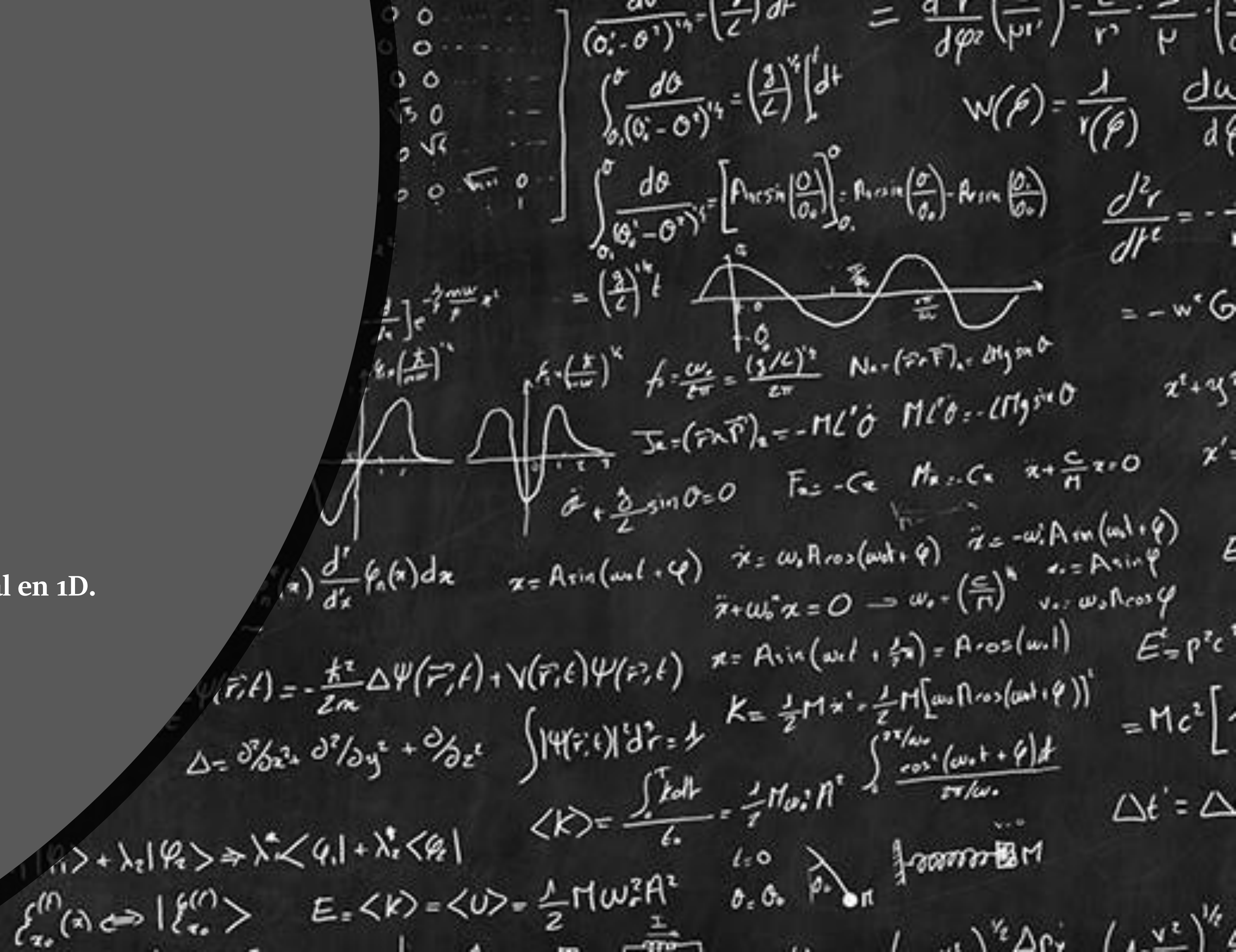
Física 4

Guía 7: Pozos de potencial en 1D. Oscilador armónico.

(27/10)

2C 2021. Clase Giribet



1. Considere el siguiente potencial (pozo infinito):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a/2 \\ \infty & |x| > a/2 \end{cases}$$

donde a es una constante y representa el ancho del pozo.

(a) Halle las autofunciones de $\hat{H}$ y los niveles de energía de una partícula de masa m.

