La ecuación de Schrödinger

Fernando Barreiro

Universidad Autónoma de Madrid

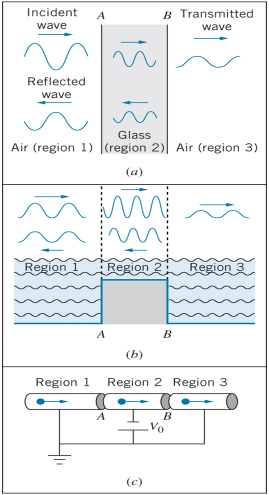
Fundamentos Fisica III

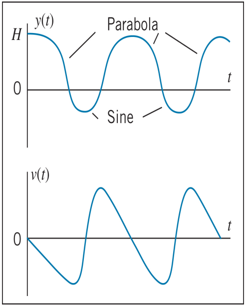
- En Mecánica Clásica, comportamiento de una masa puntual sujeta a una determinada fuerza $\vec{F}$, $F = -\frac{dU}{dx}$, está totalmente determinado por las soluciones de la ecuación de Newton: $\vec{F} = d\vec{p}/dt \Rightarrow \vec{v}(t) \Rightarrow \vec{r}(j)$

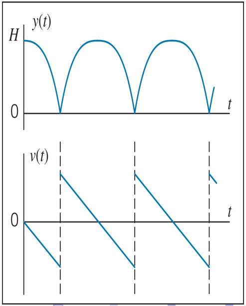
- Ejemplo: satélite moviéndose bajo la fuerza gravitacional describirá una trayectoria eliptica

- En N.R.Q.M. la ecuación a resolver es la de Schrödinger, cuyas soluciones me dan una llamada **función de onda**: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$
- $\Psi(x)$ contiene información sobre naturaleza ondulatoria de la particula
    - que **no me determina su trayectoria** como en Mecánica newtoniana
    - **cuyo cuadrado me da la densidad de probabilidad de encontrarla**

- Onda atraviesa frontera dos medios es parcialmente reflejada y transmitida
- En la frontera a un medio **prohibido** la onda puede penetrar algunas longitudes de onda en ese medio
- En una frontera finita la onda y su primera derivada son continuas.
- En una frontera infinita la onda es continua pero no su primera derivada

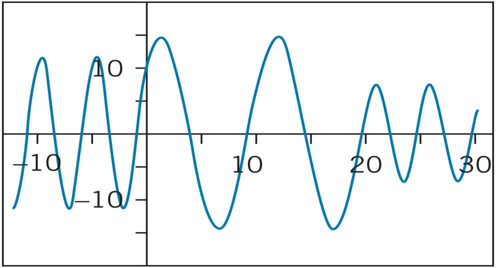






Una onda de ecuación $y_1(x) = C_1 sin(\frac{2\pi x}{\lambda_1} - \Phi_1)$ con $C_1 = 11.5$, $\lambda_1 = 4.97\ cm$ y $\Phi_1 = -65, 3^\circ$, atraviesa una región (2) de anchura $L = 20.0\ cm$ donde su longitud de onda es $\lambda_2 = 10.5\ cm$. Determinar la ecuación de la onda en (2) y en (3). Ver la figura anterior.

- $y_2(x) = C_2 sin(\frac{2\pi x}{\lambda_2} - \Phi_2)$ e $y_3(x) = C_3 sin(\frac{2\pi x}{\lambda_1} - \Phi_3)$ ecuaciones en (2) y (3)
- Continuidad en $x = 0 \Rightarrow -C_1 sin\ \Phi_1 = -C_2 sin\ \Phi_2$
- Continuidad derivada en $x = 0 \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_1} C_1 cos\ \Phi_1 = \frac{2\pi}{\lambda_2} C_2 cos\ \Phi_2$
- Dividiendo : $\phi_2 = arctan(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} tan\ \phi_1) = -45.8^\circ$ y $C_2 = C_1 \frac{sin\Phi_1}{sin\Phi_2} = 14.6\ cm$
- Continuidad en $x = L \Rightarrow C_2 sin\ (\frac{2\pi L}{\lambda_2} - \Phi_2) = C_3 sin\ (\frac{2\pi L}{\lambda_1} - \Phi_3)$
- Con. der. en $x = L \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_2} C_2 cos\ (\frac{2\pi L}{\lambda_2} - \Phi_2) = \frac{2\pi}{\lambda_1} C_3 cos\ (\frac{2\pi L}{\lambda_1} - \Phi_3)$
- Dividiendo $\Phi_3 = 60.9^\circ \Rightarrow C_3 = 7.36\ cm$

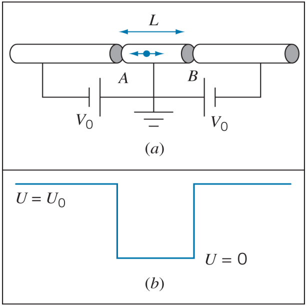


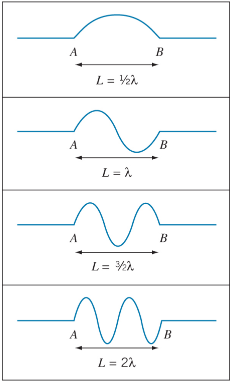
Para $x < 0$ la ecuacion de una onda es $y(x) = Acos(2\pi x/\lambda + \pi/3)$. Para $x > 0$ la longitud de onda se reduce a la mitad. Encontrar la amplitud y fase de la onda en $x > 0$

