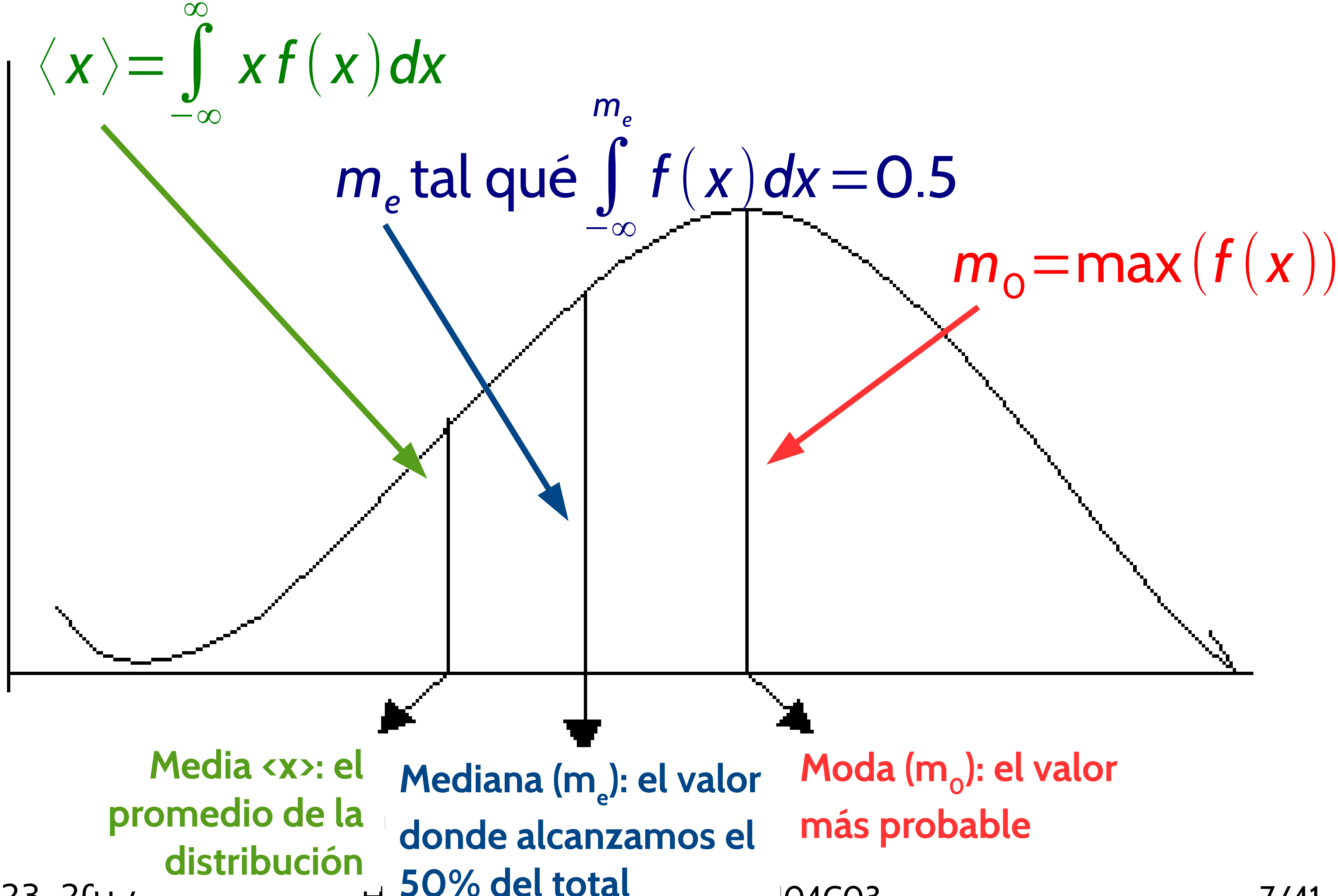
Superficie de una lámina de oro



Valores de expectación

- **Si $\Psi(x,t)$ es la solución de onda de un sistema, toda la información del sistema está contenida en Ψ.**
- Nos preguntamos ¿cuál es la posición x de la partícula? Medir esto implica medir la posición de muchas partículas en la misma situación física al mismo tiempo t, y obtener el promedio de la posición, **$\langle x \rangle$**
- **$\langle x \rangle$ es el valor de expectación de la posición**
- **Si hiciéramos muchas mediciones de la posición, el valor esperado será $\langle x \rangle \rightarrow$ el promedio de todas las mediciones**

moda, media, mediana



Valores de expectación

- En general, para un operador cualquiera, asociado a un observable g:

$$\langle g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi^* \hat{g}\, \Psi \right) dx$$

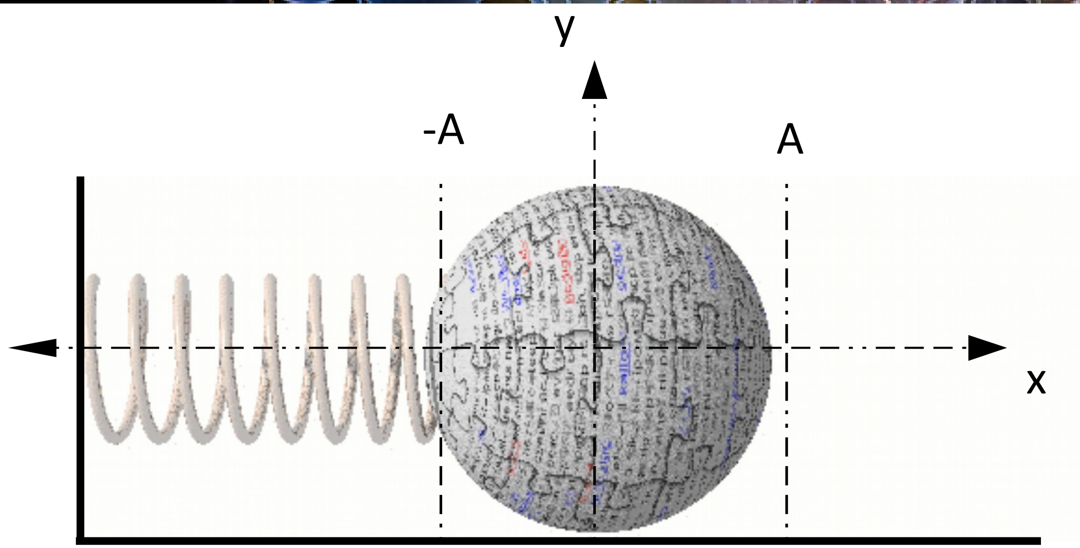
- Por ejemplo, el valor de expectación de p:

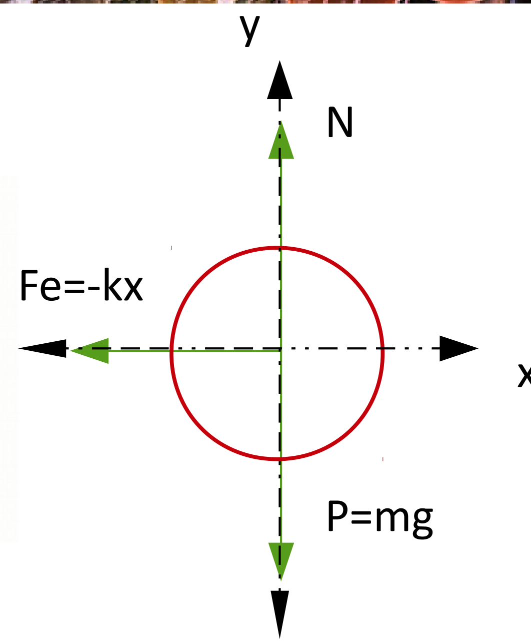
$$\langle \hat{p}(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{p}\, \Psi\, dx$$

$$\langle \hat{p}(x) \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

(¡notar como aplica el operador diferencial!)

Oscilador armónico (clásico)





El sistema está inicialmente en equilibrio (x,y)=(0,0).
A t=0 la masa m es desplazada a la posición (x,y)=(A,0)
La masa comienza a oscilar. La sumatoria de fuerzas en la dirección y es 0. La ecuación de movimiento es:

$$F_e = m\vec{a}$$

$$-k\,x(t) = m\,a_x(t)$$

$$a_x(t) = -\left(\frac{k}{m}\right)x(t)$$

La ecuación de movimiento es una ecuación diferencial ordinaria de orden 2

$$\boxed{\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\left(\frac{k}{m}\right)x(t)}$$

Solución de la ecuación de movimiento

- Tenemos una ecuación que relaciona la segunda derivada de una función, con esa función pero multiplicada por una constante negativa:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\left(\frac{k}{m}\right) x(t)$$

- Recordando que

$$\frac{d\cos(t)}{dt} = -\sin(t) \Rightarrow \frac{d^2\cos(t)}{dt^2} = -\cos(t)$$

- Proponemos la más general posible: $x(t) = A\cos(\omega t + \varphi)$

$$\Rightarrow x(t) = A\cos(\omega t + \varphi) \rightarrow \frac{d^2\left(A\cos(\omega t + \varphi)\right)}{dt^2} = -\omega^2\left(A\cos(\omega t + \varphi)\right)$$

$$\rightarrow \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\omega^2 x(t)$$

Solución

- Entonces, la ecuación de movimiento era:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\left(\frac{k}{m}\right) x(t)$$

- Y con nuestra solución obtuvimos:

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\omega^2 x(t)$$

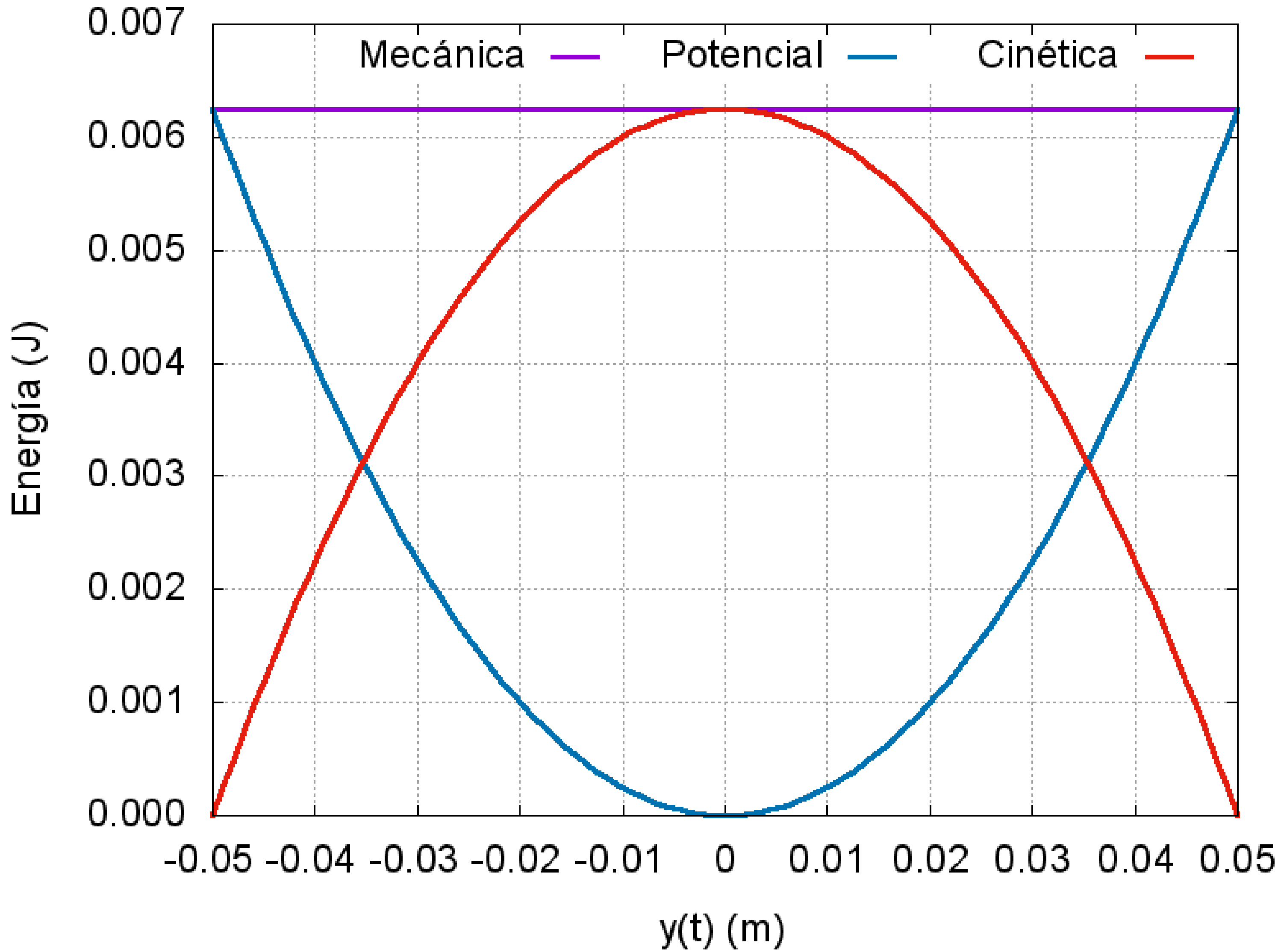
- Comparando ambas, vemos que x(t) es solución si hacemos

$$\omega^2 = \left(\frac{k}{m}\right) \rightarrow \boxed{\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \text{ ó } k = m\,\omega^2}$$

