

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SALTA

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

# EJERCICIOS PROPUESTOS Y ALGUNAS SOLUCIONES



DR. JAVIER ARMANDO GUTIERREZ  
APUNTES DE LA CÁTEDRA DE FÍSICA MODERNA I

2022

Departamento de Física

---

# Índice

<b>1</b>	<b>Ejercicios propuestos</b>	<b>5</b>
1.1	Fundamentos de la mecánica cuántica	5
1.1.1	†Radiación de cuerpo negro	5
1.1.2	†Radiación de cuerpo negro	6
1.1.3	Efecto Fotoeléctrico	6
1.1.4	Efecto Compton	7
1.1.5	Efecto Compton	7
1.1.6	Efecto Compton	7
1.1.7	Efecto Fotoeléctrico y Compton	8
1.1.8	Modelos Atómicos	8
1.1.9	Modelos Atómicos	8
1.1.10	Modelos Atómicos	9
1.1.11	Modelos Atómicos	9
1.1.12	†Modelos Atómicos	9
1.1.13	Modelos Atómicos	10
1.1.14	Incertidumbre y de Broglie	10
1.1.15	Incertidumbre y de Broglie	10
1.1.16	†Sommerfeld y Wilson	11
1.2	Mecánica Ondulatoria	11
1.2.1	Potencial estacionario	11
1.2.2	Potencial estacionario	12
1.2.3	Potencial estacionario	12
1.2.4	†Potencial estacionario	13
1.2.5	†Oscilador Armónico	13
1.2.6	†Oscilador Armónico	14
1.2.7	Oscilador Armónico	14
1.2.8	†Oscilador Armónico	15
1.3	Teoría Ondulatoria en Átomos Hidrogenoides	16
1.3.1	†Átomos Hidrogenoides	16

1.3.2	†Átomos Hidrogenoides . . . . .	16
1.3.3	†Átomos Hidrogenoides . . . . .	16
1.3.4	†Átomos Hidrogenoides . . . . .	17
1.3.5	Átomos Hidrogenoides . . . . .	17
1.4	Elementos de la Mecánica Estadística . . . . .	17
1.4.1	†Estadística de Maxwell . . . . .	17
1.4.2	†Estadística de Fermi . . . . .	17
1.4.3	†Elementos de la teoría de Sólidos . . . . .	17
<b>2</b>	<b>Solución de algunos ejercicios propuesto</b>	<b>18</b>
2.1	Fundamentos de la mecánica cuántica . . . . .	18
2.1.1	Radiación de cuerpo negro: 1.1.1 . . . . .	18
2.1.2	Radiación de cuerpo negro: 1.1.2 . . . . .	21
2.1.3	Modelos Atómicos: 1.1.12 . . . . .	21
2.1.4	Sommerfeld y Wilson : 1.1.16 . . . . .	23
2.2	Mecánica Ondulatoria . . . . .	25
2.2.1	Potencial estacionario: 1.2.4 . . . . .	26
2.2.2	Oscilador Armónico: 1.2.5 . . . . .	38
2.2.3	Oscilador Armónico: 1.2.6 . . . . .	47
2.2.4	Oscilador Armónico: 1.2.8 . . . . .	49
2.3	Teoría Ondulatoria en Átomos Hidrogenoides . . . . .	51
2.3.1	Átomos Hidrogenoides: 1.3.1 . . . . .	51
2.3.2	Átomos Hidrogenoides: 1.3.2 . . . . .	56
2.3.3	Átomos Hidrogenoides: 1.3.3 . . . . .	59
2.3.4	Átomos Hidrogenoides: 1.3.4 . . . . .	61
2.4	Elementos de la Mecánica Estadística . . . . .	62
2.4.1	Estadística de Maxwell: 1.4.1 . . . . .	62
2.4.2	Estadística de Fermi: 1.4.2 . . . . .	63
2.4.3	Elementos de la teoría de Sólidos: 1.4.3 . . . . .	64
<b>3</b>	<b>Ejercicios complementarios</b>	<b>66</b>
3.1	Fundamentos de la mecánica cuántica . . . . .	66
3.1.1	Ejercicio . . . . .	66
3.1.2	Ejercicio . . . . .	66
3.1.3	Ejercicio . . . . .	67
3.1.4	Ejercicio . . . . .	67
3.1.5	Ejercicio . . . . .	68
3.1.6	Ejercicio . . . . .	68
3.1.7	Ejercicio . . . . .	68

3.2	Mecánica Ondulatoria . . . . .	68
3.2.1	Ejercicio . . . . .	68
3.2.2	Ejercicio . . . . .	68
3.2.3	Ejercicio . . . . .	69
3.2.4	Ejercicio . . . . .	69
3.2.5	Ejercicio . . . . .	69
3.3	Átomos hidrogenoides . . . . .	69
3.3.1	Ejercicio . . . . .	69
3.3.2	Ejercicio . . . . .	70
3.3.3	Ejercicio . . . . .	70
3.3.4	Ejercicio . . . . .	70
3.3.5	Ejercicio . . . . .	70
3.3.6	Ejercicio . . . . .	70
3.3.7	Ejercicio . . . . .	70
3.3.8	Ejercicio . . . . .	70
3.4	Elementos de la Mecánica Estadística . . . . .	70
3.4.1	Ejercicio . . . . .	70
3.4.2	Ejercicio . . . . .	71
3.4.3	Ejercicio . . . . .	71
3.4.4	Ejercicio . . . . .	71
3.4.5	Ejercicio . . . . .	71
3.4.6	Ejercicio . . . . .	71
<b>A</b>	<b>Desarrollos matemáticos</b>	<b>72</b>
A.1	Método de Frobenius . . . . .	72
A.2	Operador Impulso Angular . . . . .	73
A.3	Átomo de H . . . . .	75
<b>B</b>		<b>80</b>
B.1	Algunas funciones del átomo de H . . . . .	80
B.2	Tabla de Integrales . . . . .	81
<b>C</b>	<b>Respuesta del Capítulo 3</b>	<b>82</b>
<b>D</b>	<b>Constantes Físicas y sus unidades</b>	<b>87</b>
D.1	Tabla de constantes físicas . . . . .	87
D.1.1	Sistema CGS . . . . .	87

---

<b>E Fórmulas a considerar</b>	<b>89</b>
E.1 Fundamentos de la mecánica cuántica . . . . .	89
E.2 Mecánica cuántica ondulatoria . . . . .	90
E.3 Átomos Hidrogenoides . . . . .	90
E.4 Elementos de la mecánica estadística . . . . .	91
<b>Bibliografía de consulta para la práctica y/ó teoría</b>	<b>92</b>

---

# Prefacio

La presente guía está compuesta de tres capítulos y es un compendio de diferentes ejercicios que fueron propuestos en las clases de práctica. En el primer capítulo hay diferentes ejercicios que no forman parte de la guía propuesta en cada tema, sin embargo los ejercicios son de un alto contenido conceptual que permitirá al alumno poner a prueba la fortaleza de sus conceptos.

Algunos de los ejercicios de la presente guía están resueltos en forma detallada en el segundo capítulo, en particular los ejercicios resueltos son aquellos que presentan un manejo de la matemática en forma más compleja. Esto se considera conveniente, ya que la parte conceptual se discute ampliamente en el horario de clases y en los diferentes horarios de consulta de la cátedra. En el Capítulo 3 se proponen algunos ejercicios complementarios para que los alumnos fortalezcan el manejo operacional y conceptual.

Al ser un proyecto aún en ejecución, espero que el lector sepa disculpar la falta de diversidad de todos los temas, ya que no siempre me puse a la ardua tarea de digitalizar todo el material preparado para las clases, debido a mis otras actividades. Sin embargo a su tiempo, ésta guía está en constante actualización. Quisiera remarcar que la presente guía es realizada por una persona (quien les escribe), por lo tanto es susceptible a los errores propios de una persona (mal tipeo por ejemplo), por lo tanto los invito a verificar siempre las cuentas numéricas, la notación, y ante cualquier duda acercarse a los horarios de consulta para responder vuestras inquietudes.

Por último quiero agradecer la colaboración de las distintas personas que me ayudaron (y aún lo hacen) en la redacción de estos apuntes, que son ***todos los alumnos*** que tuve desde que estoy en práctica de la materia (Año 2015), ya que fueron la principal motivación para la realización (y constante corrección y/o actualización) de esta guía.

Javier A. Gutierrez  
*Febrero 2019*

---

# Sobre la asignatura

Cada vez que comienza un nuevo cuatrimestre la pregunta recurrente de los alumnos es: ¿Qué libro se utiliza en la materia? La respuesta siempre va a variar en función de los docentes que estén a cargo de las diferentes cátedras. Sin embargo el curso de Física Moderna que se dicta para las carreras de Licenciatura en Física y Profesorado en Física, es un curso al que podríamos llamarle estándar, ya que es un curso introductorio a los conceptos de la mecánica cuántica. Pero como todo inicio de curso, siempre se recomienda realizar previamente un repaso de los conceptos fundamentales de la Mecánica Newtoniana y del Electromagnetismo Elemental.

Como bien dice unos de los libros cabecera de ésta cátedra [2], un curso introductorio a los conceptos de la mecánica cuántica requiere un conocimiento amplio de electromagnetismo, ondas [4] y termodinámica. Sin embargo cada vez que se lo requiera, se irá dando todo aquello que se necesite para poder hacer asequible los conceptos a estudiar y aprender.

Usualmente la materia está bien definida en tres partes. En primer lugar se realiza un repaso de los hechos más importantes en el desarrollo de la ciencia, en concreto en el área de la física y ciencias afines [3]. Esto puede resultar de carácter anecdótico a los alumnos, pero es importante conocer como se fue dando la construcción del conocimiento con los años, y de entender que las teorías y desarrollos que usamos hoy en día se construyó a lo largo del tiempo y por el aporte de muchas personas.

En la segunda parte de la asignatura, el primer tema propio corresponde a la cuantización de la carga [5], seguido de la teoría del cuerpo negro[2, 7]. Los fundamentos de la mecánica cuántica[2] están compuestos por diversas experiencias que no pueden ser explicadas por la física clásica. Los temas tales como el efecto fotoeléctrico, efecto Compton, son la piedra angular para el desarrollo de las teorías posteriores a estudiar. Haciendo uso de la idea de las cuantizaciones de las magnitudes físicas, se estudia el primer modelo atómico semiclásico, el modelo de Bohr. Lo llamamos de tal forma (semiclásico) ya que se empieza a hacer uso de las teorías cuánticas de la época en conjunto a las teorías clásicas, esto nos muestra una vez mas la importancia de la construcción del conocimiento científico, sobre todo para entender conceptualmente la construcción de los diversos modelos atómicos a estudiar.

Posteriormente la introducción de la mecánica ondulatoria[1, 2, 7], requiere que el alumno tenga no solo conceptos bien sólidos de los temas visto anteriormente, si no un buen manejo del cálculo vectorial. En este punto es normal realizar el primer examen parcial de los temas enseñados hasta

ese momento; el porque se elige este punto para realizar una evaluación es debido a que la cantidad de conocimiento nuevo es tal, que se requiere evaluar el nivel de entendimiento de los temas dados. En la última parte de la asignatura[6] se estudia un modelo atómico más complejo el cual permite explicar de mejor manera algunos desdoblamientos de las líneas espectrales, que antes no se podía explicar con el modelo de Bohr. La introducción de nuevas propiedades de las partículas cuánticas, permite volver más complejo aún nuestra visión de los átomos y desarrollar una estadística en función de una propiedad intrínseca (el espín). Para terminar el cursado, se estudian en forma elemental las diferentes propiedades de los sólidos[6].

Todo lo descrito anteriormente sirve para reflejar la linealidad que tienen todos los temas que componen la asignatura. Por lo tanto, como se les mencionó en el apartado anterior, no dejen de realizar las consultas necesarias para cada uno de los temas.



---

# Capítulo 1

## Ejercicios propuestos

En general cada uno de los ejercicios propuestos, tienen como objetivo fortalecer los conocimientos básicos de cada tema. En su gran mayoría los ejercicios están orientados para ser resueltos en forma lineal<sup>1</sup> mediante el uso de conceptos fundamentales. Aquellos que requieren un mayor esfuerzo desde lo operacional, se encuentran desarrollados en el Capítulo 2, y que están identificados (†). Se recuerda a los alumnos que los ejercicios propuestos en éste Capítulo son complementarios a los previsto en la guía de trabajos prácticos. Si bien resolverlos no son obligatorios, al ser ejercicios que engloban una gran cantidad de conceptos, se recomiendan su planteo y resolución para afianzar los conceptos adquiridos. Finalmente en el Capítulo 3 se proponen ejercicios complementarios cuyas respuestas están el Apéndice C.

### 1.1 Fundamentos de la mecánica cuántica

#### 1.1.1 †Radiación de cuerpo negro

Plank obtuvo la densidad de energía de radiación de cuerpo negro

$$E(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

- a) Expresar la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la longitud de onda.
- b) Encontrar la longitud de onda para la cual la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro es máxima a una temperatura dada.
- c) Obtener la densidad total de energía de la radiación de cuerpo negro en función de la temperatura.

---

<sup>1</sup>Por tal motivo encontrará repetido algunos incisos

### 1.1.2 †Radiación de cuerpo negro

La temperatura considerada regular del organismo humano varia dependiendo de su sexo, actividad reciente, el consumo de alimentos, líquidos, la hora del día, y en las mujeres, de la fase del ciclo menstrual en la que se encuentren. Tradicionalmente la Medicina considera que la temperatura corporal normal (tomada oralmente) oscila entre  $36,5$  y  $37,5$   $^{\circ}\text{C}$  en el adulto saludable; el valor promedio viene a ser  $37$   $^{\circ}\text{C}$ . Tres estudios diferentes recientes sugieren que la temperatura promedio en adultos saludables es de  $36,7$   $^{\circ}\text{C}$ .

- a) Si aproximamos al ser humano como un cuerpo negro, calcule la potencia emisiva y la longitud de onda máxima a la cual emite energía un adulto saludable.
- b) Ya que la temperatura de un adulto saludable no es la misma en su parte interna (núcleo) y la de su superficie (cutis o piel) ya que es grados centígrados más baja, calcule la potencia emisiva de y la longitud de onda máxima a la cual emite energía la piel de un adulto saludable.
- c) Exprese la forma en la cual se puede calcular la energía emitida por la piel de un adulto saludable en el espectro del visible ( $450\text{ nm} - 700\text{ nm}$ ).
- d) Explique brevemente la teoría de Rayleigh y Jeans. ¿Por que esta teoría no funcionaba para altas frecuencias?

### 1.1.3 Efecto Fotoeléctrico

En 1900 Lenard realizó una serie de experiencias que aportaron importante información acerca de las características del efecto fotoeléctrico. Estas pueden resumirse en lo siguiente:

- I) Cuando la luz que ilumina al cátodo es monocromática, la intensidad de la corriente  $I$  en el circuito es proporcional a la intensidad iluminosa  $i$  que incide sobre el mismo.
  - II) La intensidad de corriente  $I$  no depende mayormente de la diferencia de potencial  $V$  aplicada entre las placas; a circuito abierto se detectaba paso de corriente y aún invirtiendo la polaridad de potencial aplicado, circulaba corriente hasta que el voltaje alcanzaba un valor característico  $V_0$ .
  - III) No se observa retardo entre el instante en que se iluminaba la placa y la aparición de la corriente fotoeléctrica, el proceso era instantáneo.
  - IV) Se observa una dependencia lineal del potencial de frenado con la frecuencia de la luz incidente.
- a) Utilice la teoría de Einstein (haciendo uso de su ecuación) para explicar las observaciones de Lenard (realice todas las gráficas que crea conveniente).
  - b) ¿Cuál es la frecuencia de corte para el Al, si su función trabajo es de  $4.08\text{ eV}$
  - c) Si se hace incidir radiación ultravioleta de onda corta (UVC) de longitud de onda  $\lambda = 220\text{ nm}$ , calcule el impulso lineal máximo con el que son expulsados los electrones del cátodo.
  - d) ¿Existe efecto fotoeléctrico en el Al para la radiación ultravioleta de onda media (UVM), cuya longitud de onda es  $\lambda = 315\text{ nm}$ ? Calcule la velocidad de expulsión del electrón.

### 1.1.4 Efecto Compton

En un laboratorio se incide rayos gamma sobre una delgada lámina de  $Au$ , respecto al eje de incidencia, en un ángulo  $\theta$ , se mide que la radiación dispersada tiene una energía de 1.242 MeV. Por otro lado en un ángulo  $\phi$  se detecta una partícula con una longitud de onda de De Broglie  $\lambda_e$ , luego de varias observaciones se concluye que la dispersión es simétrica respecto al eje de incidencia (es decir  $\theta = \phi$ )

- Calcular la dirección en la que sale el electrón después de la interacción, así como su velocidad.
- ¿La zona del espectro a la que pertenece el fotón incidente?
- Calcular la longitud y frecuencia del fotón dispersado.
- Describa brevemente el efecto Compton y clarifique sus diferencias con el efecto fotoeléctrico.

### 1.1.5 Efecto Compton

En un laboratorio se hace incidir rayos gamma sobre una delgada lámina de  $Au$ . En un ángulo  $\theta$ , respecto al eje de incidencia, se mide que la radiación dispersada tiene una energía de 2,484 MeV. Por otro lado en un ángulo  $\phi$  se detecta una partícula con una longitud de onda de De Broglie  $\lambda_e$ ; luego de varias observaciones se concluye que la dispersión es simétrica respecto al eje de incidencia cuando  $\phi = \frac{\pi}{4}$ .

- Encuentre el valor de  $\lambda_e$  y la masa de la partícula.
- Determine el valor de la frecuencia de la radiación incidente sobre la lámina de  $Au$ .
- Si se cambia la lámina de  $Au$  por una de  $Ag$ , ¿se espera algún cambio significativo en la longitud de onda de la radiación dispersada?. Explique brevemente

### 1.1.6 Efecto Compton

En un laboratorio se recrea la experiencia de Compton; se pretende validar algunas relaciones encontradas en forma teórica.

Siendo  $P_0$  el impulso de los fotones incidentes de Rayos X;  $P_1$  y  $P_e$  el impulso de los fotones y electrones dispersados (en una lámina de  $Au$   $\epsilon = 1.4 \times 10^{-6} m$ ), a un ángulo  $\theta$  y  $\phi$  respectivamente respecto al eje de incidencia.

- Demuestre la siguiente igualdad. Remarcando claramente las hipótesis para la colisión del fotón incidente con el electrón en reposo.

$$P_e^2 = P_0^2 P_1^2 - 2P_0 P_1 \cos \theta$$

La energía de los fotones incidentes es equivalente a 10 veces la longitud de onda de Compton.

- Calcular la energía (eV) de los fotones incidentes y dispersados a un ángulo de  $\theta = \frac{\pi}{8}$ .
- Calcular el impulso lineal del electrón dispersado a un ángulo  $\phi$ , con los datos del inciso **b)**
- Calcular el impulso lineal del electrón dispersado a un ángulo  $\phi$ , con los datos del inciso **b)**
- Calcular la longitud de onda de De Broglie para el foton dispersado.

f) Describa brevemente el efecto Compton y clarifique sus diferencias con el efecto fotoeléctrico.

### 1.1.7 Efecto Fotoeléctrico y Compton

- a) Un haz de luz ultravioleta de longitud de onda  $\lambda = 350$  nm incide sobre una superficie de potasio; se observa que la energía máxima de los fotoelectrones emitidos es de 1.6 eV. Calcule la función de trabajo del potasio.
- b) Determinar la longitud de onda dispersada en una experiencia de Compton a un ángulo  $\theta = \frac{\pi}{4}$ , cuando la energía incidente es  $E_1 = 1.242$  MeV.
- c) Si hacemos colisionar fotones de alta energía con protones ¿Cuál sería el orden de la longitud de onda incidente para observar cambios en la longitud de onda dispersada? ¿Se requiere mayor o menor energía que en el efecto Compton?
- d) Calcular la longitud de onda de corte para el Ni, cuya función de trabajo es  $\phi_0 = 4.6$  eV. Para longitudes de onda por encima al valor calculado ¿Hay efecto fotoeléctrico? Justifique.

### 1.1.8 Modelos Atómicos

- a) Describa brevemente el modelo atómico de Rutherford y mencione cuál era su falla desde el punto de vista clásico.
- b) Describa el modelo atómico de Bohr, y explique brevemente como salvaguardaba las falencias del modelo de Rutherford.
- En un átomo de  $Li^{++}$ .
- d) Calcular la energía del electrón para el nivel  $n = 2$ .
- e) Si ocurre una transición del nivel  $n_i = 2 \rightarrow n_f = 3$ . Calcule  $\Delta E_{3-2}$ . ¿El fotón es emitido o absorbido? Justifique.
- f) En que rango del espectro se ubica una transición  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 2$
- g) ¿Cuánta energía es necesaria para obtener la triple ionización  $Li^{++} \rightarrow Li^{+++}$  si en el electrón esta en el estado  $n=4$ ?

### 1.1.9 Modelos Atómicos

En un átomo de  $He^+$ .

- a) Calcular la energía del electrón que se encuentra en el nivel  $n = 3$ .
- b) Si ocurre una transición del nivel  $n_i = 4 \rightarrow n_f = 3$ . Calcule  $\Delta E_{3-4}$ . El fotón que interviene en el proceso ¿es emitido o absorbido? Justifique.
- c) ¿Cuánta energía es necesaria para obtener una partícula  $\alpha$  a partir del  $He^+$  si su electrón está en el estado fundamental?
- d) Si se desea estudiar las transiciones en un átomo de  $Be$ . ¿Es correcto utilizar el modelo atómico de Bohr? Justifique.