Sol:

- Para $x > 0 \Rightarrow y(x) = B\ cos\ (2\pi x/\lambda/2 + \phi) = B\ cos(4\pi x/\lambda + \phi)$
- Continuidad de la f.d.o : $x = 0 \Rightarrow A\ cos\ (\pi/3) = B\ cos\ \phi$
- Continuidad derivada : $x = 0 \Rightarrow -2\pi(A/\lambda)\ sin(\pi/3) = -4\pi(B/\lambda)\ sin(\phi)$
- Dividiendo : $tan\ \phi = 0.5 tan\ (\pi/3) \Rightarrow \phi = 40.9^\circ$
- $B = A\frac{cos\ (\pi/3)}{cos\ \phi} = 0.66\ A$

- En QM uno frecuentemente estudia particulas confinadas como electrón en un átomo
- $V = 0$ en la región central y $V = -V_0$ en laterales $\Rightarrow U = 0$, en central y $U = U_0 = (-e) \cdot (-V_0)$ en laterales.
- Un electrón en la región central con $K << U_0$ **nunca puede saltar a las regiones laterales clásicamente** : **pozo de potencial**
- Condiciones de continuidad : $y(x) = Asin\frac{2\pi x}{\lambda} \Rightarrow 2\pi L/\lambda = n\pi \Rightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$
- Por tanto $p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L} \Rightarrow E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$:**energias cuantificadas**





- Suponiendo el pozo de potencial es infinito $\Delta x = L$
- $\Delta p_x = \sqrt{< p_x^2 > - < p_x >^2}$
- Electrón en región central tiene igual probabilidad de moverse a derecha o a izquierda $\Rightarrow < p_x >= 0 \Leftrightarrow$ onda estacionaria es superposición dos ondas idénticas en sentidos opuestos
- Por otra parte $p_x^2 = (nh/2L)^2 \Rightarrow \Delta p_x = \frac{nh}{2L}$
- Por tanto $\Delta x \Delta p_x \sim \frac{nh}{2} > \frac{\hbar}{2}$ de acuerdo con relaciones incertidumbre Heisenberg

Un electrón ($m_e c^2 = 0.511\ MeV$) está atrapado en un pozo de anchura 0.1 nm. Determinar las energias de sus tres estados de energia más bajos.
Sol.

- $E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(hc)^2}{8mc^2L^2} = \frac{(1240 eV.nm)^2}{8(511.000\ \ eV)(0.1\ \ nm)^2} = 37.6\ eV$
- $E_2 = 150.4\ eV$ y $E_3 = 338.4\ eV$

Determinar la energia minima de un neutrón ($mc^2 = 940\ MeV$) confinado en una region de dimensiones nucleares 10 fm
Sol:

- $E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(hc)^2}{8mc^2L^2} = \frac{(1240\ \ MeV.fm)^2}{8(940\ \ MeV)(10\ \ fm)^2} = 2\ MeV$
- $E_2 = 8\ MeV$ y $E_3 = 18\ MeV$

- Ecuación diferencial cuyas soluciones describen el comportamiento ondulatorio de las particulas fué formulada por Erwin Schrödinger en 1926.
- Justificación : particula libre $\Rightarrow \Psi(x) = A\ sinkx$ con $k = 2\pi/\lambda$ y $K = p^2/2m = (h/\lambda)^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$
- Pero $\frac{d\Psi(x)}{dx} = kA\ coskx$ y $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -k^2 A\ sinkx = -k^2\Psi(x)$
- $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -k^2\Psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} K\Psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi(x)$
- Ecuación independiente del tiempo: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$
- Soluciones : $\Psi(x)$ para $t = 0$. Para un t arbitrario: $\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{-i\omega t}$ con $\omega = E/\hbar$
- Interpretación de $\Psi(x)$: $P(x)dx = |\Psi(x)|^2 dx \Rightarrow P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx$
- Normalización : $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$
- $< x >= \int \Psi^*(x) \cdot x \cdot \Psi(x) dx$; $< f(x) >= \int \Psi^*(x) \cdot f(x) \cdot \Psi(x) dx$

Sea la ecuación

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} + a_1 \frac{d^{n-1} f(x)}{dx^{n-1}} + a_2 \frac{d^{n-2} f(x)}{dx^{n-2}} + ... + a_{n-1} \frac{df(x)}{dx} + a_n f(x) = 0 \quad (1)$$

Si definimos simbólicamente $D = \frac{d}{dx}$ podemos re-escribirla como:

$$[D^n + a_1 D^{n-1} + a_2 D^{n-2} + ... + a_{n-1} D + a_n] f(x) = 0 \quad (2)$$

Busquemos soluciones del tipo $f(x) = Ae^{rx}$. Como $D^n(Ae^{rx}) = r^n Ae^{rx}$, sustituyendo obtendremos

$$[r^n + a_1 r^{n-1} + a_2 r^{n-2} + ... + a_{n-1} r + a_n] Ae^{rx} = 0 \Rightarrow [r^n + a_1 r^{n-1} + a_2 r^{n-2} + ... + a_n] = 0 \quad (3)$$

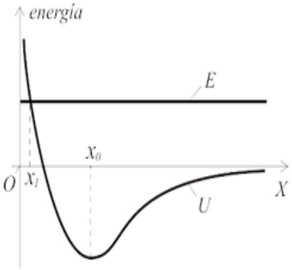
Vemos pues que la ecuación diferencial se ha convertido en una ecuación algebraica. Según el teorema general del algebra, un polinomio de grado n tiene n raices. Denotemos por r_i con $i = 1, 2, ..., n$ las raices del polinomio anterior:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} A_i e^{r_i x} \quad (4)$$

es la solución general a la ecuación diferencial dada. Las constantes A_i vendrán determinadas por las condiciones iniciales del problema i.e. por los valores de f(x) y las (n-1) derivadas en digamos $x = 0$.

