Guía 9: Potenciales en 2-D y 3-D, Momento angular, átomo de hidrógeno, Espín

Nota: Los problemas se explican en forma esquemática adrede para que se realice una lectura crítica y de elaboración personal. Sin embargo, si encuentra uno o varios errores por favor escríban a carlosv@df.uba.ar, gracias. Carlos Vigh

Problema 1: Considere el siguiente potencial (pozo infinito):

$$V(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a;\ |y| \leq b \text{ y } |z| \leq c \\ \infty & si\,no \end{cases}$$

Escribiendo el potencial en la forma:

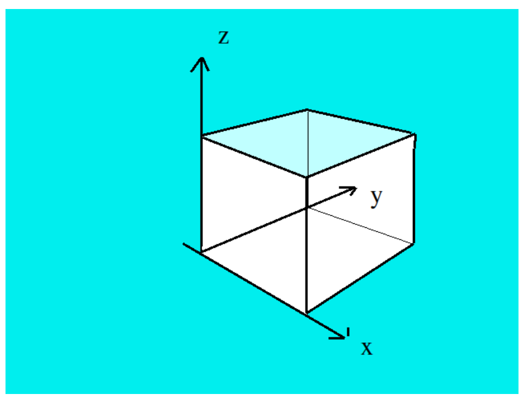
$$V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

y proponiendo para la función de onda la separación:

$$\varphi(x,y,z) = f(x)g(y)h(z)$$

1. Hallar las autofunciones del Hamiltoniano de una partícula de masa m en ese potencial.
2. Hallar los autovalores correspondientes.

Solución:



Ahora, el problema es en tres dimensiones (**ojo: tome sólo la parte positiva de la "caja", pero sale de manera análoga el problema pedido**):

$$\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \tag{1}$$

Si proponemos una función de onda separable queda:

$$\frac{\nabla^2\Psi}{\Psi} = \frac{1}{f(x)}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{g(y)}\frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{h(z)}\frac{\partial^2 h(z)}{\partial z^2} \tag{2}$$

Dentro de la caja se cumple que:

$$V\Psi = 0 \tag{3}$$

De este modo la ecuación de Schrödinger queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{f''}{f} + \frac{g''}{g} + \frac{h''}{h}\right] = E_x + E_y + E_z \tag{4}$$

Visto de esta manera se cumple separadamente lo siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{f''}{f} = E_x; \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{g''}{g} = E_y; \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{h''}{h} = E_z;$$

Se proponen soluciones de la forma:

$$f(x) = A\mathrm{sen}(k_x x); \qquad g(y) = B\mathrm{sen}(k_y y); \qquad h(z) = C\mathrm{sen}(k_z z)$$

Las condiciones de contorno son:

$$f(0) = f(a) = 0 \quad \Rightarrow k_x = n\pi/a \tag{5}$$

$$g(0) = g(b) = 0 \quad \Rightarrow k_y = m\pi/b \tag{6}$$

$$h(0) = h(c) = 0 \quad \Rightarrow k_z = p\pi/c \tag{7}$$

donde n, m, p son números naturales y además se cumple:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \tag{8}$$

De esta manera queda:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\pi^2 \left[\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{p^2}{c^2}\right] \tag{9}$$

y las autofunciones correspondientes:

$$\Psi(x, y, z) = A\mathrm{sen}\left(\frac{n_x \pi}{a}x\right)\mathrm{sen}\left(\frac{n_y \pi}{b}y\right)\mathrm{sen}\left(\frac{n_z \pi}{c}z\right) \tag{10}$$