Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Física
FIZ0322 Física Cuántica I

Ayudantía 13: Potencial central y primera descripción de átomos

Fabián Cádiz

0.1. Movimiento en un potencial central

Consideremos una partícula de masa m_e en movimiento en un potencial central. Por esto entendemos que el potencial $V(r)$ depende únicamente de la distancia al origen $|\vec{r}| = r$.

0.1.1. Coordenadas esféricas

La ecuación de Schrodinguer independiente del tiempo en coordenadas esféricas es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Recordando que el operador $\hat{L}^2$ sobre las funciones de onda tiene la representación:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

El laplaciano toma entonces la forma $\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{L}^2$, y la ecuación a resolver es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2} + V(r)\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

El hamiltoniano conmuta con las tres componentes del momento angular, $\hat{L}_i,\ i = x, y, z$. Es decir

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

En consecuencia, los tres operadores $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ y una componente de $\hat{L}$, por ejemplo $\hat{L}_z$, forman un conjunto de observables que conmutan. Este conjunto resulta ser completo, es decir, su base común es única.

Nota

La relación $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ implica, a partir del teorema de Ehrenfest, la conservación del momento angular:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{L}\rangle = \vec{0}$$

Esto es consecuencia del hecho que el potencial depende solamente de $|\vec{r}|$, o dicho de otra forma, de la invarianza del hamiltoniano ante rotaciones.

0.1.2. Funciones propias comunes a $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$

Una parte de problema a valores propios ya esta resuelta ya que se conocen las funciones propias comunes a $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$. Éstas son los armónicos esféricos. Efectuamos ahora una separación de variables bajo la forma:

$$\psi_{l,m}(\vec{r}) = R_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$
$$\hat{L}^2 \psi_{l,m}(\vec{r}) = l(l+1)\hbar^2 \psi_{l,m}(\vec{r})$$
$$\hat{L}_z \psi(l,m)(\vec{r}) = m\hbar \psi_{l,m}(\vec{r})$$

donde l y m son enteros, con $|m| \leq l$. La ecuación a valores propios para la energía se lee ahora:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) R_l(r) = E R_l(r)$$

Esta ecuación es independiente del número cuántico m: es por esto que no hemos puesto en la última ecuación un índice m a la parte radial de la función de onda. Esta ecuación diferencial es llamada ecuación radial y $R_l(r)$ se llama la función de onda radial.

La condición de normalización de la función de onda es:

$$\int d^2\Omega \int_0^\infty dr\ r^2 |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 = 1$$

Ω representa el ángulo sólido, con $d^2\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$. Como los armónicos esféricos están normalizados, la condición de normalización se reduce a:

$$\int_0^\infty dr\ r^2 |R_l(r)|^2 = 1$$

Introduciendo la función de onda reducida $u_l(r) = r R_l(r)$, la ecuación radial se escribe:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) u_l(r) = E u_l(r)$$

y la condición de normalización es $\int_0^\infty dr\ |u_l(r)|^2 = 1$. Se puede mostrar además que toda solución normalizable $R_l(r)$ es acotada en el origen, luego $u_l(0) = 0$. Esta ecuación tiene la estructura de una ecuación de Schrodinguer que describe el movimiento uni-dimensional de una partícula de masa m_e en el potencial:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}$$

Problema 1: Valor medio de r para el problema Coulombiano

Considere la ecuación radial adimensional para el átomo de hidrógeno:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right) u_{n,l}(\rho) = \varepsilon u_{n,l}(\rho)$$

donde $u_{n,l}(\rho) = \rho R_{n,l}(\rho)$ es la función de onda reducida y satisface las condiciones $\int_0^\infty d\rho |u_{n,l}(\rho)|^2 = 1$ y $u_{n,l}(0) = 0$.

a) Multiplicando esta ecuación por $\rho u_{n,l}(\rho)$ e integrando sobre ρ, muestre que

$$\frac{\langle\rho\rangle}{n^2} + \frac{l(l+1)}{n^2} - 2 = \int_0^\infty d\rho\ \rho u_{n,l}(\rho) u''_{n,l}(\rho)$$

Utilize el resultado $\langle 1/\rho\rangle = \frac{1}{n^2}$ deducido del teorema del Virial.