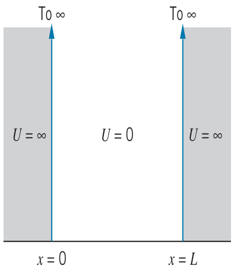
Recordatorio : particula clásica en un potencial

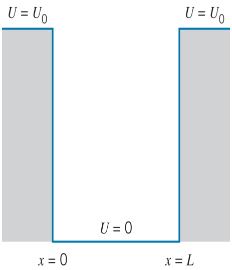
- Discutir donde la fuerza es repulsiva o atractiva
- Discutir qué zonas son permitidas o prohibidas clásicamente para una particula sujeta a un potencial como el de la figura adjunta para distintos valores de la energia total
    - positiva como ilustra la figura
    - nula
    - negativa pero por encima del minimo de potencial
    - negativa e igual al minimo de potencial
    - negativa pero por debajo del minimo de potencial

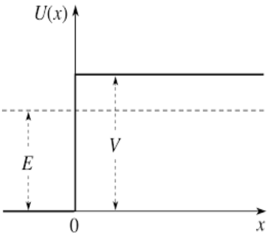


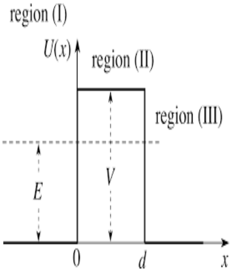
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U_0\Psi(x) = E\Psi(x)\ ;\ \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\Psi(x) = 0 \qquad (5)$$

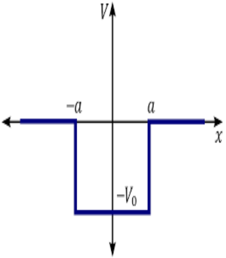
- $E > U_0$
  - $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -k^2\Psi(x)$ con $k = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$
  - $r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r_{1,2} = \pm ik \Rightarrow \Psi(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx}$
  - $\Psi(x) = A\ sinkx + B\ coskx$
- $E < U_0$
  - $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = k'^2\Psi(x)$ con $k' = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$
  - $r^2 - k'^2 = 0 \Rightarrow r_{1,2} = \pm k'$
  - $\Psi(x) = A\ e^{k'x} + B\ e^{-k'x}$

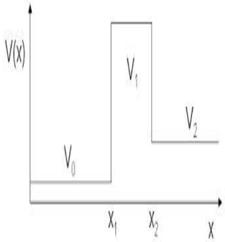

To ∞
To ∞
U = ∞
U = 0
U = ∞
x = 0
x = L

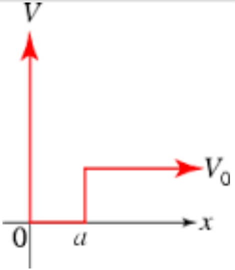

U = U0
U = U0
U = 0
x = 0
x = L

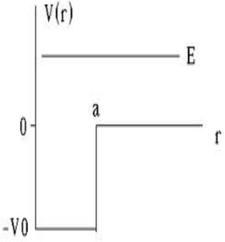

U(x)
E
V
0
x

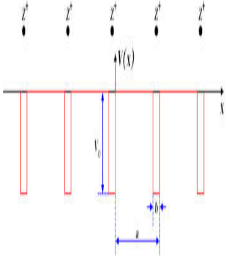

region (I)
U(x)
region (II)
region (III)
E
V
0
d
x


V
−a
a
x
−V0

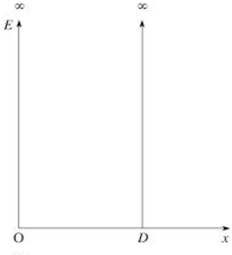

V(x)
V1
V2
V0
X1
X2
X



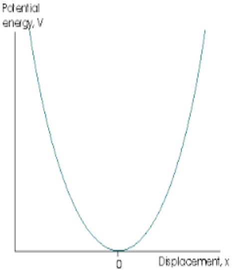




Y otros no constantes



(a)

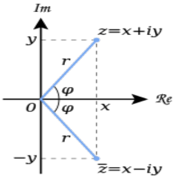


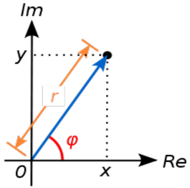
Caso particular del anterior haciendo $U_0 = 0$.

