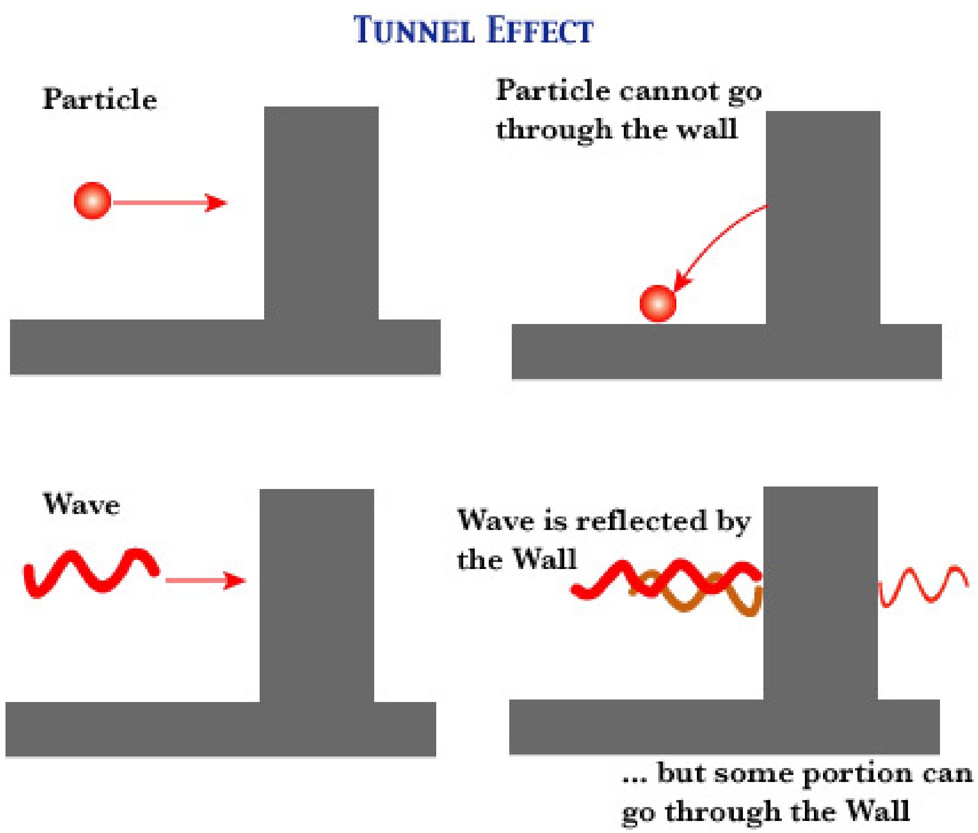
# Universidad Nacional de Río Negro
# Física Moderna A - 2017

- **Unidad** 04 – Aplicacion a sistemas simples
- **Clase** U04C01
- **Fecha** 11 Mayo 2017
- **Cont** Pozos
- **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 equivalencia.

# La función de onda en cuántica: propiedades

- 1) La función de onda **es una función compleja**
- 2) La función de onda y su primera deriva **son continuas**
- 3) La función de onda **es de cuadrado integrable** ($L^2$)...

$$\Psi \in L^2 \Longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(\Psi^2\right)\right| dV = c, \quad c \in \mathbb{R}, \text{ y } \quad 0 < \left|\left(c\right)\right| < \infty$$

... y por lo tanto **es normalizable**. Entonces debe cumplir:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(\Psi^2\right)\right| dV = 1}$$

donde dV es la integral en volumen. En cartesianas

$$dV = dx\, dy\, dz$$

# Postulados de la mecánica cuántica

I. El estado de un sistema está completamente especificado por una función de onda $\Psi(x, y, z, t)$

II. La probabilidad de encontrar a una partícula en un volumen V centrado en la posición (*x,y,z*) a tiempo *t* es

$$\int_V \left|\left(\Psi(x, y, z, t)^2\right)\right| dV \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(\Psi(x, y, z, t)^2\right)\right| dV = 1$$

III. A cada observable clásico (energía *E*, energía cinética *K*, energía potencial *V*, cant. movimiento *p*, cant. mov. Angular *L*,...) le corresponde un operador cuántico:

$$E \rightarrow \hat{H};\ K \rightarrow \hat{K};\ V \rightarrow \hat{V};\ p \rightarrow \hat{p};\ L \rightarrow \hat{L}$$

**IV. Para obtener información del sistema, se aplica el operador sobre la función de onda y verifica**

$$\hat{A}\Psi_a(x,y,z,t)=a\Psi_a(x,y,z,t)$$ ecuación de autovalores

**donde $\Psi_a$ es uno de los posibles estados del sistema, el asociado al autovalor a.**

**Corolario: cuando se "mide" al estado asociado al autovalor $a$, la funcion de onda "colapsa" al correspondiente autovector $\Psi_a$**

# Operadores: reglas de cuantización

- Operador momento: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
- Operador energía total: (*Hamiltoniano*) $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ y $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}$
- Operador energía cinética: $K = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
- Operador energía potencial: $\hat{U}$
- Ecuación de Shrödinger:

$$\boxed{\begin{gathered}\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}\right)\Psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi\end{gathered}}$$

# Si U no depende del tiempo....

- Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\boxed{\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \rightarrow \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}\right)\Psi = E\Psi}$$

- Las soluciones verifican una ecuación de autoestados

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{U}\right)\Psi_n = E_n\Psi_n$$

- A cada (auto)valor $E_n$ le corresponde un (auto)estado $\Psi_n$.