ω es la frecuencia angular del movimiento periódico

Potencial Armónico
dependencia cuadrática en las coordenadas

$$K=\frac{1}{2}mv^2,\ \ U(x)=\frac{1}{2}k\,x^2,\ \text{y}\ E=K+U$$



Importancia del oscilador armónico

- Existe:
  - Una posición de equilibrio, $x_0=0$; y
  - Una fuerza restaurativa dependiente de la posición F(x)
- Para "pequeños" desplazamientos respecto a la posición de equilibrio → Oscilador Armónico (McLaurin, $x_0=0$):

$$F(x)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}\left(\frac{d^j F}{dx^j}\right)_{x=0} x^j = F_{x=0}+\left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} x+\frac{1}{2}\left(\frac{d^{2F}}{dx^2}\right)_{x=0} x^2+\ldots$$

$$\text{si } x\simeq 0, x^2 \ll x \rightarrow F(x)\simeq F_{x=0}+\left(\frac{dF}{dx}\right)_{x=0} x$$

La Ley de Hooke, otra vez

- Ahora, en el equilibrio, F(x=0)=0 y por ser una fuerza restitutiva, dF/dx < 0:

$$\boxed{F(x) \simeq -k\,x\,, \quad k = \left|\frac{dF}{dx}\right|_{x=0}}$$

- Y como la fuerza es la derivada del potencial:

$$\boxed{\begin{gathered} U(x) = \frac{1}{2} k\,x^2 \\ U(x) = \frac{1}{2} m\,\omega^2 x^2 \end{gathered}}$$

Oscilador Armónico (cuántico)

- Como siempre, la solución cuántica será aquella que verifique la ecuación de Schrödinger para este potencial

$$E = K + U \rightarrow \hat{H} = \hat{K} + \hat{U}, \quad \text{las reglas de cuantización}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad \text{el operador Hamiltoniano}$$

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad \text{la ecuación de Schrödinger}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x), \quad \text{el monstruo}$$

Solución

Ec. de Schrödinger para el Oscilador Armónico.

El potencial $U = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ Cinetico: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right]\Psi(x) = E\,\Psi(x)$$

Reordenando:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - E\right]\Psi(x) = 0.$$

Planteamos un cambio de variable:

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \quad \Rightarrow \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, y$$

$$[y] = \left[\frac{kg\, s^{-1}}{J\, s}\right]^{+1/2} m = \left[\frac{\cancel{kg}\, \cancel{s^{-1}}}{\cancel{kg}\frac{m^2}{\cancel{s^2}}\cdot \cancel{s}}\right]^{1/2} m = \frac{1}{m}\cdot m = 1.$$

y es Adimensional. Puede verse que

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{\partial}{\partial y^2} \quad \Rightarrow$$

La ec. de Schrödinger queda.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\cancel{\mu}}\cdot\frac{\cancel{\mu}\omega}{\cancel{\hbar}}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}\cancel{\mu}\omega^2\frac{\hbar}{\cancel{\mu\omega}}y^2-E\right]\psi=0.$$

$$\left[-\frac{1}{2}\hbar\,\omega\,\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}\omega\hbar\,y^2-E\right]\psi=0$$

$$\cancel{-\frac{1}{2}\hbar\omega}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}-y^2+\frac{2E}{\hbar\omega}\right)\psi=0.$$

$$\boxed{\epsilon=\frac{2E}{\hbar\omega}}\qquad[\epsilon]=\frac{\cancel{J}}{\cancel{J s s^{-1}}}=1$$

Energía. Adimensional

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial y^2}-y^2+\epsilon\right]\psi=0.$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi=(y^2-\epsilon)\psi$$

Solución:

Una gaussiana de la forma.

$$\psi(y) = C e^{-y^2/2} \quad y \lim_{y\to\pm\infty} \psi = 0 \checkmark.$$

Puede funcionar. La suponemos para $\psi_0(y) = C e^{-y^2/2}$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial y}\psi_0 = -\frac{1}{\cancel{2}} C \cancel{2} y e^{-y^2/2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi_0 = -C \frac{\partial}{\partial y}\left(y e^{-y^2/2}\right)$$

$$= -C \left(e^{-y^2/2} + y\left(-\frac{1}{\cancel{2}}\right)\cancel{2} y e^{-y^2/2}\right)$$

$$= -C e^{-y^2/2} + y^2 C e^{-y^2/2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial y^2} = \left(-1 + y^2\right)\psi_0$$

reemplazando en la Ec. de Schrodinger.

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi = (y^2-\epsilon_0)\,\psi$$

$$\Rightarrow \quad (-1+y^2)\,\psi_0 = (y^2-\epsilon_0)\,\psi_0$$

$$(y^2-1)\,\psi_0 = (y^2-\epsilon_0)\,\psi_0$$

$\Rightarrow$ para que funcione $\Rightarrow$ $\epsilon_0 = 1$

No puede ser menos por el principio de incertidumbre.

Energía de punto cero.

$$\Rightarrow \epsilon_0 = \frac{2E_0}{\hbar\omega} = 1 \Rightarrow \boxed{E_0 = \frac{1}{2} h\omega}$$

Energía del Nivel Fundamental.

recordando que $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \Rightarrow y^2 = \frac{m\omega}{\hbar}x^2$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = C\, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Un sistema cuántico descrito por un oscilador armónico tiene $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$!!! P.ej. Helio Líquido

Hasta aquí

- El oscilador armónico tiene una energía mínima posible:

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$

- Este valor:
  - Es compatible con el principio de incertidumbre
  - Muestra que todo sistema descripto por el OA no puede tener energía cero → **Energía de punto cero** (p. ej., Helio líquido)
- La función de onda para el nivel fundamental es:

$$\boxed{\psi_0(y) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}y^2} \rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}}$$

En general...

- Las funciones de onda más generales son:

$$\boxed{\psi_0(y)=\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\right)\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}}_{\text{normalización}}\underbrace{H_n(\overbrace{y}^{y=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x})}_{\text{Hermite}}\underbrace{e^{-\frac{1}{2}y^2}}_{Gaussiana}}$$

- $H_n(y)$ es el polinomio de Hermite de grado n.
- La energía E_n es:

$$\boxed{E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

Polinomios de Hermite

$$n=0 \qquad E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega \qquad H_0(y)=1$$

$$n=1 \qquad E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega \qquad H_1(y)=2y$$

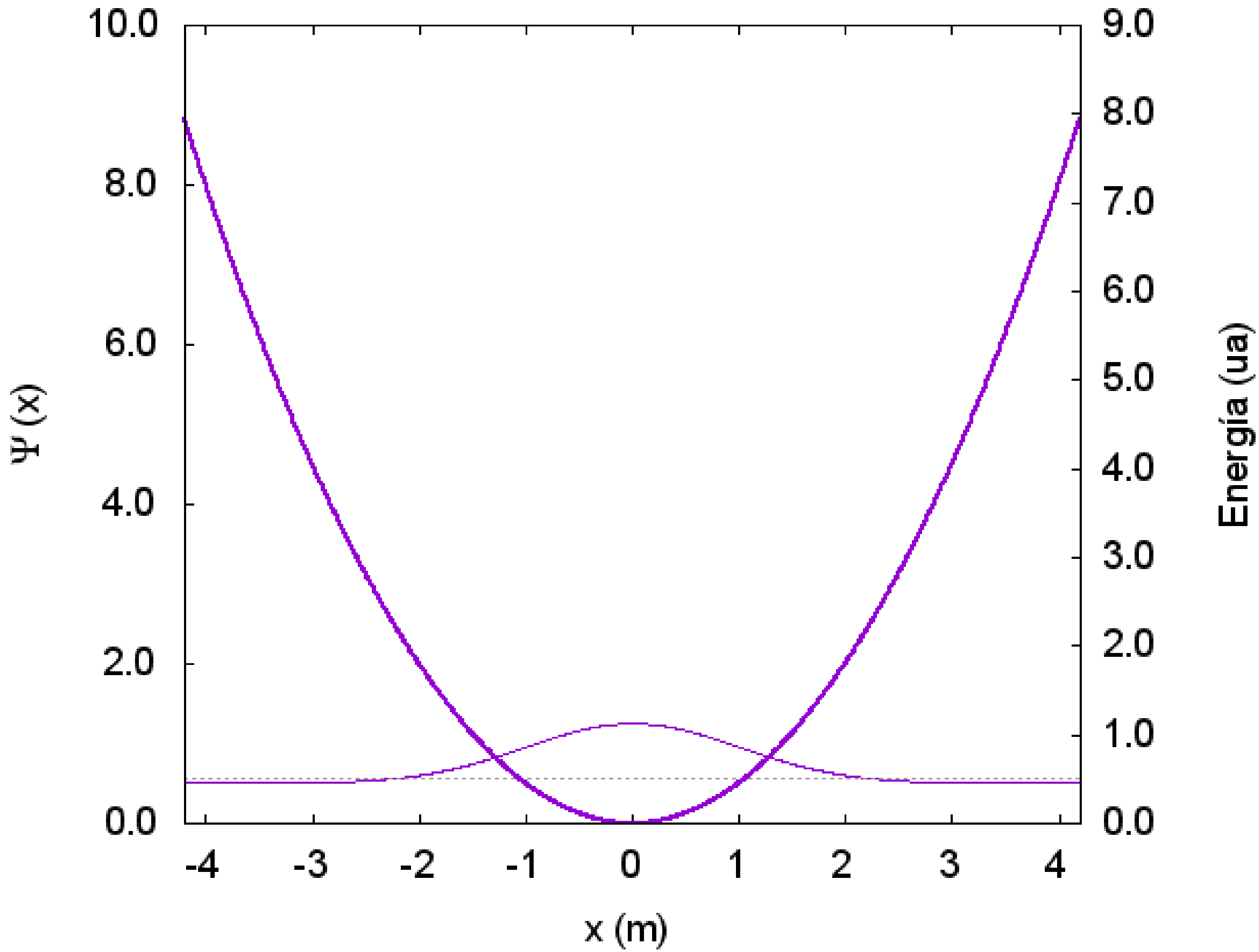
$$n=2 \qquad E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega \qquad H_2(y)=4y^2-2$$