- Solución $\Psi(x) = A\ sinkx + B\ coskx$
- La energia viene dada por $E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ con $p = \hbar k \Rightarrow$ *energia no está cuantificada*
- Como $sin\ kx = (e^{ikx} - e^{-ikx})/2i$ y $cos\ kx = (e^{ikx} + e^{-ikx})/2$ $\Rightarrow \Psi(x) = A' e^{ikx} + B' e^{-ikx}$
- Solución dependiente del tiempo : $\Psi(x,t) = (A' e^{ikx} + B' e^{-ikx}) e^{-i\omega t}$
- Solución dependiente del tiempo: $\Psi(x,t) = A' e^{i(kx-\omega t)} + B' e^{-i(kx+\omega t)}$
- Primer (segundo) término describe onda en dirección OX (resp. -OX)
- Para onda según OX hago $B' = 0 \Rightarrow$Interpretación probabilistica : $|\Psi(x)|^2 = |A'|^2$

- Def: $z \in \mathbb{C} \Leftrightarrow z = (x, y)$ siendo x, y números reales
- Si $z_1 = (x_1, y_1)$ y $z_2 = (x_2, y_2)$ son dos números complejos se define
  - $z_1 + z_2 = (x_1 + x_2, y_1 + y_2)$
  - $z_1 \cdot z_2 = (x_1 x_2 - y_1 y_2, x_1 y_2 + x_2 y_1)$, en particular $i = (0, 1) \mid i^2 = -1$
  - $\forall r \in \mathbb{R} \Rightarrow r \cdot z = (rx, ry)$
  - $\forall z \Rightarrow \exists - z = (-x, -y) \mid z + (-z) = (0, 0) = 0$
  - $\forall z \neq 0; \exists z^{-1} = (\frac{x}{x^2+y^2}, \frac{-y}{x^2+y^2}) \mid z \cdot z^{-1} = (1, 0) = 1$
  - $\bar{z} = z^* = (x, -y) \mid z \cdot \bar{z} = (x^2 + y^2, 0) = |z|^2$
- Not. alt : $z = x + iy = Re\ z + i\ Im\ z$, o bien
  $z = re^{i\varphi} \equiv fórmula\ de\ Euler \mid e^{i\varphi} = cos\varphi + isin\varphi$
- $r = \sqrt{x^2 + y^2}$; $\varphi = tan^{-1}(\frac{y}{x}) + 2k\pi, k = 0, 1, 2...$
- Def. potencias
  $z^n = r^n e^{in\varphi} \Rightarrow \bar{z} = z^* = re^{-i\varphi} \mid z \cdot z^* = r^2$; $z^{-1} = r^{-1} e^{-i\varphi}$
- Def. raices $z^{1/n} = r^{1/n} e^{i\frac{\varphi + 2k\pi}{n}}$ $k = 0, 1, 2, ..., n - 1 \Rightarrow \sqrt{-1} = \pm i = e^{i \pm \pi/2}$

Ejercicio: calcula las raices cúbicas de -1!





- Ecuación de Schrödinger : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t) + U(r)\Psi(\vec{r},t)$
- Multiplicando por $\Psi^*(\vec{r},t)$:
  $i\hbar\Psi^*(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t) + \Psi^*(\vec{r},t)U(r)\Psi(\vec{r},t)$
- Para función conjugada : $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi^*(\vec{r},t) + U(r)\Psi^*(\vec{r},t)$
- Multiplicando por $\Psi(\vec{r},t)$:
  $-i\hbar\Psi(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi(\vec{r},t)\vec{\nabla}^2\Psi^*(\vec{r},t) + \Psi^(\vec{r},t)U(r)\Psi^*(\vec{r},t)$
- Restando :
  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m}[\Psi^*\vec{\nabla}^2\Psi - \Psi\vec{\nabla}^2\Psi^*] = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}[\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*]$
- Ecuación de continuidad : $\frac{\partial}{\partial t}\int \rho \, d^3\vec{r} = -\int \vec{\nabla}\cdot\vec{j}\, d^3\vec{r} = -\oint \vec{j}\cdot d\vec{S}$
- Identificando : $\rho = \Psi^*\Psi$; $\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}[\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*]$
- Para una particula libre moviéndose según OX:
  $\Psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}; \Psi^*(x,t) = A^*e^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \Rightarrow \vec{j} = \frac{\vec{p}}{m}|A|^2$

Sea X una variable aleatoria que toma valores reales. Se dice que la función $f(x)$ representa la densidad de probabilidad para X si

- $f(x) \geq 0 \ , \ \forall x$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1$

La probabilidad de que X tome valores en el intervalo $[x_1, x_2]$ es

$$P(X \in [x_1, x_2]) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx \tag{6}$$

Se define el momento n-simo como

$$< x^n >= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n f(x)dx \tag{7}$$

y puede demostrarse que conocer $f(x)$ es equivalente a conocer todos sus momentos con $n = 0, 1, 2, ...$ Los momentos más bajos, no triviales, son

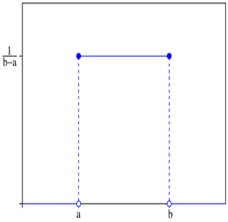
- $E(X) =< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx$ llamado valor esperado o valor medio o esperanza de X
- $E(X^2) =< x^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x)dx$ que es el momento de segundo orden