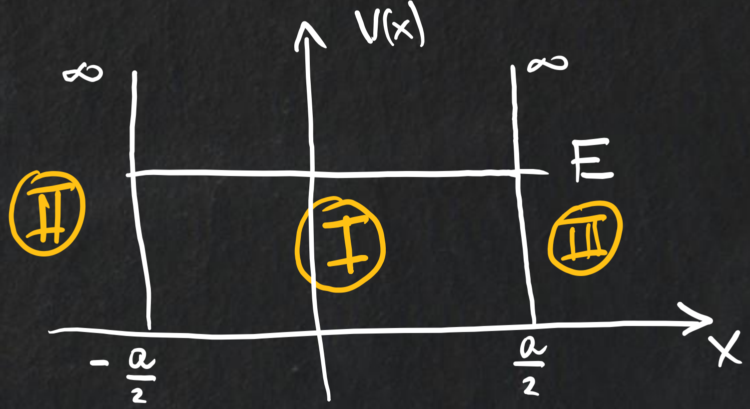
(b) Grafique φ_1, φ_2, φ_3 y φ_4 y sus módulos al cuadrado, donde las φ_i son las funciones de onda de los primeros cuatro estados de la partícula.

(c) Calcule la probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $(0, a/4)$ para estos cuatro autoestados.

(d) Calcule $<x>$, $<p>$, $<x^2>$, $<p^2>$, Δx, Δp y $\Delta x \Delta p$ para los mismos cuatro estados.

(e) Calcule y grafique la probabilidad de que la partícula tenga momento lineal p para el primer autoestado y para uno de n grande.

(f) Escriba una expresión general para $\psi(x,t)$.



Se usa para representar las propiedades de una partícula libre en una caja.

(a) Hallar las autofunciones y sus autoenergías

- II y III $\varphi_{II}(x) = 0 = \varphi_{III}(x)$, ya que la partícula no puede estar allí:

- En I resolvemos la ec. de Schrödinger indep. de t:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi_I}{\partial x^2} + 0 \cdot \varphi_I = E\,\varphi_I \Rightarrow \varphi_I''(x) = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv k^2}\varphi_I(x)$$

Las soluciones son senos y cosenos o exp. complejas

$$\Rightarrow \quad \varphi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

- La función de onda debe satisfacer:
  - Debe ser normalizable
  - Debe ser continua
  - Su derivada es continua salvo que el potencial tenga una discontinuidad infinita.

Como condiciones de empalme imponemos:

$$\varphi_I\left(+\frac{a}{2}\right) = 0 = A e^{ik\frac{a}{2}} + B e^{-ik\frac{a}{2}} = \underbrace{A e^{ik\frac{a}{2}} - A e^{-ika} e^{-ik\frac{a}{2}}} = 0$$

$$\varphi_I\left(-\frac{a}{2}\right) = 0 = \underbrace{A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}}}_{B = -A e^{-ika}}$$

$$A e^{ika} - A e^{-ika} = 0$$

$$2iA\,\mathrm{sen}(ka) = 0$$

k es discreto

$$\Rightarrow \mathrm{sen}(ka) = 0 \Rightarrow \boxed{k_n = \frac{n\pi}{a}}$$

La energía es discreta: $K_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_n \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2 \underset{n \geq 1}{=} E_1 n^2}$

$$\varphi_n(x) = A e^{iK_n x} + B e^{-iK_n x} = A e^{iK_n x} - A e^{-iK_n(x+a)}$$

$$\varphi_n(x) = A e^{-iK_n \frac{a}{2}} \left[e^{iK_n\left(x+\frac{a}{2}\right)} - e^{-iK_n\left(x+\frac{a}{2}\right)} \right]$$

$$\varphi_n(x) = \underbrace{A\, 2i\, e^{-iK_n\frac{a}{2}}}_{\equiv C} \operatorname{sen}\left(K_n\left(x+\frac{a}{2}\right)\right) \underset{K_n = \frac{n\pi}{a}}{=} \boxed{C_n \operatorname{sen}\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right] = \varphi_n(x)}$$

- C_n se determina normalizando las $\varphi_n(x)$

normalização:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1 = \int_{-\frac{a}{2}}^{a/2} \underbrace{|\varphi_I^{(n)}(x)|^2}_{\varphi_n^*(x)\cdot\varphi_n(x)} dx = |C_n|^2 \int_{-a/2}^{a/2} \operatorname{sen}^2\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right] dx$$