# No podemos conocerlo todo….

- El **principio de incertidumbre** (Heisenberg, 1927) establece un **límite fundamental a la precisión** con las que se puede **medir ciertos pares de propiedades físicas** de un sistema (***variables complementarias***)
- **La medición de una magnitud perturba al sistema** de tal manera que **resulta imposible medir todas ellas en forma simultánea y con resolución infinita**. Puede verse:

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \qquad\qquad \Delta E \, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

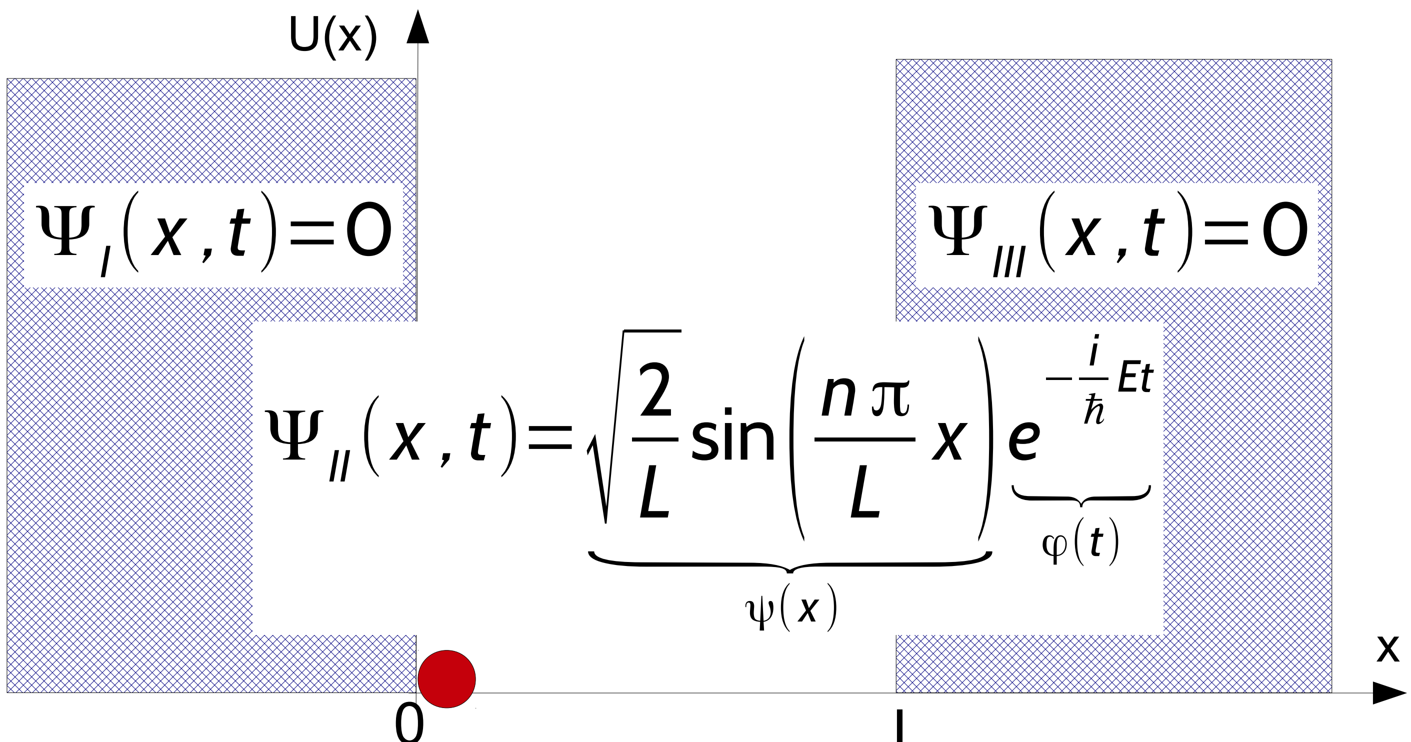
# Interpretación de Copenhague (Bohr-Heisenberg)

- **El rol del observador**
  *los sistemas físicos no poseen propiedades definidas antes de haber sido medidas.*
- **Las probabilidades son inherentes a la cuántica**
  *la mecánica cuántica sólo puede adelantar las probabilidades de que las mediciones produzcan tales o cuales resultados*
- **Colpaso de la función de onda**
  *el acto de medir perturba al sistema de forma tal que el conjunto de probabilidades se reduce a un sólo resultado posible: el medido.*