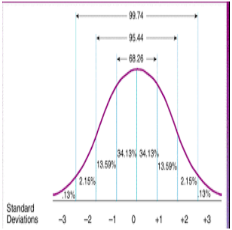
En función de los dos momentos de orden más bajo se define la desviación típica de X, σ o alternativamente Δx, como:

$$\sigma = \Delta x = \sqrt{E([X- < X >]^2)} = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} \tag{8}$$

Dos ejemplos sencillos de densidades de probablidad son:

- La distribución uniforme definida como
  - $f(x) = \frac{1}{b-a}$; $si\ x \in [a, b]$
  - $f(x) = 0$ otherwise
  - $< x >= \frac{b+a}{2}$
  - $\Delta x = \frac{b-a}{\sqrt{12}}$
- La distribución normal N(0,1)
  - f(x) $= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$
  - $< x >= 0$
  - $\Delta x = 1$





Esta última es un caso especial de $G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-(x-\mu)^2)}{2\sigma^2}}$ i.e. $N(\mu, \sigma)$ con $\mu =< x >$. Si X representa la medida de una magnitud física se dice que $\Delta x = \sigma$ es el error de X a 68% de nivel de confianza.

En una zona del espacio la función de onda de una particula viene dada por $\Psi(x) = Cxe^{-bx}$ siendo C y b constantes. Encontrar la energia potencial y la energia.
Sol.

- $d\Psi(x)/dx = Ce^{-bx} - Cbxe^{-bx}$
- $d^2\Psi(x)/dx^2 = -bCe^{-bx} - bCe^{-bx} + b^2Cxe^{-bx}$ y sustituyendo
- $-\frac{\hbar^2}{2m}(-2bCe^{-bx} + b^2Cxe^{-bx}) + U(x)Cxe^{-bx} = ECxe^{-bx}$
- Dividiendo por Cxe^{-bx} resulta $E = \frac{\hbar^2 b}{mx} - \frac{\hbar^2 b^2}{2m} + U(x)$
- Si queremos que E sea constante se deberán anular los términos dependientes de x i.e.
- Resulta $U(x) = -\frac{\hbar^2 b}{mx}$
- Entonces tendremos $E = -\frac{\hbar^2 b^2}{2m}$

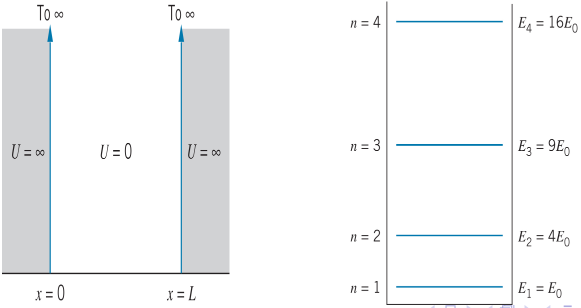
- Partícula libre OX : $\Psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p_x \cdot x - E \cdot t)}$; $\Psi^*(x,t) = A^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x \cdot x - E \cdot t)}$
- $\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{ip_x}{\hbar}\Psi(x,t) \Rightarrow \mathbf{p_x} = -\mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$
- $< p_x >= \int \Psi^*(x,t) p_x \Psi(x,t) dx = -i\hbar \int \Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) dx$
- Test de autoconsistencia sería ver que $\frac{d<x>}{dt} = \frac{<p_x>}{m}$
- $\frac{d<x>}{dt} = \frac{d}{dt}\int \Psi^*(x,t) \cdot x \cdot \Psi(x,t) = \int [\frac{iE}{\hbar}\Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) + \Psi^*(x,t)\frac{dx}{dt}\Psi(x,t) - \frac{iE}{\hbar}\Psi^*(x,t) x \Psi(x,t)] dx =< v_x >= \frac{<p_x>}{m} Q.E.D$
- $\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\Psi(x,t) \Rightarrow \mathbf{E} = \mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{t}}$

Ejemplo: Sea $\Psi(x) = Ae^{-x^2/2a^2}$. Determinar: $A, < p >, < p^2 >, < p^3 >$

- $A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} dx = A^2 a\sqrt{\pi} = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{1}{\pi^{1/4}}$
- $< p >= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2} (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) e^{-x^2/2a^2} dx = \frac{i\hbar A^2}{a^2} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2/a^2} dx = 0$
- $p^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-x^2/2a^2} = (\frac{x^2}{a^4} - \frac{1}{a^2}) e^{-x^2/2a^2}$
- $< p^2 >= -2\hbar^2 A^2 \int_0^{\infty} (\frac{x^2}{a^4} - \frac{1}{a^2}) e^{-x^2/a^2} dx \Rightarrow y = \frac{x}{a}$
- $< p^2 >= 2\hbar^2 \frac{1}{a^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (1 - y^2) e^{-y^2} dy = \frac{\hbar^2}{2a^2} \Rightarrow \Delta p_x = \frac{\hbar}{a\sqrt{2}}$
- $< x^2 >= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2/a^2} dx = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} a^3 = \frac{a^2}{2} \Rightarrow \Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}}$
- $\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \Leftrightarrow$ **función de onda gausiana satura relaciones Heisenberg**.

