SEGUNDO PARCIAL DE FÍSICA 4 - RESUELTO
MECÁNICA CUÁNTICA - 10/07/2013

1. Un gas contiene átomos de hidrógeno en estado excitado, que al pasar al estado fundamental emiten fotones. Los fotones inciden sobre una placa metálica produciendo efecto fotoeléctrico. El metal tiene función de trabajo $\phi = 2\,\text{eV}$.

   a) Suponiendo que el estado excitado sea el correspondiente a $n = 2$ en el modelo de Bohr, calcular la energía cinética máxima de los electrones emitidos por efecto fotoeléctrico. ¿Cuánto variará la energía cinética máxima si el número de átomos excitados se duplica? ¿Cuánto variará la corriente, medida con un amperímetro conectado a la placa, en ese caso? ¿Qué sucede con la corriente si en lugar de duplicar el número de átomos excitados se supone que el nivel es $n = 4$ en lugar de $n = 2$?

   b) Suponga ahora que el nivel n del nivel excitado es desconocido, pero se observa que el potencial de frenado para que la corriente fotoeléctrica sea nula es $V_0 = 10{,}089\,\text{V}$. Calcular n.

   c) Si en lugar de átomos de hidrógeno se tratase de átomos hidrogenoides con $Z = 4$, ¿cuánto valdría el potencial de frenado para el caso en el que el nivel de excitación es $n = 2$?

Solución ítem *a*) Las energías en el modelo de Bohr estan dadas por la expresión:

$$E_n = -\frac{13{,}6\,\text{eV}}{n^2} \tag{1}$$

El fotón emitido en la transición $E_2 \to E_1$ tendrá una energía $\Delta E = E_2 - E_1 = 0{,}75 \times 13{,}6\,\text{eV} = h\nu$. De la teoría del efecto fotoelétrico sabemos que la energía cinética máxima E_c^{max} esta dada por:

$$E_c^{max} = h\nu - \phi \tag{2}$$

por lo tanto, en este caso, $E_c^{max} = 0{,}75 \times 13{,}6\,\text{eV} - 2\,\text{eV} = 8{,}2\,\text{eV}$.
Si el número de átomos excitados se duplica, aumentará el número de fotones emitidos, no así su energía, por lo tanto E_c^{max} no se modificará. Por otra parte, la corriente aumentará, ya que el número de electrones arrancados del metal lo hará.
Si cambiamos el nivel excitado de 2 a 4, la corriente aumentará porque la energía cinética de los electrones aumenta y, aunque el número de electrones arrancados es el mismo, su velocidad es mayor.

Solución ítem *b*) En este caso conocemos $E_c^{max} = 10{,}089\,\text{eV}$, ya que el potencial de frenado multiplicado por el carga del electrón (e) nos indica el trabaja necesario para frenarlo, expresado en electrón-volts:

$$E_c^{max} = eV_0 \tag{3}$$

Con este dato es sencillo obtener n usando (2), $E_c^{max} + \phi = h\nu = \Delta E$. Así

$$12{,}089\,\text{eV} = 13{,}6\,\text{eV}\left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \Rightarrow n = 3. \tag{4}$$

Solución ítem *c*) Para un átomo hidrogenoide, la ecuación (1) se generaliza a:

$$E_n = -13{,}6\,\text{eV}\frac{Z^2}{n^2} \tag{5}$$

Por lo tanto, $E_c^{max} = 0{,}75 \times 16 \times 13{,}6\,\text{eV} - 2\,\text{eV} = 161{,}2\,\text{eV}$ y el potencial de frenado será $V_0 = 161{,}2\text{V}$.

2. Considere el siguiente potencial (pozo infinito) en 2 dimensiones $V(x,y) = V_x(x) + V_y(y)$, donde:

$$V_x(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a/2 \\ \infty & |x| > a/2 \end{cases}; \quad V_y(y) = \begin{cases} 0 & |y| \leq b/2 \\ \infty & |y| > b/2 \end{cases}$$

con a y b constantes mayores que cero.

a) Halle las autofunciones y autovalores de la energía para una partícula de masa m.

b) Para los dos primeros niveles, discuta la degeneración en los casos:

1) $a = b$
2) $a > b$

Solución ítem *a*) Dado que el potencial es separable, la energía total serán la suma de los autovalores de ambos potenciales unidimensionales y las autofunciones el producto de las correspondientes a cada uno de ellos. Explícitamente:

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n_x^2 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2mb^2}n_y^2 \tag{6}$$

y las autofunciones serán el producto $\varphi_{n_x n_y}(x,y) = \phi_{n_x}(x)\phi_{n_y}(y)$ donde

$$\phi_{n_x}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi x/a) & n_x\,\text{impar} \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(n\pi x/a) & n_x\,\text{par} \\ 0 & \text{fuera del pozo} \end{cases}; \quad \phi_{n_y}(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{b}}\sin(n\pi y/b) & n_y\,\text{impar} \\ \sqrt{\frac{2}{b}}\cos(n\pi y/b) & n_y\,\text{par} \\ 0 & \text{fuera del pozo} \end{cases} \tag{7}$$

Solución ítem *b*) En el caso $a = b$, $E_{n_x,n_y} = E_1\left(n_x^2 + n_y^2\right)$ donde $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$. El nivel fundamental corresponde a los números cuánticos $n_x = n_y = 1$ y no es degenerado. El primer excitado es $n_x = 1$, $n_y = 2$ ó $n_x = 2$, $n_y = 1$ y tiene por lo tanto degeneración 2.