# Partícula en una caja

- El potencial es 0 en el interior, infinito en el exterior

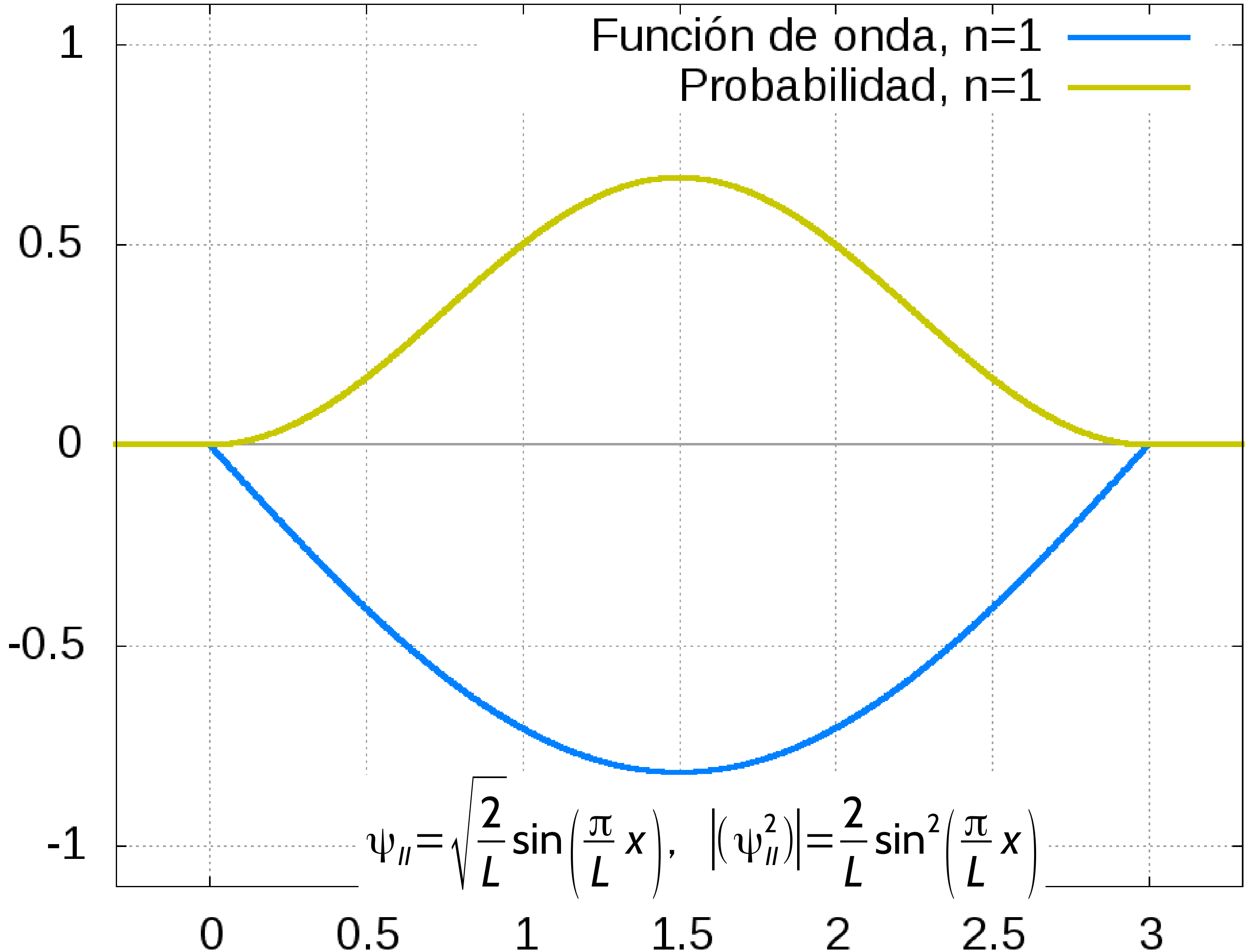
$$V(x)=\begin{cases}\infty,\ \text{si}\ x\leqslant 0 & \rightarrow \Psi_I(x,t)\\ 0,\ \text{si}\ 0<x<L & \rightarrow \Psi_{II}(x,t)\\ \infty,\ \text{si}\ x\geqslant L & \rightarrow \Psi_{III}(x,t)\end{cases}$$



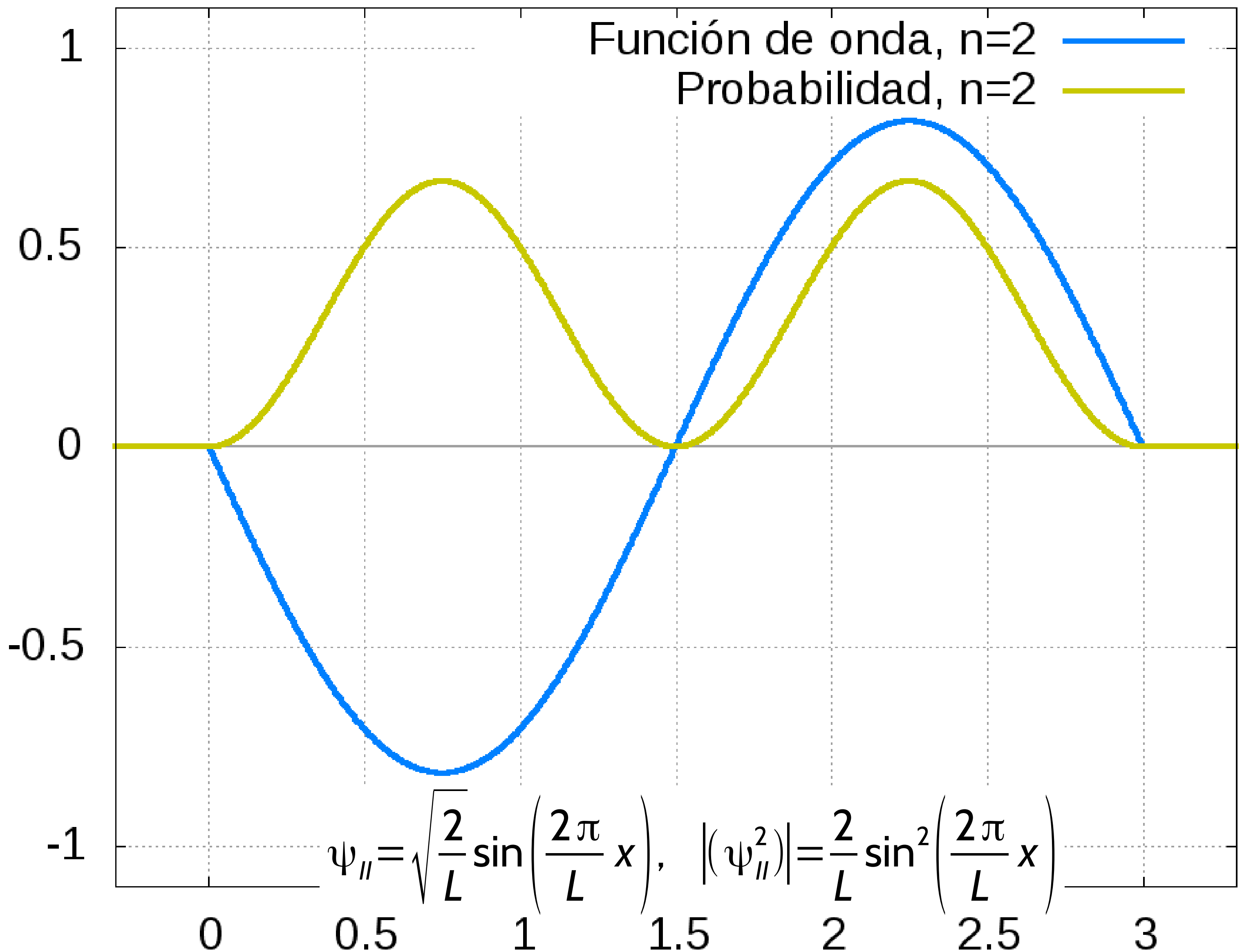

$$\Psi_I(x,t)=0 \qquad \Psi_{III}(x,t)=0$$

$$\Psi_{II}(x,t)=\underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}_{\psi(x)}\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}_{\varphi(t)}$$