Como $\cos(2\alpha) = \underbrace{\cos^2(\alpha)}_{1-\operatorname{sen}^2(\alpha)} - \operatorname{sen}^2(\alpha) = 1 - 2\operatorname{sen}^2(\alpha) \Rightarrow \operatorname{sen}^2(\alpha) = \frac{1}{2}\left[1-\cos(2\alpha)\right]$

$$1 = \frac{|C_n|^2}{2} \int_{-a/2}^{a/2} \left\{1 - \cos\left[2n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right]\right\} dx = \frac{|C_n|^2}{2}\left[a \underbrace{- \frac{a}{2n\pi}\operatorname{sen}\left(2n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right)\Big|_{-\frac{a}{2}}^{a/2}}_{=0}\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{|C_n| = \sqrt{2/a}}$$

$\sin(\alpha+\beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) + \cos(\alpha)\sin(\beta)$

- Tenemos que:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right) = \sqrt{\frac{2}{a}}\left[\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\underbrace{\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)}_{\substack{\text{no nulo} \\ \text{para } n \\ \text{PAR}}} + \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)}_{\substack{\text{no nulo} \\ \text{para } n \\ \text{IMPAR}}}\right]$$

Otra forma

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n \text{ IMPAR} \rightarrow \text{FUNC. PARES} \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n \text{ PAR} \rightarrow \text{FUNC. IMPARES} \end{cases}$$

Vemos que las soluciones tienen paridad definida.

• ¿Qué pasa si $E=0$ o $E<0$?

$\longrightarrow E=0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_I'' = E\varphi_I = 0 \Rightarrow \varphi_I''=0 \Rightarrow \varphi_I(x) = \alpha x + \beta$

Si imponemos
$$\left.\begin{aligned} \varphi_I(a/2) &= 0 = \frac{\alpha a}{2} + \beta = 0 \\ \varphi_I(-a/2) &= 0 = -\frac{\alpha a}{2} + \beta = 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \alpha = 0 = \beta$$

NO ES POSIBLE ESTE ESTADO PARA LA PARTÍCULA

$\longrightarrow E<0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_I'' = E\varphi_I \Rightarrow \varphi_I'' = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}E}_{\equiv \rho^2}\varphi_I$

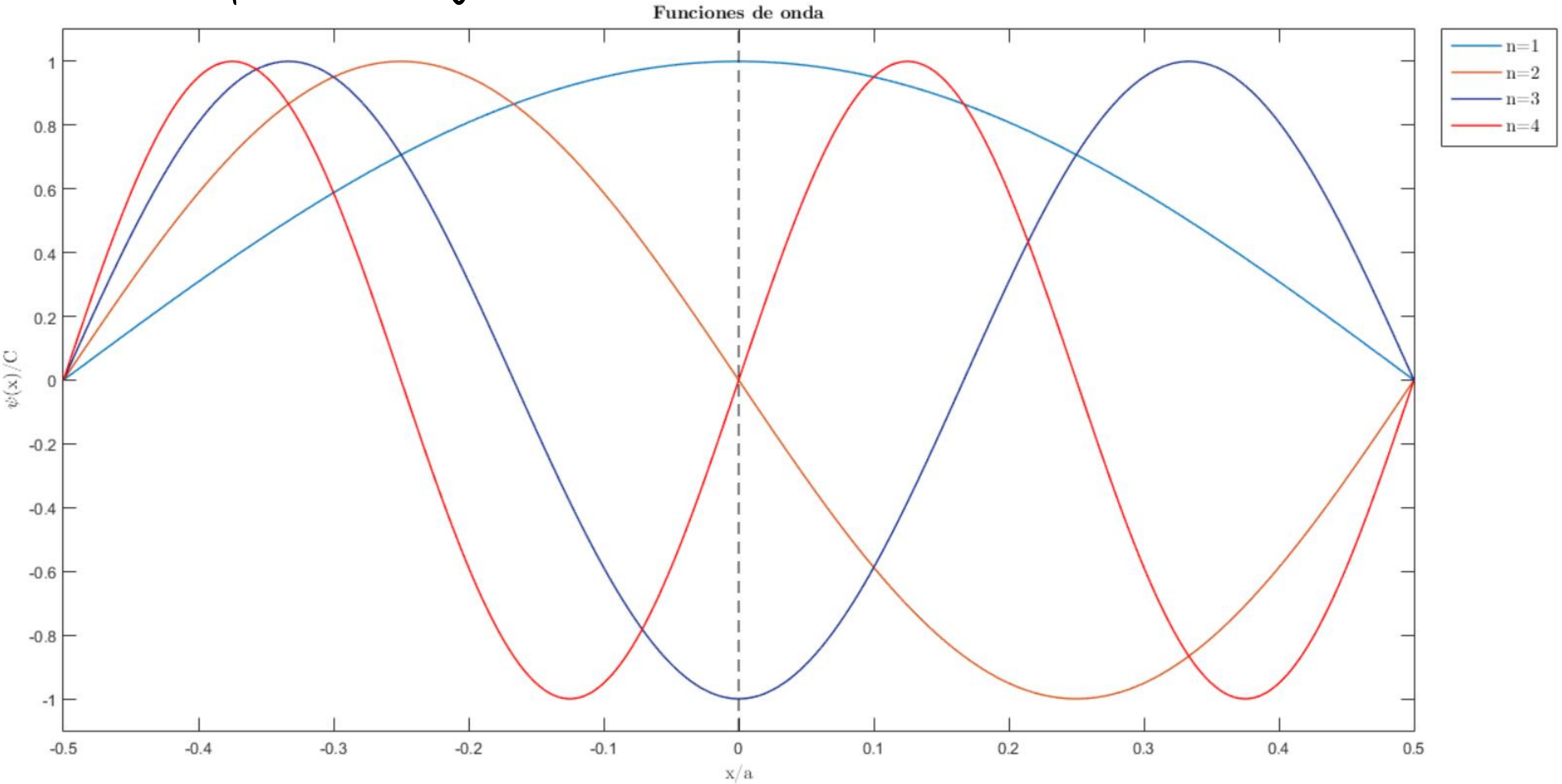
$$\varphi_I(x) = Ae^{\rho x} + Be^{-\rho x}$$

