Universidad de los Andes-Dpto. de Física
Mecánica Cuántica I-2014/II

Solución Tarea 9

1. (a) *Demuestre que para $l = n - 1$, la función de onda radial del átomo de hidrógeno tiene la forma*

$$R_{n,n-1}(r) = N r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_B}} \tag{1}$$

donde a_B es el radio de Bohr. Calcule la constante de normalización N.

La forma general de una función de onda estacionaria para el átomo de hidrógeno tiene la forma

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = C_{n,l}\left(\frac{2r}{na_B}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2r}{na_B}\right) e^{-\left(\frac{r}{na_B}\right)} Y^m_l(\theta,\phi) \tag{2}$$

donde $C_{n,l}$ es una constante de normalización. La función radial es

$$R_{n,l}(r) = C_{n,l}\left(\frac{2r}{na_B}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}\left(\frac{2r}{na_B}\right) e^{-\frac{r}{na_B}} \tag{3}$$

Si $l = n-1$ el polinomio de Laguerre asociado $L^{2l+1}_0\left(\frac{2r}{na_B}\right) = \textit{constante}$, por lo que la función radial que resulta es

$$R_{n,n-1}(r) = C'_n\left(\frac{2r}{na_B}\right)^{n-1} e^{-\frac{r}{na_B}} = N r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_B}} \tag{4}$$

La constante de normalización N (real) se obtiene al exigir

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty R^2_{n,n-1}(r) r^2 dr \\ &= N^2 \int_0^\infty r^{2(n-1)} e^{-\frac{2r}{na_B}} r^2 dr \\ &= N^2 \int_0^\infty r^{2n} e^{-\frac{2r}{na_B}} dr \end{aligned} \tag{5}$$

En la última ecuación hacer el cambio de variable $u = \frac{2r}{na_B}$, lo que lleva a $du = \frac{2}{na_B}dr$ y a la condición de normalización

$$1 = N^2\left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+1}\int_0^\infty u^{2n} e^{-u} du$$

La anterior integral es un caso especial de la función Gama de Euler, definida como

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty z^{x-1} e^{-z} dz \tag{6}$$

que para el caso especial $x = n$, un entero, es simplemente $\Gamma(n) = (n-1)!$. Obtenemos finalmente para la constante de normalización

$$N = \sqrt{\left(\frac{2}{na_B}\right)^{2n+1} \frac{1}{(2n)!}} \tag{7}$$

(b) *Calcule $\langle r \rangle$ para estos estados y compare con los resultados de las órbitas de Bohr.*

$$\begin{aligned}
\langle r \rangle &= \int_0^\infty r R_{n,n-1}^2(r) r^2 dr \\
&= N^2 \int_0^\infty r^{2n+1} e^{-\frac{2r}{na_B}} dr \\
&= N^2 \left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+2} \int_0^\infty u^{2n+1} e^{-u} du \\
&= N^2 \left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+2} \Gamma(2n+2) \\
&= N^2 \left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+2} (2n+1)! \\
&= na_B \left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (8)
\end{aligned}$$

Recordar que la teoría de Bohr predice órbitas estacionarias con radios $r_n = n^2 a_B$. Vemos que el resultado cuántico para el valor medio de la distancia del electrón al núcleo, está de acuerdo con Bohr en el límite $n >> 1$.

(c) *Calcule la incertidumbre en r, es decir $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$.*

Primero calcular

$$\begin{aligned}
\langle r^2 \rangle &= \int_0^\infty r^2 R_{n,n-1}^2(r) r^2 dr \\
&= N^2 \int_0^\infty r^{2n+2} e^{-\frac{2r}{na_B}} dr \\
&= N^2 \left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+3} \int_0^\infty u^{2n+2} e^{-u} du \\
&= N^2 \left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+3} \Gamma(2n+3) \\
&= N^2 \left(\frac{na_B}{2}\right)^{2n+3} (2n+2)! \\
&= (na_B)^2 (n+1) \left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (9)
\end{aligned}$$

La incertidumbre en la distancia electrón-núcleo es

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \frac{n a_B}{2}\sqrt{2n+1} \tag{10}$$

(d) *Compare Δr con $\langle r \rangle$ y discuta brevemente las implicaciones de sus resultados para $n >> 1$.*

$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \tag{11}$$

que en el límite $n >> 1$ tiende a cero. Este resultado implica que para grandes números cuánticos n, las "órbitas" de los electrones tienden a estar muy bien definidas como en la teoría de Bohr.