# Partícula en una caja, n=1

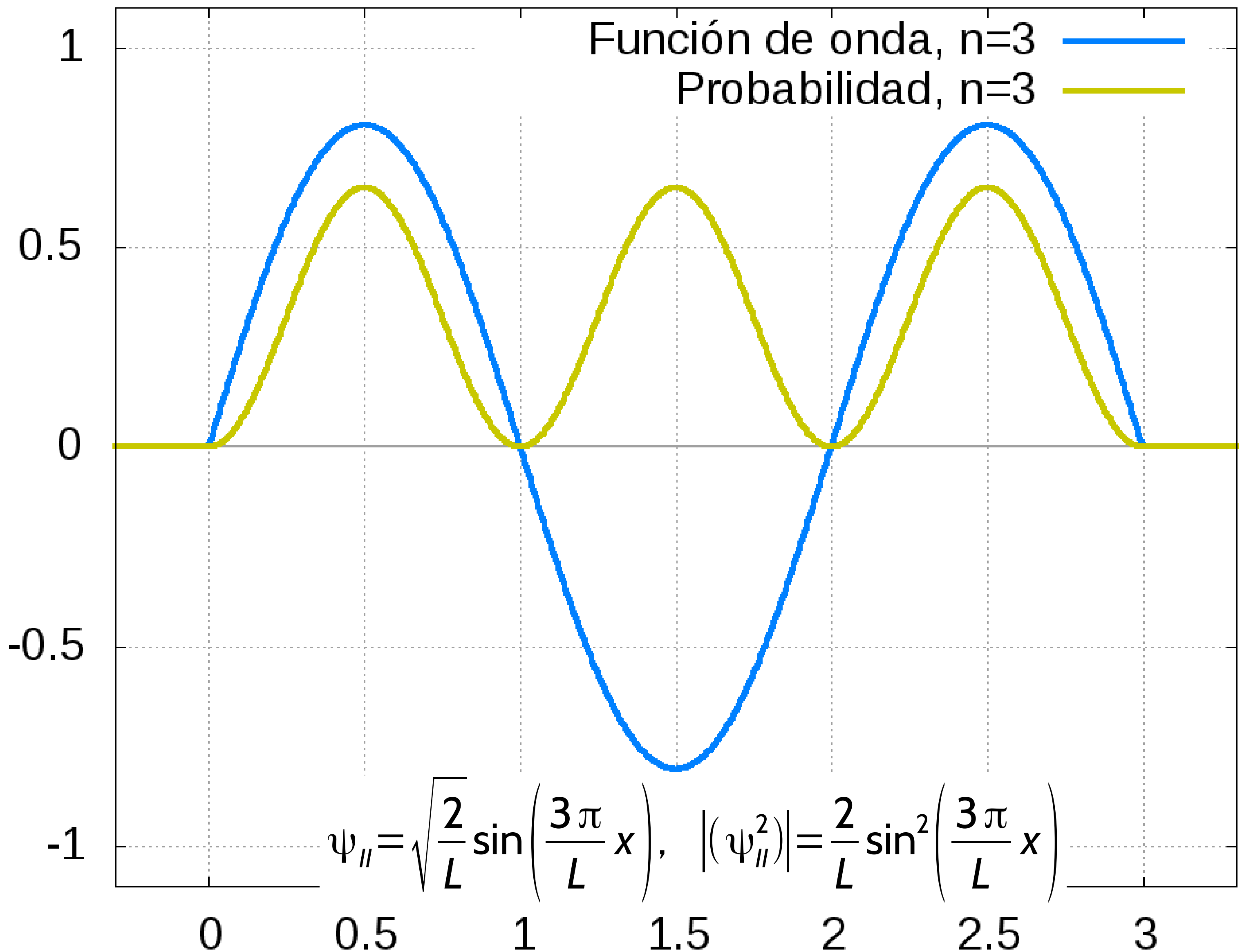


# Partícula en una caja, n=1

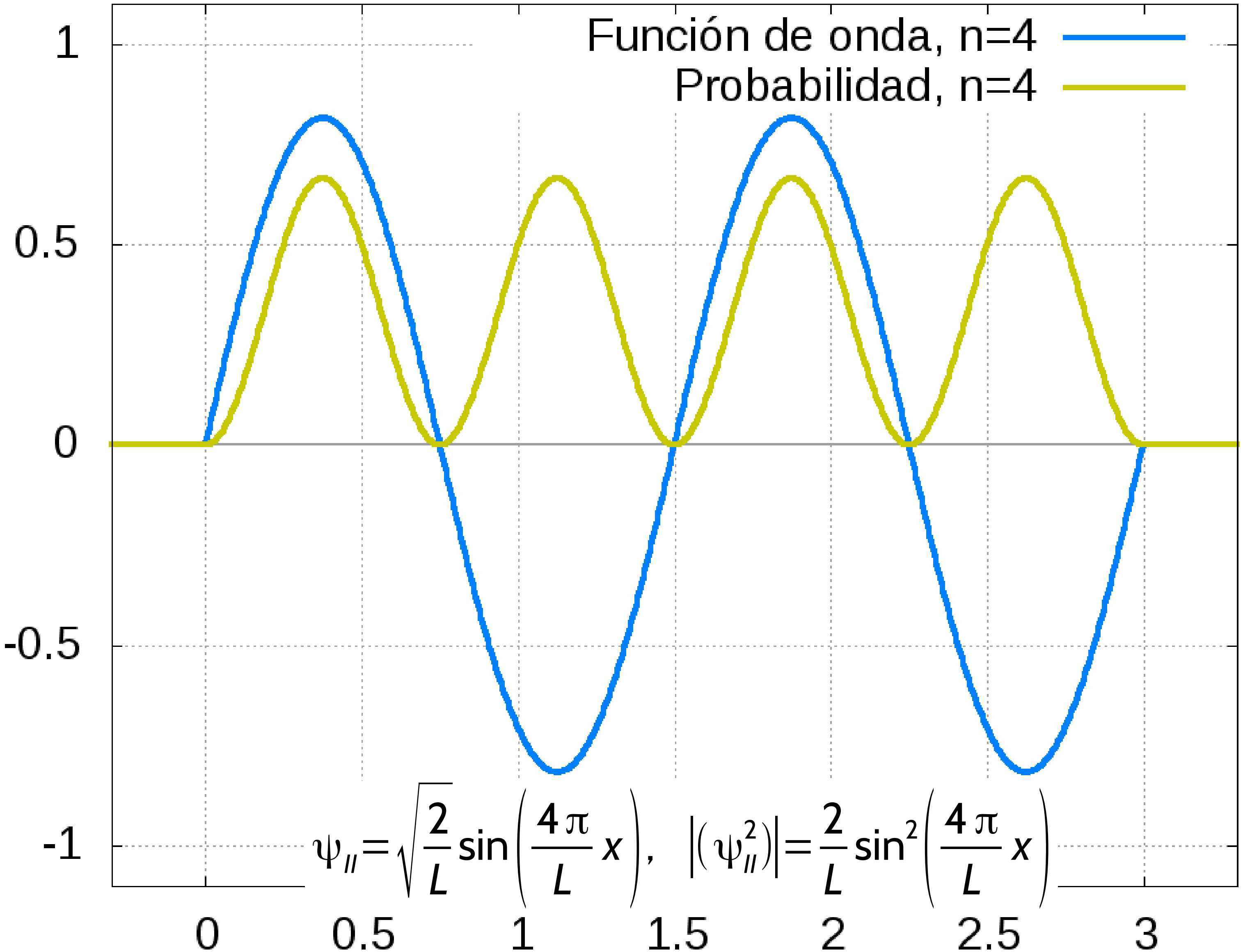



$$\psi_{II}=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right),\quad \left|\left(\psi_{II}^{2}\right)\right|=\frac{2}{L}\sin^{2}\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$$