### 1.1.10 Modelos Atómicos

En un laboratorio se repite la experiencia clásica de dispersión de Rutherford, con partículas que atraviesan una lámina delgada de  $Au$  y espesor  $\epsilon = 5 \times 10^{-7}$ . Se observaron a un ángulo de 30 grados, respecto al eje de incidencia, 238 centellos por minuto

- Si se cambia la lámina de  $Au$ , por una del mismo material pero con espesor  $\epsilon = 8,6 \times 10^{-7}$ . Calcular el número de centelleos que se observarán a ese mismo ángulo en 1 minuto.
- Manteniendo el grosor de la placa constante, ¿Qué cantidad de centelleos por minuto se espera observar en un ángulo de 60 grados?
- Si se cambia la lámina de  $Au$  por una de  $Ag$  del mismo espesor. Calcule el número de partículas dispersadas en un ángulo de 45 grados.

### 1.1.11 Modelos Atómicos

Se realizan experiencias de dispersión de Rutherford con diferentes láminas blancas, midiendo las partículas dispersadas, en cinco posiciones angulares como se muestra en la tabla. El número de partículas  $\alpha$  en el haz que inciden por unidad de área es el mismo. La sección del haz es tal que, el número de átomos dispersores en la lámina es el mismo en todas las experiencias. La tabla muestra el número de partículas dispersadas en función del ángulo para cada blanco ensayado.

Ángulo de difusión	Número Registrado		
	Blanco 1	Blanco 2	Blanco 3
30	2790	35920	102810
60	346	4451	12760
90	100	1288	3685
120	39	496	1423
180	14	187	532

- El blanco 1, era una lámina de  $Al$ . ¿De qué material eran los otros blancos?
- Explique con la tabla, la dependencia del número de partículas dispersadas, con valor del número atómico ( $Z$ ) de cada blanco y con el ángulo.
- Describa brevemente el modelo atómico de Rutherford y mencione cuál era su falla desde el punto de vista clásico.

### 1.1.12 Modelos Atómicos

- Describa el modelo atómico de Bohr, y explique brevemente como salvaguardaba las fallencias del modelo de Rutherford.

En un átomo de  $He^+$ .

- Calcular la energía del electrón para el nivel  $n = 3$

- c) Si ocurre una transición del nivel  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 3$ . Calcule  $\Delta E_{1-3}$ . ¿El fotón es emitido o absorbido? Justifique.
- d) En que rango del espectro se ubica la transición  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 2$
- e) Para el estado fundamental, calcular la velocidad y el impulso angular del electrón. El radio de órbita de un  $e^-$  en estado fundamental ¿Es mayor en un  $He^+$  o en un  $H$ ? Justifique.

### 1.1.13 Modelos Atómicos

En un laboratorio se repite la experiencia clásica de dispersión de Rutherford, con partículas que atraviesan una lámina delgada de Ag y espesor  $\epsilon = 3 \times 10^{-7} \text{m}$ . Se observaron a un ángulo de 60 grados, respecto al eje de incidencia, 238 centellos por minuto.

- a) Si se cambia la lámina, por una del mismo material pero con espesor  $\epsilon = 3 \times 10^{-7} \text{m}$ . Calcular el número de centelleos que se observarán en ese mismo ángulo en 2 minutos.
- b) Manteniendo el grosor de la placa constante, ¿Qué cantidad de centelleos por minuto se espera observar en un ángulo de 45 grados?
- c) Si se cambia el material de la lámina por una de Ag del mismo espesor. Calcule el número de partículas dispersadas en un ángulo de 45 grados en un minuto.
- d) Explique brevemente la conclusión que se obtuvo a partir de la experiencia de Rutherford, y como modificó la idea del átomo que se tenía en ese entonces.

### 1.1.14 Incertidumbre y de Broglie

- a) Los neutrones térmicos son neutrones que están en equilibrio térmico con la materia a una temperatura dada. Los electrones tienen entonces una energía cinética promedio igual a la de las moléculas de un gas ideal a la misma temperatura. Calcule la longitud de onda de de Broglie de los neutrones térmicos a 25 °C.
- b) Se deja en libertad un electrón a una distancia muy grande de un protón. Hallar la longitud de onda del electrón cuando está: a 1 m del protón y a  $0.5 \times 10^{-10} \text{m}$  del protón.
- c) Se mide la velocidad de un protón en la dirección  $x$  con una precisión de  $10^{-7} \text{ m/s}$ . Calcular el límite de precisión con que se puede localizar simultáneamente el protón en la dirección  $x$  y en la dirección  $y$ .
- d) Se determina la posición de un electrón con una indeterminación de 0.1 nm. Hallar la indeterminación en su impulso. Si la energía del electrón es del orden de 1 keV, estimar la indeterminación de la energía.

### 1.1.15 Incertidumbre y de Broglie

- a) Electrones con energía cinética de 6 eV inciden en un ángulo  $\theta$  respecto a la normal sobre una red cristalina cuyos planos están espaciados una distancia de 0.5 nm; en estas condiciones se observa difracción de Bragg de primer orden. Determine el valor del ángulo  $\theta$ .

- b) Calcule la longitud de onda de De Broglie para un electrón que está en el estado fundamental en un átomo de H. Compare el valor obtenido con el radio para el estado fundamental en el átomo de H.
- c) ¿Cuál es el tiempo que va a permanecer ligado un electrón que está en el estado fundamental en el átomo de H?

### 1.1.16 †Sommerfeld y Wilson

- a) Describa brevemente la regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson (S-W).
- b) Utilizando la regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson calcule las siguientes magnitudes:
- El impulso angular de una partícula moviéndose en un campo central.
  - La energía de una partícula moviéndose en una caja unidimensional.
  - La energía de una partícula bajo un movimiento armónico simple.

## 1.2 Mecánica Ondulatoria

### 1.2.1 Potencial estacionario

A partir de la Figura (1.1):

- a) Escriba la función del potencial esquematizada.
- b) Para una partícula de energía  $E$  que se encuentra en el intervalo  $(0, a)$ , escriba y resuelva la ecuación de Schrödinger.
- c) Esquematice la función de onda para los estados  $n=1, 2$  y  $3$ .
- d) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar un electrón en estado fundamental, en el intervalo  $(0, \frac{a}{2})$ ?
- e) Calcule la longitud de onda de De Broglie para un electrón en  $n=2$ . f) Calcular  $\langle x \rangle$  y  $\langle x^2 \rangle$  para el estado  $n = 1$ .

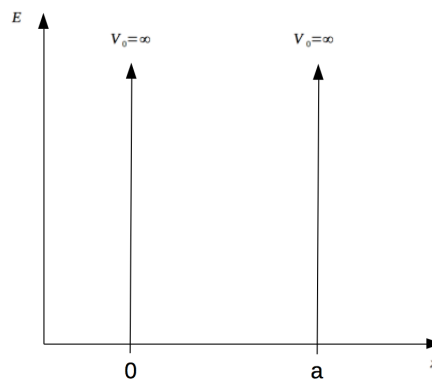


Figura 1.1: Pozo unidimensional

### 1.2.2 Potencial estacionario

A partir de la Figura (1.2):

- Escriba la función del potencial esquematizado.
- Para el caso en el que  $V_1 = 0$ , encuentre la función de onda para un electrón de energía  $E$  que se encuentra en el intervalo  $(0, a)$ .
- Esquematice la función de onda para los estados  $n=1$  y  $2$ .
- Para un potencial  $V_1 = 3eV$  encuentre el valor de  $d$  de tal forma que un electrón que está en el estado fundamental no se vea afectado por la barrera.

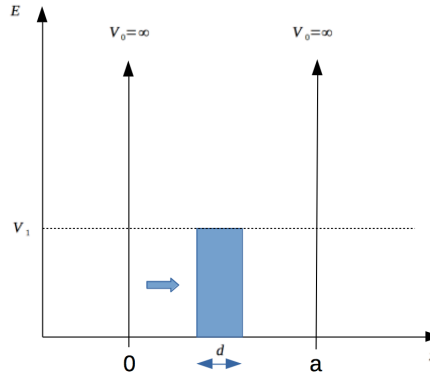


Figura 1.2: Pozo unidimensional, con una barrera al medio

### 1.2.3 Potencial estacionario

A partir de la Figura (1.3):

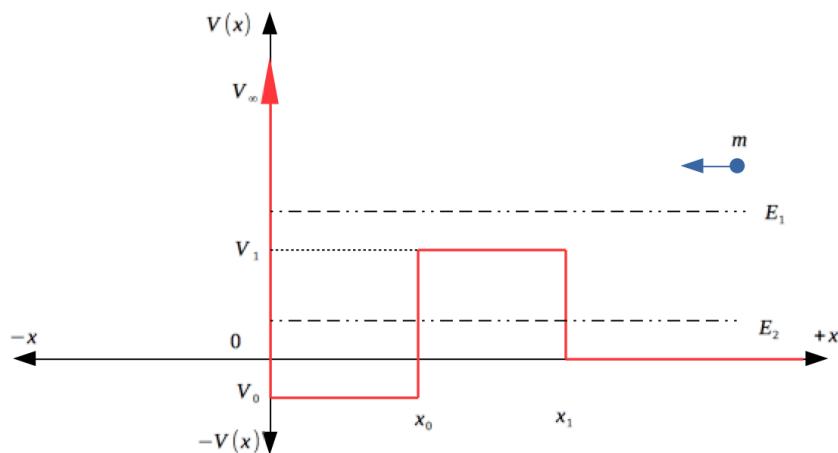


Figura 1.3: Esquema del potencial

Si una partícula que va desde la derecha a la izquierda, realice:

- Escriba en forma analítica el potencial representado.



- b) Escriba la ecuación de Shrödinger para los casos en que  $E = E_1$  y  $E = E_2$  y deduzca la función  $\psi(x)$  para los correspondientes valores de energía.
- c) ¿Qué condiciones permiten encontrar las constantes de la función  $\psi(x)$ ?
- d) Haga un esquema de las distintas soluciones de  $\psi(x)$ .

#### 1.2.4 †Potencial estacionario

A partir de la Figura (1.4):

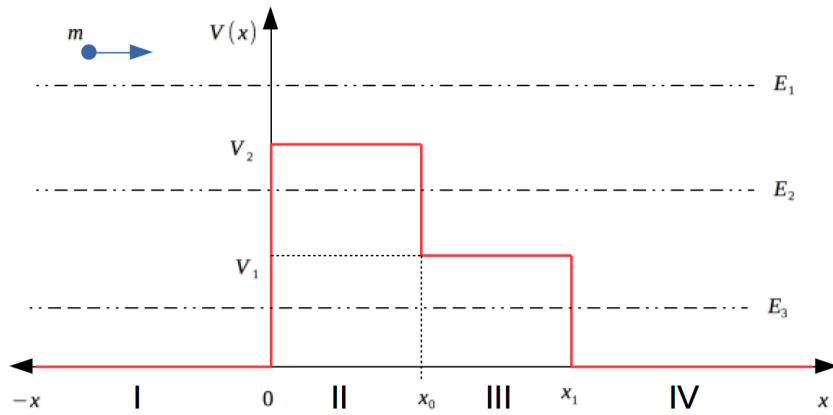


Figura 1.4: Esquema del potencial al cual está sometido una partícula de masa  $m$ , con diferentes energías mecánicas  $E_i$ , que va de izquierda a derecha.

- a) Escriba en forma analítica el potencial representado en la gráfica.
- b) Escriba la ecuación de Shrödinger para los casos en que  $E = E_1$ ,  $E = E_2$  y  $E = E_3$ . Deduzca la función  $\psi(x)$  para los correspondientes valores de energía.
- c) ¿Qué condiciones permiten encontrar las constantes de la función  $\psi(x)$ ?
- d) Haga un esquema de las distintas soluciones de  $\psi(x)$ . ¿Cómo son las longitudes de onda en cada caso?

#### 1.2.5 †Oscilador Armónico

Uno de los modelos centrales en la física clásica es el oscilador armónico, esto no es la excepción en la mecánica ondulatoria.

- a) Demostrar que para cualquier sistema que este cerca de su mínimo, el potencial del sistema es de la forma  $V(x) \propto kx^2$ .
- b) Demostrar que para un potencial  $V(x)$  la solución temporal de la ecuación de Shrödinger es:

$$\psi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

c) Demostrar que para un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ , solo puede tener valores de energía:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

d) Demostrar que para el estado fundamental ( $n = 0$ )  $\langle x \rangle = 0$ . Calcular  $\Delta x$ .

### 1.2.6 †Oscilador Armónico

Para una partícula que está en un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ , se encuentra que su función de onda para el estado fundamental es:

$$\phi_0(x) = \left( \frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2}$$

a) Calcular  $\langle x \rangle$  y la desviación estándar para la posición de la partícula.

b) Para caso particular del estado fundamental se tiene la siguiente relación:

$$E_0 = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0 \langle x^2 \rangle$$

Demuestre que se verifica el principio de indeterminación para el estado fundamental.

Ayuda:  $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\langle x \rangle - x)^2}{2\sigma^2}}$

### 1.2.7 Oscilador Armónico

En un laboratorio se desea estudiar las oscilaciones de un electrón el cual está enlazado a una molécula lineal, experimentalmente se encuentra que esta partícula tiene un potencial unidimensional de la siguiente forma:

$$V(r) = [2.1655 - 4r^2 e^{-r}] \text{ eV}$$

Tras diversas mediciones, se determina logra medir la energía de un estado de la partícula.

$$E = 0.45959 \text{ eV}$$

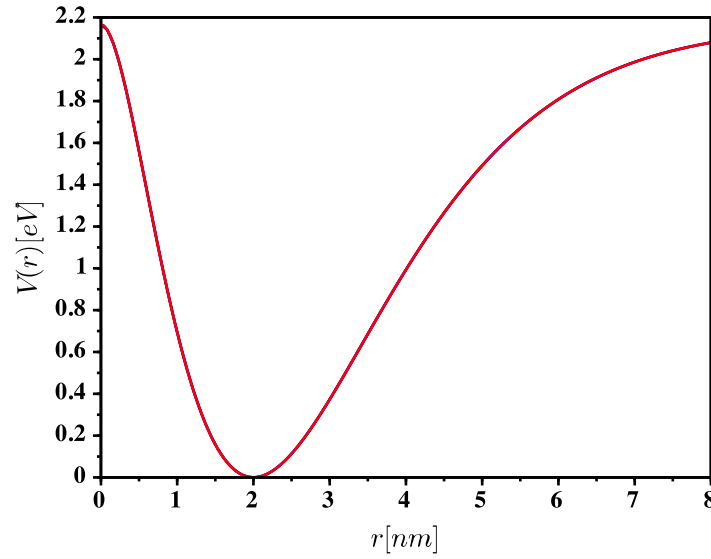


Fig 1.5: Potencial unidimensional medido en forma experimental

- Escriba la ecuación de Shrödinger independiente del tiempo para el potencial  $V(r)$ .
- Calcular la frecuencia de oscilación natural de la partícula cuando oscila en valores muy cercanos a  $r = 2$  nm.
- Determinar el número cuántico correspondiente a la energía medida.
- Calcular la energía mínima del sistema.
- Si la energía de la partícula es de 2 eV ¿La frecuencia de oscilación natural sigue siendo la calculada en el inciso (b)?

### 1.2.8 †Oscilador Armónico

Para una partícula que está en un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ , se encuentra que su función de onda para el estado fundamental es:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}x^2}$$

- Demostrar que se verifica

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

*Ayuda:* Dada dos distribuciones normales se verifica que  $\sigma_1\sigma_2 \geq 1$ . Realizar el cambio de variable  $\phi_0(x) \rightarrow \phi_0(p_x)$ .

## 1.3 Teoría Ondulatoria en Átomos Hidrogenoides

En ésta sección se abordarán diferentes problemas planteados para átomos hidrogenoides, en el cual se resuelven mediante la teoría ondulatoria.

### 1.3.1 †Átomos Hidrogenoides

Para un átomo de Hidrógeno:

- Escriba la probabilidad de encontrar a  $e^-$  en el estado  $2s$  en un diferencial de volumen.
- Grafique la densidad de probabilidad radial del estado  $2p$ , indique los valores máximos y mínimos de la densidad de probabilidad.
- Calcular el valor medio de  $r$  para el estado  $2p_0$ . ¿Cambia este valor para el  $\text{He}^+$ ?
- ¿Cuál es la probabilidad de encontrar un electrón en el primer octante para el estado  $2p_{-1}$ .
- ¿Cuál tiene mayor valor  $A$  ó  $B$ ? ¿Por qué son esperable esos valores? ¿Qué implicancia tiene los resultados obtenidos?

$$A = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta R_{2,1}(r) Y_{1,0}(\theta, \phi) R_{3,2}(r)^* Y_{2,2}(\theta, \phi)^* dr d\theta d\phi \quad (1.1)$$

$$B = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \phi) R_{2,1}(r)^* Y_{1,-1}(\theta, \phi)^* dr d\theta d\phi \quad (1.2)$$

### 1.3.2 †Átomos Hidrogenoides

- Escriba la densidad de probabilidad para el estado  $2s$  del H ¿ Este función cambia para un ión doblemente ionizado de Li?
- Calcular el valor del potencial eléctrico medio de un electrón en el estado  $1s$  para el átomo de hidrogeno, y la energía cinética media del electrón.
- ¿Cual es la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia mayor a  $a_0$  en el estado fundamental del átomo de hidrogeno?

### 1.3.3 †Átomos Hidrogenoides

- Explique brevemente el efecto Zeeman.
- Determine el momento magnético de un electrón que se mueve en una orbita elíptica (Modelo de Sommerfeld).
- Calcule la frecuencia a la cual el momento magnético  $\vec{\mu}$  da lugar a su precesión en un campo magnético  $\vec{B}$  ¿ Es posible medir esta frecuencia mediante un espectroscopio?

### 1.3.4 †Átomos Hidrogenoides

En un átomo de  $\text{He}^+$  que se encuentra en presencia de un campo magnético  $B$  uniforme igual a 5 Tesla.

Despreciar la interacción spin-órbita.

- a) Analice las posibles transiciones  $3p \rightarrow 2s$ .
- b) De todas las posibles transiciones  $3p \rightarrow 2s$  que se obtuvieron, determine cuántas se observan como distintas y calcule la longitud de onda asociada a esas transiciones.

### 1.3.5 Átomos Hidrogenoides

En un átomo de  $\text{He}^+$ , teniendo en cuenta la interacción spin-órbita para el estado  $3d$  en un campo magnético externo  $B = 0$

- a) ¿Cuáles son los valores posibles de  $j$ ?
- b) ¿Cuáles son los valores posibles de impulso angular total incluyendo el spin?
- c) ¿Cuáles son las componentes  $z$  posibles del impulso angular total?. Realice un esquema de las proyecciones de  $\mathbf{J}$  en el eje  $z$ .

## 1.4 Elementos de la Mecánica Estadística

### 1.4.1 †Estadística de Maxwell

Un circuito LC ideal en serie ( $R=0$ ) se encuentra a una temperatura  $T$ . Calcule el valor medio cuadrático (valor eficaz) inducido en el inductor, debido a las fluctuaciones térmicas aplicando el teorema de equipartición.

### 1.4.2 †Estadística de Fermi

Para un gas ideal de  $N$  electrones en un volumen  $V$  de Cu:

- a) Calcular la energía de Fermi.
- b) Calcular la energía total  $U$  a  $T=0$ .
- c) Calcular la presión del gas a  $T=0$ .

### 1.4.3 †Elementos de la teoría de Sólidos

- a) Explique: ¿Por qué los sólidos covalentes son transparentes a la luz visible?
- b) Explique los diferentes enlaces moleculares y sus características.

---

## Parte 2

# Solución de algunos ejercicios propuesto

En general los ejercicios que están desarrollados en éste capítulo, son aquellos que representan un grado avanzado de matemática.

## 2.1 Fundamentos de la mecánica cuántica

### 2.1.1 Radiación de cuerpo negro: 1.1.1

Plank obtuvo la densidad de energía de radiación de cuerpo negro

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

- a) Expresar la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la longitud de onda.
- b) Encontrar la longitud de onda para la cual la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro es máxima a una temperatura dada.
- c) Obtener la densidad total de energía de la radiación de cuerpo negro en función de la temperatura.

**Solución:**

a)

En algunas ocasiones es preferible expresar la densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la longitud de onda en vez de la frecuencia. Definamos  $E(\lambda)$  conforme la relación  $E(\lambda)d\lambda = -E(\nu)d\nu$ . El signo menos se debe a que  $d\lambda$  y  $d\nu$  tienen signos opuesto mientras que  $E(\lambda)$  y  $E(\nu)$  son positivas. Como  $\lambda\nu = c$ , tenemos

$$d\nu/d\lambda = -c/\lambda^2$$

y

$$E(\lambda) = -E(\nu)d\nu/d\lambda = -E(\nu)c/\lambda^2$$

Remplazando  $E(\nu)$  y poniendo  $\nu = c/\lambda$ , por lo tanto

$$E(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

En la siguiente figura se muestra el gráfico de  $E(\lambda)$  para diversas temperaturas. Presenta un pico pronunciado para una longitud de onda que depende de la temperatura.