b) Multiplicando la ecuación de Schrodinguer por $\rho^2 u'_{n,l}(\rho)$ e integrando sobre ρ, muestre que:

$$\frac{\langle\rho\rangle}{n^2} - 1 = -\int_0^\infty d\rho\rho u_{n,l}(\rho) u''_{n,l}(\rho)$$

c) Deduzca que: $\langle\rho\rangle = \left(3n^2 - l(l+1)\right)/2$

Solución

a) Tenemos:

$$u_{n,l}(\rho)'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{n,l}(\rho) + \frac{2}{\rho} u_{n,l}(\rho) = \varepsilon u_{n,l}(\rho)$$

Multiplicando por $\rho u_{n,l}(\rho)$:

$$u_{n,l}(\rho)''\rho u_{n,l}(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho} u^2_{n,l}(\rho) + 2u^2_{n,l}(\rho) = \varepsilon\rho u^2_{n,l}(\rho)$$

Además se sabe que los autovalores de la energía para el átomo de hidrógeno son $\epsilon = \epsilon_n = 1/n^2$:

$$u_{n,l}(\rho)''\rho u_{n,l}(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho} u^2_{n,l}(\rho) + 2u^2_{n,l}(\rho) = \frac{1}{n^2}\rho u^2_{n,l}(\rho)$$

Ahora, integrando sobre ρ:

$$\int_0^\infty d\rho\ \rho u_{n,l}(\rho)'' u_{n,l}(\rho) - l(l+1)\langle\frac{1}{\rho}\rangle + 2 = \frac{1}{n^2}\langle\rho\rangle$$

Y usando que $\langle\frac{1}{\rho}\rangle = \frac{1}{n^2}$:

$$\int_0^\infty d\rho\ \rho u_{n,l}(\rho)'' u_{n,l}(\rho) = \frac{l(l+1)}{n^2} - 2 + \frac{\langle\rho\rangle}{n^2}$$

b) Si ahora se multiplica la ecuación de Schrodinguer por $\rho^2 u'_{n,l}(\rho)$:

$$\rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho)'' - l(l+1) u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) + 2\rho u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) = \frac{1}{n^2}\rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho)$$

e integrando:

$$\int_0^\infty d\rho\ \rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho)'' - l(l+1)\int_0^\infty d\rho\ u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) + 2\int_0^\infty d\rho\ \rho u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) =$$

$$= \frac{1}{n^2} \int_0^\infty d\rho \; \rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho)$$

Pero $\int_0^\infty d\rho \; u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) = \frac{1}{2} u^2_{n,l}(\rho)\Big|_0^\infty = 0$, luego:

$$\int_0^\infty d\rho \; \rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho)'' + 2 \int_0^\infty d\rho \; \rho u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) = \frac{1}{n^2} \int_0^\infty d\rho \; \rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho)$$

Ahora se usa:

$$\int_0^\infty d\rho \; \rho^2 u'_{n,l}(\rho) u''_{n,l}(\rho) = \int_0^\infty d\rho \; \rho u_{n,l}(\rho) u''_{n,l}(\rho)$$

y

$$\int_0^\infty d\rho \; \rho u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty d\rho \; \rho^2 u'_{n,l}(\rho) u_{n,l}(\rho) = -\langle \rho \rangle$$

que puede demostrarse integrando por partes. Con esto:

$$\frac{\langle \rho \rangle}{n^2} - 1 = -\int_0^\infty d\rho \rho u_{n,l}(\rho) u''_{n,l}(\rho)$$

c) Sumando los dos resultados precedentes, obtenemos:

$$\langle \rho \rangle = \left(3n^2 - l(l+1) \right) / 2$$

Es decir, el valor medio de la distancia al núcleo crece con n^2. Para n fijo, aumenta con l.

Problema 2: Partícula encerrada entre dos esferas

Una partícula de masa m se encuentra restringida a moverse entre dos esferas impermeables de radios $r = a$ y $r = b$. No existe otro potencial. Encuentre la energía del ground state y la función de onda asociada.