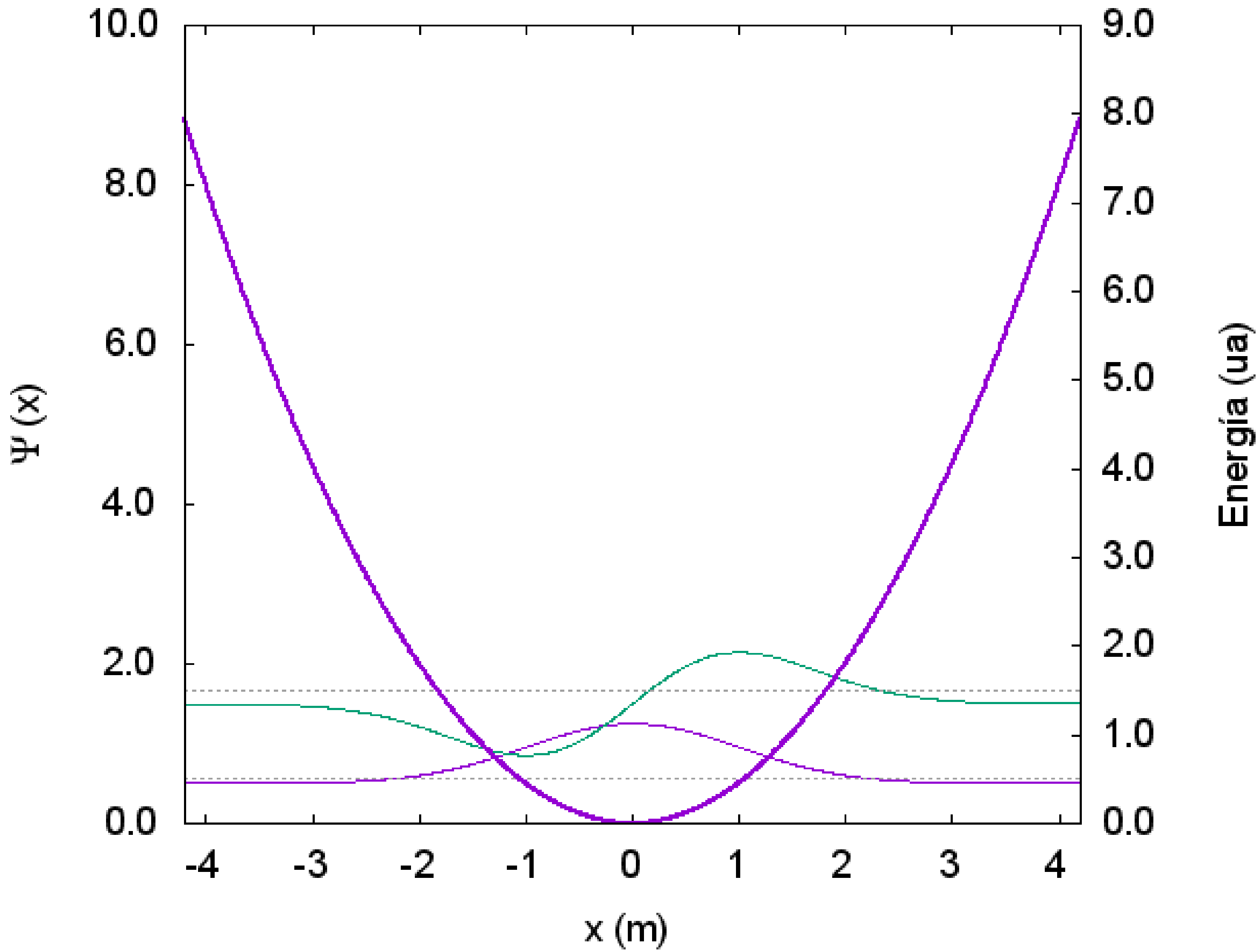
$$n=3 \qquad E_0=\frac{7}{2}\hbar\omega \qquad H_3(y)=8y^3-12y$$

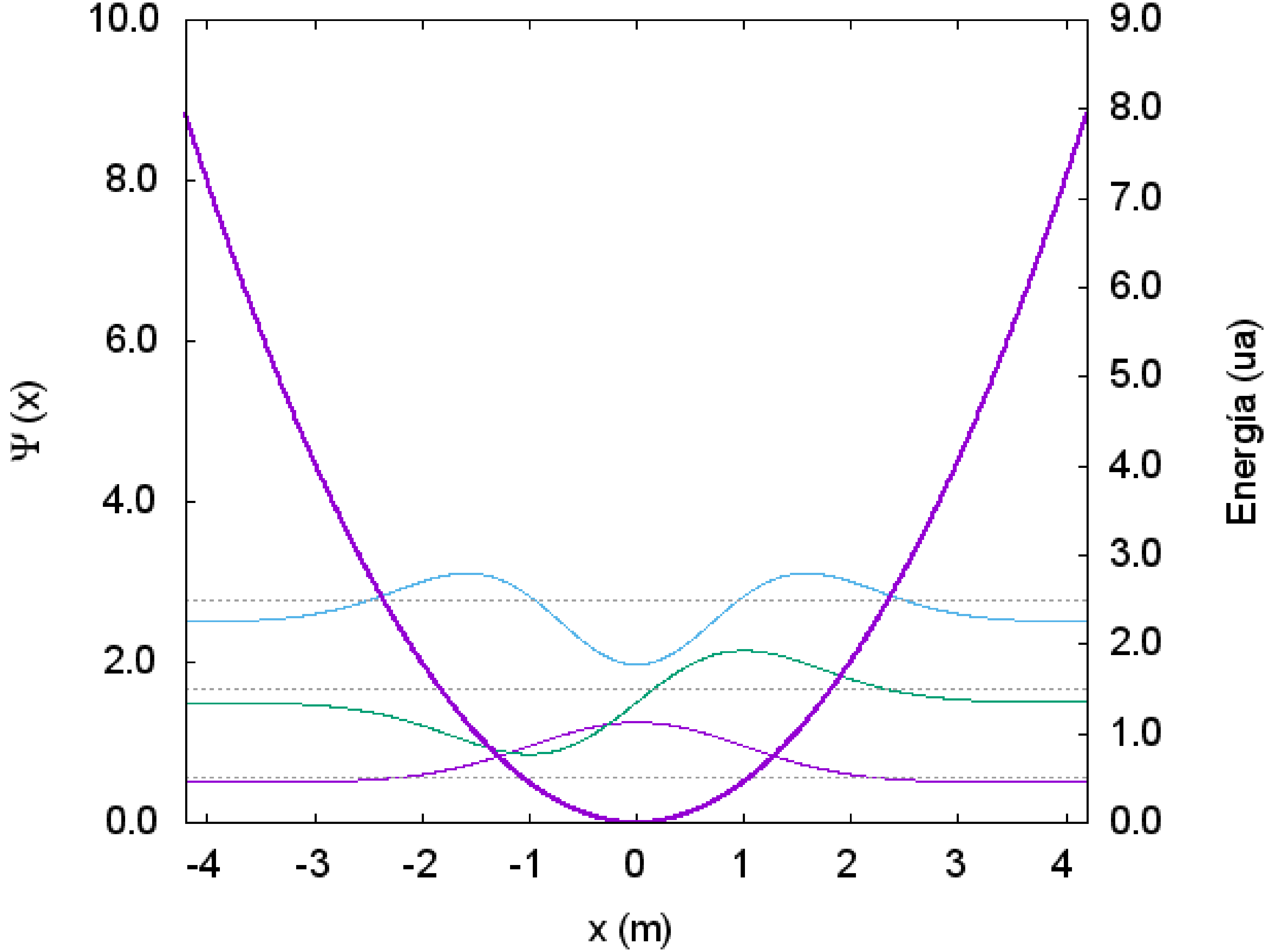
$$n=4 \qquad E_4=\frac{9}{2}\hbar\omega \qquad H_4(y)=16y^4-48y^2+12$$