2. *Considere un oscilador armónico tridimensional de masa m^* con potencial*

$$V(r) = \frac{1}{2}m^*\omega^2(x^2+y^2+z^2) = \frac{1}{2}m^*\omega^2 r^2 \tag{12}$$

(a) *Demuestre que las funciones de onda estacionarias tienen la forma*

$$\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \tag{13}$$

con energías correspondientes $E_{n_x,n_y,n_z} = E_x(n_x) + E_y(n_y) + E_z(n_z)$, donde $\psi_{n_j}(x_j)$ y $E_j(n_j)$ son las funciones de onda estacionarias y energías de un oscilador armónico uni-dimensional en la dirección x_j.

Las funciones de onda estacionarias vienen determinadas por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})+\frac{1}{2}m^*\omega^2(x^2+y^2+z^2)\right]\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = E_{n_x,n_y,n_z}\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) \tag{14}$$

la cual puede ser resuelta por separación de variables buscando la solución como

$$\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z) \tag{15}$$

Al reemplazar la anterior expresión en la Ec.(14) y dividir por $X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z)$ se obtiene

$$\frac{1}{X_{n_x}(x)}\left(\frac{d^2X_{n_x}(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m^*\omega^2x^2\right)+\frac{1}{Y_{n_y}(y)}\left(\frac{d^2Y_{n_y}(y)}{dy^2}+\frac{1}{2}m^*\omega^2y^2\right)+$$
$$+\frac{1}{Z_{n_z}(z)}\left(\frac{d^2Z_{n_z}(z)}{dz^2}+\frac{1}{2}m^*\omega^2z^2\right) = E_{n_x,n_y,n_z} \tag{16}$$

Cada término en la parte izquierda en la Ec.(16) depende de una variable distinta e independiente, mientras que su suma es igual a una constante. La única posibilidad es que cada uno de ellos sea a su vez una constante. Por lo tanto

$$\begin{aligned}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m^*\omega^2x^2\right)X_{n_x}(x) &= E_{n_x}X_{n_x}(x)\\ \left(\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{2}m^*\omega^2y^2\right)Y_{n_y}(y) &= E_{n_y}Y_{n_y}(y)\\ \left(\frac{d^2}{dz^2}+\frac{1}{2}m^*\omega^2z^2\right)Z_{n_z}(z) &= E_{n_z}Z_{n_z}(z)\end{aligned} \tag{17}$$

Cada una de las Ec.(17) corresponde a la ecuación de valores y vectores propios del Hamiltoniano de un oscilador armónico unidimensional. Se concluye entonces que

$$\begin{aligned}X_{n_x}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_x}n_x!}}\frac{1}{\sqrt{l_0}}e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}}H_{n_x}\left(\frac{x}{l_0}\right) \quad , \quad E_{n_x}=\hbar\omega\left(n_x+\frac{1}{2}\right) \quad , \quad n_x=0,1,2,3...\\ Y_{n_y}(y) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_y}n_y!}}\frac{1}{\sqrt{l_0}}e^{-\frac{y^2}{2l_0^2}}H_{n_y}\left(\frac{y}{l_0}\right) \quad , \quad E_{n_y}=\hbar\omega\left(n_y+\frac{1}{2}\right) \quad , \quad n_y=0,1,2,3...\\ Z_{n_z}(z) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_z}n_z!}}\frac{1}{\sqrt{l_0}}e^{-\frac{z^2}{2l_0^2}}H_{n_z}\left(\frac{z}{l_0}\right) \quad , \quad E_{n_z}=\hbar\omega\left(n_z+\frac{1}{2}\right) \quad , \quad n_z=0,1,2,3...\end{aligned} \tag{18}$$

con $H_{n_j}\left(\frac{x_j}{l_0}\right)$ polinomios de Hermite y la longitud de oscilador $l_0=\sqrt{\hbar/m^*\omega}$. Se tiene inmediatamente que

$$E_{n_x,n_y,n_z}=E_{n_x}+E_{n_y}+E_{n_z}=\hbar\omega\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right) \tag{19}$$