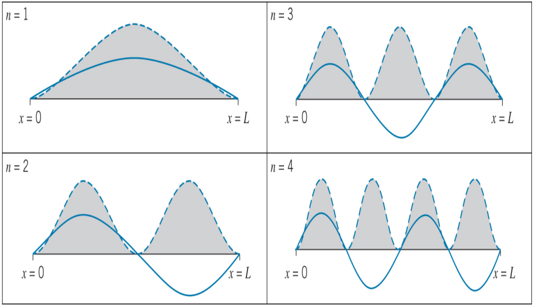
$$U(x) = 0; 0 \leq x \leq L \quad ; \quad U(x) = \infty; x < 0, x > L \tag{9}$$

- Buscamos soluciones por separado en ambas zonas i.e. $0 \leq x \leq L$ y fuera.
- $\Psi(x) = 0$ para $x < 0$ y $x > L$
- $\Psi(x) = A\ sinkx + B\ coskx$ para $0 \leq x \leq L$ con $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- Para determinar A y B aplicamos condiciones de continuidad en los bordes $x = 0, L$
  - $\Psi(0) = A\ sin0 + B\ cos0 = B = 0$
  - $\Psi(L) = A\ sinkL = 0 \Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}; n = 1, 2, \ldots$
- $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$: estado fundamental $\Rightarrow E_n = n^2 E_0$: **energias cuantizadas** $\neq 0$
- Nótese que $lim_{n\to\infty} \Delta E_n = lim_{n\to\infty} \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = lim_{n\to\infty} \frac{2n+1}{n^2} \to 0$



- $\int_0^L A^2 sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = A^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin \frac{n\pi x}{L}; n = 1, 2, ...$
- $\int_0^L \Psi_n(x) \cdot \Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$
- Si Ψ es solución general $\Rightarrow \Psi = \sum_i A_i \Psi_i(x) \Rightarrow A_j = \int_0^L \Psi(x) \Psi_j(x) dx$

Probabilidad encontrar particula en distintos estados en figura adjunta. Nótese, **densidad probabilidad encontrar particula clásica seria uniforme**



Un electrón está atrapado en un potencial de longitud $L = 0.1nm$. Determinar:

- la energia del estado fundamental y de los dos primeros estados excitados
- que energia hay que suministrar al electron para llevarle del estado fundamental al segundo nivel excitado
- cuando el electrón salta del segundo nivel excitado al primero, que cantidad de energia es emitida

Solución:

- $E_0 = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(hc)^2}{8mc^2L^2} = \frac{(1240eV.nm)^2}{8 \cdot 511\ \ KeV(0.1nm)^2} = 37.6\ eV$
    - Para $n = 2 \Rightarrow E_2 = 4E_0 = 150.4\ eV$
    - Para $n = 3 \Rightarrow E_3 = 9E_0 = 338.4\ eV$
- Para que el electrón salte del estado fundamental al segundo estado excitado le hemos de suministrar $\Delta E = E_2 - E_0 = 300.8eV$
- Cuando el electrón salta de E_1 a E_0 emite una energia de $\Delta E = E_3 - E_2 = \ 188\ eV$

Seguimos con el electrón del ejemplo anterior. Determinar:

- en el estado fundamental la probabilidad de encontrarle entre $x = 0.009\ nm$ y $x = 0.011\ nm$
- en el primer estado excitado la probabilidad de encontrarle entre $x = 0$ y $x = 0.025\ nm$
- $< x >$ para cualquier estado

Solución:

- $P(x)dx = |\Psi(x)|^2 dx = \frac{2}{L} sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = \frac{2}{0.1\ \ nm} sin^2 \frac{\pi 0.01\ \ nm}{0.1\ \ nm} 0.002\ nm = 0.0038 = 0.38\%$
- $P(x_1, x_2) = 2/L \int_{x_1}^{x_2} sin^2 \frac{2\pi x}{L} dx = (\frac{x}{L} - \frac{1}{4\pi} sin \frac{4\pi x}{L})_{x_1}^{x_2} = 0.25 = 25\%$
- $< x > = \int_0^L |\Psi(x)|^2 x dx = 2/L \int_0^L x sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{L}{2} \Rightarrow medir < x >$ $no\ dice\ en\ que\ estado\ se\ encuentra\ el\ electr\acute{o}n$ puesto que $< x > = L/2$ es independiente de n.
- Recordar $\int x sin^2 ax = \frac{x^2}{4} - \frac{x sin 2ax}{4a} - \frac{cos 2ax}{8a^2}$; $a = \frac{n\pi}{L}$

- $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin \frac{n\pi x}{L}$
- $< x >= \frac{2}{L} \int_0^L x \cdot sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} \frac{L^2}{4} = \frac{L}{2}$
- $< x^2 >= \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \cdot sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} (\frac{L}{n\pi})^3 \int_0^{n\pi} u^2 sin^2 u du \ ; \ u = n\pi x/L$
- $\int_0^{n\pi} u^2 sin^2 u du = [\frac{u^3}{6} - (\frac{u^2}{4} - \frac{1}{8}) sin 2u - \frac{u cos 2u}{4}]_0^{n\pi} \Rightarrow < x^2 >= \frac{2L^2}{(n\pi)^3} [\frac{(n\pi)^3}{6} - \frac{n\pi}{4}] = L^2 [\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}]$
- $\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} = L \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}$
- $< p >= \frac{2}{L} \int_0^L sin \frac{n\pi x}{L} (-i\hbar \frac{d}{dx}) sin \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} (-i\hbar \frac{n\pi}{L}) \int_0^L sin \frac{n\pi x}{L} cos \frac{n\pi x}{L} dx = 0$
- $< p^2 >= \frac{2}{L} \int_0^L sin \frac{n\pi x}{L} (-i\hbar \frac{d}{dx})^2 sin \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} (\frac{\hbar n\pi}{L})^2 \int_0^L sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^2}$
- Alternativa : $K = E_n \Rightarrow \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \Rightarrow p^2 = \frac{h^2 n^2}{4L^2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^2}$
- $\Delta p = \sqrt{< p^2 > - < p >^2} = \frac{nh}{2L} = \frac{n\pi\hbar}{L}$
- $\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}} \frac{nh}{2} = \frac{h}{2} \sqrt{\frac{n^2}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}$
- $\Delta x \Delta p = 0.09h = 0.57\hbar$ para n=1, donde tiene el minimo, y crece con n.

