C.Física Moderna: Taller 13

Ecuación de Schrödinger en 3D

1 Pozo de potencial infinito en 3D

Considere un pozo infinito $V(\boldsymbol{r})$ con profundidad infinita de lados L_x, L_y y L_z.

$$V(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \boldsymbol{r} \in [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z] \\ \infty & \text{de lo contrario} \end{cases}$$

El objetivo de este ejercicio es encontrar los estados estacionarios para una partícula confinada en dicho pozo y sus energías permitidas. Planteé un ansatz para la solución de la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

donde

$$\psi(\boldsymbol{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$$

1. Calcule $X(x), Y(y)$ y $Z(z)$.
2. Usando las condiciones de frontera apropiadas encuentre las energías propias del sistema.
3. Calcular la constante de normalización para los funciones de onda de los estados estacionarios.
4. Encuentre la condición que deben cumplir L_x, L_y y L_z para que las energías no sean degeneradas

Solución

1.1 Introduciendo la solución que nos dan en la ecuación de Schrödinger obtenemos la siguiente ecuación diferencial:

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{Z(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2}\right) = E \tag{1}$$

Vemos entonces, que cada sumando de la ecuación depende de una coordenada diferente, la única forma de que esto se cumpla es que cada termino sea constante. Llamamos las 3 constantes c_x, c_y y c_z:

$$-\frac{\hbar^2}{2mX(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = c_x \tag{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mY(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} = c_y \tag{3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mZ(z)}\frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = c_z \tag{4}$$

Donde tenemos la condición que:

$$c_x + c_y + c_z = E \tag{5}$$

Tenemos el mismo tipo de ecuación diferencial ordinaria lineal, cuya solución es bien conocida:

$$X(x) = X_0 \sin(k_x x + \phi_x) \tag{6}$$

$$Y(y) = Y_0 \sin(k_y y + \phi_y) \tag{7}$$

$$Z(z) = Z_0 \sin(k_z z + \phi_z) \tag{8}$$

Donde X_0 y ϕ_x son las constantes de integración(y para cada caso respectivamente). Las constantes k_α se definen como:

$$k_\alpha = \sqrt{\frac{2mc_\alpha}{\hbar^2}} \qquad \alpha = x, y, z \tag{9}$$

1.2 Para encontrar las energías propias utilizamos las condiciones de frontera que nos dicen que la función se debe anular en los extremos de la caja para que la función de onda sea continua:

$$X(0) = 0 \tag{10}$$
$$X(L_x) = 0 \tag{11}$$

De la primera condición se deduce que $\phi_x = 0$. De la segunda condición tenemos:

$$X(L_x) = X_0 \sin(k_x L_x) \tag{12}$$
$$= 0 \tag{13}$$

No podemos pedir que $X_0 = 0$ ya que esto nos daría una solución que no se puede normalizar. Por lo tanto se exige:

$$\sin(k_x L_x) = 0 \tag{14}$$

Por lo que se tiene:

$$k_x L_x = n_x \pi \qquad n_x = 1, 2, 3, \ldots \tag{15}$$

Recuerde que por convención se toma los números de onda positivos, por eso $n_x \in \mathbb{N}$ y no en $\mathbb{Z}$. El motivo por el cual no se incluye el valor $n_x = 0$ es que la solución $k_x = 0$ no es físicamente aceptable ya que no puede ser normalizada. Con el resultado anterior tenemos la siguiente expresión para k_x:

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} \tag{16}$$

De forma análoga se obtiene para y y z:

$$k_y = \frac{n_y \pi}{L_y} \tag{17}$$
$$k_z = \frac{n_z \pi}{L_z} \tag{18}$$

Ahora las constante c_x, c_y y c_z son:

$$c_x = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} \tag{19}$$
$$c_y = \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_y^2} \tag{20}$$
$$c_z = \frac{n_z^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_z^2} \tag{21}$$

Y con ellas la energía es:

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \tag{22}$$

1.3 La función de onda independiente del tiempo es:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = X_0 Y_0 Z_0 \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \tag{23}$$

Y la condición de normalización es:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r \ \psi(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}) = 1 \tag{24}$$