$$n=5 \qquad E_5=\frac{11}{2}\hbar\omega \qquad H_5(y)=32y^5-160y^3+120y$$

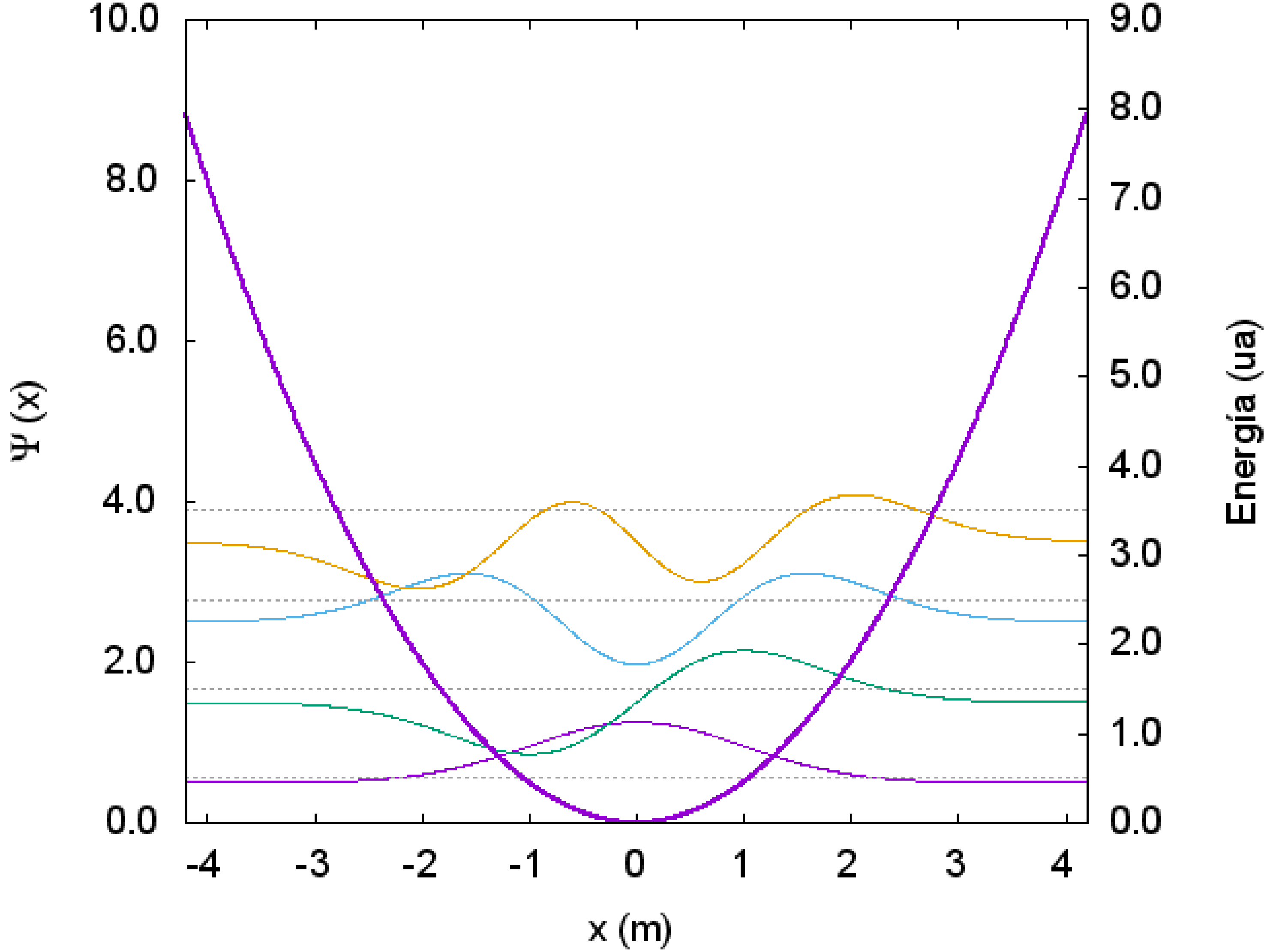
Funciones de onda



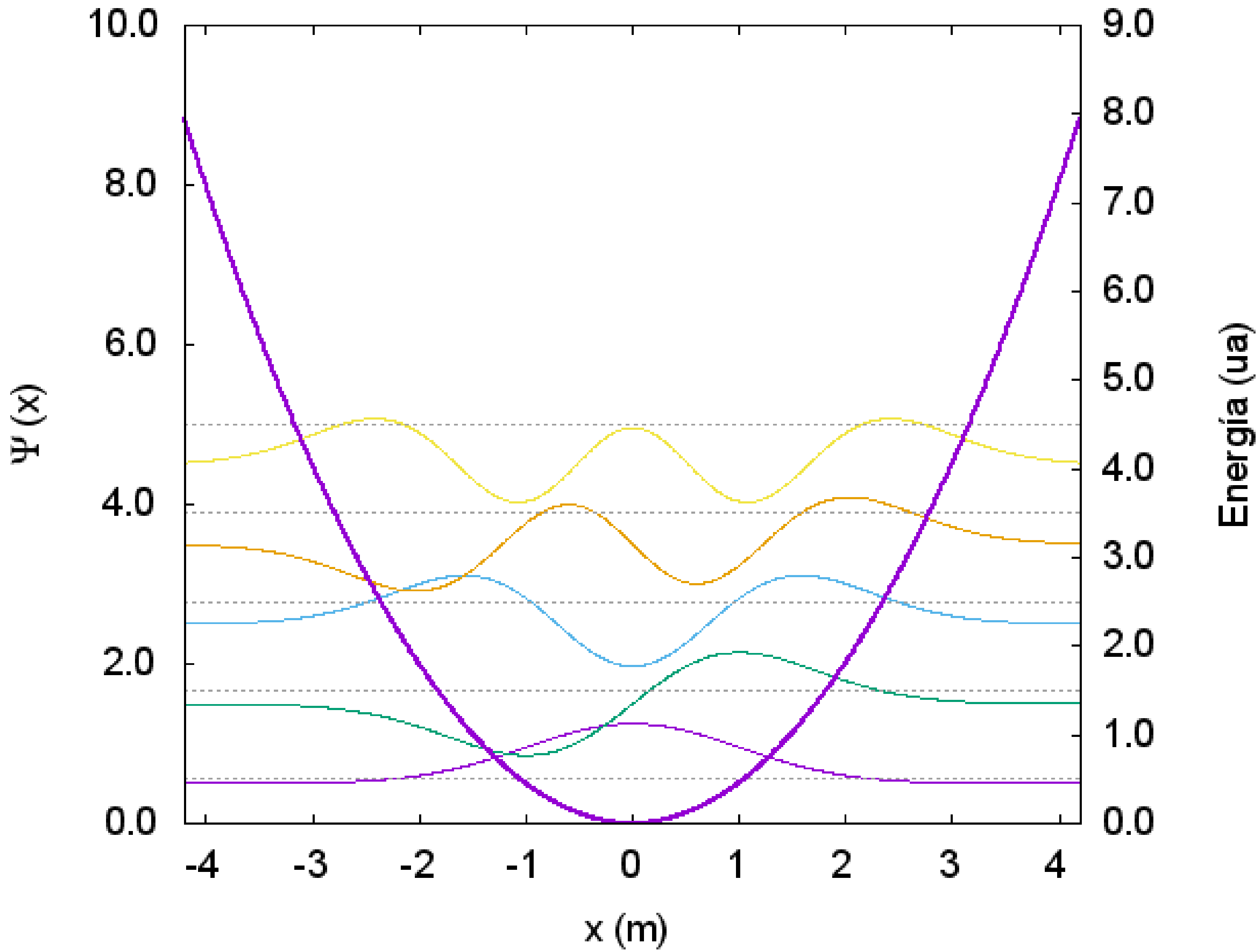

10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Ψ (x)
Energía (ua)
-4 -3 -2 -1 0 1 2 3 4
x (m)



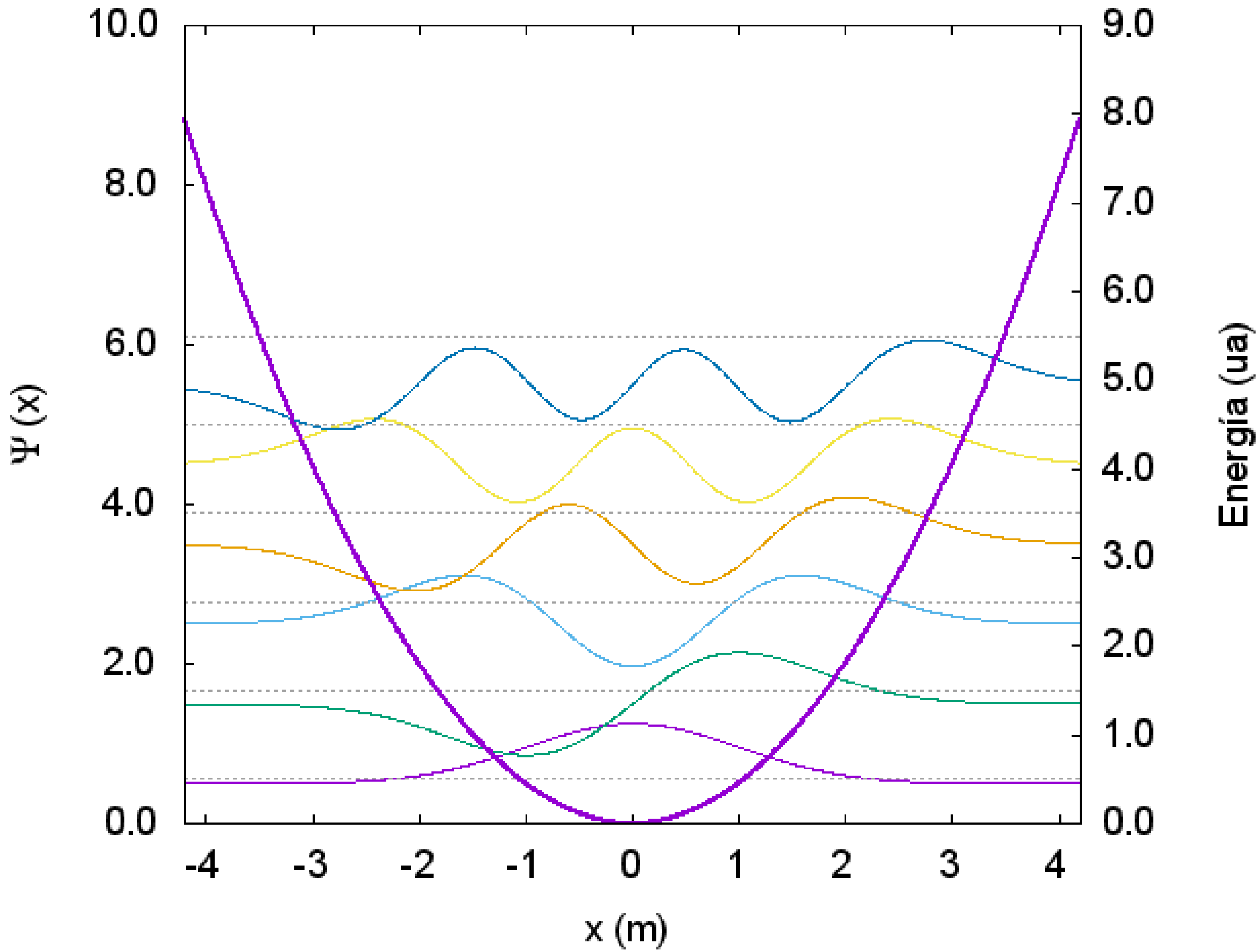
10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Ψ (x)
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

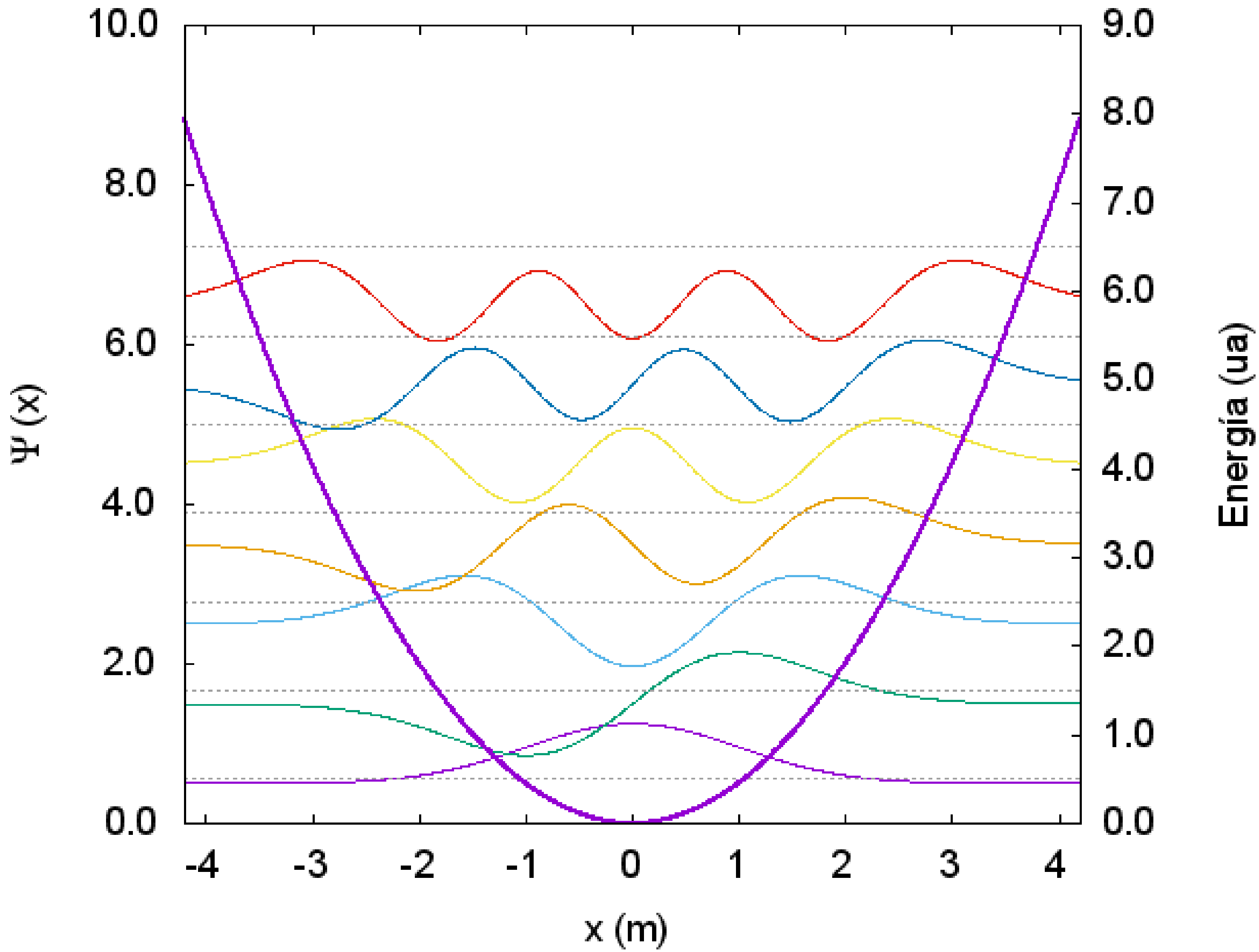


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Ψ (x)
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