Ejemplo :$U_0 = 400\ eV$ y suponemos $E < U_0$

$$U(x) = 0; 0 \leq x \leq L \tag{10}$$

$$U(x) = U_0; x < 0, x > L \tag{11}$$

- $0 \leq x \leq L \Rightarrow \Psi_0(x) = Asinkx + Bcoskx$
- $x < 0 \Rightarrow \Psi_1(x) = Ce^{k'x}$. $\nexists De^{-k'x}$ porque $\uparrow, x \rightarrow -\infty$.
- $x > L \Rightarrow \Psi_2(x) = Ge^{-k'x}$. $\nexists Fe^{k'x}$ porque $\uparrow, x \rightarrow +\infty$.
- $\Psi_0(0) = \Psi_1(0) \Rightarrow B = C$; $\Psi_0'(0) = \Psi_1'(0) \Rightarrow Ak = Ck' \Rightarrow C = B = Ak/k'$
- $\Psi_0(L) = \Psi_2(L) \Rightarrow AsinkL + Ak/k' coskL = Ge^{-k'L}$
- $\Psi_0'(L) = \Psi_2'(L) \Rightarrow AkcosKL - Ak^2/k' sinKL = -Gk' e^{-k'L}$
- Dividiendo estas dos últimas ecuaciones resulta una ecuación entre k y k'

$$-k' = \frac{kcoskL - k^2/k' sinkL}{sinkL + k/k' coskL} \tag{12}$$

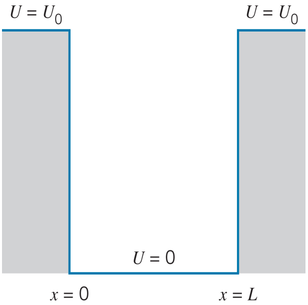
  que hay que resolver para determinar E numéricamente.
- Recordemos que $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $k' = \sqrt{2m(U_0 - E)}//\hbar$

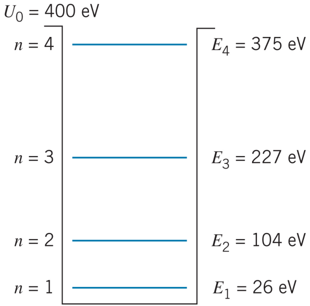
Ejemplo :$U_0 = 400\ eV$; $L = 0.1\ nm$

$$U(x) = 0; 0 \leq x \leq L \tag{13}$$

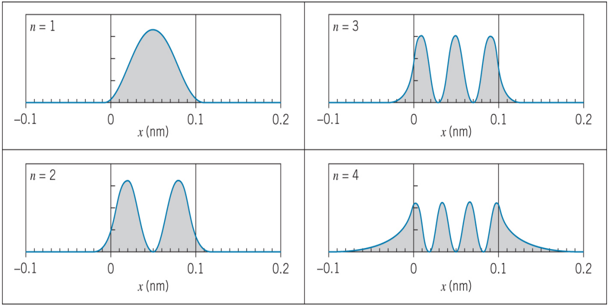
$$U(x) = U_0; x < 0, x > L \tag{14}$$

- Niveles energia primeros cuatro estados figura adjunta, ningún nivel puede superar U_0, niveles energia menores que en pozo infinito misma anchura.
- Las diferencias se acentúan cuando $n \to 4$
- Δx pozo finito mayor que en infinito, debido a penetración en $x < 0$ y $x > L$, luego Δp_x será menor, luego menor $K = E$

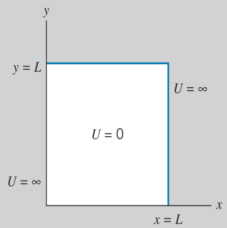


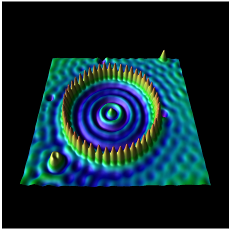


- Las densidades de probabilidad de los cuatro primeros estados excitados exhiben la penetración en zonas prohibidas clásicamente. Esta penetración aumenta si n crece, luego $\Delta x \uparrow$ si $n \uparrow \Rightarrow \Delta p \downarrow \Rightarrow$ diferencias entre estados con un mismo n en pozo infinito y finito aumentan si $n \uparrow$.
- Para $n = 4$ estoy cerca de U_0 necesito poca ΔE para saltar fuera del pozo, luego $\Delta t \uparrow \Rightarrow \Delta x \uparrow$
- Para $n = 1$ estoy lejos de U_0 necesito ΔE grande para saltar fuera del pozo, luego $\Delta t \downarrow \Rightarrow \Delta x \downarrow$
- Nótese la continuidad de la función de onda y su derivada en $x = 0$ y $x = L$