Solución

Sea la función de onda radial $R(r) = \chi(r)/r$. Luego, $\chi(r)$ satisface la ecuación:

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi(r) = 0 \qquad a \leq r \leq b$$

Para el ground state, $l = 0$, y la parte angular de la función de onda es $Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Ya que $V(r) = 0$, definiendo $K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, la ecuación radial se reduce a:

$$\chi''(r) + K^2\chi(r) = 0$$

con condiciones de borde

$$\chi(r)\Big|_{r=a} = \chi(r)\Big|_{r=b} = 0$$

La primera de ellas impone que las soluciones sean de la forma:

$$\chi(r) = A\sin[K(r-a)]$$

Luego, de $\chi(b) = 0$, obtenemos la cuantificación de K:

$$K = \frac{n\pi}{(b-a)} \qquad n = 1, 2, ...$$

Para el ground state, $n = 1$, obtenemos la energía:

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2}$$

De la condición de normalización:

$$\int_a^b dr\; r^2 R^2(r) = \int_a^b dr\; \chi^2(r) = 1$$

obtenemos $A = \sqrt{2/(b-a)}$. Así, para el ground state, la función de onda radial normalizada es:

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

y la función de onda normalizada es:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

Problema 3: Desintegración de un átomo de tritio

El núcleo del átomo de tritio es el isótopo H^3 del hidrógeno , de carga $Z = 1$. Este núcleo es radioactivo y se transforma en helio 3 por desintegración beta:

$$H^3 \quad \rightarrow \quad He^3 + e^- + \overline{\nu}$$

donde $\overline{\nu}$ es un antineutrino. La energía del electrón emitido es del orden de 15 keV y el núcleo de He^3 es de carga $Z = 2$. La desintegración es un proceso instantáneo. El electrón β de la desintegración se emite a gran velocidad y abandona el sistema atómico rápidamente. En consecuencia, se forma un átomo de helio ionizado He^3_+. Sea $a_1 = \hbar^2/me^2$ el radio de Bohr y $E_I = mc^2\alpha^2/2 \approx 13,6 \quad eV$ la energía de ionización del átomo de hidrógeno. En el estado fundamental $|\psi_0\rangle$ del átomo de tritio, la función de onda del electrón $(n = 1, l = 0, m = 0)$ es la misma que la del átomo de hidrógeno usual

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1^3}} e^{-r/a_1} \tag{1}$$

Al instante t_0 de la desintegración del núcleo suponemos que la función de onda del electrón atómico es prácticamente la misma que aquella del tritio y que esá dada por 2. Se nota $|n, l, m\rangle$ los estados del átomo de Helio ionizado que constituye un sistema hidrogenoide: un electrón en un campo coulombiano de un núcleo de carga 2.

a) Escriba el hamiltoniano $\hat{H}_1$ del electrón atómico antes de la desintegración y el hamiltoniano $\hat{H}_2$ de este electrón después de la desintegración.

b) Cuáles son, en función de E_I, los niveles de energía E_n del átomo He^3_+?. Exprese su radio de Bohr y su función de onda $\varphi_{100}(\vec{r})$ en el estado fundamental.

c) Calcule el valor medio $\langle E\rangle$ de la energía del electrón después de la desintegración. Use:

$$\langle\psi_0|\frac{1}{r}|\psi_0\rangle = \frac{1}{a_1} \qquad \hat{H}_2 = \hat{H}_1 - \frac{e^2}{r}$$

d) Exprese en función de $|\psi_0\rangle$ y $|n, l, m\rangle$ la amplitud de probabilidad $c(n, l, m)$ y la probabilidad $p(n, l, m)$ de encontrar al electrón en el estado $|n, l, m\rangle$ de He^3_+ después de la desintegración. Muestre que solo las probabilidades $p_n = p(n, 0, 0)$ son no nulas.

e) Calcule la probabilidad p_1 de encontrar al electrón en el estado fundamental de He^3_+. Cuál es la contribución de correspondiente a $\langle E\rangle$?

f) Un cálculo numérico da los siguientes resultados:

$$p_2 = \frac{1}{4} \qquad \sum_{n=3}^{\infty} p_n = 0{,}02137 \qquad \sum_{n=3}^{\infty} \frac{p_n}{n^2} = 0{,}00177$$

Calcule la probabilidad de encontrar al electrón en los estados ligados del He^3_+ y la contribución $\langle E_L\rangle$ correspondiente a $\langle E\rangle$.