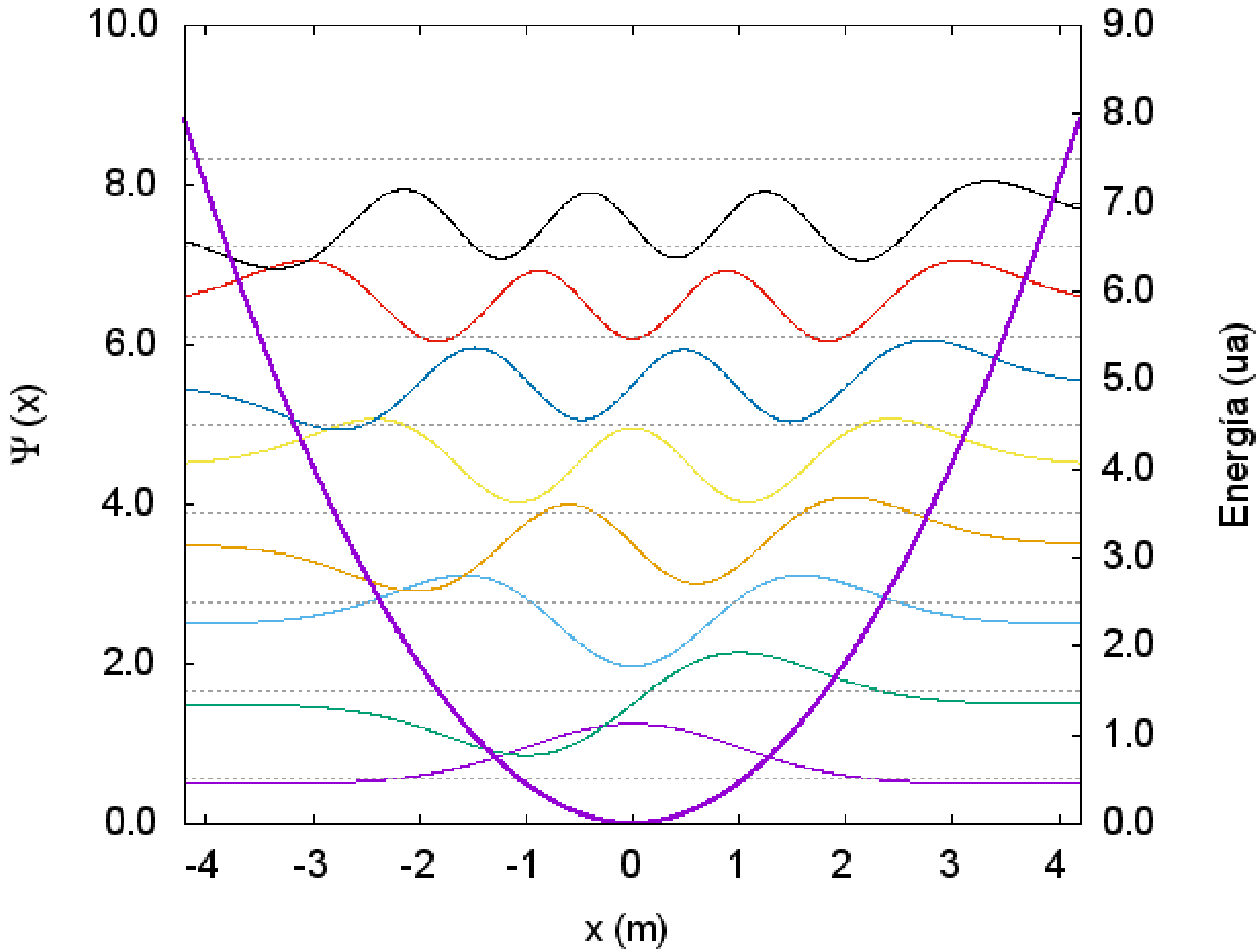


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Ψ (x)
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

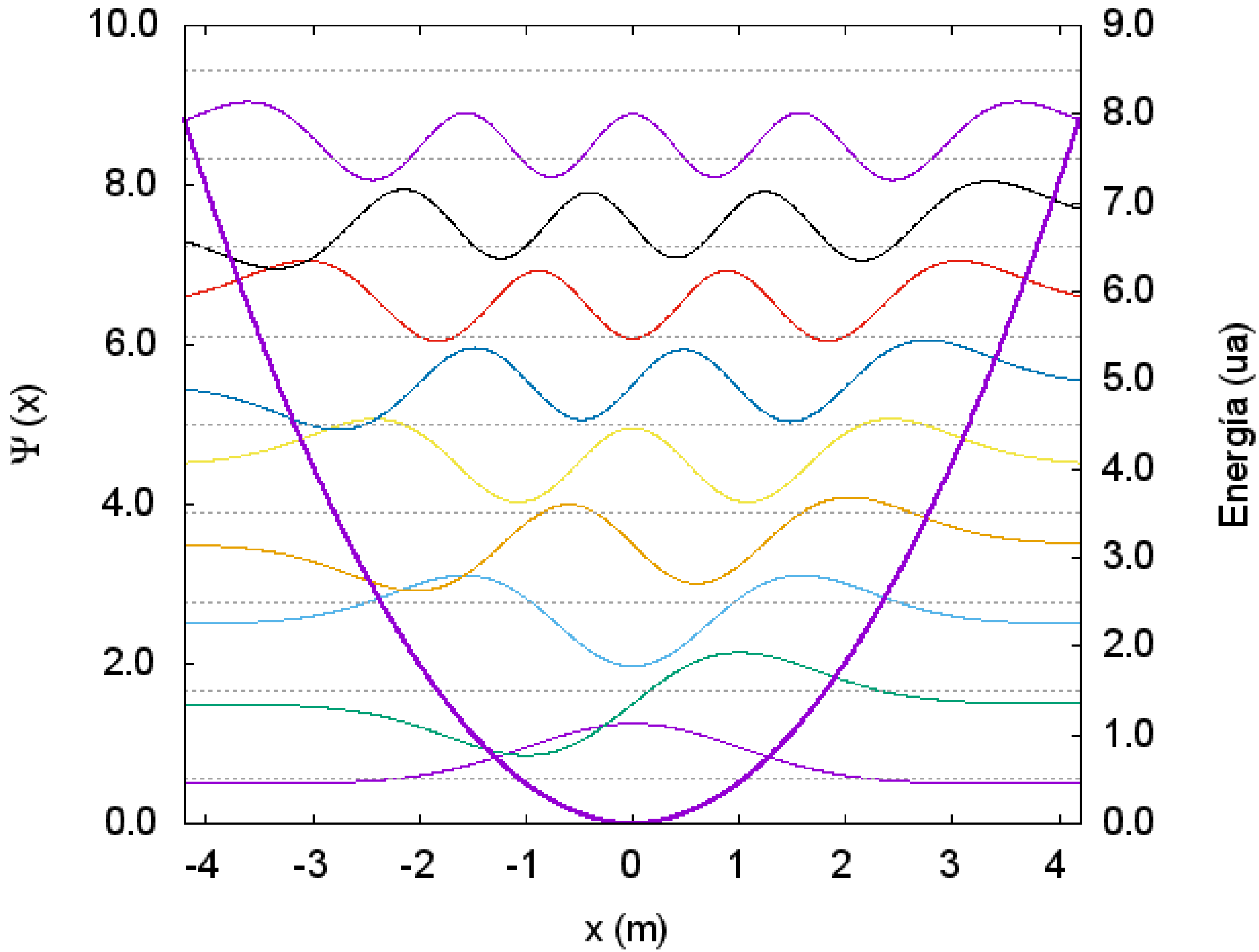

10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Ψ (x)
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

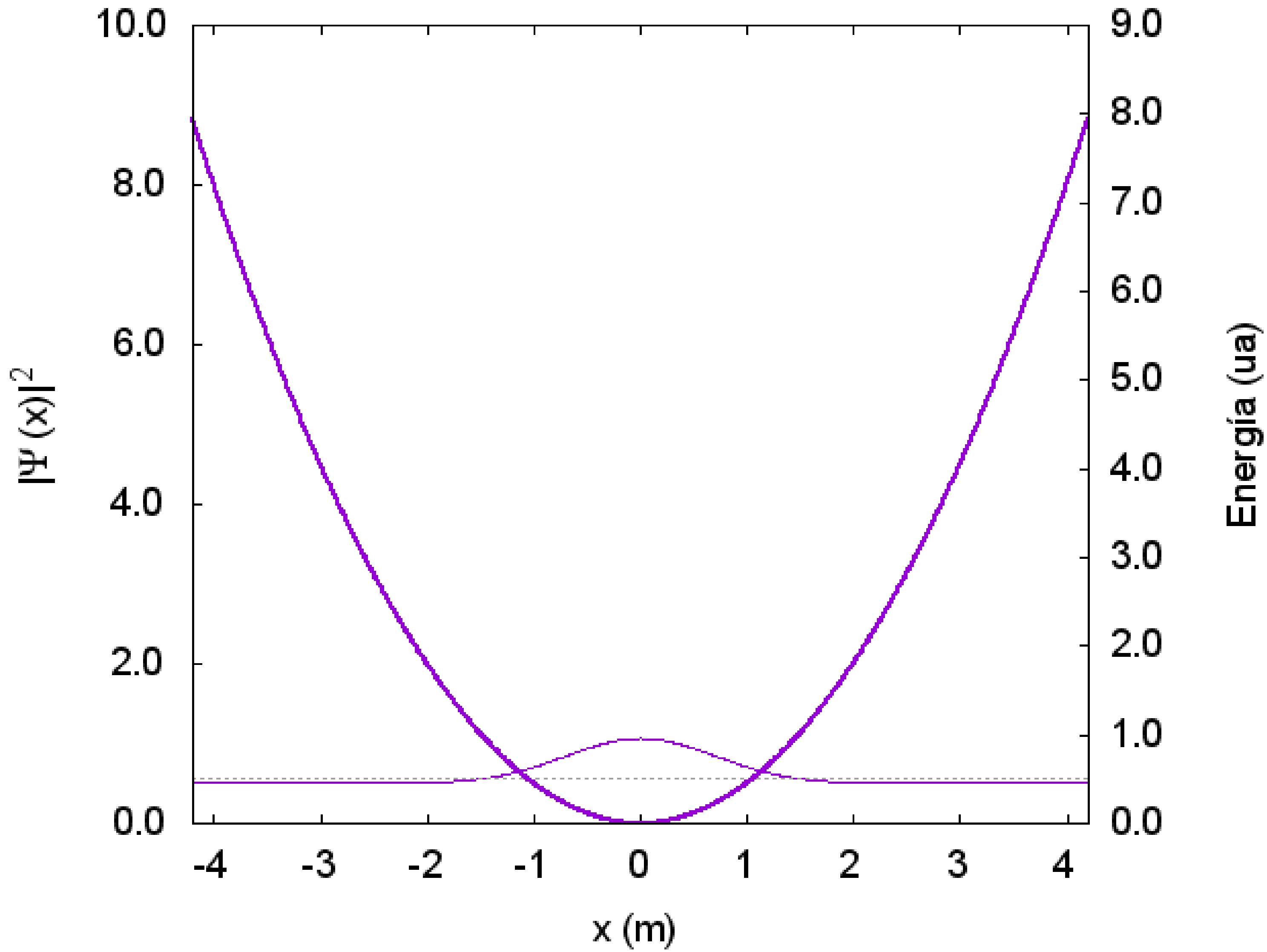


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Ψ (x)
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