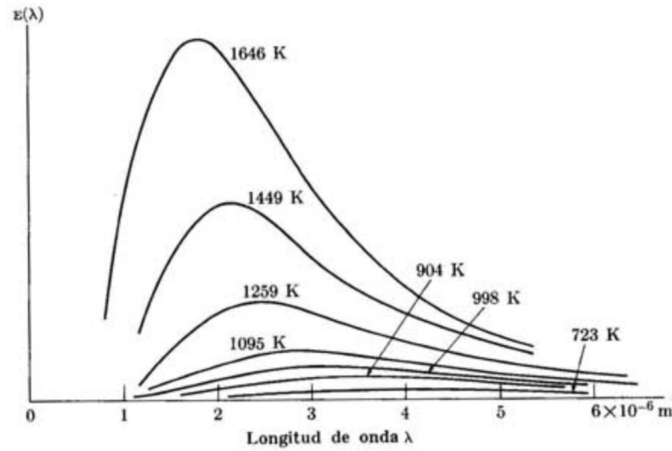


Fig 2.1: Densidad de energía monocromática de la radiación de cuerpo negro en función de la longitud de onda para diversas temperatura.

b)

Usando la ecuación anterior, y para simplificar la exposición, realizamos el cambio de variable  $x = hc/\lambda kT$ ; la expresión de  $E(\lambda)$  se convierte entonces en

$$E(\lambda) = \frac{8\pi k^5 T^5}{h^4 c^4} \frac{x^5}{e^x - 1}$$

Para encontrar el máximo de  $E(\lambda)$  se calcula  $dE(\lambda)/dx$  e iguala a cero. La ecuación resultante es:

$$e^{-x} + \frac{1}{5}x - 1 = 0$$

Siendo esta última una ecuación trascendente que se resuelve por aproximación sucesivas obteniendo  $x = 4.9651$ , por lo tanto  $\lambda T = b$ , donde

$$b = hc/4.9651k = 2.8978 \times 10^{-3} \text{mK}$$

Se denomina *constante de desplazamiento de Wien*. La expresión

$$\lambda T = b$$

Constituye la ley de desplazamiento de Wien, descubierta en 1896 por Wilhelm Wien.

Esta ley establece que los máximos de  $E(\lambda)$  a diferentes temperaturas  $T_1, T_2, T_3, \dots$  ocurren para longitudes de onda  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \dots$  tales que

$$\lambda_1 T_1 = \lambda_2 T_2 = \lambda_3 T_3 = \dots$$

A medida que la temperatura del cuerpo aumenta, el máximo de su distribución de energía se desplaza hacia longitudes de onda mas cortas, lo que origina un cambio en el color en el cuerpo. La ley de desplazamiento de Wien por lo tanto es muy útil para determinar la temperatura de cuerpos muy calientes, hallando la longitud de onda para la cual la intensidad de radiación es máxima.

c)

Como  $E(\nu)d\nu$  es la densidad de energía en el intervalo  $d\nu$  de la radiación de cuerpo negro, la densidad total de energía es

$$E = \int_0^\infty E(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$E$  es igual al área bajo la curva  $E(\nu)$ , introduciendo la variable  $x = h\nu/kT$ , tenemos  $d\nu = (kT/h)dx$  entonces

$$E = \frac{8\pi h}{c^3} \left( \frac{kT}{h} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{8\pi h}{c^3} \left( \frac{kT}{h} \right)^4 \frac{\pi^4}{15}$$

El resultado de la integral puede verificarse por ejemplo: usando el método de los residuos, ó por métodos numéricos. Por lo tanto

$$E = aT^4$$

Siendo

$$a = \frac{8\pi^5 k^4}{15h^3 c^3} = 7.5643 \times 10^{-16} \text{ Jm}^{-3} \text{ K}^{-4}$$

La ecuación  $E = aT^4$  se conoce como ley de *Stefan-Boltzmann* y fue descubierta empíricamente por en 1879 por Josef Stefan y demostrada teóricamente por Ludwig Boltzmann algunos años más tarde usando métodos termodinámicos. Un cálculo que omitiremos muestra que la energía emitida por un cuerpo negro, por unidad de área y por unidad de tiempo, llamada su *emitividad de radiación*, está dada por  $F = \sigma T^4$ , donde  $\sigma = \frac{1}{4}ca = 5.6693 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$  se denomina constante de *Stefan-Boltzmann*. Vale destacar que la mayoría de los cuerpos radiantes (como el Sol, un filamento incandescente ó un gas caliente) no se comportan como cuerpos negros, y por lo tanto no siguen rigurosamente los resultados obtenidos.



### 2.1.2 Compton: ??

### 2.1.3 Modelos Atómicos: 1.1.12

a) Describa el modelo atómico de Bohr, y explique brevemente como salvaguardaba las falencias del modelo de Rutherford.

En un átomo de  $He^+$

b) Calcular la energía del electrón para el nivel  $n = 3$

c) Si ocurre una transición del nivel  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 3$ . Calcule  $\Delta E_{1-3}$ . ¿ El fotón es emitido o absorbido? Justifique.

d) En que rango del espectro se ubica la transición  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 2$

e) Para el estado fundamental, calcular la velocidad y el impulso angular del electrón. El radio de orbita de un  $e^-$  en estado fundamental ¿ Es mayor en un  $He^+$  o en un  $H$ ? Justifique.

**Solución:**

a) El modelo atómico de Bohr está basado en la utilización de ideas clásicas con el agregado de postulados cuánticos. Esto puede resumirse en una serie de postulados:

i) En el átomo, un electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb entre el electrón y el núcleo, y obedece las leyes de la mecánica clásica.

ii) Pero, de la infinidad de órbitas que permite la mecánica clásica, el electrón puede moverse sólo en las que impulso angular orbital  $L$  es un múltiplo entero de la constante de Planck,  $h$ , dividida entre  $2\pi$ .

iii) A pesar de que electrón se encuentra constantemente sujeto a una aceleración, se mueve en una órbita permitida sin radiar energía electromagnética. Así su energía total  $E$  permanece constante.

iv) Un electrón emite radiación electromagnética cuando al moverse inicialmente en una órbita con energía total  $E_i$ , cambia discontinuamente su movimiento, y se mueve en una órbita de energía total  $E_f$ . La frecuencia de la radiación emitida es igual a la diferencia de energías  $(E_i - E_f)$  dividida entre la constante de Planck  $h$ .

b) Para calcular la energía del electrón en el nivel 3 ( $n = 3$ ) solo es necesario utilizar la fórmula de energía de enlace del electrón en átomos hidrogenoides:

$$E_n = -\frac{m_e}{2\hbar^2 n^2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

Para el caso de  $He^+$ ,  $Z = 2$  y  $n = 3$  :

$$E_3 = -13.6 \times \left( \frac{Z}{n} \right)^2 eV = -6.04 eV$$

c) Para calcular la energía de la transición del nivel  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 3$  entonces:

$$\Delta E_{n_i-n_f} = E_{n_i} - E_{n_f} = -\frac{m_e}{2\hbar^2 n_i^2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 + \frac{m_e}{2\hbar^2 n_f^2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

Por lo tanto:

$$\Delta E_{n_i-n_f} = -13.6 \left( \frac{Z}{n_i} \right)^2 + 13.6 \left( \frac{Z}{n_f} \right)^2$$

Para la transición  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 3$  se tiene:

$$\Delta E_{1-3} = -13.6 \left( \frac{2}{1} \right)^2 + 13.6 \left( \frac{2}{3} \right)^2 = -54.4eV + 6.04eV = -48.36eV$$

El fotón que aparece en el proceso es absorbido, ya que el electrón requiere energía para pasar de un nivel de menor energía ( $n_i = 1$ ) a uno de mayor energía ( $n_f = 3$ ). **d)** Para calcular el rango del espectro que se ubica la transición  $n_i = 1 \rightarrow n_f = 2$  es necesario calcular la energía del fotón involucrado en el proceso, y posteriormente calcular la frecuencia y determinar a que región del espectro pertenece.

$$\Delta E_{1-2} = -13.6 \left( \frac{2}{1} \right)^2 + 13.6 \left( \frac{2}{2} \right)^2 = -54.4eV + 13.6eV = -40.8eV$$

Al ser un valor negativo, se aprecia que el fotón es absorbido, además de ser una transición que va desde un nivel de menor energía a uno de mayor. Por lo tanto la frecuencia del fotón absorbido es:

$$\nu = \frac{40.8eV}{h} = \frac{40.8eV}{4.13 \times 10^{-15}eV.s} = 9.879 \times 10^{15}s^{-1}$$

Calculando la longitud de onda

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 m.s^{-1}}{9.879 \times 10^{15}s^{-1}} = 0.304 \times 10^{-7}m$$

La longitud de onda del fotón absorbido es  $\lambda = 30.4$  nm, el cual se ubica en el espectro UV.

**e)**

Aplicando las leyes de la mecánica clásica al electrón, para que este sea estable hacemos uso de los postulados de Bohr, por lo tanto igualamos la fuerza electrostática a la aceleración centrípeta:

$$k_e \frac{Ze^2}{r^2} = m_e a_c = m_e \frac{v^2}{r}$$

Sabiendo que  $L = m_e v r$ , calculamos  $v^2 = \frac{L^2}{m_e^2 r^2}$  obtenemos:

$$r = \frac{L^2}{k_e Z e^2 m_e}$$

Utilizando el postulado de Bohr  $L = n\hbar$  por lo tanto:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k_e Z e^2 m_e} = \frac{n^2}{Z} a_0$$

Donde  $a_0$  es el radio de Bohr, y tiene un valor  $a_0 = 5.291 \times 10^{-9}$  cm.

Para calcular la velocidad:

$$v_n = \frac{L}{m_e r_n} = \frac{n\hbar}{m_e} \frac{Z}{n^2} \frac{k_e m_e e^2}{\hbar^2}$$

Por lo tanto

$$v_n = \frac{Z}{n} \frac{k_e e^2}{\hbar} = \frac{Z}{n} v_0$$

Donde  $v_0 = 3.87 \times 10^{-3}$  cm/s.

Ahora estamos en condiciones de realizar el cálculo para el estado fundamental ( $n = 1$ ) del  $\text{He}^{-1}$  ( $Z = 2$ ).

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{1^2}{2} a_0 = \frac{1}{2} a_0 \\ v_1 &= \frac{2}{1} v_0 = 2v_0 \\ L_1 &= 1\hbar = \hbar \end{aligned}$$

Donde  $\hbar = 6.582 \times 10^{-16}$  eV s.

El radio del estado fundamental ( $n = 1$ ) para  $H$  ( $Z = 1$ ) es:

$$r_H = a_0$$

Para el estado fundamental ( $n = 1$ ) del  $\text{He}^{-1}$  ( $Z = 2$ ) es:

$$r_{\text{He}^{-1}} = \frac{1}{2} a_0$$

Por lo tanto:

$$r_H > r_{\text{He}^{-1}}$$

#### 2.1.4 Sommerfeld y Wilson : 1.1.16

- a) Describa brevemente la regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson (S-W).
- b) Utilizando la regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson calcule las siguientes magnitudes:
  - i) El impulso angular de una partícula moviéndose en un campo central.
  - ii) La energía de una partícula moviéndose en una caja unidimensional.
  - iii) La energía de una partícula bajo un movimiento armónico simple.

**Solución:**

a) En 1916 W. Wilson y A. Sommerfeld enunciaron una regla para la cuantificación de los sistemas periódicos. La regla es:

$$\oint P dq = nh$$

Donde  $n$  es un número entero y  $h$  la constante de Plank.  $P$  puede ser una componente del momento lineal, como  $p_x$ , en cuyo caso  $q$  es la correspondiente coordenada  $x$ ; y  $P$  puede ser una componente del momento angular, como  $L_z$ , y entonces  $q$  es el ángulo  $\theta$  asociado con la rotación alrededor del eje  $z$ . En la ecuación anterior, la integral debe realizarse a un ciclo completo del sistema.

b)

i)

Para este caso, la regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson resulta

$$\oint L d\theta = nh$$

Siendo  $L$  el impulso angular  $mvr$  en la dirección perpendicular al plano de la órbita (que suponemos en el plano  $xy$ ).

Como  $L$  es constante, la anterior ecuación queda

$$\oint L d\theta = nh \rightarrow L 2\pi = nh \rightarrow$$

$$L = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \quad (\text{Que es uno de los postulados de Bohr})$$

ii)

Para una partícula confinada en una caja unidimensional de paredes infinitas y longitud  $a$ , sobre la partícula no actúa ninguna fuerza excepto cuando choca contra las paredes y se refleja elásticamente. Si consideramos la partícula en la pared de la izquierda al comienzo del ciclo, tenemos

$$\oint p dx = \int_{x=0}^a (+mv) dx + \int_{x=a}^0 (-mv) dx = 2mva = nh$$

Por lo tanto

$$p = mv = \frac{nh}{2a}$$

Para una partícula libre no relativista, la energía es

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Remplazando el impulso lineal, encontramos

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}$$

Que es la energía de una partícula en una caja unidimensional.

iii)

La segunda ley de Newton para el movimiento de una masa  $m$  ligada a un resorte lineal de constante

$k$  es

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$$

Donde una de las soluciones a dicha ecuación es

$$x = A \sin \omega t$$

Siendo  $A$  la amplitud del movimiento y  $\omega$  la frecuencia angular,  $\omega = \frac{2\pi}{T} = \sqrt{\frac{k}{m}}$

La suma de la energía potencial,  $\frac{1}{2}kx^2$ , y la energía cinética,  $\frac{p^2}{2m}$ , es constante e igual al valor máximo de cualquiera de ellas:

$$E = T + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

A partir de la solución planteada, podemos calcular

$$dx = \omega A \cos \omega t dt$$

y

$$p = m \frac{dx}{dt} = m\omega A \cos \omega t$$

Por lo tanto, sustituyendo en la regla de cuantización de Sommerfeld-Wilson, entonces

$$\oint p dx = \oint m\omega^2 A^2 \cos^2 \omega t dt = nh$$

Si remplazamos con  $2E = m\omega^2 A^2$ , y realizamos el cambio de variable  $\theta = \omega t$  (con lo cual  $dt = d\theta/\omega$ ), por lo tanto:

$$\oint \frac{2E}{\omega} \cos^2 \theta d\theta = nh \rightarrow \frac{2E}{\omega} \int_{\theta=0}^{2\pi} \cos^2 \theta d\theta = nh$$

Resolviendo la integral, obtenemos

$$\frac{2E}{\omega} \pi = n\pi$$

Entonces

$$E = \frac{nh\omega}{2\pi} = \frac{nh}{T} = nh\nu$$

Que es la condición utilizada por Plank para la radiación de cuerpo negro.

## 2.2 Mecánica Ondulatoria

En esta sección, se abordan la solución de la ecuación de Shrödinger para potenciales estacionarios. Es necesario resaltar que los ejercicios expuestos son complementarios a la teoría que puede consultarse en la bibliografía recomendada.

### 2.2.1 Potencial estacionario: 1.2.4

A partir de la Figura (2.2):

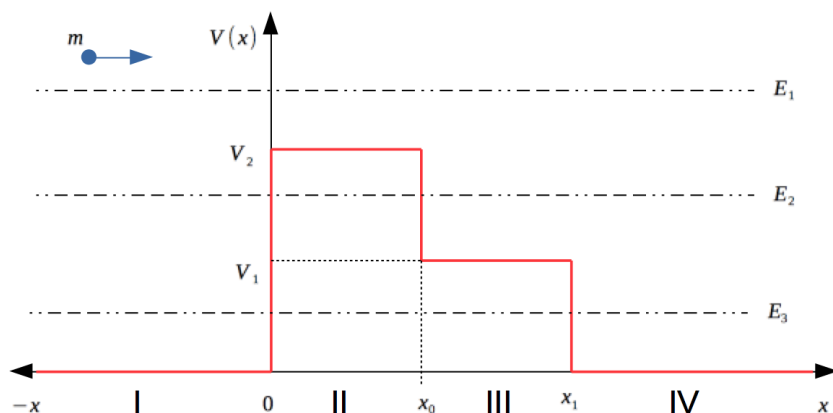


Figura 2.2: Esquema del potencial al cual está sometido una partícula de masa  $m$ , con diferentes energías mecánicas  $E_i$ , que va de izquierda a derecha.

- Escriba en forma analítica el potencial representado en la gráfica.
- Escriba la ecuación de Shrödinger para los casos en que  $E = E_1$ ,  $E = E_2$  y  $E = E_3$ . Deduzca la función  $\psi(x)$  para los correspondientes valores de energía.
- ¿Qué condiciones permiten encontrar las constantes de la función  $\psi(x)$ ?
- Haga un esquema de las distintas soluciones de  $\psi(x)$ . ¿Cómo son las longitudes de onda en cada caso?

**Solución:**

a)

En este caso, es necesario observar las distintas regiones planteadas en la Figura (1.1), la cual nos permitirá eventualmente poder resolver el ejercicio. Para las diferentes regiones tenemos:

$$\begin{aligned}
 I & : x \in (-\infty, 0) \\
 II & : x \in [0, x_0) \\
 III & : x \in [x_0, x_1) \\
 IV & : x \in [x_1, \infty)
 \end{aligned}$$

Por lo tanto el potencial estacionario que se observa en la Figura (1.1) es:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in (-\infty, 0) \\ V_2 & \text{si } x \in [0, x_0) \\ V_1 & \text{si } x \in [x_0, x_1) \\ 0 & \text{si } x \in [x_1, \infty) \end{cases}$$

b)

Para este caso, necesitamos plantear la ecuación de Shrödinger estacionaria para el caso unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

Planteamos la ecuación de Shrödinger estacionaria 1D, para cada una de las regiones, ya que  $V(x)$  es una función definida por intervalos, entonces:

Separamos el problema para diferentes valores de  $E$ , por lo tanto:

Sea  $E = E_1$

**Región I:**

Se tiene que  $V(x) = 0$  si  $x \in (-\infty, 0)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + 0\phi(x) = E_1\phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2mE_1}{\hbar^2} \phi(x) = 0$$

Por conveniencia realizamos el cambio de variable  $\kappa_{I,1} = \left(\frac{2mE_1}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ , por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{I,1}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = \alpha^2 e^{\alpha x}$$

De tal forma que podemos remplazar el operador derivada segunda como:

$$\frac{d^2}{dx^2} \equiv \alpha^2$$

Como  $e^{\alpha x} \neq 0$ , si no obtendríamos como resultado la solución trivial ( $\phi(x) = 0$ ) que no es de interés. Por lo tanto remplazando el problema se reduce a encontrar las raíces del polinomio que se obtiene de remplazar la solución propuesta en la ecuación diferencial (polinomio característico), de tal manera obtenemos:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{I,1}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{I,1}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{I,1}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{I,1}$$

Al obtener dos valores de  $\alpha$  (autovalores del polinomio característico), se procede a armar la función  $\phi(x)$  que será una combinación lineal de las soluciones encontradas (una por cada autovalor encontrado), por lo tanto:

$$\phi(x) = A_1 e^{i\kappa_{I,1}x} + A_2 e^{-i\kappa_{I,1}x}$$

El primer término representa una partícula libre de impulso  $p = \hbar k$  y energía  $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$  moviéndose en la dirección  $+x$ , y segundo término representa una partícula libre con el mismo impulso y energía pero moviéndose en la dirección opuesta  $-x$ .

## Región II:

Se tiene que  $V(x) = V_2$  si  $x \in [0, x_0)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V_2 \phi(x) = E_1 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_2 + E_1) \phi(x) = 0$$

En este caso se tiene  $V_2 < E_1$ , por lo tanto se tiene  $0 < E_1 - V_2$ , de tal modo que  $\frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - V_2) > 0$ , por lo tanto se define:

$$\kappa_{II,1}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - V_2)$$

Donde  $\kappa_{II,1}^2$  siempre será un valor positivo, por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{II,1}^2 \right] \phi(x) = 0$$



Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{II,1}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{II,1}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{II,1}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{II,1}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = B_1 e^{i\kappa_{II,1}x} + B_2 e^{-i\kappa_{II,1}x}$$

### Región III:

El desarrollo de esta parte será similar a la anterior.

Se tiene que  $V(x) = V_1$  si  $x \in [x_0, x_1]$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V_1 \phi(x) = E_1 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_1 + E_1) \phi(x) = 0$$

En este caso se tiene  $V_1 < E_1$ , por lo tanto se tiene  $0 < E_1 - V_1$ , de tal modo que  $\frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - V_1) > 0$ , por lo tanto se define:

$$\kappa_{III,1}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - V_1)$$

Donde  $\kappa_{III,1}^2$  siempre será un valor positivo, por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{III,1}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{III,1}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{III,1}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{III,1}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{III,1}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = C_1 e^{i\kappa_{III,1}} + C_2 e^{-i\kappa_{III,1}}$$

**Región IV:**

Se tiene que  $V(x) = 0$  si  $x \in [x_1, \infty)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + 0\phi(x) = E_1 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2mE_1}{\hbar^2} \phi(x) = 0$$

Por conveniencia realizamos el cambio de variable  $\kappa_{IV,1} = \left(\frac{2mE_1}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ , por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{IV,1}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{IV,1}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{IV,1}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{IV,1}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{IV,1}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = D_1 e^{i\kappa_{IV,1}} + D_2 e^{-i\kappa_{IV,1}}$$

Sea  $E = E_2$

**Región I:**

Se tiene que  $V(x) = 0$  si  $x \in (-\infty, 0)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + 0\phi(x) = E_2 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2mE_2}{\hbar^2} \phi(x) = 0$$

Por conveniencia realizamos el cambio de variable  $\kappa_{I,2} = \left(\frac{2mE_2}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ , por lo tanto:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{I,2}^2\right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{I,2}^2\right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{I,2}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{I,2}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{I,2}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = F_1 e^{i\kappa_{I,2}x} + F_2 e^{-i\kappa_{I,2}x}$$

## Región II:

En esta parte, el desarrollo será algo diferente a lo anterior.

Se tiene que  $V(x) = V_2$  si  $x \in [0, x_0)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V_2 \phi(x) = E_2 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_2 + E_2) \phi(x) = 0$$

En este caso se tiene  $V_2 > E_2$ , por lo tanto se tiene  $0 < V_2 - E_2$ , de tal modo que  $\frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - V_2) < 0$ , por lo tanto se define:

$$-\kappa_{II,2}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - V_2)$$

Definiendo de esta forma, nos aseguramos siempre que  $-\kappa_{II,2}^2 < 0$ , por lo tanto:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \kappa_{II,2}^2\right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[\frac{d^2}{dx^2} - \kappa_{II,2}^2\right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 - \kappa_{II,2}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 - \kappa_{II,2}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm \kappa_{II,2}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = G_1 e^{\kappa_{II,2} x} + G_2 e^{-\kappa_{II,2} x}$$

Cada término corresponde a una función creciente y decreciente respectivamente.

