Grado en Física, Curso 2023-2024

Mecánica Cuántica I

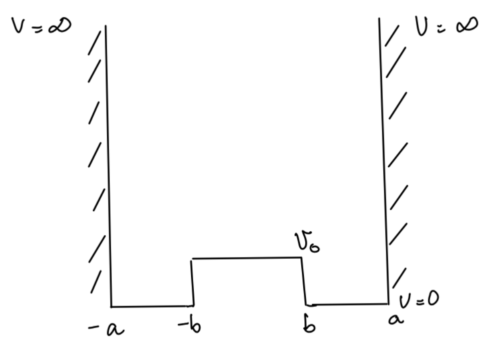
Control, 20 de octubre de 2023

1. La separación entre átomos en un determinado cristal es de $3\mathring{A}$. Calcula la energía que debe tener un haz de electrones para que se pueda observar su difracción en este cristal. Considera que los electrones no son relativistas. Si la incertidumbre en la medida del momento de esos electrones es del 0.01%, estima cuál será la mínima incertidumbre posible en su posición. *(1 punto)*
   Datos: masa del electrón $m_e = 9.11 \times 10^{-31} kg$. Constante de Planck $h = 6.63 \times 10^{-34} J.s$

2. Considera una partícula cuántica de masa m confinada a moverse en el segmento $-a < x < a$.

   (a) Resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y deduce los posibles estados estacionarios y sus energías. *(2.5 puntos)*

   (b) Considera que en el interior del segmento hay una barrera de altura V_0 y anchura $2b$ centrada en $x = 0$ como se muestra en la figura. Deduce la relación que describe las energías posibles cuando $E > V_0$ y escribe la ecuación para los estados estacionarios para el caso de las soluciones simétricas. *(2.5 puntos)*



Problema 2

3. Una partícula de masa m se encuentra en un potencial armónico. La función de onda de esta partícula para $t = 0$ es:

$$\Psi(x, 0) = A(1 - 6b)e^{-b^2/2}$$

con $b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$

   (a) Calcula el valor de la constante A *(1 punto)*

   (b) Calcula $\Psi(x, t)$. ¿Se trata de un estado estacionario? Razona tu respuesta. *(1.5 puntos)*

   (c) Calcula el valor esperado de la energía. ¿Varía en el tiempo? Razona tu respuesta. *(1 punto)*

   (d) ¿Cuál es la probabilidad de que al medir la energía del sistema se obtenga el valor $\frac{3}{2}\hbar\omega$ *(0.5 puntos)*

Relaciones de utilidad:

Estados estacionarios para el potencial armónico:

$$\Psi_n(x) = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(b)e^{-b^2/2}$$

con $b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ y

$$H_0(b) = 1$$

$$H_1(b) = 2b$$

$$H_2(b) = 4b^2 - 2$$

$$H_3(b) = 8b^3 - 12b$$

y $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\cos(2x) = 2cos^2(x) - 1$$

1) $\lambda = 3\,\mathring{A} = 3\times10^{-10}\,m$

$h = 6{,}63\times10^{-34}\,J.s$

$m_e = 9.11\times10^{-31}\,Kg$

$$E = \frac{P^2}{2m} \qquad \lambda = \frac{h}{p} \rightarrow p = \frac{h}{\lambda}$$

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{(6.63\times10^{-34})^2}{2(9.11\times10^{-31})(3\times10^{-10})^2} = \boxed{2{,}7\times10^{-17}\,J}$$

$$E = \frac{2{,}7\times10^{-17}\,J}{1{,}6\times10^{-19}\,J/eV} = 1{,}7\times10^{2}\,eV = 170\,eV$$

$$\sigma_p \geqslant 0.01\% \rightarrow \qquad \sigma_p . \sigma_x \geq \frac{\hbar}{2} \rightarrow \qquad \sigma_x \geqslant \frac{\hbar}{2\sigma_p}$$

$$\sigma_p = \frac{h}{\lambda} . 10^{-4}$$

$$\sigma_x \geq \frac{\hbar\,\lambda}{2h\,.10^{-4}} = \frac{\lambda}{4\pi\times10^{-4}} = \frac{3\times10^{-10}}{4\pi10^{-4}} = \boxed{2{,}4\times10^{-7}\,m}$$

(2) Hay varias formas de resolver el ejercicio. Aquí se incluyen dos.

(a) Pozo centrado en $x=0$ $\quad -a < x < a$

Solución simétrica: $\psi(x) = A \cdot \cos(Kx)$ con $\psi(x=-a)=0$, $\psi(x=a)=0$

Condición para K: $Ka = n\frac{\pi}{2}$

con $n = 1, 3, 5, \ldots$ impar.

$$K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rightarrow E_n = \frac{K^2\hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2}{2ma^2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2a)^2}n^2$$

Solución del un pozo entre 0 y 2a

$$\psi(x) = A \cdot \cos(Kx)$$

Normalizando: $\displaystyle\int_{-a}^{a} |A|^2 \cdot \cos^2(Kx) = 1 = |A|^2 a = 1$

$$A = \frac{1}{\sqrt{a}} \; ; \quad \boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos(Kx)}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2a)^2}n^2 \quad \text{con } n = 1,3,5\ldots \text{ impar}}$$

Solución antisimétrica:

$\psi(x) = A \cdot \sin(Kx)$ $\quad \psi(x=-a)=0$, $\psi(x=a)=0$.

$$A \cdot \sin(Ka) = 0 \rightarrow Ka = n\pi \quad K = \frac{n\pi}{a}$$

$$-A\sin(Ka) = 0 \quad K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rightarrow E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 \quad n = 1, 2, \ldots$$

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2a)^2}(2n)^2 \quad n' = 2n = 2,4,6,\ldots \text{ pares.}}$$

De nuevo se recupera la solución del pozo entre 0 y 2a.