no puede satisfacer simultáneamente

$\varphi_I(a/2) = 0 = \varphi_I(-a/2)$

ABSURDO y $E \not< 0$.

(b) Vemos que las autofunciones tienen paridad definida



(c) Ejemplo:

$$P\left(-\frac{a}{4} \leq X \leq \frac{a}{4}\right) = \int_{-\frac{a}{4}}^{a/4} |\varphi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{4}}^{a/4} \operatorname{sen}^2\left(n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right) dx$$

$$\operatorname{sen}^2(\alpha) = \frac{1}{2}\left(1-\cos(2\alpha)\right)$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{n\pi}\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases} 1/2, & n \text{ PAR} \\ \text{otra cosa}, & n \text{ IMPAR} \end{cases}$$

Para n SUF GRANDE

$$P \sim \frac{1}{2}$$

(d) Calcula $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, Δx y Δp para n genérico.

$$\langle x\rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \varphi_n^*(x)\, x\, \varphi_n(x)\, dx = \int_{-a/2}^{a/2} \underbrace{x}_{\text{IMPAR}} \underbrace{|\varphi_n(x)|^2}_{\text{FUNCIÓN PAR } \forall n} dx = 0 \quad (*)$$

Estamos integrando FNC. IMPAR en intervalo SIMÉTRICO

$$\langle p\rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \varphi_n^*(x)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x)\, dx \quad \text{donde} \quad \varphi_n(x) = \begin{cases} A_n \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & n \text{ IMPAR} \\ B_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & n \text{ PAR} \end{cases}$$

n IMPAR

FUNCIÓN IMPAR

$$\langle p\rangle \propto \int_{-a/2}^{a/2} \begin{Bmatrix} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \end{Bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} -\frac{n\pi}{a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ \frac{n\pi}{a}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \end{Bmatrix} dx = 0$$

n PAR

POR PARIDAD (*)

$$(\Delta x)^2 = \langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \underbrace{\langle x\rangle^2}_{0} = \langle x^2\rangle$$

$$\langle x^2\rangle = \int_{-a/2}^{a/2} x^2 |\varphi_n(x)|^2 = |C|^2 \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \operatorname{sen}^2\left(n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right) dx$$

$$\boxed{\langle x^2\rangle = \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2}}$$