Como $n_x+n_y+n_z=n=$ entero o cero, también podemos escribir

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right) \quad , \quad n=0,1,2,3... \tag{20}$$

(b) *Encuentre la fórmula general que da cuenta de los degeneramientos de las energías obtenidas en (a).*

El estado fundamental, el de menor energía, corresponde a $n_x=n_y=n_z=n=0$. Sólo hay una manera de lograr $n=0$, por lo tanto el estado fundamental es no-degenerado. El primer nivel excitado, $n=1$, puede ser logrado de 3 formas: $n_x=1$, $n_y=n_z=0$, o $n_y=1$, $n_x=n_z=0$, o $n_z=1$, $n_x=n_y=0$, por lo que es 3 veces degenerado.

En general, el grado de degeneramiento del nivel n es igual al número de maneras de lograr $n = n_x + n_y + n_z$. Para encontrar ese número empecemos por fijar n. Primero escojamos n_x, el cual puede ser cualquier entero entre 0 y n; es decir, n_x puede tomar $n+1$ posibles valores. Ahora escojamos n_y. Para un valor dado de n_x, n_y puede ser cualquier número entre 0 y $n - n_x$, por lo que n_y puede tomar $n - n_x + 1$ valores posibles. Finalmente, para n_z sólo hay una posibilidad $n_z = n - n_x - n_y$. Por lo tanto, el grado de degeneramineto g_n del nivel n, es la suma de estas distintas posibilidades

$$g_n = \sum_{n_x=0}^{n} (n - n_x + 1) = 1 + \frac{3n}{2} + \frac{n^2}{2} \tag{21}$$

(c) *Dado que el Hamiltoniano para este sistema es rotacionalmente invariante, las funciones de onda estacionarias pueden ser también escritas en coordenadas esféricas como*

$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta,\phi) \tag{22}$$

Por analogía con el átomo de hidrógeno escriba la ecuación diferencial que debe ser satisfecha por la función de onda radial $R_{n,l}(r)$.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\ ) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2} + \frac{1}{2}m^*\omega^2 r^2 \right] R_{n,l}(r) = E_{n,l} R_{n,l}(r) \tag{23}$$

Como la función radial se puede escribir también como $R(r) = u(r)/r$, la ecuación diferencial para la función $u(r)$ es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2} + \frac{1}{2}m^*\omega^2 r^2 \right] u_{n,l}(r) = E_{n,l} u_{n,l}(r) \tag{24}$$

(d) *Escriba la función de onda radial como $R(r) = r^l e^{-\frac{r^2}{2a^2}} \rho(r)$, con la longitud a que puede obtener de su conocimiento del oscilador armónico cuántico uni-dimensional y parte (a). Escriba la ecuación diferencial que debe ser satisfecha por $\rho(r)$. Solucione esta ecuación diferencial por serie de potencias como aparece en el texto.*

Escribamos $u(r) = r^{l+1} e^{-\frac{r^2}{2a^2}} f(r)$ que es una forma dictada por las condiciones de frontera que debe satisfacer $u(r)$ cuando $r \longrightarrow 0$ y $r \longrightarrow \infty$. En especial, cuando $r \longrightarrow \infty$ la Ec.(24) se reduce a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}m^*\omega^2 r^2 \right] u_{n,l}(r) \sim 0 \tag{25}$$

o de manera equivalente

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} \sim \frac{r^2}{l_0^4}u(r) \tag{26}$$

La solución asintótica de la anterior ecuación es

$$u(r) \sim e^{-\frac{r^2}{2l_0^2}} \tag{27}$$

De donde se puede concluir que $a = l_0$. Con el cambio de variable $\rho = r/l_0$ la Ec.(24) se escribe

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \lambda\right] u(\rho) = 0 \tag{28}$$

con $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$. Como $u(r) = r^{l+1}e^{-\frac{r^2}{2a^2}}f(r)$, la Ec.(28) lleva a la siguiente ecuación para $f(\rho)$

$$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho^2)\frac{df}{d\rho} + (\lambda - 2l - 3)\rho f = 0 \tag{29}$$