# Partícula en una caja, n=3



# Partícula en una caja, n=4

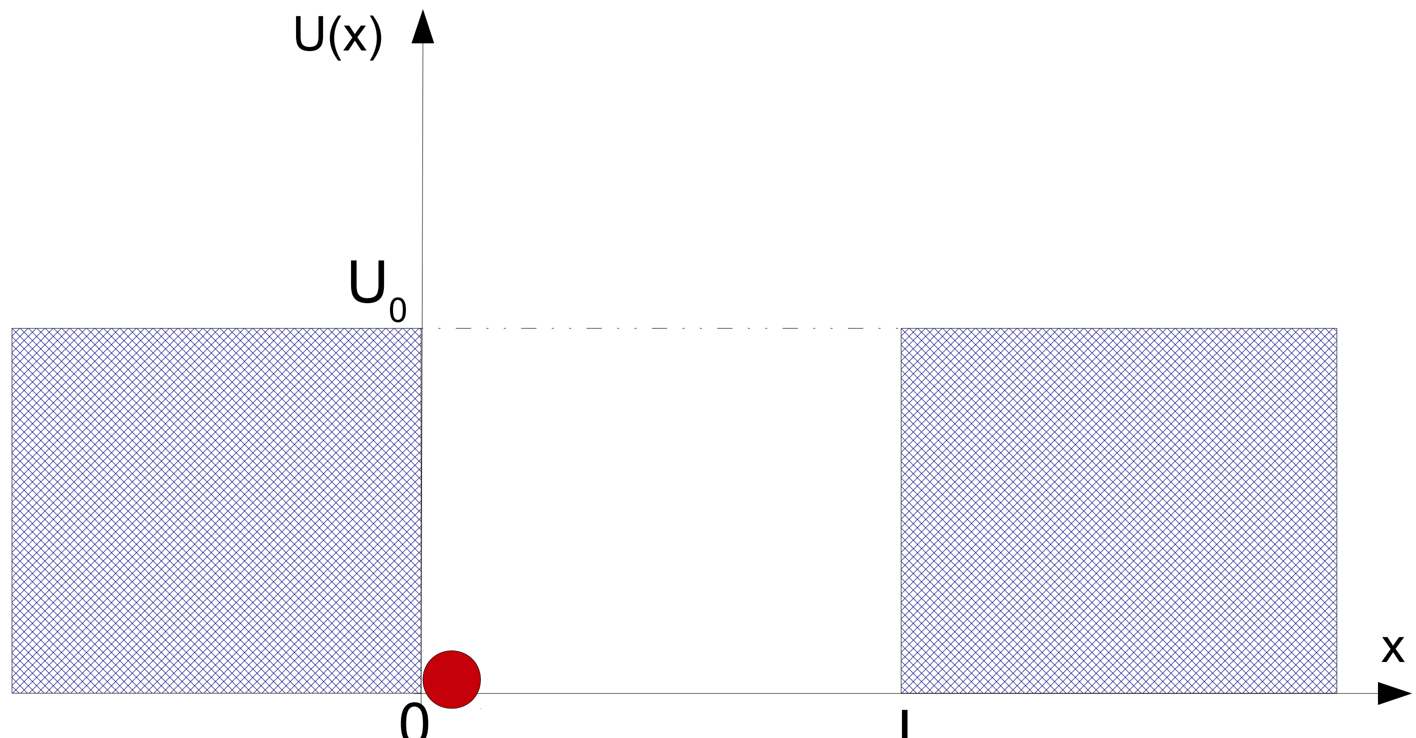



$$\psi_{II} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{4\pi}{L} x\right), \quad \left|\left(\psi_{II}^2\right)\right| = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{4\pi}{L} x\right)$$