### Región III:

En este caso se tiene que  $V(x) = V_1$  si  $x \in [x_0, x_1)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V_1 \phi(x) = E_1 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_1 + E_2) \phi(x) = 0$$

En este caso se tiene  $V_1 < E_2$ , por lo tanto se tiene  $0 < E_2 - V_1$ , de tal modo que  $\frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - V_1) > 0$ , por lo tanto se define:

$$\kappa_{III,2}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - V_1)$$

Donde  $\kappa_{III,2}^2$  siempre será un valor positivo, por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{III,2}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{III,2}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{III,2}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{III,2}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i \kappa_{III,2}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = H_1 e^{i \kappa_{III,2} x} + H_2 e^{-i \kappa_{III,2} x}$$

### Región IV:

Se tiene que  $V(x) = 0$  si  $x \in [x_1, \infty)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + 0 \phi(x) = E_2 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \frac{2mE_2}{\hbar^2}\phi(x) = 0$$

Por conveniencia realizamos el cambio de variable  $\kappa_{IV,2} = \left(\frac{2mE_2}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ , por lo tanto:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{IV,2}^2\right]\phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{IV,2}^2\right]\phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{IV,2}^2]\phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{IV,2}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{IV,2}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = I_1 e^{i\kappa_{IV,2}x} + I_2 e^{-i\kappa_{IV,2}x}$$

Sea  $E = E_3$

### Región I:

Se tiene que  $V(x) = 0$  si  $x \in (-\infty, 0)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + 0\phi(x) = E_3\phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \frac{2mE_3}{\hbar^2}\phi(x) = 0$$

Por conveniencia realizamos el cambio de variable  $\kappa_{I,3} = \left(\frac{2mE_3}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ , por lo tanto:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{I,3}^2\right]\phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{I,3}^2\right]\phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{I,3}^2]\phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{I,3}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{I,3}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = J_1 e^{i\kappa_{I,3}x} + J_2 e^{-i\kappa_{I,3}x}$$

### Región II:

Se tiene que  $V(x) = V_2$  si  $x \in [0, x_0)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V_2 \phi(x) = E_3 \phi(x)$$

Re ordenando:

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_2 + E_3) \phi(x) = 0$$

En este caso se tiene  $V_2 > E_3$ , por lo tanto se tiene  $0 < V_2 - E_3$ , de tal modo que  $\frac{2m}{\hbar^2} (E_3 - V_2) < 0$ , por lo tanto se define:

$$-\kappa_{II,3}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_3 - V_2)$$

Definiendo de esta forma, nos aseguramos siempre que  $-\kappa_{II,3}^2 < 0$ , por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \kappa_{II,3}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} - \kappa_{II,3}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 - \kappa_{II,3}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 - \kappa_{II,3}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm \kappa_{II,3}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = Q_1 e^{\kappa_{II,3}x} + Q_2 e^{-\kappa_{II,3}x}$$

### Región III:

En este caso se tiene que  $V(x) = V_1$  si  $x \in [x_0, x_1)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V_1 \phi(x) = E_3 \phi(x)$$

Re ordenando:

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (-V_1 + E_3) \phi(x) = 0$$

En este caso se tiene  $V_1 > E_3$ , por lo tanto se tiene  $0 < V_1 - E_3$ , de tal modo que  $\frac{2m}{\hbar^2} (E_3 - V_1) < 0$ , por lo tanto se define:

$$-\kappa_{III,3}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_3 - V_1)$$

Definiendo de esta forma, nos aseguramos siempre que  $-\kappa_{III,3}^2 < 0$ , por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \kappa_{III,3}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} - \kappa_{III,3}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 - \kappa_{III,3}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 - \kappa_{III,3}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm \kappa_{III,3}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = R_1 e^{\kappa_{III,3} x} + R_2 e^{-\kappa_{III,3} x}$$

#### Región IV:

Se tiene que  $V(x) = 0$  si  $x \in [x_1, \infty)$  por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + 0 \phi(x) = E_3 \phi(x)$$

Re ordenando

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2mE_3}{\hbar^2} \phi(x) = 0$$

Por conveniencia realizamos el cambio de variable  $\kappa_{IV,3} = \left( \frac{2mE_3}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ , por lo tanto:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{IV,3}^2 \right] \phi(x) = 0$$

Se propone una solución del tipo  $\phi(x) = e^{\alpha x}$ , de tal manera que:

$$0 = \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \kappa_{IV,3}^2 \right] \phi(x) \equiv [\alpha^2 + \kappa_{IV,3}^2] \phi(x)$$

Como  $\phi(x) \neq 0$  entonces:

$$\alpha^2 + \kappa_{IV,3}^2 = 0$$

Teniendo como resultado:

$$\alpha_{1,2} = \pm i\kappa_{IV,3}$$

Por lo tanto:

$$\phi(x) = S_1 e^{i\kappa_{IV,3}x} + S_2 e^{-i\kappa_{IV,3}x}$$

**b)**

Para obtener el valor de cada uno de los parámetros de las soluciones encontradas, es necesario aplicar las diferentes condiciones que se imponen a la función de onda  $\phi(x)$ , tales como la continuidad de la función, la diferenciabilidad (de tal forma de asegurar la existencia de la derivada segunda) que en el caso unidimensional basta con pedir que la derivada de la función sea continua.

Un aspecto a tener en cuenta siempre, es la condición de normalización de la función de onda, es decir que siempre debe estar acotada en la región de estudio.

Otro aspecto de importancia, está en las condiciones físicas del problema.

Como a modo de ejemplo construiremos la solución para  $E = E_3$

En la Región I:

$$\phi(x) = J_1 e^{i\kappa_{I,3}x} + J_2 e^{-i\kappa_{I,3}x}$$

Para este caso, los coeficientes  $J_1$  y  $J_2$  son distintos de cero, ya que la partícula de masa  $m$  puede estar dirigiéndose a  $+x$  (por que es su condición inicial), ó puede estar dirigiéndose a  $-x$  por haber rebotado al entrar en contacto con el potencial  $V(x)$  en  $x = 0$  y por principio de indeterminación pudo no haber tenido la energía suficiente para atravesar la barrera (como se espera clásicamente). En cuanto a los valores relativos entre  $J_1$  y  $J_2$  se espera que  $|J_1|^2 > |J_2|^2$ , debido a que dado los niveles de energías es esperable que sea menos probable que la partícula rebota en la barrera a que la atraviese.

En la Región II:

$$\phi(x) = Q_1 e^{\kappa_{II,3}x} + Q_2 e^{-\kappa_{II,3}x}$$

Aquí hay una combinación de dos exponenciales, no se puede descartar a priori algunos de los coeficientes, ya que es necesario tener una función que sea diferenciable en los puntos  $x = 0$  y  $x = x_0$ .

En la Región III:

$$\phi(x) = R_1 e^{\kappa_{III,3}x} + R_2 e^{-\kappa_{III,3}x}$$



Al igual que en la región II, no podemos descartar a priori algunos de los coeficiente, y en este caso es necesario verificar la diferenciabilidad en los puntos  $x = x_0$  y  $x = x_1$ . Es importante resalta que en este caso la amplitud de la función de onda en la región III, debe ser menor que en la región II, debido a que la probabilidad de encontrar a la partícula en la región III, está condicionada a las probabilidades de rebote en los puntos  $x = 0$  y  $x = x_0$ .

En la Región IV:

$$\phi(x) = S_1 e^{i\kappa_{IV,3}} + S_2 e^{-i\kappa_{IV,3}}$$

En este caso  $S_2 = 0$ , ya que representa a una partícula que va en dirección  $-x$ , esto no es posible ya que no existe algún potencial  $V(x) \neq 0$ , cuando  $x \rightarrow \infty$  que haga que la partícula rebote y vuelva (debido a que la condición inicial es la partícula está la región I y se dirige hacia  $+x$ ). También es necesario recalcar que la amplitud de la función de onda en esta región es menor que el de la región I, debido a que no existe probabilidad de robote en IV y además está condicionada a las probabilidades anteriores.

Por lo tanto la función de onda para  $E = E_3$

$$\phi_3(x) = \begin{cases} J_1 e^{i\kappa_{I,3}} + J_2 e^{-i\kappa_{I,3}} & \text{si } x \in (-\infty, 0) \\ Q_1 e^{\kappa_{II,3}} + Q_2 e^{-\kappa_{II,3}} & \text{si } x \in [0, x_0) \\ R_1 e^{\kappa_{III,3}} + R_2 e^{-\kappa_{III,3}} & \text{si } x \in [x_0, x_1) \\ S_1 e^{i\kappa_{IV,3}} & \text{si } x \in [x_1, \infty) \end{cases}$$

A partir de la Figura (2.3), se puede apreciar un esquema de la solución encontrada para  $\phi_3(x)$

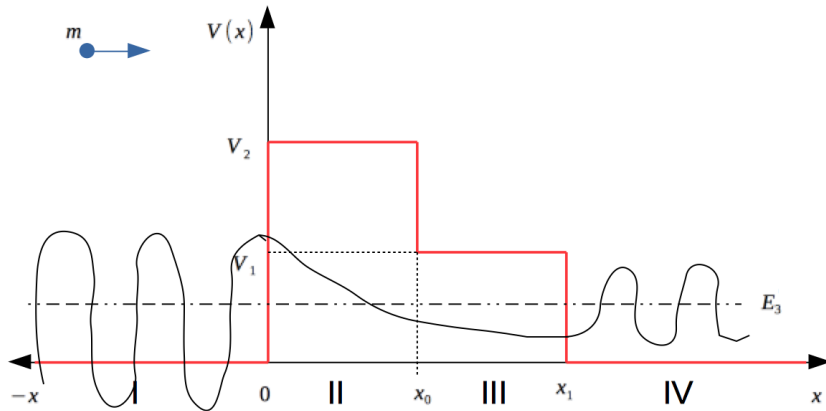


Figura 2.3: Esquema aproximado de la función de onda  $\phi_3(x)$ , para un valor de energía  $E = E_3$ . Los parámetros  $\kappa_{I,3}$  y  $\kappa_{IV,3}$ , tienen el mismo valor, ya que corresponden a una partícula con la

misma energía cinética ( $T = E_3$ ), ya que en esas regiones  $V(x) = 0$ .

Queda como ejercicio para el lector realizar los mismos cálculos y gráficas correspondientes a  $E = E_1$  y  $E = E_2$

### 2.2.2 Oscilador Armónico: 1.2.5

Uno de los modelos centrales en la física clásica es el oscilador armónico, esto no es la excepción en la mecánica ondulatoria.

- a) Demostrar que para cualquier sistema que este cerca de su mínimo, el potencial del sistema es de la forma  $V(x) \propto kx^2$ .
- b) Demostrar que para un potencial  $V(x)$  la solución temporal de la ecuación de Shrödinger es:

$$\psi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

- c) Demostrar que para un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$ , solo puede tener valores de energía:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

- d) Demostrar que para el estado fundamental ( $n = 0$ )  $\langle x \rangle = 0$ . Calcular  $\Delta x$ .

#### Solución

a)

Sea un sistema con una función potencial  $f(x)$ , tal que un mínimo de la función sea  $x_0$ . Si el sistema se encuentra en dicho mínimo, podemos expresar a  $f(x)$  como un desarrollo de serie de Taylor alrededor de  $x_0$ . Entonces:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n} f(x) \right)_{x=x_0} (x - x_0)^n$$

Al estar el sistema cerca del mínimo<sup>1</sup>, podemos truncar la serie y quedarnos unicamente con los primeros términos, entonces:

$$f(x) \approx f(x_0) + \left( \frac{d}{dx} f(x) \right)_{x_0} (x - x_0) + \left( \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right)_{x_0} (x - x_0)^2 + \dots$$

Por condición necesaria, al estar el sistema en un mínimo tenemos que:

$$\left( \frac{d}{dx} f(x) \right)_{x_0} = 0$$

---

<sup>1</sup>Esto se conoce como equilibrio estable en la teoría de la dinámica no lineal

Luego, al saber que una función potencial podemos definirla a menos una constante, nos es indistinto el valor de  $f(x_0)$ . Finalmente

$$f(x) = \left( \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right)_{x_0} (x - x_0)^2 \equiv \frac{1}{2} k (x - x_0)^2$$

Siendo  $k > 0$ , ya que  $(x - x_0)^2 > 0$  y por criterio de la segunda derivada, ésta debe ser positiva para ser mínimo. Por lo que queda demostrado que cualquier sistema que este alrededor de un mínimo de su potencial, puede representarse dicho potencial como una función del tipo  $V(x) = \frac{1}{2} k x^2$ , ya que un cambio de variable nos permite no arrastrar el término  $x_0$ .

b)

Se plantea la ecuación de Shrödinger para un potencial  $V(x)$ , por lo tanto:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t)$$

Para resolver la ecuación de arriba proponemos <sup>2</sup> que  $\Psi(x, t) = \phi(x)\psi(t)$ , por lo tanto:

$$i\hbar \frac{\partial \phi(x)\psi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \phi(x)\psi(t)}{\partial x^2} + V(x)\phi(x)\psi(t)$$

Realizando la derivada de las funciones  $\phi(x)$  y  $\psi(t)$  obtenemos:

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} \phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} \psi(t) + V(x)\phi(x)\psi(t)$$

Ordenando las variables independientes en diferentes términos obtenemos:

$$i\hbar \frac{1}{\psi(t)} \frac{d\psi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\phi(x)} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) = cte$$

Para que ambos términos sean iguales es necesario que sean igual a una constante, ya que ambos términos implican una derivada. Otro factor importante que nos permite hacer eso, es que por definición el potencial  $V(x)$  está definido a menos una constante, por lo tanto resolvemos la ecuación resultante para  $\psi(t)$

$$i\hbar \frac{1}{\psi(t)} \frac{d\psi(t)}{dt} = cte \equiv E$$

Le asignamos a la constante un valor fijo  $E$ , acomodando:

$$\frac{d\psi(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \psi(t)$$

---

<sup>2</sup>Es posible de proponer este tipo de solución cuando al menos una de las soluciones es periódica, como se verá más adelante es un requisito que siempre se cumple

Para resolver esta última ecuación proponemos  $\psi(t) = e^{\alpha t}$ , reemplazando:

$$\alpha e^{\alpha t} = -\frac{iE}{\hbar} e^{\alpha t}$$

De esta forma identificamos que  $\alpha = -\frac{iE}{\hbar}$ . Por lo tanto la parte temporal de la solución a la ecuación de Shrödinger, para un potencial del tipo  $V(x)$  es:

$$\psi(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

De la cual podemos inferir que  $E$  es la energía del sistema, ya que  $[\hbar] = \text{J.s}$ . Por otro lado cabe resaltar que este resultado es general para todo potencial estacionario (que no dependa de  $t$ ), es más al realizar el cálculo de  $|\psi(t)|^2$ , encontramos lo siguiente:

$$|\psi(t)|^2 = \psi(t)^* \psi(t) = e^{\frac{iE}{\hbar}t} e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = 1$$

Con este resultado podemos ver que al tener un potencial estacionario, la densidad de probabilidad del sistema  $|\Psi(x, t)|^2 dx$  no cambia en el tiempo ya que:

$$|\Psi(x, t)|^2 dx = |\phi(x)\psi(t)|^2 dx = |\phi(x)|^2 |\psi(t)|^2 dx = |\phi(x)|^2 dx$$

c)

En el inciso anterior se vio que para cualquier potencial estacionario, la parte temporal de la solución a la ecuación de Shrödinger siempre tiene la misma forma. Al utilizar un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ , la ecuación a resolver es:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\phi(x)} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 = E$$

Que simplemente es la ecuación no resuelta en el inciso anterior ya que no teníamos una forma explícita del potencial  $V(x)$ . Acomodando la ecuación obtenemos:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \right) \phi(x) = 0$$

Realizando los siguientes cambio de variables

$$a = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad b = \frac{m\omega_0}{\hbar}$$

Podemos re escribir la ecuación de la siguiente forma:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + (a - b^2 x^2) \phi(x) = 0$$

Para obtener una ecuación mas fácil de trabajar, vamos a realizar el cambio de variable  $q = b^{1/2}x$ , usando la regla de la cadena se tiene que  $\frac{d}{dx} = \frac{d}{dq} \frac{dq}{dx} = b^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dq}$ , por lo tanto:

$$\frac{d^2}{dx^2} = b \frac{d^2}{dq^2}$$

Re-escribiendo la ecuación obtenemos:

$$\frac{d^2\phi}{dq^2} + \left(\frac{a}{b} - q^2\right)\phi = 0 \quad (2.1)$$

Existen dos formas de resolver esta ecuación, la forma directa es utilizando sofisticadas herramientas matemáticas, y una menos sofisticadas pero mas intuitiva es la que utilizaremos en nuestro caso. Como es de vital importancia no perder de foco la parte física del problema, usaremos un método que si quiere llamarse más artesanal para resolver la ecuación.

Como primer paso es importante saber que la solución  $\phi$  debe cumplir con todos los requisitos para una función de onda es decir

- $\phi$  debe ser una solución de la ecuación de Shrödinger, lo cual implica que  $\phi \in C^1$ , en otras palabras que  $\phi$  sea continua y  $\frac{d\phi}{dx}$  también.
- $\phi$  debe ser de cuadrado integrable, es decir que  $\phi$  debe estar acotada en toda la región de dominio que en el caso 1-D es  $(-\infty, \infty)$

Dicho lo anterior, como primer paso estudiaremos que ocurre con la ecuación en un caso límite, es decir cuando  $q \gg \frac{a}{b}$ , dando como resultado la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2\phi}{dq^2} = q^2\phi$$

Para ésta última ecuación en forma asintótica, cuando  $q^2 \gg 1$  se obtiene el siguiente resultado:

$$\phi = e^{\pm \frac{q^2}{2}}$$

Como  $\phi$  debe estar acotada en toda la región, es decir que tiene que ser convergente en todo el dominio, unicamente nos quedamos con:

$$\phi = e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Esto nos permite proponer la siguiente solución para la ecuación (2.1):

$$\phi = e^{-\frac{q^2}{2}} f(q)$$

Remplazando en la ecuación (2.1) se obtiene:

$$e^{-\frac{q^2}{2}} \underbrace{\left( \frac{d^2 f}{dq^2} - 2q \frac{df}{dq} + \left( \frac{a}{b} - 1 \right) f \right)}_{=0} = 0$$

Podemos observar que para no obtener la solución trivial ( $\phi = 0$ ), es necesario que el término marcado sea igual a 0. Por lo tanto el problema se reduce a calcular la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 f}{dq^2} - 2q \frac{df}{dq} + \left( \frac{a}{b} - 1 \right) f = 0 \quad (2.2)$$

Para resolver la ecuación (2.2) existe un camino formal, y es proponer una solución del tipo

$$f = \sum_{j=0}^{\infty} c_j q^{k+j}$$

Siendo  $c_j$  coeficientes constantes, luego hay que remplazar en la ecuación (2.2) y determinar el valor de  $k$ , para el cual no se obtenga el resultado trivial. Esto debe hacerse ya que uno de los términos de la ecuación posee una singularidad<sup>3</sup>, sin embargo vamos a obviar este paso (Ver Apéndice A.1) ya que al realizar las cuentas se obtiene que  $k = 0$ , de tal manera que la solución propuesta, simplemente debe ser:

$$f = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j q^j$$

Donde los coeficientes  $\alpha_j$  son constante, de tal manera que derivando la función  $f$  obtenemos:

$$\frac{df}{dq} = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j j q^{j-1} \quad \frac{d^2 f}{dq^2} = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) \alpha_j q^{j-2}$$

Remplazando en la ecuación (2.2) obtenemos:

$$\begin{aligned} 2\alpha_2 + \left( \frac{a}{b} - 1 \right) + \left( 6\alpha_3 - 2\alpha_1 + \left( \frac{a}{b} - 1 \right) \alpha_1 \right) q \\ + \sum_{j=2}^{\infty} \left( (j+1)(j+2)\alpha_{j+2} - 2j\alpha_j + \left( \frac{a}{b} - 1 \right) \alpha_j \right) q^j = 0 \end{aligned}$$

Re acomodando todos los términos en una sola sumatoria obtenemos:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[ (j+1)(j+2)\alpha_{j+2} + \left( \frac{a}{b} - 1 - 2j \right) \alpha_j \right] q^j = 0$$

---

<sup>3</sup>Esto significa que el coeficiente se hace cero.

De esta última ecuación obtenemos lo que se conoce como ecuación de recurrencia, la cual nos permite obtener una correlación entre los diferentes coeficientes  $\alpha_j$ .

$$\frac{\alpha_{j+2}}{\alpha_j} = \frac{2j - \frac{a}{b} + 1}{(j+1)(j+2)} \quad (2.3)$$

Siendo esta última la ecuación de recurrencia para la ecuación (2.2).

En este punto es necesario hacer una pequeña disgregación, la construcción de la función  $\phi$  se da a partir de la serie de potencias para la función  $f$ , por lo tanto es conveniente analizar que ocurre con su fórmula de recurrencia, comparándola con una conocida.

Sea  $g(x)$  tal que:

$$e^{x^2} = 1 + x^2 + \frac{q^4}{2!} + \dots + \frac{q^j}{(\frac{1}{2}j)!} \quad j = 0, 2, 4, \dots$$

Esta función tiene la siguiente ecuación como fórmula de recurrencia:

$$\frac{\beta_{j+2}}{\beta_j} = \frac{1}{\frac{1}{2}j + 1}$$

Volviendo a la ecuación en estudio, es necesario analizar para  $j \gg 1$  la fórmula de recurrencia (2.3), que converge a un valor de  $\frac{2}{j}$  tomando el límite para  $\frac{\alpha_{j+2}}{\alpha_j}$  obtenemos:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{\alpha_{j+2}}{\alpha_j} = 0$$

Podemos inferir que la serie es convergente.