En el caso $a > b$, la energía puede ponerse como $E_{n_x,n_y} = E_1\left[n_x^2 + \left(\frac{a}{b}\right)^2 n_y^2\right]$ donde, por enunciado, $a/b > 1$. El estado fundamental vuelve a ser $n_x = n_y = 1$ y es no degenerado. El primer excitado ahora es $n_x = 2$, $n_y = 1$ y también es no degenerado. Por ser $a > b$, el estado $n_x = 1$, $n_y = 2$ es de mayor energía que el primer excitado.

3. Considere una partícula de masa m moviéndose en una circunferencia de radio R.

   a) Escriba el hamiltoniano del sistema. Expréselo en coordenadas cilíndricas.

   b) Encuentre las autofunciones y sus autovalores.

   c) Considere ahora un campo magnético aplicado perpendicularmente a la circunferencia. Si la partícula tiene carga q y espín cero, ¿cómo se modifican las autofunciones y sus autovalores?

Ayuda: si $\mathbf{B} = B\hat{z}$, el potencial vector $\mathbf{A}$ puede ponerse en la forma $\mathbf{A} = \frac{BR}{2}\hat{\theta}$.
En cilíndricas $\nabla\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\hat{z}$.

Solución ítem *a*) La partícula se mueve libremente en un anillo de radio R. El hamiltoniano es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \frac{\hat{p}_\theta^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} \tag{8}$$

donde hicimos uso de la ayuda y, siguiendo el enunciado, consideramos a θ como la única variable.

Solución ítem *b*) La ecuación de Schröedringer independiente del tiempo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\theta^2} = E\psi \tag{9}$$

La solución es conocida, $\psi = A\exp(in\theta)$. La condición de contorno que debe cumplir ψ es ser univaluada al completar un giro: $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$. Esto implica $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. Por último, la condición de normalización determina el valor de A:

$$\int_0^{2\pi} \psi^*(\theta)\psi(\theta)\mathrm{d}\theta = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{10}$$

Reemplazando en (9):

$$\frac{\hbar^2}{2mR^2}n^2 = E_n \tag{11}$$

obtenemos los autovalores.

Solución ítem *c*) Hay dos maneras de resolver este punto. Como la partícula tiene espín cero, el campo producirá el efecto Zeeman "normal". El hamiltoniano es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_\theta^2}{2m} - \frac{\mu_B B}{\hbar}\hat{L}_z \tag{12}$$

donde $\mu_B = q\hbar/2m$ es el magnétón de Bohr. Esta solución es una aproximación, ya que despreciamos el término diamagnético. Dado que, en polares, $\hat{L}_z = R\hat{r} \times p_\theta\hat{\theta} = Rp_\theta = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}$ es fácil ver que las autofunciones no cambian ya que:

$$\hat{L}_z\psi(\theta) = n\hbar\psi(\theta) \tag{13}$$

son autofunciones comunes. Las energías, por otro lado, se modifican porque pasan a depender del momento angular en $\hat{z}$:

$$E = \frac{\hbar^2}{2mR^2}n^2 - \mu_B Bn \tag{14}$$

Otra forma de resolver el problema, sin ninguna aproximación, es trabajar con el momento generalizado:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_\theta - q\frac{BR}{2}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} + i\frac{\hbar q B}{2m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} + \frac{q^2B^2R^2}{8m}$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} - \frac{\mu_B B}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right) + \frac{q^2B^2R^2}{8m} \quad (15)$$

Si comparan esta expresión con (12) pueden ver que solo se agrega un corrimiento a la energía y por lo tanto el análisis anterior sigue siendo válido.

4. El electrón de un átomo de hidrógeno se encuentra en el estado descripto por la función de onda

$$\Psi = A\left(\psi_{100} + 2\psi_{210} + 2\psi_{211} - \psi_{21-1}\right).$$

Las funciones ψ_{nlm} son las autofunciones normalizadas del sistema.

a) Normalice la función de onda.

b) Encuentre los valores medios de $\hat{H}$, $\hat{L^2}$ y $\hat{L}_z$.

c) Considere ahora el acoplamiento espín–órbita del electrón, $H_{SO} = f(r)\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}f(r)\left(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2\right)$ donde $f(r)$ es una función radial y $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. ¿Cuántos valores distintos de energía pueden medirse si el sistema esta en la función de onda del enunciado?

Solución ítem *a*)

$$\int \Psi^*\Psi \mathrm{d}^3r = A^2(1+4+4+1) = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{10}}. \quad (16)$$

Solución ítem *b*) Los valores medios son inmediatos, dado que las ψ_{nlm} son autofunciones de todos los operadores pedidos:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \frac{1}{10}(E_1 + 9E_2) = \frac{1}{10}\left(E_1 + 9\frac{E_1}{4}\right) = \frac{13}{40}E_1 \\
\langle \hat{L}^2 \rangle &= \frac{1}{10}\left(0 + 9\times 2\hbar^2\right) = \frac{18}{10}\hbar^2 \\
\langle \hat{L}_z \rangle &= \frac{1}{10}(0 + 4\times 0 + 4\hbar - \hbar) = \frac{3}{10}\hbar
\end{aligned} \quad (17)$$

Solución ítem *c*) Para la función de onda del enunciado tenemos $\ell = 0, 1$ y, por supuesto, $s = 1/2$. Los valores de j posibles son:

$$\begin{aligned}
\ell = 0 &\Rightarrow j = 1/2 \\
\ell = 1 &\Rightarrow j = 1/2, 3/2
\end{aligned} \quad (18)$$

El término de espín–órbita modificará las energías, estando el cambio dado por el término

$$E_{SO} \propto \hbar^2\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right] \quad (19)$$

Así para el estado 100, $E_{SO} = 0$, mientras que los estados $21m$ se separarán en dos energías distintas con $E_{SO} \propto -2\hbar^2$ ($j = 1/2$) y $E_{SO} \propto \hbar^2$ ($j = 3/2$). En total hay pues tres valores distintos de energías que pueden medirse.