# Nuevo sistema: pozo finito

- El potencial es 0 en el interior, infinito en el exterior

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



# Pozo de potencial, solución

Ec. de Schrodinger.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}+\hat{U}\right)\Psi_{II} = E_n \Psi_{II}$$

Si $U=0$ (pozo)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\Psi_{II} = E\Psi \to \frac{\partial}{\partial x^2}\Psi_{II} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\Psi$$

Solución (part. libre) $\Psi_{II}(x) = A_{II}\sin\left(\frac{p}{\hbar}x\right)+B_{II}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$

y $p=\sqrt{2mE}$

si $U=U_0$. $\Rightarrow$ $\hat{U} \to U_0$ $\Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = (E-U_0)\Psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}\Psi(x)$$

Si $(U_0-E)<0 \Rightarrow U_0<E \to$ partícula libre en cambio de medio.

$$\Psi_{I,III} = A_I \sin\left(\frac{p'}{\hbar}x\right) + B_I\cos\left(\frac{p'}{\hbar}x\right)$$

# Pozo de potencial, solución

¿Qué pasa si $E < U_0$? $\Rightarrow (U_0 - E) > 0 \Rightarrow$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I = a\,\psi_I \qquad a > 0$$

Propongo $\psi_I = e^{bx}$ ó $\psi = e^{-bx}$:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} e^{\pm bx}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\pm b\, e^{\pm bx}\right) = b^2 e^{\pm bx} \quad \text{y } b^2 > 0$$

$\Rightarrow b^2 = a > 0.$

$\Rightarrow \psi_I = C e^{bx} + D e^{-bx}$

$K = p^2/2m$ y porque $E = K + U_0$

En nuestro caso, $a = \dfrac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \Rightarrow b = \dfrac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = p'/\hbar$

$\Rightarrow \psi_I = C e^{bx} + D e^{-bx}$ por normalización, si $x < 0$ (zona I):

$\Rightarrow \psi_I = C e^{p'x/\hbar}$. y lo mismo para III, $x > 0 \Rightarrow$

$$\psi_{III} = D e^{-p'x/\hbar}$$

# Pozo de potencial, solución

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} C e^{p'/\hbar\, x} & \text{si } x<0 \\ A \sin\left(p/\hbar\, x\right) + B \cos\left(p/\hbar\, x\right) & \text{si } 0<x\leq L \\ D e^{-p'/\hbar\, x} & \text{si } x>L \end{cases}$$

Notar que si $U_0 \to \infty \Rightarrow p' = \sqrt{2m(U_0-E)} \to \infty \Rightarrow \psi_I$ y $\psi_{III} \to 0$

(ojo!)

Ahora en 0 $\psi$ debe ser continua y su derivada también.

$$\Rightarrow \psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \Rightarrow C = B$$

Solución gráfica muy compleja

En $x=L$ tenemos

$$\psi_{II}(x=L) = \psi_{III}(x=L) \Rightarrow$$

$$A \sin\left(p/\hbar\, L\right) + B \cos\left(p/\hbar\, L\right) = D e^{-p'/\hbar\, L}$$ ... Solución numérica.