En el caso de que  $j \gg 1$  podemos aproximar el cociente como:

$$\frac{\alpha_{j+2}}{\alpha_j} \approx \frac{2}{j}$$

Al obtener este resultado podemos inferir que la función (para  $j \gg 1$ ) es:

$$f(q) = e^{q^2}$$

Remplazando  $f(q)$  en  $\phi$ , y para  $j \gg 1$  se tiene:

$$\phi \rightarrow e^{\frac{q^2}{2}}$$

La función  $\phi$  no cumple con los requisitos de una función de onda, ya que no es acotada<sup>4</sup>.

Para evitar este inconveniente se propone truncar la serie de  $f(q)$  a partir de un valor  $j = n^5$ , y por lo tanto  $f(q)$  será un polinomio y no una serie infinita.

<sup>4</sup>Diverge para grandes valores de  $q$ .

<sup>5</sup>A grandes valores de  $j$   $f(q) \rightarrow e^{q^2}$  entonces  $f(q)$  no es una función de onda aceptable.

Por lo tanto si deseamos truncar la serie de  $f(q)$ , necesitamos que para un valor  $j = n$  se cumpla:

$$\frac{\alpha_{n+2}}{\alpha_n} = 0$$

Por lo tanto se pide que el numerador se haga cero, de tal manera que ocurra lo siguiente:

- Al truncar la serie a partir de un valor  $j = n$ , todos los coeficientes  $\alpha'_j$ , tal que  $j' > j = n$  serán igual a cero.
- El valor de  $n$  siempre es entero y positivo, por lo que limitara los valores que pueden tener la relación  $\frac{a}{b}$ .

Con lo anterior expuesto, analizamos que ocurre con el coeficiente  $\alpha_{n+2}$ , por lo tanto:

$$\alpha_{n+2} = 2n - \frac{a}{b} + 1 = 0$$

Ahora si remplazamos las variables:

$$a = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad b = \frac{m\omega_0}{\hbar}$$

Obtenemos:

$$2n + 1 = \frac{a}{b} = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \quad (2.4)$$

Despejando la energía obtenemos:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_0 \hbar \quad (2.5)$$

Este resultado nos muestra que la energía en un oscilador cuántico solo puede tomar valores discretos. Dichos valores están igualmente espaciados por un factor  $\frac{1}{2}\omega_0\hbar$ .

Cabe resaltar que para el estado fundamental  $n = 0$ , el sistema admite como energía mínima a un valor distinto de cero.

Al calcular  $\Delta E$  obtenemos lo siguiente:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_0 \hbar - \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \omega_0 \hbar = \hbar\omega_0$$

Remplazando  $\omega = \frac{\nu}{2\pi}$  obtenemos

$$\Delta E = h\nu$$

Que es la energía de intercambio entre las paredes de la cavidad y la radiación electromagnética, que había propuesto Plank para describir la radiación de cuerpo negro.



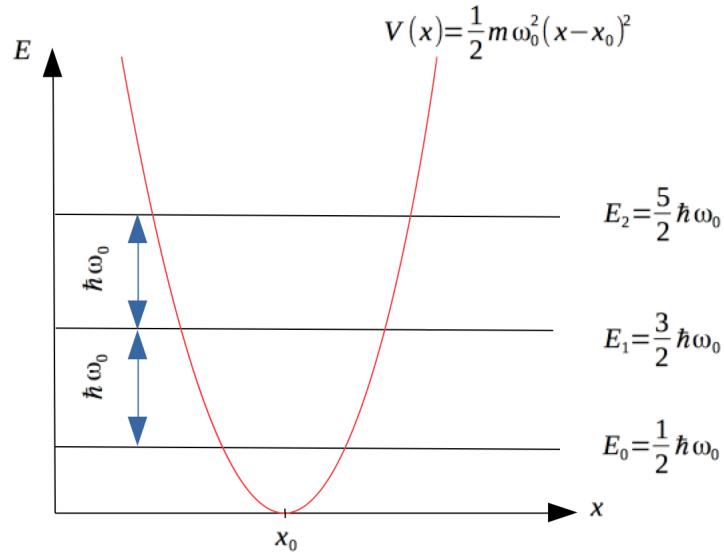


Fig 2.4: El valor de  $E_0$ , está calculado para  $n = 0$  se aprecia que es un valor distinto de 0. Luego la distancia entre los valores  $E_0$  y  $E_1$  es igual a  $\hbar\omega_0$ , lo mismo ocurre para la distancia entre  $E_1$  y  $E_2$ . Por lo tanto todas las distancias entre las energías  $E_n$  y  $E_{n+1}$  es  $\hbar\omega_0$ .

d)

Para obtener el valor medio de  $x$  en el estado fundamental ( $n = 0$ ) es necesario calcular la función de onda para el oscilador armónico. En el inciso anterior se llegó a demostrar que es necesario truncar la serie propuesta, para que ésta sea una función que cumpla con los requisitos de una función de onda. Por lo tanto partiendo de la ecuación (2.4) despejamos el valor de  $\frac{a}{b}$

$$\frac{a}{b} = 2n - 1$$

Ahora en la fórmula de recurrencia (2.3), remplazamos el valor de  $\frac{a}{b}$

$$\alpha_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} \alpha_j$$

Es importante recalcar que ésta ecuación solo vincula coeficientes con la misma paridad, *i.e.* los  $\alpha_0, \alpha_2, \alpha_4, \dots$  y los  $\alpha_1, \alpha_3, \alpha_5, \dots$  esto quiere decir que podemos separar al polinomio como una suma de su parte par e impar

$$f(q) = f_{par}(q) + f_{impar}(q)$$

Donde la solución par depende de  $\alpha_0$  y la impar de  $\alpha_1$ .

Como la solución debe ser normalizable, si  $n$  es par entonces  $\alpha_1 = 0$ , mientras que si  $n$  es impar entonces  $\alpha_0 = 0$ . La solución de paridad opuesta a  $n$  debe anularse, ya que de no hacerlo, ésta diverge y por tanto  $f(q)$  no sería una solución física del problema.

Hagamos una pequeña lista de lo que obtenemos:

- $n = 0 \rightarrow \alpha_1 = 0$  y  $f(q) = \alpha_0 \Rightarrow \phi_0(q) = \alpha_0 e^{-\frac{q^2}{2}}$
- $n = 1 \rightarrow \alpha_0 = 0$  y  $f(q) = \alpha_1 q \Rightarrow \phi_1(q) = \alpha_1 q e^{-\frac{q^2}{2}}$
- $n = 2 \rightarrow \alpha_1 = 0$  y  $f(q) = \alpha_0(1 - 2q^2) \Rightarrow \phi_2(q) = \alpha_0(1 - 2q^2)e^{-\frac{q^2}{2}}$

De esta forma podríamos seguir de manera indefinida, sin embargo debemos resaltar que las soluciones no están normalizadas, por lo tanto aún no obtenemos la solución.

Por otro lado tenemos los polinomios de Hermite

- $H_0(q) = 1$
- $H_1(q) = 2q$
- $H_2(q) = 4q^2 - 2$
- $H_3(q) = 8q^3 - 12q$

Estos polinomios se pueden hallar con la fórmula de Rodrigues:

$$H_n(q) = (-1)^n e^{q^2} \left[ \left( \frac{d}{dq} \right)^n e^{-q^2} \right] \quad (2.6)$$

Para verificar la ortogonalidad se tiene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(q) H_m(q) e^{-q^2} dq = \delta_{nm} \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (2.7)$$

Recordando que  $q = b^{\frac{1}{2}}x$ , normalizamos el factor  $e^{-\frac{q^2}{2}}$  de la siguiente manera:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} dx = \frac{b}{\pi}$$

Por lo tanto, reemplazando  $b$  obtenemos:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\sqrt{b}x) \sqrt{\frac{\pi}{b}} e^{-\frac{bx^2}{2}}$$

Finalmente podemos expresar la función  $\phi$  que es la solución para oscilador cuántico, podemos ver claramente que la solución depende del número cuántico  $n$ .

$$\phi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (2.8)$$

Ahora si estamos en condiciones de calcular el valor medio de  $x$  para el estado fundamental, ya que tenemos la forma funcional de  $\phi_0(x)$  que es:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

El valor medio de  $x$  lo podríamos calcular de la siguiente forma:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(x)^* x \phi_0(x) dx$$

Sin embargo, en este caso no es necesario ya que al calcular el módulo de  $\phi_0(x)$  obtenemos:

$$|\phi_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

Que tiene la forma de una distribución normal:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\langle x \rangle - x)^2}{2\sigma^2}}$$

Comparando ambas funciones podemos encontrar que:

$$\langle x \rangle = 0$$

Es decir que la posición media para en un oscilador armónico para el estado fundamental, es igual a cero.

### 2.2.3 Oscilador Armónico: 1.2.6

Para una partícula que está en un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$ , se encuentra que su función de onda para el estado fundamental es:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}x^2}$$

- a) Calcular  $\langle x \rangle$  y la desviación estándar para la posición de la partícula.
- b) Para caso particular del estado fundamental se tiene la siguiente relación:

$$E_0 = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0 \langle x^2 \rangle$$

Demuestre que se verifica el principio de indeterminación para el estado fundamental.

Ayuda:  $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\langle x \rangle - x)^2}{2\sigma^2}}$

**Solución:**

a) Para calcular  $\langle x \rangle$  basta con escribir la densidad de probabilidad

$$|\phi_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2}$$

A partir de esta función, podemos identificar los elementos que la componen (ya que es una distribución normal) por lo tanto

$$\langle x \rangle = 0$$

y la varianza

$$\sigma_x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$$

Siendo la desviación estándar la raíz cuadrada positiva de la varianza, encontramos:

$$\sigma_x = \left[\frac{\hbar}{2m\omega_0}\right]^{1/2}$$

b) Conociendo que  $\langle x \rangle = 0$ , para calcular la dispersión ( $\Delta x = \sigma_x$ ) tenemos:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

Por lo tanto encontramos que

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$$

Para verificar el principio de indeterminación, vamos a partir por medio la reducción del absurdo<sup>6</sup>. Es decir vamos a partir de que se puede demostrar que la energía del estado fundamental, corresponde con el principio de indeterminación.

En ese caso podemos escribir<sup>7</sup>

$$E_0 = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(\Delta x)^2$$

Es conocido el resultado los niveles de energía del oscilador armónico, por tanto para el estado fundamental tenemos

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

Por lo tanto al remplazar en la ecuación de la energía obtenemos:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_0 = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \frac{\hbar}{2m\omega_0}$$

<sup>6</sup>Existe otra forma un poco más directa que es por medio de la transformada de Fourier para llevar de  $\phi_0(x) \rightarrow \phi_0(\mathbf{k})$ , posteriormente se utiliza una relación de las distribuciones normales  $\sigma_x\sigma_k \geq 1$ , conociendo que  $k = p/\hbar$  es posible demostrar el principio.

<sup>7</sup>Esto se debe a que  $\langle x^2 \rangle = \Delta x^2$  y  $\langle p_x^2 \rangle = \Delta p_x^2$ . Esto último es porque  $\langle p_x \rangle = 0$ , se puede demostrar, pero en nuestro caso lo usamos como hipótesis.

De la cual despejando obtenemos:

$$\langle p_x^2 \rangle = \frac{\hbar m \omega_0}{2}$$

Finalmente si

$$(\Delta p_x)^2 = \frac{\hbar m \omega_0}{2}$$

Obtenemos:

$$\Delta p_x \Delta x = \sqrt{\frac{\hbar m \omega_0}{2} \frac{\hbar}{2m\omega_0}} = \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Con lo que queda demostrado que haciendo uso de la energía para el estado fundamental se verifica el principio de indeterminación.

Este es un resultado físico muy importante, ya que nos dice que la energía de un sistema descrito por un potencial de oscilador armónico, no puede tener un valor cero. Los sistemas físicos tales como los átomos en una red sólida o las moléculas poliatómicas en un gas, no puede tener energía cero incluso a la temperatura del cero absoluto. La energía del estado vibracional fundamental, es referida a menudo como "vibración de punto cero".

#### 2.2.4 Oscilador Armónico: 1.2.8

Para una partícula que está en un potencial  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ , se encuentra que su función de onda para el estado fundamental es:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}x^2}$$

a) Demostrar que se verifica

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

*Ayuda: Dada dos distribuciones normales se verifica que  $\sigma_1 \sigma_2 \geq 1$ . Realizar el cambio de variable  $\phi_0(x) \rightarrow \phi_0(p_x)$ .*

**Solución:**

a) El primer paso que debemos realizar, es considerar los elementos necesarios para realizar la demostración.

Por lo tanto necesitamos en primer lugar calcular las desviaciones estándar, es decir que:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ \sigma_{p_x} &= \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} \end{aligned}$$

Para el caso de las distribuciones normales tenemos  $\sigma_x = \Delta x$  y  $\sigma_{p_x} = \Delta p_x$ .

Es sabido que en estado fundamental de un oscilador armónico cuántico, se obtiene una distribución normal, por lo tanto construimos la densidad de probabilidad

$$|\phi_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2}$$

A partir de esta función, podemos identificar los elementos que la componen (ya que es una distribución normal) por lo tanto la varianza es

$$\sigma_x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$$

Finalmente encontramos que la dispersión en  $x$  es:

$$\Delta x = \left( \frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{1/2}$$

Para obtener  $\sigma_{p_x}$  tenemos dos caminos, el primero consiste en calcular<sup>8</sup>  $\langle p_x^2 \rangle$  y  $\langle p_x \rangle$  tal lo hace Eisberg[2], el segundo es utilizar el camino que nos sugiere la ayuda y es realizar un cambio de variable. Por el valor agregado que tiene realizar el camino sugerido, es que resolveremos por esta vía el problema.

Si recordamos la transformada de Furier para una función  $f(t)$  se tiene que<sup>9</sup>:

$$F(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-ist} dt$$

En el caso de funciones periódicas, se verifica que  $f(t+T) = f(t)$ , donde  $T$  es el período de la función. Cuando se realiza una transformada de Furier de  $f(t)$  desde el punto de vista matemático se realiza una transformación lineal de la función  $f(t)$  llevándola del espacio temporal ( $t$ ) a un espacio de frecuencias ( $s$ ). Entonces se paso de una función  $f(t)$  con un período  $T$  a una función  $F(s)$  con una frecuencia  $\nu = \frac{1}{T}$ , utilizando esto último como analogía<sup>10</sup> realizamos el siguiente planteo.

**Cuando tenemos una función de onda  $\phi(x)$  asociada a una partícula con una longitud de onda de De Broglie  $\lambda$ , y le realizamos una transformada de Fourier, obtenemos una función de onda  $\phi(k)$  con un número de onda  $\frac{1}{\lambda}$ .**

Por lo tanto:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{-ikx} dx$$

Es decir, que podemos obtener  $|\phi(k)|^2$  a partir de la transformada de Fourier. Cuando realizamos la transformada para el estado fundamental del oscilador armónico obtenemos:

$$\phi_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2} e^{-ikx} dx$$

<sup>8</sup>Aquí podemos observar que es directa la demostración.

<sup>9</sup>El factor  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$  puede variar en función de como se defina la transformada y la antitransformada, lo que siempre tiene que verificar es que en el caso unidimensional el producto de los factores (de la transformada y antitransformada) tiene que ser  $\frac{1}{2\pi}$ .

<sup>10</sup>Si se desea mejor detalles consultar Berkeley Physics Course - Vol 3 - Frank S. Crawford, Jr.

Cabe resaltar que la transformada de Fourier de una función gaussiana, es otra función gaussiana. Por lo tanto, a los fines de demostrar el principio de incertidumbre, no es necesario resolver analíticamente la transformada, ya que al construir  $|\phi_0(k)|^2$  podemos obtener  $\sigma_k$  y determinar que  $\langle k \rangle = 0$ . Entonces:

$$\sigma_k = \Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle}$$

Como  $p_x = \hbar k$  encontramos que:

$$\Delta k = \Delta p_x / \hbar$$

Por lo tanto se verifica que :

$$\sigma_x \sigma_k \geq 1$$

Entonces:

$$\Delta x \Delta k = \Delta x \Delta p_x / \hbar \geq 1$$

Con lo que queda demostrado el principio de indeterminación a partir del oscilador armónico

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

*Nota: No debe tomarse como una demostración final, ya que el principio de indeterminación fue formulado antes que la teoría ondulatoria.*

## 2.3 Teoría Ondulatoria en Átomos Hidrogenoides

En ésta sección se abordarán diferentes problemas planteados para átomos hidrogenoides, en el cual se resuelven mediante la teoría ondulatoria. Los ejercicios en general están desarrollados en manera bien detallada. Se siguen utilizando algunos resultados generales obtenidos anteriormente, como el caso en que cada vez que se tenga un potencial estacionario, podemos dejar de lado la parte temporal y enfocarnos en la resolución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. El resultado de algunas integrales pueden verificarse mediante la tabla prevista en el Apéndice (B.2).

### 2.3.1 Átomos Hidrogenoides: 1.3.1

Para un átomo de Hidrógeno:

- Escriba la probabilidad de encontrar a  $e^-$  en el estado  $2s$  en un diferencial de volumen.
- Grafique la densidad de probabilidad radial del estado  $2p$ , indique los valores máximos y mínimos de la densidad de probabilidad.
- Calcular el valor medio de  $r$  para el estado  $2p_0$ . ¿Cambia este valor para el  $\text{He}^+$ ?
- ¿Cuál es la probabilidad de encontrar un electrón en el primer octante para el estado  $2p_{-1}$ .
- ¿Cuál tiene mayor valor  $A$  ó  $B$ ? ¿Por qué son esperable esos valores? ¿Qué implicancia tiene los

resultados obtenidos?

$$A = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta R_{2,1}(r) Y_{1,0}(\theta, \phi) R_{3,2}(r)^* Y_{2,2}(\theta, \phi)^* dr d\theta d\phi \quad (2.9)$$

$$B = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta R_{1,0}(r) Y_{0,0}(\theta, \phi) R_{2,1}(r)^* Y_{1,-1}(\theta, \phi)^* dr d\theta d\phi \quad (2.10)$$

### Solución

a)

En primer lugar es necesario identificar los números cuánticos:

$$2s \Rightarrow n = 2; l = 0; m_l = 0$$

La probabilidad de encontrar a  $e^-$  en un  $dV = dx dy dz$  está dado por la densidad de probabilidad en un  $dV$ , por lo tanto:

$$dP = \rho dV = |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$$

Si realizamos un cambio de variable para pasar de coordenadas rectangulares  $(x, y, z)$  a coordenadas esféricas  $(r, \theta, \phi)$  :

$$|\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz \xrightarrow{(r, \theta, \phi)} |\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

El término extra  $(r^2 \sin\theta)$  es el Jacobiano de la transformación, es un término que aparece ya sea por la contracción o expansión de la función (en éste caso  $|\Psi|^2$ ) en un punto  $P$ .

El valor de  $\Psi$  en esféricas está dado por:

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

De tal manera es posible se define la densidad de probabilidad como:

$$|\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = \frac{1}{32\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/a_0} r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

Para demostrar que finalmente es una densidad de probabilidad, es necesario mostrar que es una función normalizada, dado que los polinomios dados estan normalizados, el producto tambien tiene que estar normalizado.

Que la función este normalizada en todo el dominio, implica certeza, es decir que la partícula existe en el espacio de integración.

b)

La densidad de probabilidad radial del estado 2p está dado por:



$$\rho_{2p}(r)dr = |R_{2,1}(r)|^2 r^2 dr = r^4 \frac{1}{24} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^5 e^{-Zr/a_0} dr$$

Haciendo un cambio de variable  $x = Zr/a_0$  y  $dx = drZ/a_0$ , re escribimos la densidad de probabilidad:

$$\rho_{2p}(x)dx = \frac{1}{24} x^4 e^{-x} dx$$

Al ser una nueva función de densidad de probabilidad es necesario mostrar su normalización. Sabemos que si  $r \rightarrow \infty$  entonces  $x \rightarrow \infty$  y si  $r \rightarrow 0$  entonces  $x \rightarrow 0$ , haciendo un cambio de variable  $4 = n - 1 \Rightarrow n = 5$

$$\frac{1}{24} \int_0^\infty x^4 e^{-x} dx = \frac{1}{24} \Gamma(5) = \frac{\Gamma(4+1)}{24} = \frac{4!}{24} = 1$$

Podemos ver que el cambio de variable no afecta la normalización de la función. Definimos la función de probabilidad como la integral de la función de densidad de probabilidad

$$P(x = X) = \frac{1}{24} \int_0^X x^4 e^{-x} dx$$

Si deseamos graficar la densidad de probabilidad, podemos hacerlo de varias formas, pero al pedirnos los valores máximos y mínimos, debemos hacerlo mediante el cálculo de los extremos de la función.

Al ser la densidad una función acotada, sabemos que para  $x \rightarrow 0$  y  $x \rightarrow \infty$ , la densidad debe ser cero o al menos un valor acotado, es fácilmente demostrable que para estos valores la función tiende a cero, por lo tanto debe existir al menos un máximo en la función de probabilidad, por lo tanto extremamos  $P(x = X)$

$$\frac{d}{dx} P(x = X) = \frac{1}{24} \frac{d}{dx} \int_0^X x^4 e^{-x} dx = \frac{1}{24} \int_0^X \frac{d}{dx} [x^4 e^{-x}] dx = 0$$

Para que la integral sea cero, el integrando tiene que ser cero, por lo tanto nos basta con extremar el integrando (la densidad de probabilidad), para este caso:

$$\frac{d}{dx} [x^4 e^{-x}] = 4x^3 e^{-x} - x^4 e^{-x} = x^3 (4 - x) e^{-x} = 0$$

Dado que ya hicimos los análisis para  $x \rightarrow 0$  y  $x \rightarrow \infty$ , podemos afirmar que  $x = 4$  es un máximo.