(¡Ejercicio!)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \underbrace{\langle p\rangle^2}_{=0} = \langle p^2\rangle = \int_{-a/2}^{a/2}\varphi_n^*(x) \underbrace{\left(-\hbar^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x)}_{2mE_n\varphi_n(x)}\, dx$$

$$(\Delta p)^2 = 2mE_n \underbrace{\int_{-a/2}^{a/2}|\varphi_n(x)|^2\, dx}_{=1 \text{ (por normalización)}} = \boxed{\frac{\hbar^2\pi^2}{a^2} n^2 = \langle p^2\rangle = (\Delta p)^2}$$

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\underbrace{\left[\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2\right]}_{>1} \Rightarrow \boxed{\Delta x\,\Delta p > \frac{\hbar}{2}}$$

Se satisface el principio de incerteza.

ⓔ Si $|\varphi(x)|^2 dx$ representa la prob. de que la part. esté entre x y $x+dx$, entonces

$|\phi(p)|^2 dp$ es la prob de que la partícula tenga momento de valor entre p y $p+dp$.

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\, e^{-i\frac{p x}{\hbar}}\, dx = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\frac{a}{2}}^{a/2}\varphi_I^{(n)}(x)\, e^{-i\frac{px}{\hbar}}\, dx$$

Para hacer esta cuenta conviene escribir:

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \frac{e^{\frac{i\pi x}{a}} - e^{-\frac{i\pi x}{a}}}{2i}$$

Ejercicio: ¡Seguir la cuenta!

(f) Escribir la solución general $\psi(x,t)$

La ec. de Schrödinger dep. del tiempo:

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

Proponemos como solución $\psi(x,t) = \varphi(x)\,\chi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi(t)\,\varphi''(x) + V(x)\,\varphi(x)\,\chi(t) = i\hbar\,\varphi(x)\,\chi'(t)$$

$$\rightarrow \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x)}_{=\,\text{cte}} = \underbrace{i\hbar\frac{\chi'(t)}{\chi(t)}}_{=\,\text{cte}\,\equiv\,E} \longrightarrow \begin{cases} i\hbar\,\chi'(t) = E\,\chi(t) \\ \Rightarrow \boxed{\chi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\,\varphi(x) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_n(x,t) = \varphi_n(x)\,e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}}$$

La solución general es una superposición de estas autofunciones:

$$\boxed{\psi(x,t) = \sum_{m} A_m \varphi_m(x)\, e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}}}$$

13

13. Sea una partícula de masa m en un pozo de potencial infinito de ancho a. En $t = 0$ el estado del sistema es $\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x)$, donde las $\varphi_n(x)$ son las autofunciones de $\hat{H}$.

(a) ¿Cuál es la probabilidad P de que una medición de la energía de la partícula, efectuada en un instante t cualquiera, dé un resultado mayor que $5E_1$, siendo E_1 la energóa del estado fundamental? Si $P = 0$,¿cuáles coeficientes deben ser cero y cuáles no?

Queremos calcular $P(E > 5E_1)$

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \underbrace{\psi^*(x,t)}_{\sum_m A_m^* \varphi_m^*(x) e^{\frac{iE_m t}{\hbar}}} \hat{H}\, \underbrace{\psi(x,t)}_{\sum_n A_n \varphi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}}\, dx = \sum_{m,n} E_n\, e^{\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}} A_m^* A_n \underbrace{\int_{-a/2}^{a/2} \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\, dx}_{\delta_{mn} \text{ POR ORTONORMALIDAD}}$$

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_n |A_n|^2 E_n \Rightarrow P(E = E_n) = |A_n|^2$$

$$E_n = E_1 n^2$$

$$P(E > 5E_1) = 1 - P(E \leq 5E_1) = 1 - P(E_1) - P(E_2)$$

$$= 1 - |c_1|^2 - |c_2|^2$$

¡Seguir el ejemplo!