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\operatorname{sen}(Kx)}$$

Otra forma de resolverlo:

Consideramos la solución

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\psi(x=a) = 0 \rightarrow A e^{ika} + B e^{-ika} = 0 \rightarrow B = -A e^{2ika}$$

$$\psi(x=-a) = 0 \rightarrow A e^{-ika} + B e^{ika} = 0$$

$$A e^{-ika} - A e^{3ika} = 0 \rightarrow A\left(e^{-ika} - e^{3ika}\right) = 0$$

$$e^{-2ika} - e^{2ika} = 0 \rightarrow 2i \operatorname{sen}(2ka) = 0$$

para que se cumpla $2ka = n\pi \quad n = 1, 2, \ldots$

Por tanto: $$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2a)^2} n^2}$$ El resultado para un pozo de anchura $2a$. $n = 1, 2, 3, \ldots$

$$\psi_{II} = A'\left(e^{ikx} - e^{2ika} \cdot e^{-ikx}\right) \quad \text{con} \quad k = \frac{n\pi}{2a}$$

Se puede reescribir como:

$$\psi_{II} = A'\left(e^{i\frac{n\pi}{2a}x} - e^{\frac{in\pi}{2a}\cdot 2a} \cdot e^{-\frac{in\pi}{2a}x}\right)$$

$$\psi_{II} = A' \cdot e^{\frac{in\pi}{2a}a} \Big(\underbrace{e^{\frac{in\pi}{2a}(x-a)} - e^{-\frac{in\pi}{2a}(x-a)}}_{2i \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right)} \Big)$$

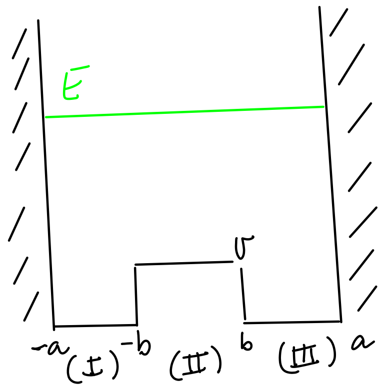
$$\psi_{II} = \underbrace{A' \cdot e^{\frac{in\pi}{2a}a}}_{\text{Constante}} \cdot 2i \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right)$$

obtenemos normalizando.

$$\boxed{\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right)} \quad n = 1, 2, \ldots$$

(2) (b)

Si incluimos la barrera:



$E > V$

Caso simétrico:

$\Psi_I = A \cdot \cos(Kx)$

con $\Psi_I(x=-a) = 0$

$\Psi_{III} = A \cdot \cos(Kx)$

con $\Psi_{III}(x=a) = 0 \rightarrow Ka = n\frac{\pi}{2}$

$n = 1, 3, 5 \ldots$

(II) $\displaystyle -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + V\Psi_{II} = E\Psi_{II}$ $\qquad \displaystyle \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = -\underbrace{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}_{=l^2}\Psi_{II}$ $\quad E > V$, $E - V > 0$

$$l = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} \qquad \Psi_{II} = B \cdot e^{ilx} + Ce^{-ilx}$$

Si estamos en la solución simétrica $B = C$

$$\Psi_{II} = Be^{ilx} + Be^{-ilx} \; ; \quad \Psi_{II} = B(\underbrace{e^{ilx} + e^{-ilx}}_{2\cos lx})$$

$$\left.\begin{aligned} e^{iKx} &= \cos Kx + i \operatorname{sen} Kx \\ e^{-iKx} &= \cos Kx - i \operatorname{sen} Kx \end{aligned}\right\} \; e^{iKx} + e^{-iKx} = 2\cos Kx$$

$$\Psi_{II} = 2B\cos lx$$

Condiciones de contorno: $\Psi_{II}(x=-b) = \Psi_I(x=-b)$

$$\psi_I = A \cdot \cos(-Kb) = 2B \cdot \cos(-\ell b) \quad \rightarrow \quad A \cos(Kb) = 2B \cos(\ell b)$$

$$B = \frac{1}{2} \frac{\cos(Kb)}{\cos(\ell b)} A$$

$$\psi_I(x) = A \cdot \cos(Kx)$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{A}{2} \frac{\cos(Kb)}{\cos(\ell b)} \cdot \cos(\ell x)$$

$$\psi_{III}(x) = A \cdot \cos(Kx)$$

$$\psi'_{II}(b) = \psi'_{III}(b) \rightarrow \quad -\cancel{A} \cdot K \operatorname{sen}(Kb) = -\frac{\cancel{A}}{2} \ell \frac{\cos(Kb)}{\cos(\ell b)} \operatorname{sen}(\ell b)$$