Buscamos la solución a la anterior ecuación escribiendo $f(\rho)$ en forma de serie

$$f(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j\rho^j \tag{30}$$

Calculamos

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\rho} &= \sum_{j=1}^{\infty} jc_j\rho^{j-1} \\ \frac{d^2f}{d\rho^2} &= \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)c_j\rho^{j-2} \end{aligned} \tag{31}$$

Al sustituir las Ecs.(30)-(31), en la ecuación diferencial (29), al igualar potencias idénticas de ρ se obtiene

$$\begin{aligned} \rho^0 &: \quad 2(l+1)c_1 = 0 \Longrightarrow c_1 = 0 \\ \rho^1 &: \quad c_2 = \frac{3+2l-\lambda}{6+4l}c_0 \\ \rho^2 &: \quad c_3 = \frac{5+2l-\lambda}{12+6l}c_1 \Longrightarrow c_3 = 0 \\ \rho^3 &: \quad c_4 = \frac{4+3+2l-\lambda}{20+8l}c_2 \end{aligned} \tag{32}$$

Por lo tanto todos los coeficientes impares en la serie son cero, $c_j = 0$ si j =impar. Para los términos pares se encuentra la siguiente relación de recurrencia

$$c_{j+2} = \frac{2j + 3 + 2l - \lambda}{(j + 2l + 3)(j + 2)} c_j \tag{33}$$

(e) *Demuestre que al imponer la condición de terminar la serie de potencias en (d) con un número finito de términos (necesaria para garantizar que la función de onda sea normalizable) se llega a los resultados correctos de las energías.*

Para terminar la serie en un valor finito de $j = j_{max}$ se debe tener que

$$\lambda = 2j_{max} + 3 + 2l \tag{34}$$

es decir, las energías deben cumplir

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2j_{max} + 3 + 2l \Longrightarrow E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right) \tag{35}$$

con $n = j_{max} + l$ =entero o cero, totalmente de acuerdo con la Ec.(20).

(f) *Demuestre que los degeneramientos de los niveles de energía obtenidos en (a) y (d) son compatibles. Existe una simetría oculta adicional en este sistema que origine degeneramientos extras?. En términos de sus conocimientos de mecánica clásica para osciladores armónicos bi- o tri-dimensionales por qué es natural el haber encontrado degeneramientos extras, más allá de los degeneramientos normales asociados a varios m para n y l dados.*

Para determinar los degeneramientos g_n procedemos como antes: dado un valor de n existen varios valores posibles de j_{max} y l que conducen al mismo n. Recuerde que j_{max} =par.

Así si n =par, entonces $j_{max} = 0, 2, 4, ..., n$, es decir j_{max} puede tomar $n/2$ valores posibles. Para cada uno de estos valores de j_{max}, l tiene que ser $n - j_{max}$, y para cada valor de l existen $2l + 1$ posibles estados con la misma energía correspondientes a los distintos valores del número cuántico azimutal m. Entonces

$$g_n = \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}} [2(n - 2k) + 1] = 1 + \frac{3n}{2} + \frac{n^2}{2} \tag{36}$$

Ahora, si n =impar, entonces $j_{max} = 0, 2, 4, ..., n - 1$, es decir j_{max} puede tomar $\frac{n-1}{2}$ valores posibles. Entonces

$$g_n = \sum_{k=0}^{\frac{n-1}{2}} [2(n - 2k) + 1] = 1 + \frac{3n}{2} + \frac{n^2}{2} \tag{37}$$

Los resultados en las Ecs.(36)-(37) están de acuerdo con la Ec.(21).

Para el oscilador armónico bi- o tri-dimensional **clásico** existe una simetría extra asociada al hecho de tener órbitas cerradas, algo propio de potenciales que varían como r^2 o $1/r$. En otros términos, además del momentum angular hay otra cantidad que se conserva: la dirección del eje mayor de la órbita, asociada al vector de Runge-Lenz en el caso $V(r) = 1/r$.