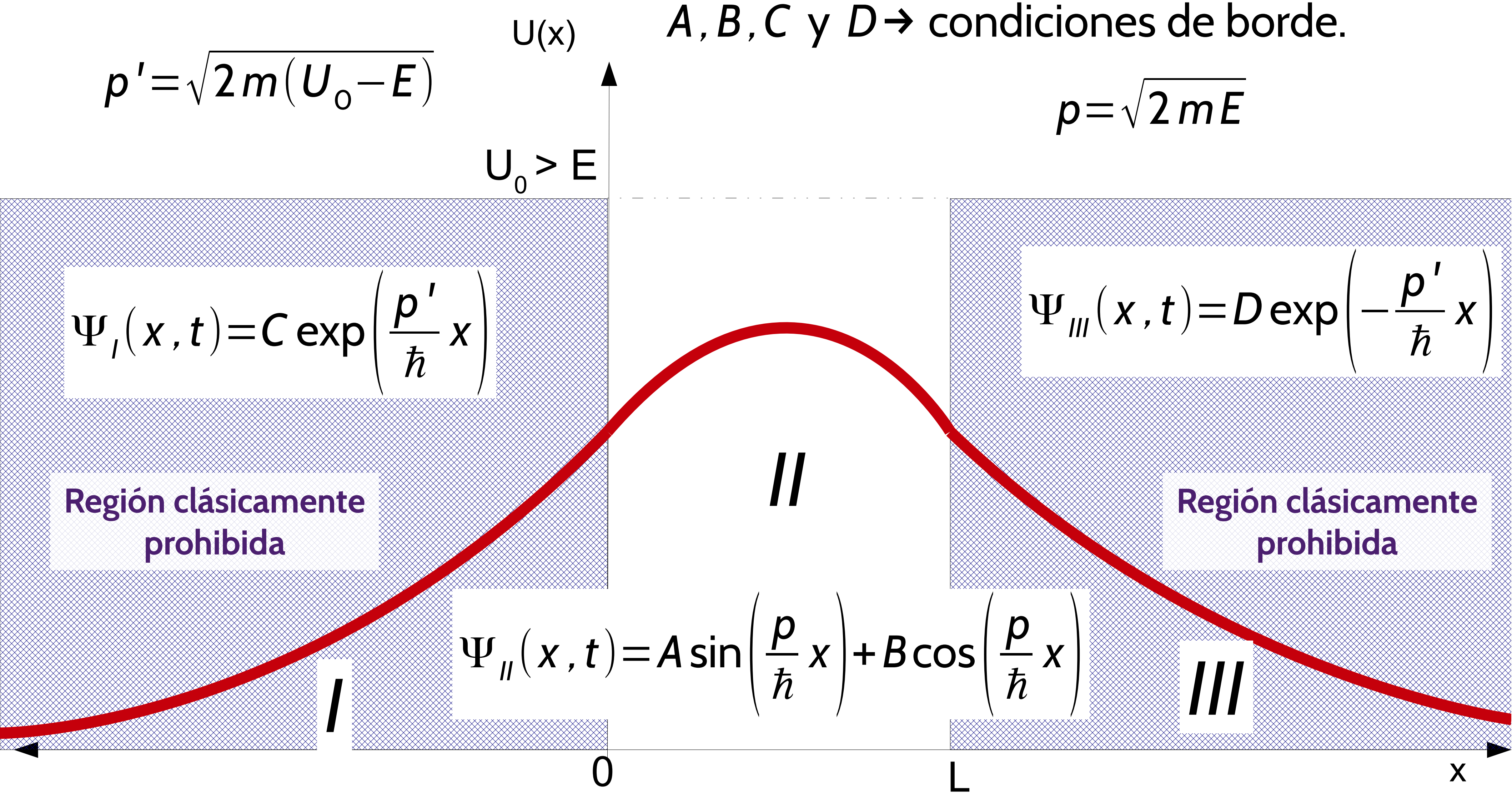
gráficamente

# Pozo finito, solución $U_0 > E$

$A, B, C$ y $D \rightarrow$ condiciones de borde.

$$p' = \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

$$p = \sqrt{2mE}$$




$$\Psi_I(x,t) = C \exp\left(\frac{p'}{\hbar} x\right)$$

$$\Psi_{II}(x,t) = A \sin\left(\frac{p}{\hbar} x\right) + B \cos\left(\frac{p}{\hbar} x\right)$$

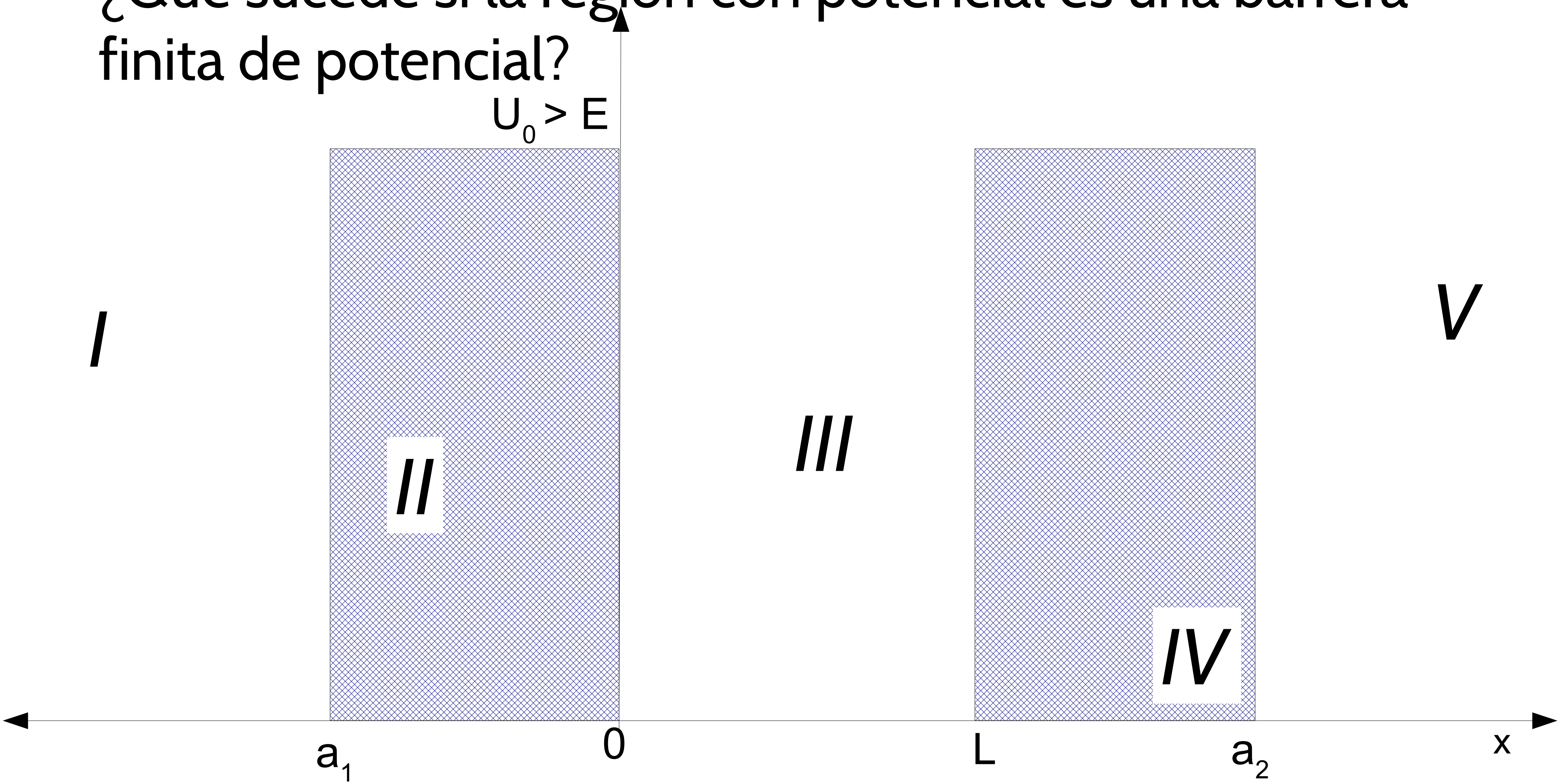
$$\Psi_{III}(x,t) = D \exp\left(-\frac{p'}{\hbar} x\right)$$

# Pozo finito de potencial

- Si $U_0 < E$
  - Solución de partícula libre en todo el espacio.
  - Fuera del pozo (regiones I y III) la fase es diferente, $(E-U_0)$, a la de la región II, E.
- Si $U_0 > E$
  - En el interior del pozo (región II), partícula libre
  - Fuera del pozo (regiones I y III) es la región clásicamente prohibida (energía menor al potencial)
  - Sin embargo, la función de onda es una exponencial decreciente → probabilidad no nula de encontrarla

# Barrera de potencial, $U_0$>E

- ¿Qué sucede si la región con potencial es una barrera finita de potencial?