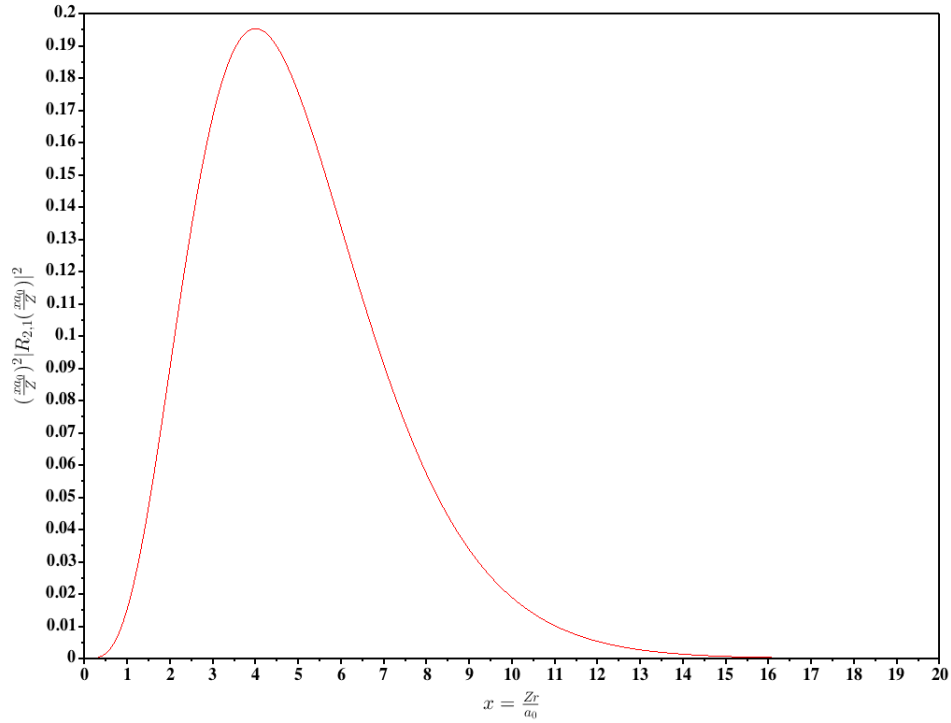


Fig 2.5:  $x = 4$  es un máximo, para  $x \rightarrow 0$  y  $x \rightarrow \infty$  la función es cero. Entonces  $r_{max} = \frac{4a_0}{Z}$

c)

Al igual que antes, es necesario en primer lugar reconocer los números cuánticos

$$2p_0 \Rightarrow n = 2; l = 1; m_l = 0$$

Una vez identificado los números cuánticos, asociamos las funciones  $R_{n,l}$  y  $Y_l^{m_l}$  correspondientes

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

El cálculo del valor medio de  $r$  para el estado  $2p_0$ , no se ve afectado por el armónico esférico  $Y_1^0$ , ya que el radio medio no se calcula en función de las coordenadas  $(\theta, \phi)$ , sabiendo que las funciones están normalizadas (en el inciso anterior vimos que al cambio de variable la función estaba normalizada, por lo tanto las funciones radiales también, es de esperar ya que son funciones de estados del hidrógeno) procedemos a demostrar que el valor medio es:

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r |R_{2,1}(r)|^2 r^2 dr$$

Anteriormente encontramos que la función  $r^2 |R_{2,1}(r)|^2 dr = \frac{1}{24} x^4 e^{-x} dx$ , siendo  $x = Zr/a_0$ , por lo tanto re-escribiendo obtenemos:

$$\langle r \rangle = \frac{1}{24} \frac{a_0}{Z} \int_0^\infty x^5 e^{-x} dx$$

Utilizando propiedades de la función Gamma (ver Apéndice), se resuelve para  $5 = n - 1 \Rightarrow n = 5 + 1$  por lo tanto:

$$\langle r \rangle = \frac{1}{24} \frac{a_0}{Z} \Gamma(5 + 1) = \frac{1}{24} \frac{a_0}{Z} 5\Gamma(4 + 1) = \frac{5}{24} \frac{a_0}{Z} 4! = \frac{5a_0}{Z}$$

El radio medio es  $\langle r \rangle = \frac{5a_0}{Z}$ , al ser una función del número atómico, no es el mismo valor para  $\text{He}^+$ . Se aprecia claramente que el radio medio y el radio máximo, tienen valores muy cercanos, por lo que podemos apreciar, que el modelo de Bhor daba valores muy cercanos a los del modelo ondulatorio.

d)

Aunque en este punto ya resulte tedioso, es necesario nuevamente iniciar con la identificación de los números cuánticos, ya que es la forma correcta de encarar este tipo de ejercicios.

$$2p_{-1} \Rightarrow n = 2; l = 1; m_l = -1$$

A diferencia de los incisos anteriores en este caso sólo debemos concentrarnos en los armónicos ya que:

$$\begin{aligned} P &= \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \rho_{2p-1}(r, \theta, \phi) dr d\theta d\phi = \int_0^\infty \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} |\Psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \int_0^\infty r^2 |R_{2,1}(r)|^2 dr \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \sin \theta |Y_{1,-1}(\theta, \phi)|^2 d\theta d\phi \end{aligned}$$

La integral radial es idénticamente igual a 1, por lo tanto siendo

$$|Y_{1,-1}(\theta, \phi)|^2 = Y_{1,-1}(\theta, \phi) Y_{1,-1}^*(\theta, \phi) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$$

Resolviendo la parte angular obtenemos:

$$P = \frac{3}{8\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta d\phi = \frac{3}{8\pi} \frac{\pi}{2} \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta = \frac{3}{8\pi} \frac{\pi}{2} \frac{2}{3} = \frac{1}{8}$$

De esta forma encontramos que  $P = \frac{1}{8}$

e)

Ambos valores son cero. Al ser una integral en todo el espacio de armónicos esféricos no conjugados, el valor es cero, ya que sabemos que los  $Y_{l,m_l}$  son ortonormales. Podemos aseverar que las funciones de estados del electrón en el átomo de hidrogeno son representada mediante funciones ortonormales.

### 2.3.2 Átomos Hidrogenoides: 1.3.2

a) Escriba la densidad de probabilidad para el estado 2s del H ¿ Este función cambia para un ión doblemente ionizado de Li?

b) Calcular el valor del potencial eléctrico medio de un electrón en el estado 1s para el átomo de hidrogeno, y la energía cinética media del electrón.

c) ¿Cual es la probabilidad de encontrar al electrón a una distancia mayor a  $a_0$  en el estado fundamental del átomo de hidrogeno?

**Solución**

a)

La densidad de probabilidad se define como:

$$dP(\bar{x}) = |\Psi(\bar{x})|^2 dx dy dz$$

Donde  $|\Psi(\bar{x})|^2 = \Psi(\bar{x})\Psi(\bar{x})^*$ , realizando el cambio de coordenadas cartesianas a esféricas:

$$dP = |\Psi(\bar{x})|^2 dx dy dz \xrightarrow{(r, \theta, \phi)} dP = |\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

Para el estado 2s del átomo de H, los números cuánticos correspondientes son:

$$n = 2; l = 0; m_l = 0$$

Por lo tanto la función de onda correspondiente al estado 2s es  $\Psi_{2,0,0} = R_{2,0}(r)Y_{0,0}(\theta, \phi)$ , escribiendo la densidad de probabilidad obtenemos

$$dP = \frac{1}{8} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \left( 2 - \frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/a_0} \frac{1}{4\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

Para verificar que la última ecuación es una función de densidad de probabilidad, es necesario verificar que es una función normalizada. Para ello verificamos que:

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dP = 1$$

Una alternativa es asegurar que las funciones de  $R_{n,l}(r)$  y  $Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$  son funciones normalizadas, por lo tanto su producto también lo es.

La función de densidad de probabilidad tiene como parámetro el valor  $Z$ , en el litio doblemente

ionizado (cumple con el criterio de átomo hidrogenoide) tiene un  $Z=3$ . Por lo tanto la función cambia en un factor proporcional a  $Z$ , por lo tanto no es la misma función, sin embargo la normalización de  $dP$  aún se mantiene.

b)

Para el correcto planteo es necesario calcular el valor medio de la magnitud  $\frac{1}{\bar{r}}$ . En la bibliografía recomendada<sup>11</sup> puede encontrarse la siguiente definición

$$\bar{V} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm_l}^* \left( -\frac{Ze^2}{r} \right) \psi_{nlm_l} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = -Ze^2 \left( \frac{1}{\bar{r}} \right)$$

Donde es posible demostrar que el potencial eléctrico<sup>12</sup> es:

$$\bar{V} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{\hbar^2 n^2}$$

En el siguiente ejemplo vamos a realizar las cuentas necesarias para obtener dicho resultado. Hacer uso de las fórmulas finales es aceptable siempre en cuando se justifique cada paso.

Para el estado 1s calculamos  $V(\bar{r})$  (en M.K.S), por lo tanto

$$V(\bar{r}) = \int_0^\infty \left( \frac{-k_e Ze}{r} \right) |R_{1,0}(r)|^2 r^2 dr = -k_e Ze \int_0^\infty r |R_{1,0}(r)|^2 dr$$

En definitiva el problema se reduce a calcular:

$$\frac{1}{\bar{r}} = \int_0^\infty r |R_{1,0}(r)|^2 dr = 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_0^\infty r e^{-2Zr/a_0} dr$$

Usando el cambio de variable  $u = 2Zr/a_0$ ,  $du = 2Zdr/a_0$ , y si  $r \rightarrow \infty$  entonces  $u \rightarrow \infty$ , por lo tanto

$$\frac{1}{\bar{r}} = 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_0^\infty r e^{-2Zr/a_0} dr = \left( \frac{Z}{a_0} \right) \int_0^\infty u e^{-u} du$$

Utilizando el cambio de variable en  $u^{n-1}=1$ , se obtiene un  $n=2$ , por lo que el resultado de la integral es una función gamma  $\Gamma(2)$ , cuyo valor es igual a 1. Finalmente encontramos que

$$\frac{1}{\bar{r}} = \frac{Z}{a_0}$$

Podemos apreciar que el valor  $\frac{1}{\bar{r}}$  no es idénticamente igual al valor de  $\bar{r}$ , pero si se mantiene en el mismo orden. Por lo tanto el potencial eléctrico para el estado 1s del átomo de H es:

$$V(\bar{r}) = -k_e \frac{e}{a_0}$$

<sup>11</sup>Fundamentos de Física Moderna - R. M. Eisberg

<sup>12</sup>Aquí se está usando el sistema de unidades del Eisberg

Para el cálculo de la energía cinética del electrón en el estado 1s, partimos de la deficiencia total del electrón

$$E_n = -\frac{Z}{n^2} 13.6 \text{ eV} = T + U(\bar{r})$$

Donde  $U(\bar{r}) = e.V(\bar{r})$ <sup>13</sup>, en este caso podemos obtener la energía cinética mediante:

$$T = -\frac{Z}{n^2} 13.6 \text{ eV} - U(\bar{r})$$

Remplazando

$$T = -13.6 \text{ eV} + e \times 14.3996 \times 10^{-10} \frac{\text{eVm}}{\text{e}^2} \frac{e}{5.291 \times 10^{-11} \text{ m}} = -13.6 \text{ eV} + 27.21 \text{ eV} \approx 13.6 \text{ eV}$$

c)

Utilizando la densidad de probabilidad radial para el estado 1s se obtiene:

$$P(r = X) = 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_0^r r^2 e^{-2Zr/a_0} dr$$

Para  $X \rightarrow \infty$  se tiene la certeza, por lo tanto si nos pide la probabilidad de encontrar el electrón para distancias mayores a  $a_0$  se tiene:

$$1 = 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_0^{a_0} r^2 e^{-2Zr/a_0} dr + 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_{a_0}^{\infty} r^2 e^{-2Zr/a_0} dr = P(r \leq a_0) + P(a_0 < r)$$

Por lo tanto

$$P(r \leq a_0) = 4 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^3 \int_{a_0}^{\infty} r^2 e^{-2Zr/a_0} dr$$

Utilizando los cambios de variable  $u = 2Zr/a_0$ ,  $du = 2Zdr/a_0$ , y si  $r \rightarrow \infty$  entonces  $u \rightarrow \infty$ , además si  $r \rightarrow a_0$  entonces  $u \rightarrow 2Z$

$$P(r \leq a_0) = \frac{1}{2} \int_{2Z}^{\infty} u^2 e^{-u} du = \frac{1}{2} \left( \left[ \frac{u^2 e^{-u}}{-1} \right]_{2Z}^{\infty} + \int_{2Z}^{\infty} u e^{-u} du \right)$$

Integrando por partes una vez más y resolviendo para  $Z=1$

$$P(r \leq a_0) = \frac{1}{2} \left( \left[ \frac{u^2 e^{-u}}{-1} \right]_{2Z}^{\infty} + \left[ \frac{u e^{-u}}{-1} \right]_{2Z}^{\infty} + \int_{2Z}^{\infty} e^{-u} du \right) = 5e^{-2} \approx 0.66$$

**Los invito a verificar todas las cuentas**

<sup>13</sup>En Física II usualmente se la define como  $U_r = -q.V(r)$ . Pero en este caso tenemos el sistema de referencia tal que la energía total es negativa, que es lo mismo decir el trabajo del universo al sistema y no del sistema al universo, como estamos acostumbrados

### 2.3.3 Átomos Hidrogenoides: 1.3.3

- a) Explique brevemente el efecto Zeeman.
- b) Determine el momento magnético de un electrón que se mueve en una orbita elíptica (Modelo de Sommerfeld).
- c) Calcule la frecuencia a la cual el momento magnético  $\vec{\mu}$  da lugar a su precesión en un campo magnético  $\vec{B}$  ¿ Es posible medir esta frecuencia mediante un espectroscopio?

#### Solución

- a) Clásicamente se sabe que un dipolo magnético, sometido a un campo magnético externo tiene un torque  $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ , el sistema tiene un potencial  $E_B$  que es igual al trabajo realizado por el momento de torsión, de tal modo

$$E_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Haciendo uso del modelo de Bohr, para un electrón que orbita alrededor del núcleo, se tiene que:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Utilizando la mecánica ondulatoria se demostró que  $\vec{L}$  no puede tomar un módulo y dirección arbitrario, si no que debe tomar ciertos valores, a lo que llamamos cuantización espacial.  $\vec{L}$  está orientado de tal manera que  $L_z$  sólo puede tomar los siguientes valores:

$$L_z = m_l \hbar$$

Supongamos que un átomo hidrogenoide se coloca en un campo magnético  $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ , la energía del electrón está dada por su energía de enlace y la energía de interacción entre el impulso orbital del electrón y el campo externo. Por lo tanto

$$E = E_n + E_B = E_n + m_l \frac{e\hbar}{2m_e} B_0 = E_n + m_l \mu_B B_0$$

Donde definimos el magnetón de Bohr como:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}$$

Como hay más niveles de energías discreto disponibles después de que se activa el campo  $\vec{B}$ , habrá más líneas en el espectro observado. Sin embargo se puede demostrar que únicamente serán visibles las transiciones tales que cumplan con la regla de selección

$$\Delta l = \pm 1 \quad \Delta m_l = \pm 1, 0$$

Por lo tanto, para calcular las energías de las transiciones eléctricas dipolares se tiene:

$$\Delta E = \Delta E_{n_i, n_f} \pm \mu_B B_0$$

Donde  $\Delta E_{n_i, n_f}$  es la transición de campo cero.

Analizando la ecuación se puede observar que debido a la regla de selección, sólo hay desdoblamiento en las líneas espectrales observadas.

b) Un electrón que se mueve en una trayectoria elíptica producira una corriente dada por

$$I = \text{carga del electrón} \times \text{frecuencia del electrón}$$

El momento magnético está dado por

$$\vec{\mu} = IA\hat{n}$$

Siendo  $\hat{n}$  el versor normal de la superficie A. Usando el período en vez de la frecuencia tenemos

$$|\vec{\mu}| = \frac{e}{T}A$$

El momento angular es:

$$|\vec{L}| = mr^2 \frac{d\theta}{dt}$$

Para la elipse se tiene que:

$$dA = \frac{1}{2}r^2 d\theta$$

Siendo  $\frac{dA}{dt}$  constante en la mecánica clásica para fuerzas centrales

$$|\vec{L}| = 2m \frac{dA}{dt} = 2m \frac{A}{t}$$

Entonces para  $t=T$ , tenemos  $A = \frac{|\vec{L}|}{2m}T$ , reemplazando el momento magnético

$$|\vec{\mu}| = \frac{e}{T} \frac{|\vec{L}|T}{2m} = \frac{e}{2m} |\vec{L}|$$

Finalmente

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

Que es el mismo resultado para una orbita circular (modelo de Bohr).

c) Sabiendo que el torque del electrón es

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -\frac{e}{2m} \vec{L} \times \vec{B}$$



El torque causará un cambio en el momento de tal forma que

$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt} = -\frac{e}{2m} \vec{L} \times \vec{B}$$

El cambio en  $\vec{L}$ ,  $d\vec{L}$  es perpendicular a  $\vec{L}$  y  $\vec{B}$ , dando como resultado una precesión de  $\vec{L}$  respecto a la dirección de  $\vec{B}$ .

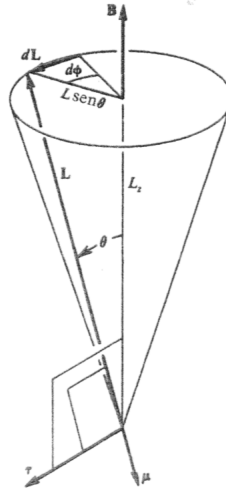


Fig 2.6: Esquema de la variación del momento angular

Siendo  $\theta$  el ángulo relativo entre  $\vec{L}$  y  $\vec{B}$  se puede calcular la variación  $d\vec{L}$  en función de la variación angular  $d\phi$ , por lo tanto

$$d\phi = \frac{|d\vec{L}|}{|\vec{L}| \sin \theta}$$

Por lo tanto obtenemos la frecuencia de precesión como:

$$\omega_p = \frac{d\phi}{dt} = \frac{\left| \frac{d}{dt} \vec{L} \right|}{|\vec{L}| \sin \theta} = \frac{\frac{e}{2m} |\vec{L}| |\vec{B}| \sin \theta}{|\vec{L}| \sin \theta} = \frac{e}{2m} |\vec{B}|$$

El resultado encontrado se conoce como precesión de Larmor, y  $\omega_p$  es igual a la diferencia de frecuencia observada en el efecto Zeeman, por lo tanto es una magnitud mensurable en un espectroscopio.

### 2.3.4 Átomos Hidrogenoides: 1.3.4

Para resolver este problema, toda la explicación está en el Alonso, solo que se lo hace para el H. En este caso al ser  $\text{He}^+$  se utiliza un  $Z=2$  para las cuentas.

En un átomo de  $\text{He}^+$  que se encuentra en presencia de un campo magnético  $B$  uniforme igual a 5 Tesla.

Despreciar la interacción spin-órbita.

a) Analice las posibles transiciones  $3p \rightarrow 2s$ .

En la sección 3.6 (Efecto Zeeman) se hace un análisis de las transiciones  $p \rightarrow s$ .

b) De todas las posibles transiciones  $3p \rightarrow 2s$  que se obtuvieron, determine cuántas se observan como distintas y calcule la longitud de onda asociada a esas transiciones.

Las líneas espectrales estarán en función de la regla de selección  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ . Por lo tanto de todas las transiciones posibles, se observan como distintas 3 líneas espectrales.

## 2.4 Elementos de la Mecánica Estadística

### 2.4.1 Estadística de Maxwell: 1.4.1

Un circuito LC ideal en serie ( $R = 0$ ), se encuentra a una temperatura  $T$ . Calcule el valor medio cuadrático (valor eficaz) inducido en el inductor, debido a las fluctuaciones térmicas aplicando el teorema de equipartición.

#### *Solución*

La energía de un inductor  $L$  es

$$E = \int_0^I V_L i dt = \int_0^I L i di = \frac{1}{2} L I^2$$

Si se aplica el teorema de equipartición

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} L \langle I^2 \rangle = \frac{1}{2} kT$$

En un circuito LC ideal en serie, se tiene que la frecuencia de resonancia es:

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$$

De esta forma, al saber que las corrientes y el voltaje son senoidales, con frecuencia angular  $\omega_0$ . Entonces la magnitud del voltaje  $V_L$ , está relacionado con la magnitud de la corriente  $I$  (ley de inducción), que pasa por el inductor, de tal forma

$$V_L = \omega_0 L I$$

Por lo tanto

$$\langle V_L^2 \rangle = (\omega_0 L)^2 \langle I^2 \rangle$$

Finalmente encontramos que

$$\langle V_L^2 \rangle = \omega_0^2 L k T \rightarrow V_{Lmc} = \omega_0 \sqrt{L k T} = \sqrt{\frac{k T}{C}}$$

Siendo  $V_{Lmc}$  el voltaje inducido debido a las fluctuaciones térmicas.

### 2.4.2 Estadística de Fermi: 1.4.2

Para un gas ideal de  $N$  electrones en un volumen  $V$  de Cu:

- Calcular la energía de Fermi.
- Calcular la energía total  $U$  a  $T=0$ .
- Calcular la presión del gas a  $T=0$ .