- Comentarios finales

- Las soluciones $\varphi_n(x)$ son de paridad definida como consecuencia de que el potencial sea simétrico, i.e. $V(x) = V(-x)$.
(Ver. último ej. de guía 7)

- nº nodos de φ_n : $n-1$

- Si tomamos otro origen de coordenadas:

$$\rightsquigarrow \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

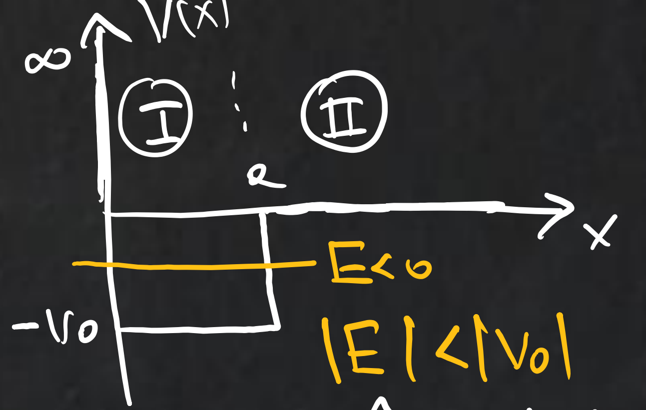
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2$$

En este caso, los φ's no tienen paridad definida.

2. Sea el potencial:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Encuentre las autofunciones de $\hat{H}$ y una ecuación para sus autovalores, para $E < 0$.



$|E| < |V_0|$

$\uparrow V_0 - |E| > 0$

- Separamos en regiones

I $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_I''(x) - V_0\,\varphi_I(x) = E\,\varphi_I(x) \Rightarrow \varphi_I''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{\overbrace{\left[V_0 - |E|\right]}^{V_0-|E|>0}}_{\equiv \mu^2}\varphi_I(x)$

$$\varphi_I''(x) = -\mu^2\varphi_I(x) \Rightarrow \boxed{\varphi_I(x) = A_1 e^{i\mu x} + B_1 e^{-i\mu x}}$$

II $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{II}''(x) = E\,\varphi_{II}(x) \Rightarrow \varphi_{II}''(x) = \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}E}_{\equiv q^2}\,\varphi_{II}(x) = q^2\,\varphi_{II}(x)$

$$\Rightarrow \varphi_{II}(x) = \underbrace{A_2 e^{qx}}_{=0 \text{ pues sino } \varphi_{II} \text{ diverge para } x\to\infty} + \tilde{B}_2 e^{-qx}$$

$$\varphi_{II}(x) = \tilde{B}_2 e^{-qx} = \underbrace{B_2 e^{qa}}_{\equiv \tilde{B}_2} e^{-qx} = \boxed{B_2 e^{-q(x-a)} = \varphi_{II}(x)}$$

- <u>Condiciones de empalme:</u>

$$\varphi_I(0) = 0 \Rightarrow A_1 + B_1 = 0 \Rightarrow \boxed{A_1 = -B_1} \quad 1$$

- <u>Continuidad de φ:</u>

$$\varphi_I(a) = \varphi_{II}(a) \Rightarrow \boxed{A_1 e^{ika} + B_1 e^{-ika} = B_2} \quad 2$$

- <u>Continuidad de $\frac{d\varphi}{dx}$:</u> $\varphi_I'(a) = \varphi_{II}'(a) \Rightarrow \boxed{ik\left[A_1 e^{ika} - B_1 e^{-ika}\right] = -qB_2}$

3

De 3 y 1

$$iK \ 2A_1 \cos(Ka) = -q B_2 \Rightarrow \boxed{B_2 = -\frac{2iK A_1}{q} \cos(Ka)} \quad (4)$$

De 2 y 1

$$\boxed{A_1 \ 2i \sin(Ka) = B_2} \quad (5)$$

$$\frac{(5)}{(4)} \longrightarrow -\frac{q}{K} \tan(Ka) = 1 \Rightarrow \boxed{\tan(Ka) = -\frac{K}{q}}$$

$$\boxed{\tan\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)}\ a\right] = -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)} \Big/ \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}}$$

Ecuación trascendente para E.

(gráfico mostrado en clase)

- **Autofunciones:**

$$\psi_{I}(x) = 2A_1 i \,\mathrm{sen}(\kappa x)$$

$\longrightarrow$ Ejercicio: normalizar

$$\psi_{II}(x) = B_2 \, e^{-q(x-a)} = \underbrace{2A_1 \,\mathrm{sen}(\kappa a)\, e^{-q(x-a)}}_{\text{Prob. no nula de que la partícula esté en } x > a}, \quad x \geq a$$

- **Comentario final**

Estados ligados (E debajo) y prob no nula de estar del otro lado

E

Estados del continuo o de scattering

Ondas propagantes

E