Condición para ℓ: $\quad K \cdot \frac{\operatorname{sen}(Kb)}{\cos(Kb)} = \ell \frac{\operatorname{sen}(\ell b)}{\cos(\ell b)}$

$$\boxed{K \cdot \operatorname{tg}(Kb) = \ell \cdot \operatorname{tg}(\ell b)}$$

Cuantización de la energía.

$$\int_{-a}^{a} |\psi|^2 dx = 1 \qquad \int_{-a}^{-b} |A|^2 \cdot \cos^2(Kx)\, dx + \int_{-b}^{b} \frac{|A|^2}{4} \cdot \frac{\cos^2(Kb)}{\cos^2(\ell b)} \cdot \cos^2(\ell x) dx +$$

$$+ \int_{b}^{a} |A|^2 \cdot \cos^2(Kx)\, dx = 1$$

$$2 \int_{b}^{a} |A|^2 \cos^2(Kx)\, dx + \frac{1}{4} |A|^2 \frac{\cos^2(Kb)}{\cos^2(K\ell)} \int_{-b}^{b} \cos^2(\ell x)\, dx = 1$$

$$\int_{b}^{a} \cos^2(Kx)\, dx = \frac{a-b}{2} \; ; \qquad \frac{\cancel{2}(a-b)}{\cancel{2}} |A|^2 + \frac{1}{4} |A|^2 \frac{\cos^2(Kb)}{\cos^2(K\ell)} \cdot b = 1$$

$$\left((a-b) + \frac{1}{4} b \frac{\cos^2(kb)}{\cos^2(k\ell)} \right) |A|^2 = 1$$

$$\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{a-b + \frac{1}{4} b \cos^2(kb) / \cos^2(\ell b)}}}$$

(3) $\Psi(x,0) = A(1-6b)\, e^{-b^2/2}$ con $b = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$

Solución para el oscilador armónico:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(b)\, e^{-b^2/2}$$

$H_0 = 1 \quad H_1 = 2b \quad H_2 = 4b^2 - 2, \ldots$

(a) $A = ?$ $\quad \Psi(x,0) = A e^{-b^2/2} - A6b e^{-b^2/2} = c_0\psi_0 + c_1\psi_1$

Dos formas de obtener A:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = 1 \quad \text{o} \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 (1-6b)^2 e^{-b^2} dx = 1 \qquad |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx + |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} 36 \underbrace{\frac{m\omega}{\hbar} x^2}_{y^2} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx$$

$$- |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \cancel{12\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}} dx = 1$$

0

Damos estas integrales: $\quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \qquad dy = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, dx \rightarrow dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, dy$$

$$|A|^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} + |A|^2 \frac{36}{2}\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} = 1 \qquad |A|^2 = \frac{1}{19}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}$$

$$\boxed{A = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{19}}}$$

Segundo método:

$$\Psi(x,0) = A e^{-b^2/2} - A6b e^{-b^2/2} = c_0\psi_0 + c_1\psi_1$$

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-b^2/2} \qquad \psi_1 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \cdot \frac{2b}{\sqrt{2}} \cdot e^{-b^2/2}$$

$\sqrt{9}$

$$A e^{-b^2/2} - A 6 b e^{-b^2/2} = C_0 \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \cdot e^{-b^2/2} + C_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{2}{\sqrt{2}} b \cdot e^{-b^2/2}$$

$$A = C_0 \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \qquad -A6 = C_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{2}{\sqrt{2}}$$

$$C_0 = \left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{1/4} \cdot A \qquad C_1 = -\left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{1/4} 3\sqrt{2}\, A$$

$$|C_0|^2 + |C_1|^2 = 1 \qquad \left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{1/2} (1 + 18) |A|^2 = 1 \qquad \boxed{A = \frac{1}{\sqrt{19}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}}$$

(b)

$$C_0 = \left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{1/4} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{19}} = \frac{1}{\sqrt{19}} \qquad C_1 = -\left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{1/4} \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{19}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} = -\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{19}}$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad E_1 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{19}} \varphi_0 \cdot e^{-i\frac{\omega t}{2}} - \frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{19}} \varphi_1 e^{-i\frac{3\omega t}{2}}}$$

Es la combinación de dos estados estacionarios → no será estacionario ya que $|\Psi(x,t)|^2 = f(t)$.

(c) $\boxed{\langle H \rangle} = |C_0|^2 \cdot E_0 + |C_1|^2 \cdot E_1 = \frac{1}{19}\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{9 \cdot 2}{19}\left(\frac{3\hbar\omega}{2}\right) =$

$$= \frac{1}{19}\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) + \frac{54}{19}\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) = \frac{55}{19}\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) = \boxed{\frac{55}{38}\hbar\omega}$$

No depende del tiempo porque la energía del sistema es constante.

(d) $\boxed{|C_1|^2} = \frac{18}{19} = \boxed{0{,}95}$