**Solución**

a)

Deducción pag 257-258 del Alonso[6]

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m_e} \left( \frac{3n_0}{\pi} \right)^{2/3}$$

El valor de  $n_0 = n_v N/V$ , donde  $n_v$  son los electrones de la banda de valencia, en el caso de metales (como en éste caso el Cu) éste valor es igual 1. Entonces al ser la relación uno a uno entre la cantidad de electrones de valencia (electrones del gas) y la cantidad de átomos de Cu:

$$\frac{N}{V} = \frac{N_A}{A} \rho_{Cu}$$

Donde  $N_A$  es el número de Avogadro ( $6.0022 \times 10^{23}$  part/mol),  $A$  es la masa atómica (para el Cu 63.54 gramos/mol) y  $\rho_{Cu}$  la densidad del cobre (8.6 gramos/cm<sup>3</sup>), por conveniencia se toma un valor de  $V = 1$  cm<sup>3</sup>. Remplazando cada uno de los valores se obtiene una energía de Fermi para el Cu:

$$\epsilon_F = 4.07 \text{ eV}$$

b)

La energía total  $U$  está dad por

$$U = \int E dn = \int E \frac{dn}{dE} dE$$

Para  $T=0$  y para energía menores a las de Fermi el factor de ocupación es igual a 1, por lo tanto

$$\frac{dn}{dE} = \frac{8\pi V \sqrt{(2m_e^3)} E^{1/2}}{h^3}$$

Integrando entre 0 y  $\epsilon_F$  (ya que para  $E > \epsilon_F$  el factor de ocupación es cero)

$$U = \frac{8\pi V \sqrt{(2m_e^3)}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} E^{3/2} dE = \frac{16\pi V \sqrt{(2m_e^3)}}{5h^3} \epsilon_F^{5/2}$$

Teniendo el dato de que  $\epsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3N}{\pi V}\right)^{2/3}$  se obtiene:

$$U = \frac{3}{5} N \epsilon_F$$

c)

Al tener la energía total del sistema, estamos en condiciones de utilizar la ecuación para la presión prevista en el parcial  $PV = \frac{2}{3}U$ , la presión está dada por:

$$P = \frac{2}{3} \frac{U}{V} = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \epsilon_F$$

Es decir que a  $T=0$ , existe una presión del gas de electrones (distinta de cero) que está íntimamente relacionada con la energía de Fermi. Es un resultado diferente a lo que se puede encontrar desde un punto de vista clásico.

### 2.4.3 Elementos de la teoría de Sólidos: 1.4.3

a) Explique: ¿Por qué los sólidos covalentes son transparentes a la luz visible?

b) Explique los diferentes enlaces moleculares y sus características.

*Solución:*

a)

Las energías de excitación electrónica de sólidos covalentes son del orden de unos pocos eV (la primera energía de excitación del diamante es de 6 eV). Dicha energía es muy grande en comparación a la energía de agitación térmica (del orden de  $kT$ , en temperatura ambiente es de  $2.4 \times 10^{-2}$  eV), por lo que la mayoría de los sólidos covalentes están en su estado fundamental. Por lo tanto muchos de los sólidos covalentes son transparente a la luz visible (por ejemplo el diamante), debido a que la diferencia entre su primer estado electrónico y el fundamental es mayor que las energías de los fotones del visible, que están en un intervalo de 1.7 y 3.1 eV.

b)

El tema es bastante amplio y se estaba orientado a analizar la capacidad del alumno de asimilar y poder describir diferentes enlaces moleculares haciendo uso de las funciones de onda, algo que en materias anteriores (Elementos de Fisicoquímica) se hacía solo de una manera coloquial.

Los enlaces entre dos átomos se puede dar de diferentes formas, pero vamos a suponer que la función

de onda electrónica en la molécula puede expresarse como una combinación lineal de los orbitales atómicos. Por lo tanto solo se admite dos tipos de funciones de onda, las simétricas ( $\Psi_s$ ) y las antisimétricas ( $\Psi_a$ ). Dependiendo del tipo de molécula que se desee formar (homonucleares ó heteronucleares) dependerá la característica del enlace a formar. Los niveles s y p se combinan para producir orbitales moleculares  $\sigma$  y  $\pi$  (en moléculas diatómicas homonucleares), la función de onda radial modula los orbitales moleculares. Un ejemplo de molécula homonuclear es la molécula de H, ya que ésta es diatómica.

---

## Parte 3

# Ejercicios complementarios

En éste capítulo se presentan diversos ejercicios correspondientes a los distintos temas de la asignatura. A diferencia de los capítulos propuestos, los ejercicios aquí presente tienen sus respuestas (en la mayoría de los casos) en el Apéndice C y su aporte es más del todo operativo.

### 3.1 Fundamentos de la mecánica cuántica

#### 3.1.1 Ejercicio

Expresar la energía de un fotón en electronvolts en función de su longitud de onda dada en metros. Usar el resultado para obtener la longitud de onda de los rayos X en función del voltaje de aceleración aplicado a un tubo de rayos X.

#### 3.1.2 Ejercicio

En una experiencia de laboratorio se utiliza una fuente de longitud de onda variable, un ánodo de Li y se obtienen los siguientes datos de voltaje de frenado:

$V_0$ [eV]	$\lambda$ [nm]
6.29	400
5.95	450
5.67	500
5.45	550
5.26	600
5.1	650
4.97	700

a) Calcular la función de trabajo y la longitud de onda de corte del material usado. ¿En qué rango del espectro está la longitud de onda de corte? Realice la gráfica correspondiente

- b) Si se cambia el material del ánodo por uno de Cu, cuyo  $\phi = 4.7 \text{ eV}$ , calcular la velocidad máximas de los electrones expulsados cuando se hace incidir radiación ultravioleta de onda corta (UVC) de longitud de onda  $\lambda = 220 \text{ nm}$ .
- c) Describa brevemente el efecto fotoeléctrico.
- d) Explique cualitativamente la diferencia fundamental entre el efecto fotoeléctrico y el efecto Compton.

### 3.1.3 Ejercicio

Dada la siguiente Figura:

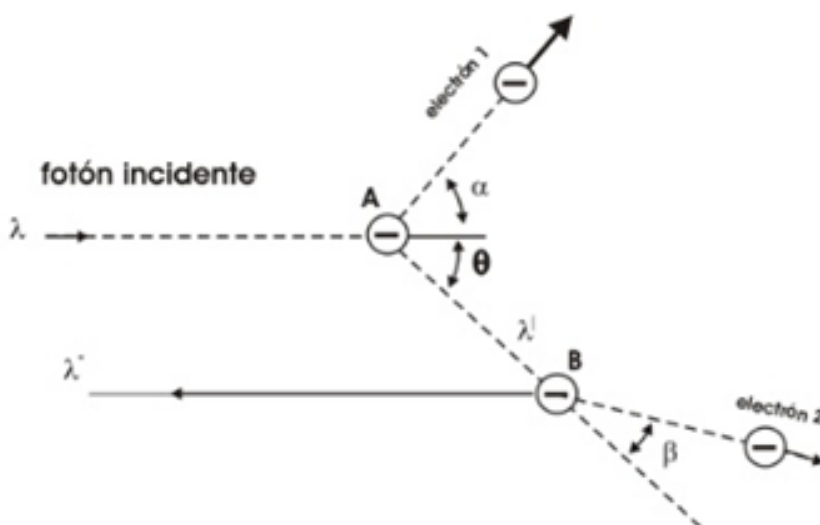


Figura 3.1: Dispersión de fotones

Un fotón que tiene una longitud de onda  $\lambda$  dispersa a un electrón libre en **A** produciendo un segundo fotón que tiene una longitud de onda  $\lambda'$ . Este fotón dispersa después otro electrón libre en **B** produciendo un tercer fotón con longitud de onda  $\lambda''$  que se mueve en dirección opuesta al fotón original, tal como se muestra en la Figura 1. Determine el valor numérico  $\Delta\lambda = \lambda'' - \lambda$ .

### 3.1.4 Ejercicio

- a) ¿Cuál es el tamaño de una rendija que se necesita para difractar electrones cuya energía cinética es de  $2 \text{ eV}$ ?
- b) Calcular la longitud de onda de De Broglie de un electrón cuya velocidad es  $1.4 \times 10^3 \text{ cm/s}$ .
- c) Calcular en que rango del espectro están las transiciones  $n_i = 4 \rightarrow n_f = 2$ , en un ión positivo del átomo de He.
- d) Explique a que tipo de átomos puede aplicarse la teoría de Bohr.

### 3.1.5 Ejercicio

Luz ultravioleta de longitud de onda  $\lambda = 350$  nm incide sobre una superficie de potasio; se observa que la energía máxima de los fotoelectrones emitidos es de 1.6 eV. Calcule la función de trabajo del potasio.

### 3.1.6 Ejercicio

Demostrar que la energía máxima que puede perder un fotón de Rx incidente de energía  $E_0$ , que colisiona con un electrón en reposo es:

$$\Delta E_{max} = \frac{2E_0^2}{m_e c^2 + 2E_0}$$

### 3.1.7 Ejercicio

Demuestre que utilizando la regla de cuantización de Wilson-Sommerfeld para calcular los niveles permitidos de energía para una pelota de masa  $m$  que rebota elásticamente en la dirección vertical, se obtiene que es:

$$E_n = \left( \frac{9}{8} \pi^2 m g^2 \hbar^2 n^2 \right)^{1/3} = E_1 n^{2/3}$$

## 3.2 Mecánica Ondulatoria

### 3.2.1 Ejercicio

Considere la siguiente distribución Gaussiana

$$f(x) = A e^{-\lambda(x-a)^2}$$

Donde  $A, a, \lambda$  son constantes.

- Determine el valor de  $A$ .
- Encuentre  $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle$  y  $\sigma$ .

### 3.2.2 Ejercicio

A tiempo  $t = 0$  una partícula es representada por la siguiente función de onda

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ax/a, & \text{si } 0 \leq x \leq a \\ A(b-x)/(b-a), & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0, & \text{c.o.c} \end{cases}$$



Donde  $A, a$  y  $b$  son constantes.

- a) Normalize  $\Psi(x)$
- b) Realice un esquema de la función.
- c) ¿Dónde es mas probable encontrar la partícula a tiempo  $t = 0$ ?
- d) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula para  $x < a$ ?
- e) Calcular  $\langle x \rangle$ .

### 3.2.3 Ejercicio

Considere la siguiente función de onda

$$\Psi(x, t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{i\omega t}$$

Donde  $A, \lambda$  y  $\omega$  son parámetros positivos y reales.

- a) Normalize  $\Psi(x, t)$
- b) Calcular  $\langle x \rangle$  y  $\langle x^2 \rangle$ .
- c) Calcular la desviación estándar y realice un esquema.

### 3.2.4 Ejercicio

Una partícula de masa  $m$  está tiene una función de estado

$$\Psi(x, t) = Ae^{-a[(mx^2/\hbar)+it]}$$

Donde  $A$  y  $a$  son parámetros positivos y reales.

- a) Encuentre el valor de  $A$ .
- b) Encuentre la función  $V(x)$  que permite obtener a  $\Psi(x, t)$  a partir de la ecuación de Shrödinger.

### 3.2.5 Ejercicio

Para el potencial pozo infinito unidimensional, de ancho  $L$ , calcular  $\langle x \rangle$  y  $\langle x^2 \rangle$ .

## 3.3 Átomos hidrogenoides

### 3.3.1 Ejercicio

Un electrón en un  $\text{He}^{-1}$  está en el estado  $n = 2$ . a) ¿Cuál es su momento magnético según la teoría de Bohr?

- b) ¿Cuál es su momento magnético según la teoría ondulatoria?

### 3.3.2 Ejercicio

Un electrón en una orbita circular tiene un impulso angular de  $\sqrt{2}\hbar$  en un campo de 0.5 T. ¿Cuál es la frecuencia de Larmor?

### 3.3.3 Ejercicio

Para  $l = 3$ , calcule los ángulos posibles que  $\vec{L}$  forma con el eje  $z$ .

### 3.3.4 Ejercicio

¿Cuál es la separación entre la línea espectral de Zeeman y la de campo cero, si la longitud de onda de campo cero es 450 nm?

### 3.3.5 Ejercicio

En un átomo ocurren transiciones entre un estado  $l = 3$  y  $l = 2$  en un campo de 0.2 T. Si las longitudes de onda antes de que se activara el campo eran de 400 nm, determine las longitudes de ondas finales.

### 3.3.6 Ejercicio

En un experimento de Stern-Gerlach, átomos de plata atraviesan una distancia de 0.1 m a través de un campo magnético no homogéneo, con un gradiente de 60 T/m. Si la separación que se observa en la placa colectora es de 0.15 mm, determine la velocidad de los átomos de plata tomando en cuenta que su masa es de  $1.79 \times 10^{-25}$  kg.

### 3.3.7 Ejercicio

¿Cuál es la diferencia de energía entre las dos orientaciones del spin del electrón cuando este último se encuentra en un campo magnético de 0.5 T?

### 3.3.8 Ejercicio

- a) Encuentre los valores posibles de  $\vec{J}$  para  $\vec{L} = 3$  y  $\vec{S} = \frac{1}{2}$ .
- b) Calcule  $\vec{L} \cdot \vec{S}$  para el inciso anterior.

## 3.4 Elementos de la Mecánica Estadística

### 3.4.1 Ejercicio

Para un sistema de dos estados con energías  $\epsilon$  y  $2\epsilon$  encuentre la distribución más probable para la energía media, si  $g_1 = g_2 = 1/2$ .

### 3.4.2 Ejercicio

Para un circuito RLC en serie, utilizando el teorema de equipartición, determine el valor medio cuadrático que produce el inductor.  $R = 0.1 \, \Omega$ ,  $L = 0.1 \, \text{mH}$ ,  $C = 1 \mu\text{F}$  y  $T = 300 \, \text{K}$ .

### 3.4.3 Ejercicio

Determine la razón de energía emitida desde un cuerpo negro de  $2000 \, \text{K}$  en bandas con un ancho de longitud de onda de  $10 \, \text{nm}$  centrada en  $500 \, \text{nm}$  (visible) y  $5000 \, \text{nm}$  (infrarojo).

### 3.4.4 Ejercicio

El potasio tiene una densidad de  $0.86 \times 10^3 \, \text{kg/m}^3$  y una masa atómica de 39. ¿Cuál es la energía de Fermi para los electrones en el metal, si cada átomo de potasio dona un electrón al gas de electrones?

### 3.4.5 Ejercicio

¿Cuál es la densidad de los estados de fotones en el intervalo de energía entre  $E$  y  $E + dE$  en una cavidad de volumen  $V = L^3$ ?

### 3.4.6 Ejercicio

¿Qué cantidad de energía por intervalo de longitud de onda emite un cuerpo negro?

---

## Apéndice A

# Desarrollos matemáticos

### A.1 Método de Frobenius

Dada la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 f}{dq^2} - 2q \frac{df}{dq} + \left(\frac{a}{b} - 1\right) f = 0$$

Se propone la siguiente serie como solución:

$$f = \sum_{j=0}^{\infty} c_j q^{k+j}$$

Donde en un primer paso es necesario encontrar el valor  $k$ , de tal forma que no se obtenga una solución trivial. Derivando se obtiene:

$$\frac{df}{dq} = \sum_{j=0}^{\infty} c_j (j+k) q^{j+k-1} \quad \frac{d^2 f}{dq^2} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+k)(j+k-1) c_j q^{j+k-2}$$

Remplazando

$$\sum_{j=2}^{\infty} (j+k)(j+k-1) c_j q^{j+k-2} - 2 \sum_{j=1}^{\infty} c_j (j+k) q^{j+k} + \left(\frac{a}{b} - 1\right) \sum_{j=0}^{\infty} c_j q^{k+j} = 0$$

La cual puede acomodarse como:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[ (j+k)(j+k-1) c_j q^{j+k-2} \right] + \sum_{j=0}^{\infty} \left[ \left( \left[ \frac{a}{b} - 1 \right] - 2[j+k] \right) c_j q^{k+j} \right] = 0$$

Observamos que en la primera suma, los términos  $j=0$  y  $j=1$ , que corresponden a  $q^{k-2}$  y  $q^{k-1}$  están desapareados, es decir, no existen términos con estos exponentes en la segunda suma, por lo tanto deben ser cero para  $f(q)$  sea solución de la ecuación (con las características de una función de

onda). Esto da lugar al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} c_0 k(k-1) &= 0 \\ c_1 (k+1)k &= 0 \end{aligned}$$

Cuya única solución es para  $k = 0$ , por lo tanto la serie que proponemos como solución a la ecuación debe ser:

$$f = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j q^j$$

Aquí se cambia a  $c_j$  por  $\alpha_j$ , sólo para mostrar que es una solución que se propone diferente a la anterior.

## A.2 Operador Impulso Angular

Para el impulso angular se tiene el siguiente conjunto de ecuaciones

- En  $\hat{x}$

$$L_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

- En  $\hat{y}$

$$L_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

- En  $\hat{z}$

$$L_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

- Módulo:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Si utilizamos el siguiente cambio de variables:

$$x = r \sin \theta \cos \phi; \quad y = r \sin \theta \sin \phi; \quad z = r \cos \theta$$

Que nos permite realizar un cambio de coordenadas cartesianas a las esféricas, obtenemos :

- 

$$\hat{L}_x = i\hbar \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

- 

$$\hat{L}_y = i\hbar \left( -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

- 

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \phi}^2$$

A partir de los operadores  $\hat{L}_z$  y  $\hat{L}^2$  es posible encontrar un conjunto completo de funciones comunes entre ambos operadores. Esto es debido a que una medida de  $\hat{L}_z$  Estas funciones son los armonicos esféricos:

$$Y = Y(\theta, \phi)$$

Finalmente debemos resolver las siguientes conjunto de ecuaciones:

$$\hat{L}_z Y(\theta, \phi) = bY(\theta, \phi)$$

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \phi) = cY(\theta, \phi)$$

Donde  $b$  y  $c$  son números reales. Reemplazamos en la ecuación de  $\hat{L}_z$  por su operador

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y(\theta, \phi) = bY(\theta, \phi)$$

Como este operador solo es función de  $\phi$ , podemos proponer separación de variables

$$Y(\theta, \phi) = S(\theta)T(\phi)$$

Entonces:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} (S(\theta)T(\phi)) = bS(\theta)T(\phi)$$

$$-i\hbar S(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} (T(\phi)) = bS(\theta)T(\phi)$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \frac{dT(\phi)}{d\phi} &= \frac{ib}{\hbar} T(\phi) \\ T(\phi) &= Ae^{ib\phi/\hbar} \end{aligned}$$

En este punto es necesario tener en cuenta los siguientes puntos.

- La función  $T(\phi)$  debe ser una función aceptable.
- $A$  es una constante pero debemos ver como se comporta la función cuando el ángulo toma los valores  $\phi$  y  $\phi + 2\pi$
- Entonces

$$T(\phi) = T(\phi + 2\pi)$$

- Se puede demostrar que  $b = m\hbar$ , donde  $m$  es un número entero.

Por lo tanto debemos podemos analizar:

- Los autovalores de la componente  $z$  del impulso angular están cuantizados:
- Para obtener la constante  $A$  se procede a normalizar la función

$$A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

- Por lo tanto:

$$T_m(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\phi}$$

Para encontrar las autofunciones de  $\hat{L}^2$ , se requiere un mayor esfuerzo matemático (más que en el oscilador), por lo tanto solo emplearemos algunos resultados fundamentales.

La función armonico esférico debe ser de la forma:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = S_{l,m}(\theta, \phi) T_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} S_{l,m}(\theta, \phi) e^{im\phi}$$

La función  $S_{l,m}(\theta, \phi)$  depende de los parámetros  $l$  y  $m$ , es posible demostrar que la solución a la ecuación es:

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi)$$

Donde el armonico esférico tiene la siguiente forma:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right] P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}$$

La función  $P_l^{|m|}(\cos\theta)$  son los polinomios asociados de Legendre, el cual se obtiene del cambio de variable  $x = \cos\theta$ , por lo tanto:

$$P_l^{|m|}(x) = (-1)^{|m|} (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$$

El polinomio  $P_l(x)$  se obtiene a partir de la formula de Rodrigues:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} [(x^2-1)^l]$$

### A.3 Átomo de H

Si tenemos una partícula sometida a una fuerza central, tenemos un Hamiltoniano de la siguiente forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)$$

Donde

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Por lo tanto:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2 \hbar^2} \hat{L}^2$$

Finalmente el Hamiltoniano puede ser escrito como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{2\mu r^2} \hat{L}^2 + V(r)$$

En la mecánica clásica el impulso angular se conserva para una fuerza central, es posible demostrar que a partir de la ecuación anterior se obtiene una autofunción  $\Psi(r, \theta, \phi)$ , de tal forma que se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(r, \theta, \phi) &= E\Psi(r, \theta, \phi) \\ \hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= l(l+1)\hbar^2 \Psi(r, \theta, \phi) \\ \hat{L}_z \Psi(r, \theta, \phi) &= m\hbar \Psi(r, \theta, \phi) \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned}$$

En el apartado anterior vimos que  $Y_l^m(\theta, \phi)$  es autofunción de  $\hat{L}^2$ , y como esta autofunción no depende de  $r$ , al multiplicar por otra función (que no depende de  $(\theta, \phi)$ ) seguirá siendo autofunción de  $\hat{L}^2$ . Podemos definir la siguiente función como solución de la ecuación del Hamiltoniano:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

En cualquier caso de partículas con energía potencial de simetría esférica  $V(r)$  la función propia será el producto de una función radial y un armonico esférico. Por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( R'' + \frac{2}{r} R' \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R + V(r)R = ER \quad (\text{A.1})$$

La energía cinética del sistema está dado por:

$$T = \frac{1}{2} M |\dot{R}|^2 + \frac{1}{\mu} |\dot{r}|^2$$

El movimiento interno ( $r$ ) se puede dar de dos formas, por el cambio de  $|r|$  (vibración) y por el cambio de la dirección de  $r$  (rotación). Escribiendo  $T$  en términos de impulso:

$$T = \frac{|P_M|^2}{2M} + \frac{|p_\mu|^2}{\mu}$$



Si el potencial sólo depende de  $r$  (de las coordenadas relativas entre las partículas) tenemos:

$$\hat{H} = \frac{|P_M|^2}{2M} + \left[ \frac{|p_\mu|^2}{\mu} + V(r) \right]$$

Es decir que podemos separar nuestro problemas en dos Hamiltonianos, uno para la parte de traslación y el otro para la interacción. En general para sistemas no interactuantes se tiene

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots \hat{H}_n = \sum_{i=0}^n \hat{H}_i$$

Lo mismo ocurre para los autovalores

## Potencial de Coulomb

En un sistema que consiste en un núcleo de masa  $M$  y carga  $Ze$  y un electrón de masa  $m$  y carga  $-e$ , la energía potencial es:

$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r}$$

La función de onda del sistema será del tipo  $\Psi = \Psi_{cm} \Psi(r, \theta, \phi)$ . Dejamos de lado las coordenadas con respecto al centro de masa, esto es posible porque:

$$\hat{H} = \hat{H}_{cm} + \hat{H}_r$$

La solución propuesta será del tipo

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Por lo tanto:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1)$$

- Cuando resolvemos la ecuación encontramos que las energías no negativas están permitidas.
- Físicamente las autofunciones encontradas, corresponde a estados no ligados al núcleo.
- Estados del continuo no deben tenerse en cuenta para estudiar los estados ligados, pero si sería necesario para obtener un conjunto completo de funciones.