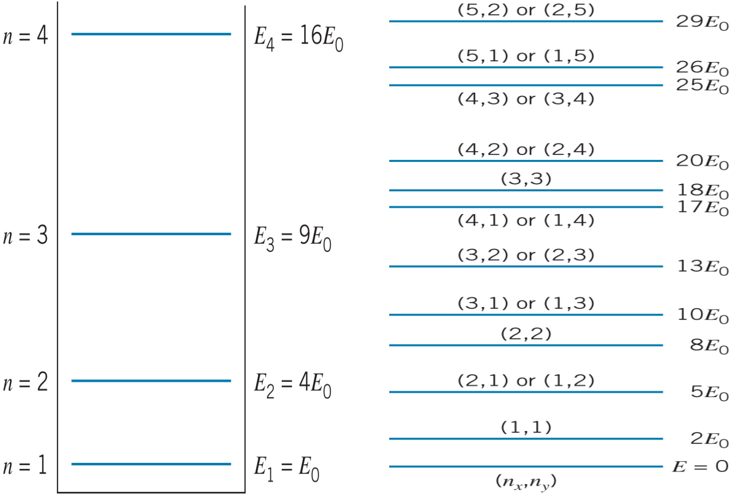
- $-(\hbar^2/2m)\{\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial y^2}\} + U(x,y)\Psi(x,y) = E\Psi(x,y)$
- $U(x,y) = 0$; $0 \leq x \leq L; 0 \leq y \leq L$; $U(x,y) = \infty; otherwise$
- Busquemos soluciones separables i.e. $\Psi(x,y) = f(x)g(y)$
- $f(x) = A\ sink_x x + B\ cosk_x x$; $g(y) = C\ sink_y y + D\ cosk_y y$
- Cond. contorno : $\Psi(0,y) = \Psi(L,y) = 0$; $\forall y$; $\Psi(x,0) = \Psi(x,L) = 0;\ \forall x$
- Lueg $f(0) = 0 \Rightarrow B = 0$ y $g(0) = 0 \Rightarrow D = 0$
- Y $f(L) = 0 \Rightarrow k_x L = n_x\pi$; $g(L) = 0 \Rightarrow k_y L = n_y\pi$
- $\Psi(x,y) = A' sin\frac{n_x\pi x}{L} sin\frac{n_y\pi y}{L} \Rightarrow A' = \frac{2}{L} \mid \int_0^L \int_0^L |\Psi|^2 dxdy = 1$
- $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2) = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2) = E_0(n_x^2 + n_y^2)$; $E_0 = \frac{h^2}{8mL^2}$
- Pozo potencial infinito tridimensional : **quantum dot**



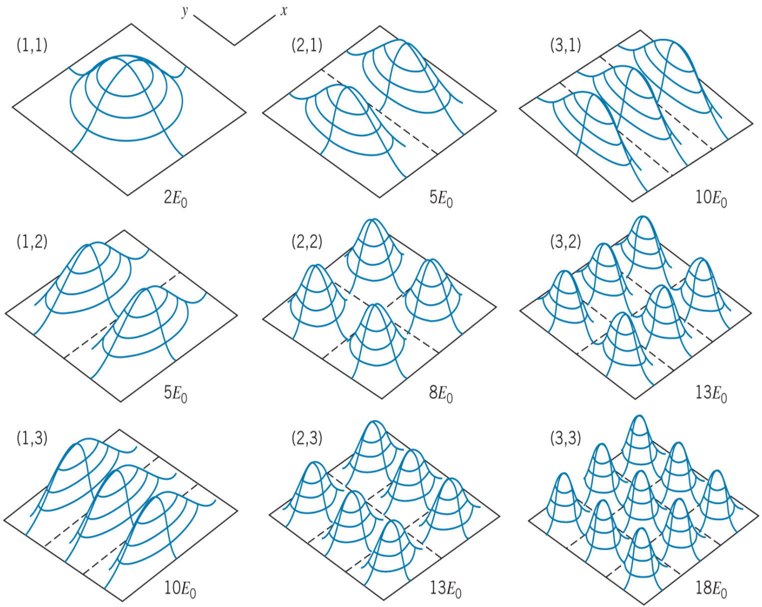


Son el análogo clásico al corral cuántico de la figura anterior. La figura muestra lineas nodales en algunos modos normales de vibración de un timbal.

Comparativa niveles energia pozo infinito uni - y bidimensional L=0.1 nm



Pozo potencial infinito bidimensional



- Figura anterior muestra ciertas correlaciones entre posiciones máximos y minimos con la energia
- Ejemplo : para $E = 8E_0$ cuatro máximos centrados en $x = L/4$ o $y = L/4$
- También ocurre que para una misma energia puedo tener dos distribuciones diferentes de máximos y minimos, como ocurre para dos estados con $E = 13\ E_0$ pero $n_x \Leftrightarrow n_y$
- Se dice estos estados son degenerados : números cuánticos diferentes, $n_x, n_y \Rightarrow$ *misma E*
- Ejemplo llamativo en figura adjunta a $E = 50\ E_0$: triplemente degenerado (1,7), (7,1), (5,5)