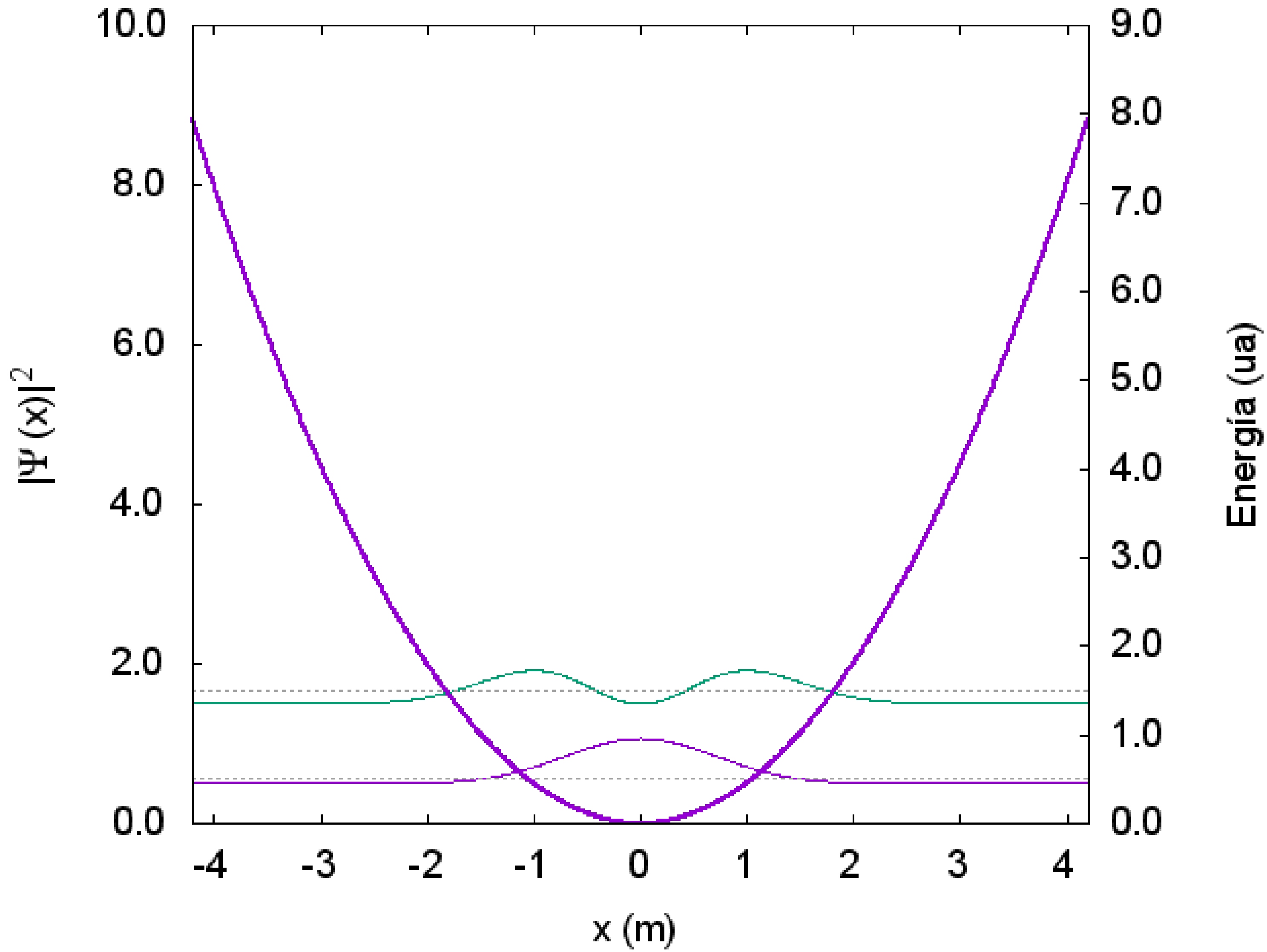


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
Ψ (x)
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

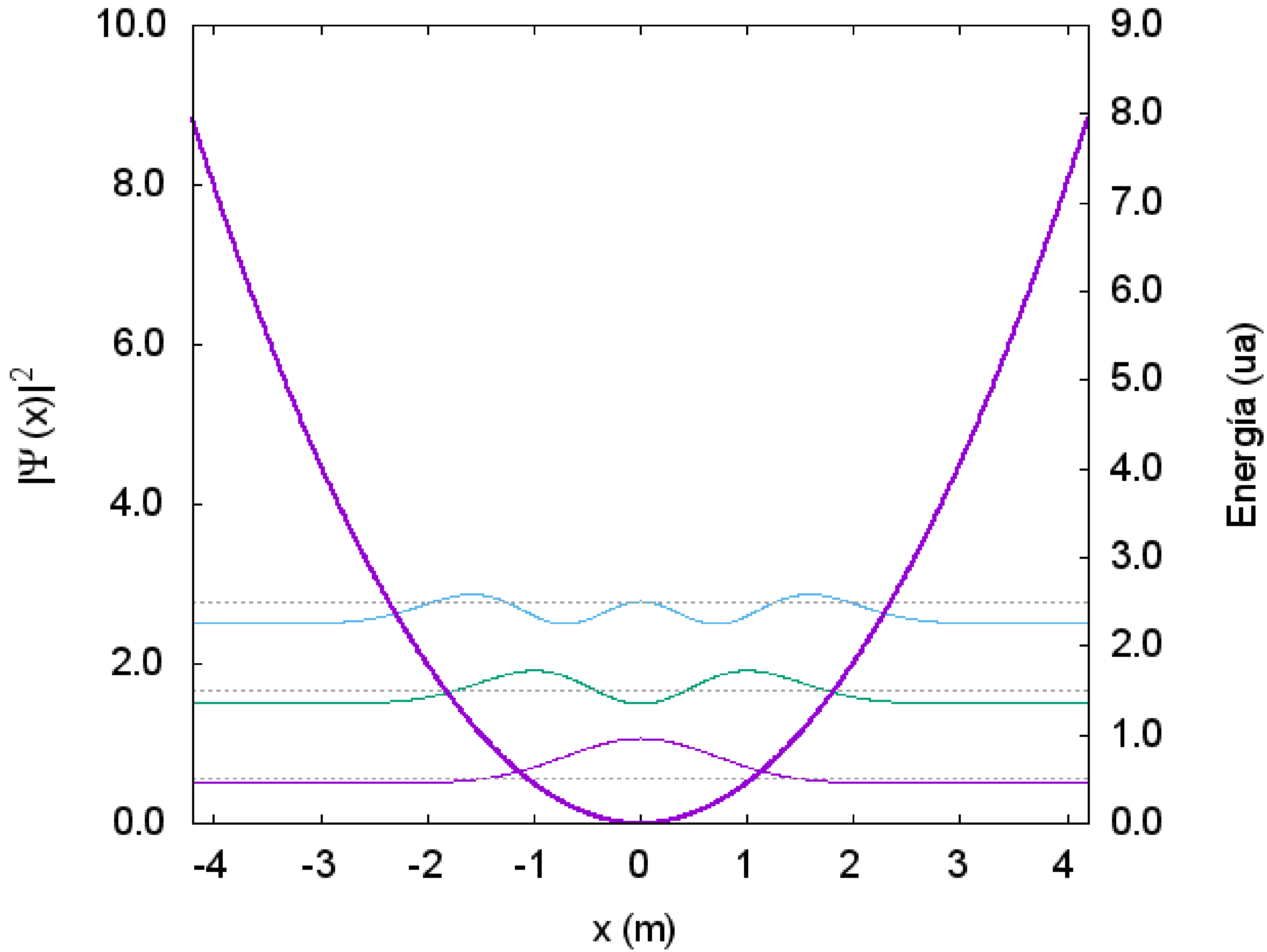

10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
Ψ (x)
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)



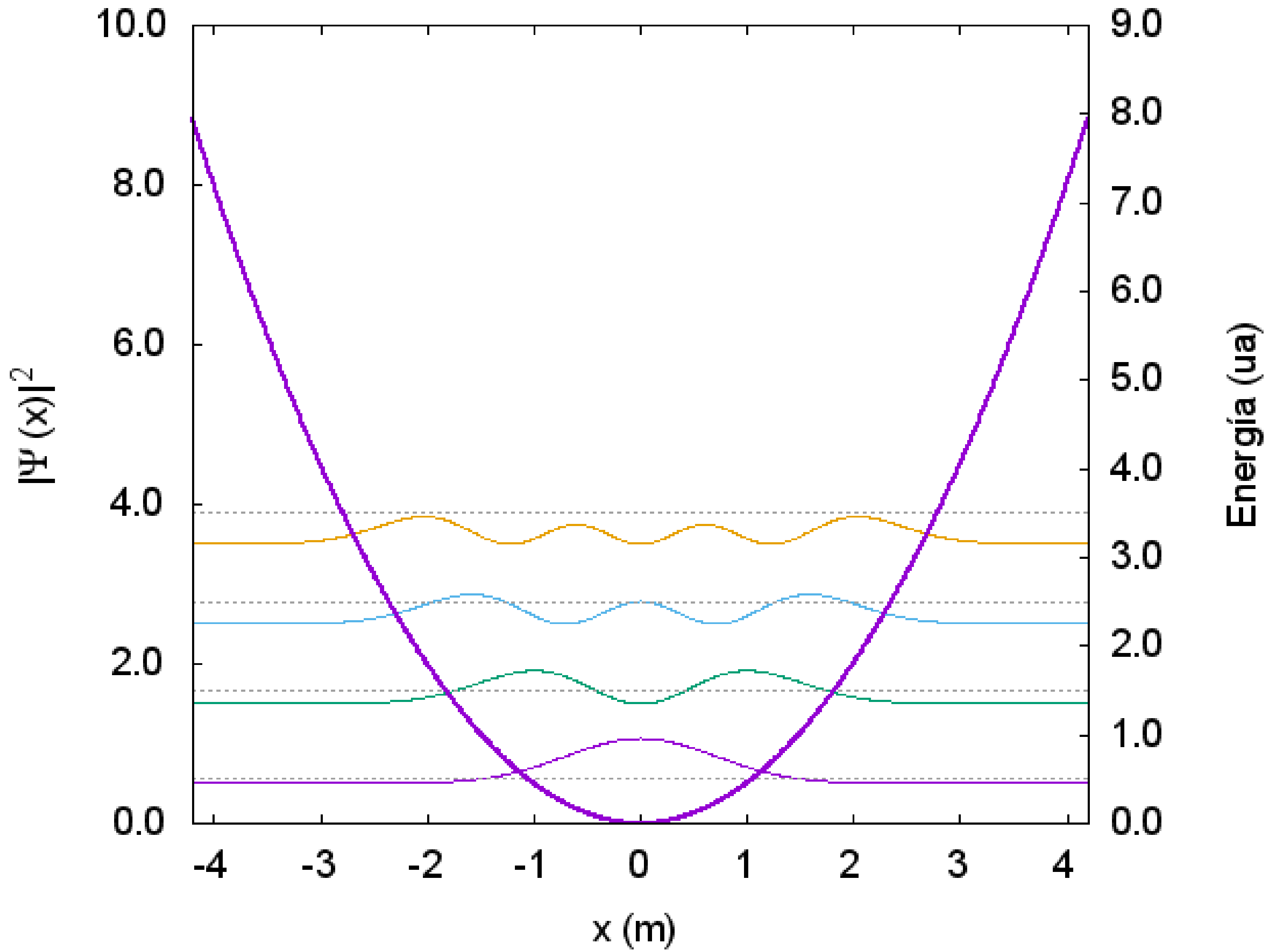
10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
$|\Psi(x)|^2$
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)