Como la función de onda se anula fuera de la caja se tiene:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r \ \psi(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}) = \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz (X_0Y_0Z_0)^2 \sin^2{(k_x x)} \sin^2{(k_y y)} \sin^2{(k_z z)} \tag{25}$$

Al hacer las integrales se obtiene:

$$(X_0Y_0Z_0)^2 \frac{L_x L_y L_z}{8} = 1 \tag{26}$$

Por lo que la constante de normalización es:

$$X_0Y_0Z_0 = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \tag{27}$$

Y la función de onda

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right) \tag{28}$$

1.4 Para responder este inciso consideremos solo dos longitudes iguales. Supongamos que los pares (n_{x_1}, n_{y_1}) y (n_{x_2}, n_{y_2}) dan la misma energía. Entonces tenemos:

$$\frac{n_{x_1}^2}{L_x^2} + \frac{n_{y_1}^2}{L_y^2} = \frac{n_{x_2}^2}{L_x^2} + \frac{n_{y_2}^2}{L_y^2} \tag{29}$$

Ninguna de las longitudes es cero, por lo que se puede escribir:

$$n_{x_1}^2 L_y^2 + n_{y_1}^2 L_x^2 = n_{x_2}^2 L_y^2 + n_{y_2}^2 L_x^2 \tag{30}$$

Despejando se obtiene:

$$(n_{x_1}^2 - n_{x_2}^2) L_y^2 = (n_{y_2}^2 - n_{y_1}^2) L_x^2 \tag{31}$$

Se tienen dos casos a considerar. Primero consideremos si $n_{x_1} = n_{x_2}$ entonces $n_{y_1} = n_{y_2}$, lo cual implica que no hay degeneramiento. De igual forma si $n_{y_1} = n_{y_2}$ entonces $n_{x_1} = n_{x_2}$. Por lo tanto ambos números deben ser diferentes y consideramos solo ese caso. Ahora que sabemos que $n_{y_1} \neq n_{y_2}$ podemos dividir la ecuación anterior y obtenemos:

$$\frac{n_{x_1}^2 - n_{x_2}^2}{n_{y_2}^2 - n_{y_1}^2} = \frac{L_x^2}{L_y^2} \tag{32}$$

Note que el lado izquierda de la igualdad es la división de un número entero entre otro, por lo que es un número racional. Entonces se tiene que:

$$\frac{L_x^2}{L_y^2} \in \mathbb{Q} \tag{33}$$

De la ecuación para las energías vemos que sólo si dos cuadrados de las longitudes son conmensurables se puede tener estados degenerados. Es decir que si algún par de los cuadrados de las longitudes son conmensurables, existe degeneramiento en alguna energía. Se dice que dos números son conmensurables cuando su razón es un número racional.

---

2 Estado degenerados

Una partícula de masa m se mueve en una caja tridimensional cuyas dimensiones son $L_x = L, L_y = 2L$ y $L_z = 2L$.

1. Encuentre las primeras seis energías más bajas.
2. Diga cuales de esas energías son degeneradas.

Solución

2.1 Del ejercicio anterior tenemos las energías para el sistema son:

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}\left(4n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) \tag{34}$$

Se introduce la constante $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$. Con ello:

$$E(n_x, n_y, n_z) = E_0\left(4n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) \tag{35}$$

En la siguiente tabla se escriben las primeras 6 energías

n_x	n_y	n_z	E/E_0	Estado
1	1	1	6	Estado fundamental
1	2	1	9	Primera energía excitada
1	1	2	9	
1	2	2	12	Segunda energía excitada
1	1	3	14	Tercera energía excitada
1	3	1	14	

2.2 Vemos entonces que hay degeneramiento para la primera y tercer energía excitada.
2.3 La primera energía excitada es la primera con degeneramiento. Las funciones de onda para los dos estados con energía $E = 9E_0$ son:

$$\psi_{1,2,1}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{2}{L^3}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{2L}z\right) \tag{36}$$

$$\psi_{1,1,2}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{2}{L^3}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{2L}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right) \tag{37}$$

FORMULAS ÚTILES

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$