# Barrera de potencial, sol. $U_0 > E \rightarrow$ Efecto Túnel

$A, B, C$ y $D \rightarrow$ condiciones de borde.

$$p' = \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

$$p = \sqrt{2mE}$$

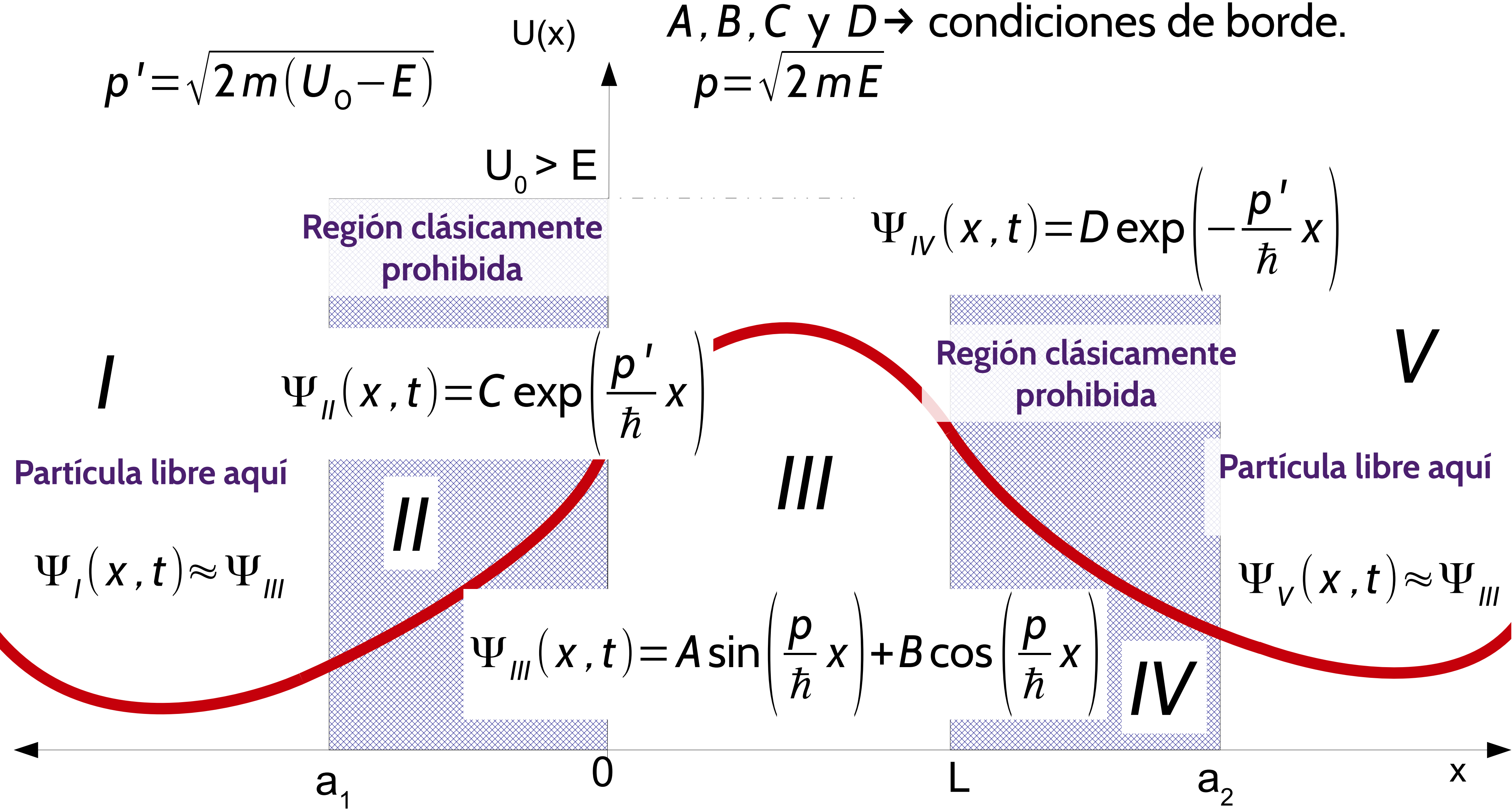
$$\Psi_{II}(x,t) = C \exp\left(\frac{p'}{\hbar} x\right)$$

$$\Psi_{III}(x,t) = A \sin\left(\frac{p}{\hbar} x\right) + B \cos\left(\frac{p}{\hbar} x\right)$$

$$\Psi_{IV}(x,t) = D \exp\left(-\frac{p'}{\hbar} x\right)$$

$$\Psi_I(x,t) \approx \Psi_{III}$$

$$\Psi_V(x,t) \approx \Psi_{III}$$



# Efecto túnel

- En la **barrera del potencial**, la existencia de la función de onda y su continuidad, aseguran que exista una probabilidad no nula de ~~**que la partícula escape**~~ **encontrar a la partícula fuera de la barrera**
- Clásicamente esto está prohibido.
- A este fenómeno se lo llama **efecto túnel**
- Tiene innumerables aplicaciones tecnológicas

# Efecto Túnel y microscopio