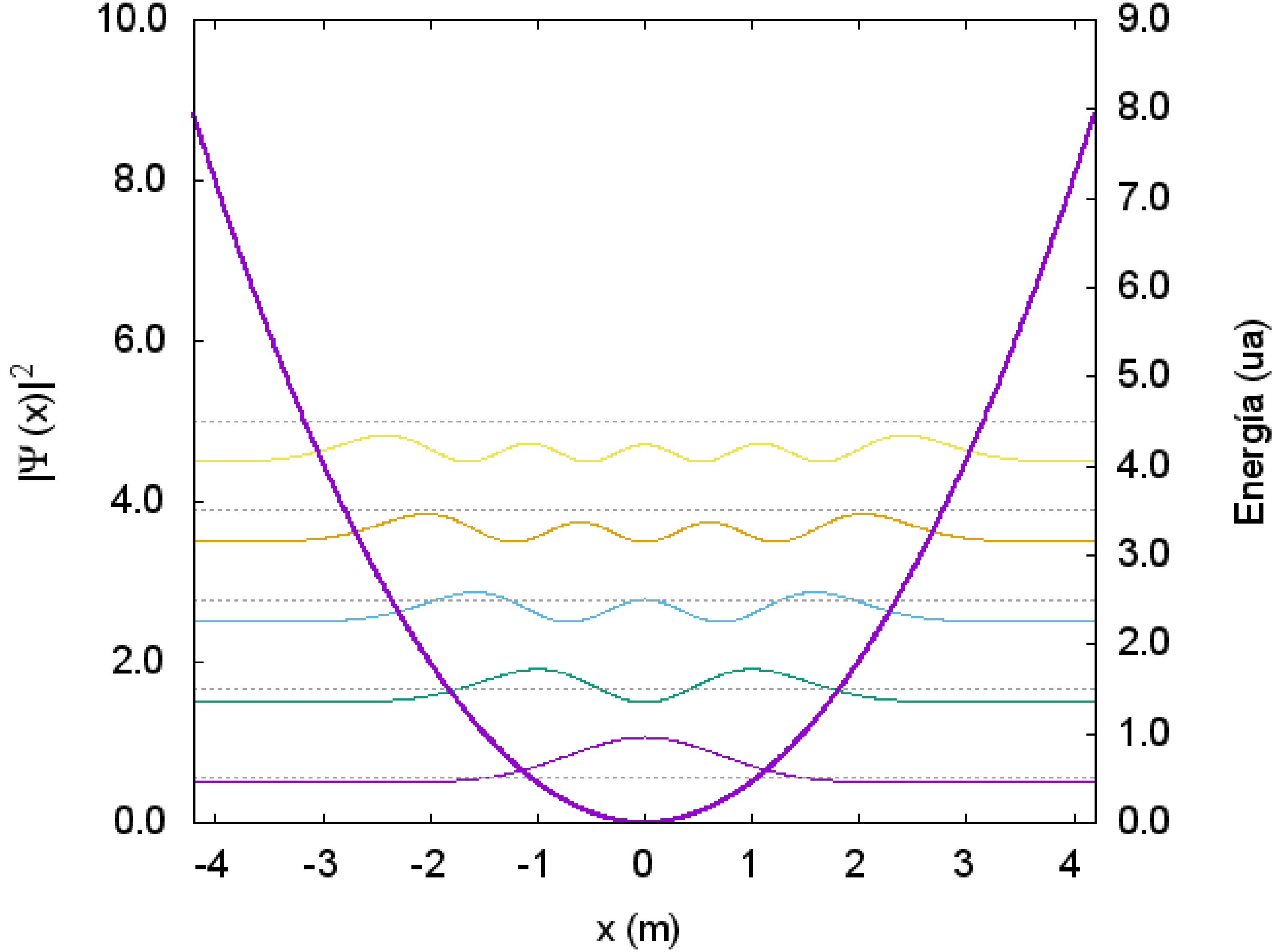
10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
$|\Psi(x)|^2$
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)



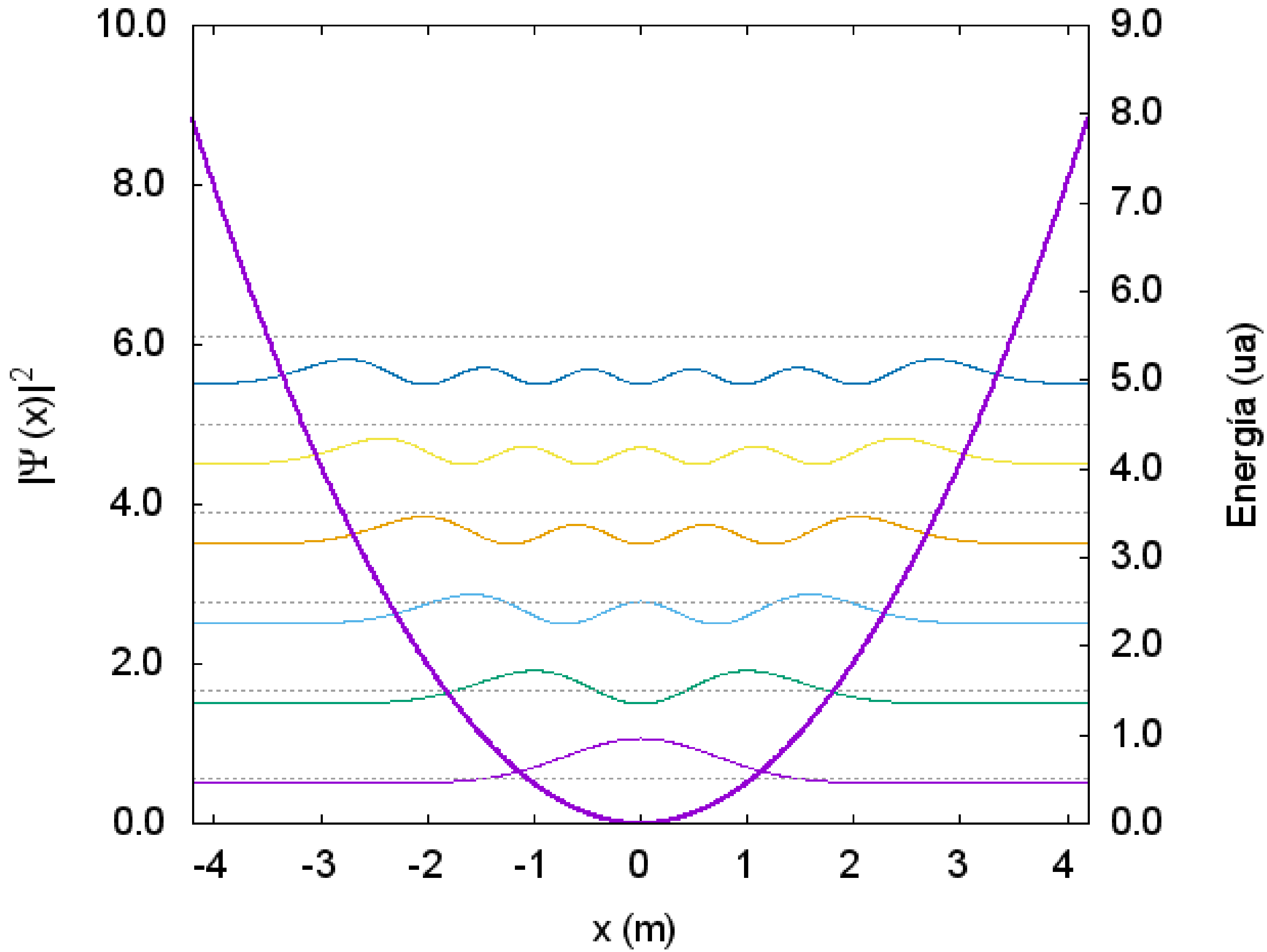
10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
$|\Psi(x)|^2$
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)



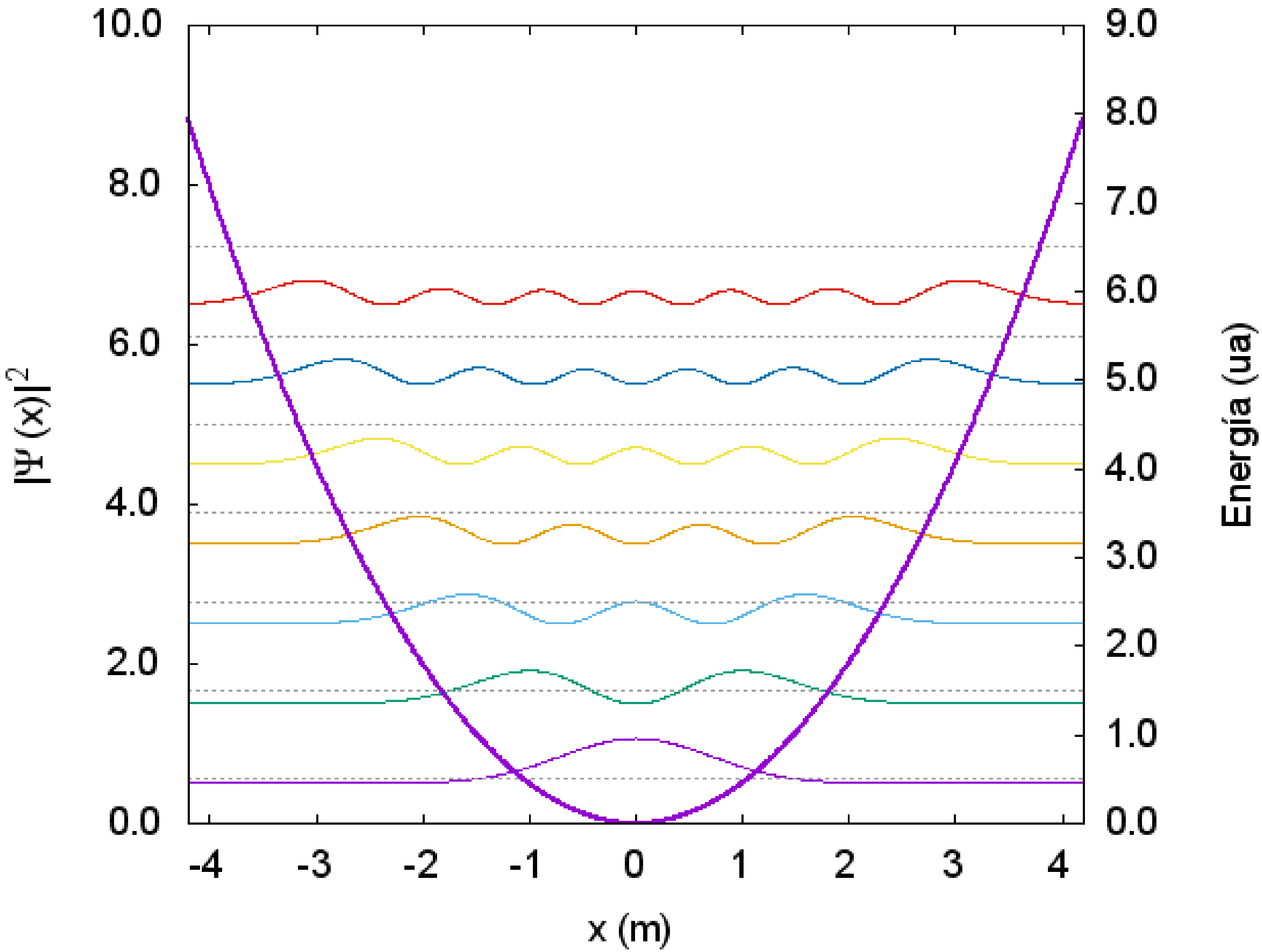
10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
$|\Psi(x)|^2$
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