Cuando las energías son menores que cero, aparecen los estados ligados. Sustituimos:

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}$$

$$r = \frac{n\hbar^2}{2\mu Z e^2} x = \frac{na_0}{2Z} x$$

- Por lo tanto

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{2}{R} \frac{dR}{dx} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{n}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] R = 0$$

- Al igual que en el oscilador, utilizamos la misma técnica (de Fobrenius).
- Buscamos una solución asintótica para:

$$\frac{d^2 R}{dx^2} = \frac{R}{4}$$

Con solución:

$$e^{\pm \frac{x}{2}}$$

- Utilizando los criterios para una función de onda aceptable
- Proponemos:

$$R = e^{-x/2} f(x)$$

- Por conveniencia proponemos:

$$R = e^{-x/2} x^l g(x)$$

- Quedando la ecuación

$$x \frac{d^2 g}{dx^2} + (2(l+1) - x) \frac{dg}{dx} + (n - l - 1)g = 0$$

- Proponemos como solución:

$$g(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \gamma_j x^j$$

- Operando, obtenemos la relación de recurrencia:

$$\frac{\gamma_{j+1}}{\gamma_j} = \frac{j+1+l-n}{(j+1)(2l+j+2)}$$

- Para  $j \gg 1$

$$\frac{\gamma_{j+1}}{\gamma_j} \approx \frac{1}{j}$$

- El comportamiento anterior es igual para la función  $e^x$
- La función  $g$  no tiene un comportamiento aceptable cuando  $j$  tiende a infinito.
- Al igual que en el oscilador, debemos truncar la serie a partir de un valor de  $j$  para obtener

un polinomio.

$$\begin{aligned} j + 1 + l - n &= 0 \\ n &= l + 1 + j \quad j = 0, 1, 2 \\ n &= l + 1, l + 2, \dots \end{aligned}$$

- $l$  es un número entero al igual que  $j$ , por lo tanto  $n$  es número entero.
- Por lo tanto encontramos que:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- La función  $g$  que son soluciones a la ecuación son conocidas como polinomios asociados de Laguerre
- Los polinomios de Laguerre de orden  $b$  y grado  $a - b$  están definidos por:

$$L_b^a(x) = \frac{d^b}{dx^b} \left[ e^x \frac{d^a}{dx^a} (x^a e^{-x}) \right]$$

- Por lo tanto:

$$g(x) = L_{n+l}^{2l+1}(x)$$

- Cuando  $b > a$  entonces  $L_b^a(x) = 0$
- $a = 2l + 1, b = n + l$
- Con lo cual  $n + l \geq 2l + 1$
- ó

$$n \geq l + 1$$

---

## Apéndice B

### B.1 Algunas funciones del átomo de H

$$R_{1,0}(r) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/2a_0} \quad (\text{B.1})$$

$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( 2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \quad (\text{B.2})$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-Zr/2a_0} \quad (\text{B.3})$$

$$R_{3,0}(r) = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left[ 2 \left( \frac{Zr}{a_0} \right)^2 - 18 \left( \frac{Zr}{a_0} \right) + 27 \right] e^{-Zr/3a_0} \quad (\text{B.4})$$

$$R_{3,1}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left[ 6 - \left( \frac{Zr}{a_0} \right) \right] e^{-Zr/3a_0} \quad (\text{B.5})$$

$$R_{3,2}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{15}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \left( \frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-Zr/3a_0} \quad (\text{B.6})$$

$$Y_{0,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad (\text{B.7})$$

$$Y_{1,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (\text{B.8})$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (\text{B.9})$$

$$Y_{2,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) e^{i\phi} \quad (\text{B.10})$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad (\text{B.11})$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \quad (\text{B.12})$$

## B.2 Tabla de Integrales

$$\int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-x} dx = \Gamma(n) ; \Gamma(n+1) = n\Gamma(n) \quad (\text{B.13})$$

$$\Gamma(n+1) = n! ; \Gamma(1) = \Gamma(2) = 1 ; \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad (\text{B.14})$$

$$\int x^n e^{ax} dx = \frac{x^n e^{ax}}{a} - \frac{n}{a} \int x^{n-1} e^{ax} dx \quad (\text{B.15})$$

$$\int \sin^n(x) dx = -\frac{1}{n} \sin^{n-1} x \cos x + \frac{n-1}{n} \int \sin^{n-2} x dx \quad (\text{B.16})$$

$$\int \cos^n(x) dx = \frac{1}{n} \cos^{n-1} x \sin x + \frac{n-1}{n} \int \cos^{n-2} x dx \quad (\text{B.17})$$

$$\int \sin^n(x) \cos(x) dx = \frac{\sin^{n+1} x}{n+1} \quad (\text{B.18})$$

$$\int \sin(x) \cos^n(x) dx = -\frac{\cos^{n+1} x}{n+1} \quad (\text{B.19})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad (\text{B.20})$$

$$\int u dv = uv - \int v du \quad (\text{B.21})$$

---

## Apéndice C

# Respuesta del Capítulo 3

### Fundamentos de la mecánica cuántica

#### Ejercicio 3.1.1

Si la longitud de onda  $\lambda$  está en [m], entonces:

$$E = \frac{1.2397 \times 10^{-6}}{\lambda}$$

Si se la expresa en [nm], entonces:

$$E = \frac{1.2397 \times 10^3}{\lambda}$$

En ambos casos,  $E$  queda expresado en electronvolts.

Si  $V$  es el voltaje de la aceleración (en volts), que es numéricamente igual a la energía de los electrones (en eV), las longitudes de onda de los rayos X producidos son iguales o mayores que el umbral de longitud de onda que satisfacen la siguiente relación

$$\lambda_0 = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{V} \text{m}$$

#### Ejercicio 3.1.2

- a)  $\lambda = 221$  nm. UVC.
- b)  $v_{max} = 5.7 \times 10^5$  m/s
- c) Ver Eisberg[2] ó Alonso [6].
- d) Fundamentalmente en el efecto fotoeléctrico el fotón es absorbido, y en el efecto Compton se da una dispersión del fotón. Son dos fenómenos de interacción de la radiación con la materia, pero en cada caso el resultado final del fotón interviniente es distinto.

### Ejercicio 3.1.3

El valor de  $\Delta\lambda$  es igual a dos veces la longitud de onda de Compton.

### Ejercicio 3.1.4

- a)  $d < 0.8674$  nm
- b)  $\lambda = 5.25 \times 10^{-3}$  cm.
- c)  $\lambda = 122$  nm. UV.
- d) Átomos hidrogenoides.

### Ejercicio 3.1.5

$\phi_0 = 1.945$  eV.

### Ejercicio 3.1.6

Utilizando Compton, sabiendo que  $\lambda = hc/E$ , y definiendo  $\Delta E_{max} = E_0 - E$ , se encuentra

$$\Delta E_{max} = \frac{(1 - \cos \theta) E_0^2}{m_e c^2 + (1 - \cos \theta) E_0}$$

Se extrema  $\frac{d\Delta E_{max}}{d\theta}$  y se verifica.

### Ejercicio 3.1.7

Sea  $E = \frac{p_z^2}{2m} + mgz$ ,  $p_z = \sqrt{2m(E - mgz)}$ , por lo tanto el movimiento está acotado entre  $z = 0$  y  $z = E/mg$ , entonces usando  $\oint p_z dz = 2\pi\hbar n$ ,  $n=0,1,2..$  entonces:

$$\oint_{\Gamma} p_z dz = \int_{z=0}^{z=E/mg} p_z dz + \int_{z=E/mg}^{z=0} (-p_z) dz$$

Siendo  $\Gamma$  la trayectoria de la partícula, ordenando

$$\begin{aligned} \oint_{\Gamma} p_z dz &= 2 \int_{z=0}^{z=E/mg} p_z dz \\ 2 \int_0^{E/mg} \sqrt{2m(E - mgz)} dz &= \sqrt{2m} \frac{4E^{3/2}}{3mg} \end{aligned}$$

Entonces

$$\sqrt{2m} \frac{4E^{3/2}}{3mg} = 2\pi\hbar n$$

Luego

$$E^{3/2} = 2\pi\hbar n \frac{3mg}{4} \frac{1}{\sqrt{2m}}$$

$$E_n = \left( 2\pi n \hbar \frac{3m^{1/2}g}{4} \frac{1}{2^{1/2}} \right)^{2/3}$$

$$E_n = \left( 1\pi \hbar \frac{3m^{1/2}g}{2} \frac{1}{2^{1/2}} \right)^{2/3} n^{2/3}$$

$$E_n = \left( \pi^2 \hbar^2 \frac{9mg^2}{4} \frac{1}{2} \right)^{1/3} n^{2/3}$$

$$E_n = \left( \frac{9}{8} \pi^2 \hbar^2 mg^2 \right)^{1/3} n^{2/3}$$

Se resuelve, despeja E, y se demuestra.

## Mecánica Ondulatoria

### Ejercicio 3.2.1

a)  $A = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}$

b)  $\langle x \rangle = a$  ;  $\langle x^2 \rangle = a^2 + \frac{1}{2\lambda}$  ;  $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}$

### Ejercicio 3.2.2

a)  $A = \sqrt{\frac{3}{b}}$

c)  $x = a$

d)  $P = \frac{a}{b}$

e)  $\langle x \rangle = \frac{2a+b}{4}$

### Ejercicio 3.2.3

a)  $A = \sqrt{\lambda}$

b)  $\langle x \rangle = 0$  ;  $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\lambda^2}$

c)  $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}$

### Ejercicio 3.2.4

a)  $A = \left( \frac{2am}{\pi \hbar} \right)^{1/4}$

b)  $V(x) = 2ma^2x^2$



### Ejercicio 3.2.5

$$\langle x \rangle = \frac{L}{2}$$

Se puede observar que  $\langle x \rangle$  es independiente de  $n$ .

$$\langle x^2 \rangle = a \left[ \frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2} \right]$$

## Átomos Hidrogenoides

### Ejercicio 3.3.1

a)  $1.85 \times 10^{-23} \text{ J/T}$

b)  $1.31 \times 10^{-23} \text{ J/T}$  ó 0

### Ejercicio 3.3.2

$$6.99 \times 10^9 \text{ Hz}$$

### Ejercicio 3.3.3

$$16.8^\circ; 35.3^\circ; 60^\circ$$

### Ejercicio 3.3.4

$$3.78 \times 10^{-3} \text{ nm}$$

### Ejercicio 3.3.5

$$400.00149 \text{ nm}; 400 \text{ nm}; 399.99851 \text{ nm}.$$

### Ejercicio 3.3.6

$$455 \text{ m/s}$$

### Ejercicio 3.3.7

$$5.79 \times 10^{-5} \text{ eV}$$

### Ejercicio 3.3.8

a)  $\frac{7}{2}; \frac{5}{2}$  b)  $\frac{3}{2}\hbar; -2\hbar$

## Elementos de la Mecánica Estadística

### Ejercicio 3.4.1

$$\langle E \rangle = \frac{2\epsilon e^{-2\beta\epsilon} + \epsilon e^{-\beta\epsilon}}{e^{-2\beta\epsilon} + e^{-\beta\epsilon}}$$

### Ejercicio 3.4.2

$$6.44 \times 10^{-8} \text{ V}$$

### Ejercicio 3.4.3

$$\rho_\lambda = \frac{8\pi hcV}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{\beta hc/\lambda} - 1} = F(\lambda) d\lambda$$

$\Delta\lambda$  es muy pequeño, por lo que puede tomarse a  $F(\lambda)$  como constante en el intervalo.

$$\frac{\Delta E_{5000}}{\Delta E_{500}} = 5.5$$

### Ejercicio 3.4.4

$\epsilon_F = 2.05 \text{ eV}$ . A  $300 \text{ K}$   $kT = 0.026 \text{ eV}$ , por lo que  $E \approx \epsilon_F$ .

### Ejercicio 3.4.5

$$\frac{8\pi V E^2}{(hc)^3}$$

### Ejercicio 3.4.6

$$\frac{8\pi V hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\beta hc/\lambda} - 1}$$

---

## Apéndice D

# Constantes Físicas y sus unidades

### D.1 Tabla de constantes físicas

Los valores extraídos de la tabla (D.2) corresponden a los publicados por CODATA (por su siglas en inglés, *Committee on Data for Science and Technology*) en el 2004.

La incerteza se da como un error relativo en partes por millón (p.p.m), el error absoluto es el que está entre paréntesis en el valor.

#### D.1.1 Sistema CGS

El sistema CGS ha sido casi totalmente reemplazado por el Sistema Internacional de Unidades (SI). Sin embargo aún perdura su utilización en algunos campos científicos y técnicos muy concretos, con resultados ventajosos en algunos contextos. Así, muchas de las fórmulas del electromagnetismo presentan una forma más sencilla cuando se las expresa en unidades CGS. Por lo tanto es mas común encontrar en algunos libros de la bibliografía recomendada el uso de sistemas de unidades diferentes al SI. Este es el caso del libro Fundamentos de Física Moderna - *Eisberg*, donde el autor hace uso del sistema de unidades CGS Gaussiano.

Constante de Coulomb	Constante magnética	Sistema de Unidad
$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	$\frac{1}{c^2} \frac{\mu_0}{4\pi}$	CGS Gaussiano
		SI

Table D.1: Equivalencia entre CGS Gaussiano y SI, para las constantes que acompañan a las leyes de Coulomb y de Biot-Savat.

Table D.2: Algunos valores de uso frecuente			
Cantidad	Símbolo, ecuación	Valor	Incerteza
Velocidad de la luz	$c$	$299792458 \text{ m s}^{-1}$	exacto
Constante de Plank	$h$	$6.6260693(11) \times 10^{-34} \text{ J s}$	170
Constante de Plank reducida	$\hbar \equiv h/2\pi$	$1.05457168(18) \times 10^{-34} \text{ J.s}$ $= 6.58211915(56) \times 10^{-16} \text{ eV s}$	170 85
Carga del electrón	$e$	$1.60217653(14) \times 10^{-19} \text{ C}$ $= 4.80320441(41) \times 10^{-10} \text{ ues}$	85 85
Masa del electrón	$m_e$	$9.1093826(16) \times 10^{-31} \text{ Kg}$	170
Masa del protón	$m_p$	$1.67262171(29) \times 10^{-27} \text{ Kg}$ $= 1836.15267261(85)m_e$	170 46
Unidad de masa atómica unificada	(masa átomo $^{12}\text{C}$ )/12	$1.660533886(28) \times 10^{-27} \text{ Kg}$	170
Permitividad del espacio vacío	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2)$	$8.854187817.... \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$	exacto
Permeabilidad del espacio vacío	$\mu_0$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$	exacto
Constante de estructura fina	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$	$7.297352568(24) \times 10^{-3}$ $= 1/137.03599911(46)$	3.3 3.3
Longitud de onda de Compton	$\lambda = h/(m_e c)$	$2.4263102367 (11) \times 10^{-12} \text{ m}$	11
Radio de Bhor	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$	$0.5291772108(18) \times 10^{-10} \text{ m}$	3.3
Magneton de Bhor	$\mu_B = e\hbar/(2m_e)$	$5.788381804(39) \times 10^{-11} \text{ MeV T}^{-1}$	6.7
Constante de Boltzman	$k$	$1.3806505(24) \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ $8.617343(15) \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$	1800 1800
Número de Avogadro	$N_A$	$6.0221415(10) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	170
Constante de Wien	$b = \lambda_{max} T$	$2.8977685(51) \times 10^{-3} \text{ m K}$	17000
Constante de Stephan-Boltzman	$\sigma = \pi^2 k^4/(60\hbar^3 c^2)$	$5.670400(40) \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$	7000

---

## Apéndice E

# Fórmulas a considerar

En esta sección y a modo de ayuda, se encuentran **algunas de las diferentes fórmulas y ecuaciones** a utilizar en los diferentes temas visto en clase. Ya que el objetivo está fundamentalmente centrado en evaluar los conceptos fundamentales de la mecánica cuántica, y la interpretación de los resultados. Por tal motivo es que se pone a disposición las siguientes ecuaciones, sin mencionar a que corresponde cada variable, ya que la identificación e interpretación de cada una de ellas forman parte de la formación del alumno.

### E.1 Fundamentos de la mecánica cuántica

$$\frac{e}{m_e} = \frac{sdv^2}{VlL} = \frac{sv}{lLdB^2} \quad (\text{E.1})$$

$$q = \frac{m\rho d}{V} \quad (\text{E.2})$$

$$E_b = \sigma T^4 \quad (\text{E.3})$$

$$\rho_T = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (\text{E.4})$$

$$eV_0 = h\nu - \phi_0 \quad (\text{E.5})$$

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (\text{E.6})$$

$$b = \frac{D}{2} \cot(\phi/2) \quad (\text{E.7})$$

$$D = k \frac{zZe^2}{\frac{1}{2}m_\alpha v^2} \quad (\text{E.8})$$

$$N(\phi)d\phi = -N_0 dP(\phi) = \frac{N_0 \pi \delta \epsilon}{8} \left( k \frac{zZe^2}{\frac{1}{2}m_\alpha v^2} \right)^2 \frac{\sin\phi}{\sin^4(\phi/2)} d\phi \quad (\text{E.9})$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k Z e^2 m_e} \quad (\text{E.10})$$

$$E_n = -k^2 \frac{Z^2 e^4 m_e}{2 n^2 \hbar^2} \quad (\text{E.11})$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{k^2 Z^2 e^4 m}{4 \pi \hbar^3 c} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (\text{E.12})$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{E.13})$$

## E.2 Mecánica cuántica ondulatoria

$$dP(x) = |\psi(x)|^2 dx \quad (\text{E.14})$$

$$E\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) \quad (\text{E.15})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x)\Psi(x, t) \quad (\text{E.16})$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \frac{1}{x_0} \quad (\text{E.17})$$

$$E_n = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{L^2} \right) \quad (\text{E.18})$$

$$(\text{E.19})$$

## E.3 Átomos Hidrogenoides

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad (\text{E.20})$$

$$L_z = m\hbar \quad (\text{E.21})$$

$$M_z = -\frac{e}{2m_e} L_z \quad (\text{E.22})$$

$$E_B = m\mu_B B \quad (\text{E.23})$$

$$E_{SL} = \frac{|E_n| Z^2 \alpha^2}{n} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right) \quad (\text{E.24})$$

## E.4 Elementos de la mecánica estadística

$$n_i = \frac{N}{Z} e^{\beta E_i} \quad (\text{E.25})$$

$$U = NkT^2 \frac{d(\ln Z)}{dT} \quad (\text{E.26})$$

$$\langle E \rangle = kT^2 \frac{d(\ln Z)}{dT} \quad (\text{E.27})$$

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\beta(E_i - \epsilon_F)} + 1} \quad (\text{E.28})$$

$$g(E)dE = \frac{8\pi(2m^3)^{1/2} E^{1/2}}{h^3} dE \quad (\text{para } e^-) \quad (\text{E.29})$$

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{3N}{\pi V} \right)^{2/3} \quad (\text{E.30})$$

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta E_i} + 1} \quad (\text{E.31})$$

$$g(\nu)d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (\text{para fotones}) \quad (\text{E.32})$$

---

# Bibliografía de consulta para la práctica y/ó teoría

- [1] Darrell F. Schroeter David J. Griffiths. *Introduction to Mechanics Quantum*. Reed College, Oregon, 2018.
- [2] Robert Eisberg. *Fundamentos de Física Moderna*. LIMUSA, 1983.
- [3] CURSO DE FÍSICA DE BERKELEY (B.P.C.) EYVIND H. WICHMANN. *Física cuántica - B.P.C. IV*. Reverté, 1971.
- [4] Crawford Jr Frank S. *ONDAS BERKELEY PHYSICS COURSE, VOLUMEN 3*. Reverté, 1971.
- [5] Edward J. Finn Marcelo Alonso. *FISICA (VOL. II): CAMPOS Y ONDAS*. Fondo Iberoamericano de desarrollo, 1999.
- [6] Edward J. Finn Marcelo Alonso. *FISICA (VOL. III): FUNDAMENTOS CUÁNTICOS Y ESTADÍSTICOS*. Fondo Iberoamericano de desarrollo, 1999.
- [7] Resnick Robert Eisberg. *Física Cuántica. Átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. LIMUSA Wiley, 1993.