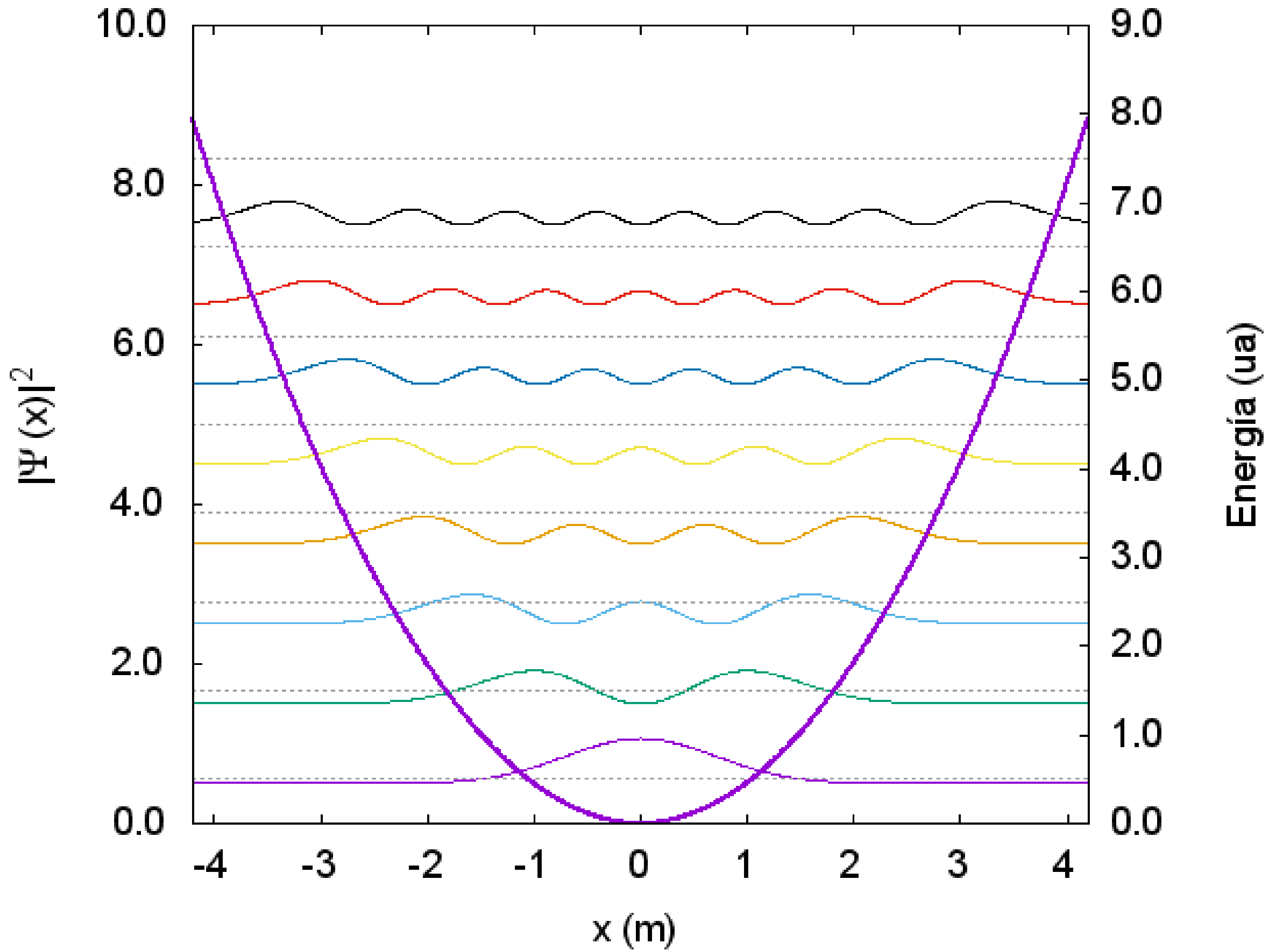


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
$|\Psi(x)|^2$
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

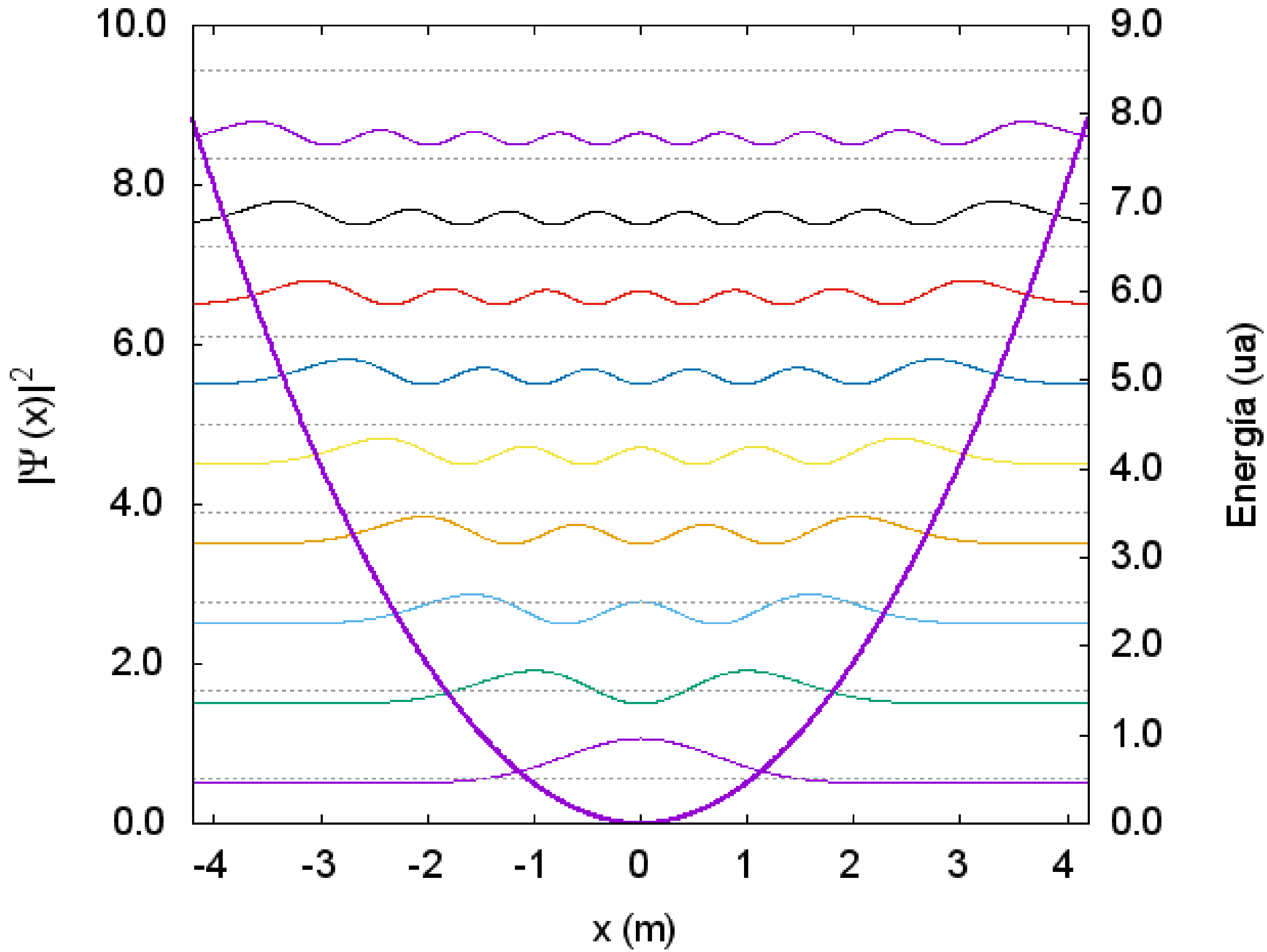


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
$|\Psi(x)|^2$
Energía (ua)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)

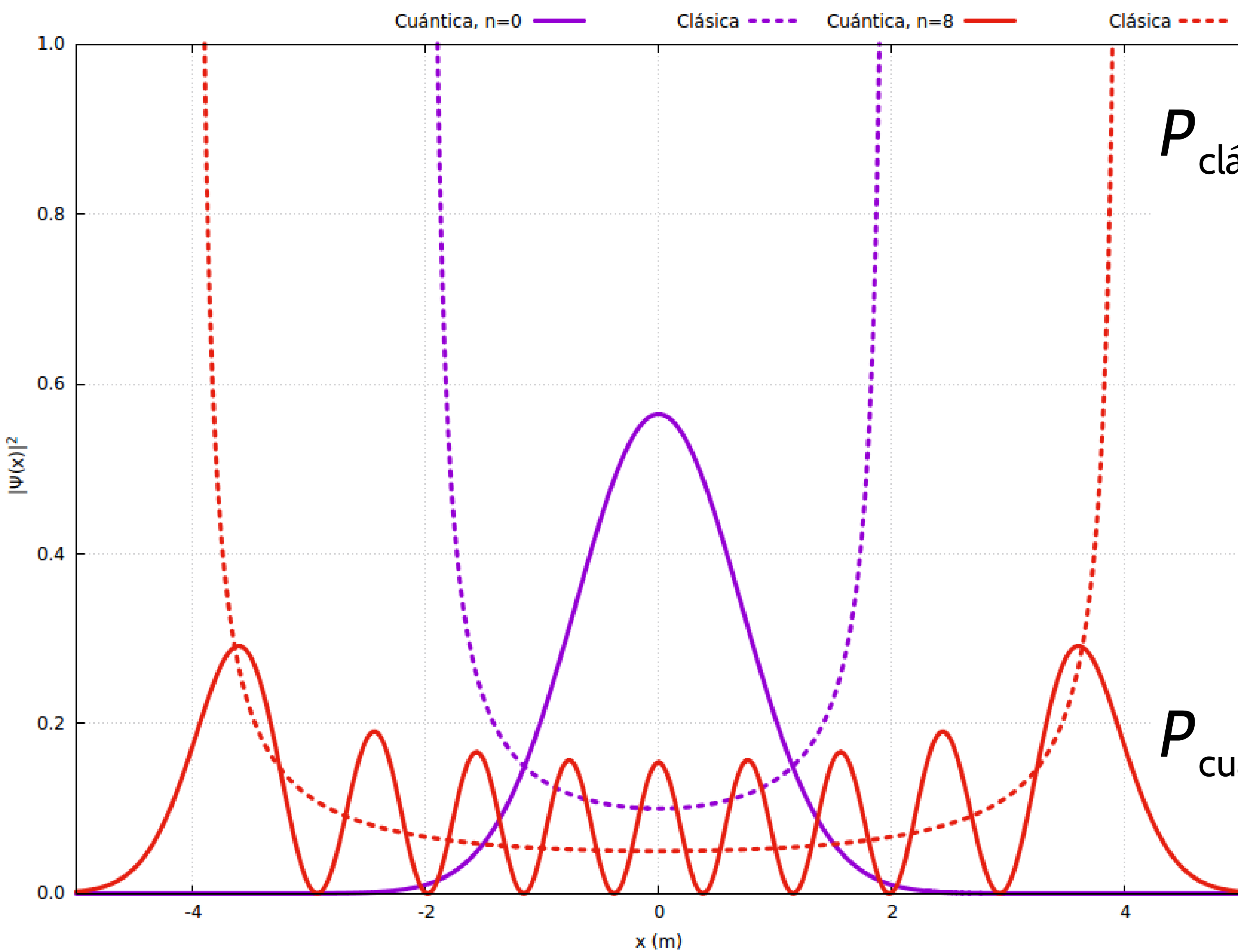

10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
$|\Psi(x)|^2$
Energía (ua)
x (m)


10.0
8.0
6.0
4.0
2.0
0.0
9.0
8.0
7.0
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x (m)
$|\Psi(x)|^2$
Energía (ua)

¿En que posición es más probable encontrar a un péndulo?



Oscilador clásico vs cuántico y el principio de correspondencia



$$P_{\text{clásica}} \propto \frac{1}{v_x}$$

$$P_{\text{cuántica}} = \left|\left(\psi\left(x\right)\right)^2\right|$$