Solución

a) Los dos hamiltonianos son:

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \qquad \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{2e^2}{r}$$

b) Los niveles de un átomo hidrogenoide de carga Z son $E_n = -Z^2E_I/n^2$, en este caso entonces:

$$E_n = -\frac{4E_I}{n^2}$$

El radio de Bohr del ion He^3_+ es $a_2 = a_1/2$, y la función de onda es:

$$\varphi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_2^3}} e^{-r/a_2}$$

c) La energía media del electrón en la nueva configuración es:

$$\langle E \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H}_2 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H}_1 | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \frac{e^2}{r} | \psi_0 \rangle$$

Es decir,

$$\langle E \rangle = -E_I - \frac{e^2}{a_1} = -3E_I \sim -40{,}8 \;\; eV$$

d) Por definición, la amplitud de probabilidad es $c(n,l,m) = \langle n,l,m|\psi_0\rangle$, y la probabilidad $p(n,l,m) = |\langle n,l,m|\psi_0\rangle|^2$. La forma analítica es:

$$c(n,l,m) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \; R_{nl}(r) Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)^* \psi_0(r)$$

donde $R_{nl}(r)$ son las funciones de onda radiales del átomo hidrogenoide He^3_+. Ya que $\psi_0(r)$ es de la forma $\psi_0(r) = R_0(r)Y_{0,0}(\vartheta,\varphi)$, la ortogonalidad de los armónicos esféricos establece que:

$$p(n,l,m) = 0 \quad \text{si} \quad (l,m) \neq (0,0)$$

e) La amplitud de probabilidad de que el electrón permanezca en el estado fundamental es:

$$c(1,0,0) = 4\pi \int_0^\infty dr \; r^2 \frac{e^{-r/a_2}}{\sqrt{\pi a_2^3}} \frac{e^{-r/a_1}}{\sqrt{\pi a_1^3}} = \frac{16\sqrt{2}}{27}$$

Luego la probabilidad es $p_1 = 0{,}70233$, la contribución correspondiente a $\langle E \rangle$ es $p_1 E_1 = -38{,}2 \;\; eV$

f) Con los valores dados en el enunciado, se obtiene:

$$p_2 E_2 = -\frac{E_I}{4} = -3{,}4 \;\; eV, \qquad p = \sum_{n=1}^{\infty} p_n = 0{,}9737$$

La contribución de los estados ligados a $\langle E \rangle$ es:

$$\langle E_L \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} p_n E_n = -3{,}0664 E_I = -41{,}7 \;\; eV$$

La probabilidad total p es menor a 1, existe entonces una probabilidad $(1-p) = 0{,}026$ de que el electrón atómico no se encuentre ligado en el estado final. La contribución $\langle E_L \rangle = -41{,}7 \;\; eV$ es $0{,}9 \;\; eV$ menor que $\langle E \rangle$. La probabilidad $(1-p)$ corresponde a un electrón de energía positiva, es decir, se trata de una ionización de He^3_+ en He^3_{++} con la emisión del electrón atómico.

Problema 4: Ecuación de continuidad

Muestre que en la prescencia de un campo electromagnético dependiente del tiempo $\left(\phi, \vec{A}\right)$ la ecuación de continuidad se cumple para una partícula de carga $-e$ si la densidad de carga está dada por:

$$\rho(\vec{x}, t) = -e\ \psi(\vec{x}, t)^* \psi(\vec{x}, t)$$

con una densidad de corriente:

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = -\frac{e\hbar}{2im} \left\{ \psi(\vec{x}, t)^* \left(\vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right) \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right) \psi(\vec{x}, t)^* \right\}$$

Solución

Para probar la ecuación de continuidad, basta notar que la interacción de una partícula de carga $-e$ con un campo electromagnético $(\vec{A}, \phi)$ se describe mediante el hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} + e\vec{A} \right)^2 - e\phi = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar} \vec{A} \right)^2 - e\phi$$

Así, escribimos la ecuación de Schrodinguer dependiente del tiempo y su conjugada:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} [\vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar} \vec{A}]^2 \psi - e\phi\psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} [\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}]^2 \psi^* - e\phi\psi^*$$

Si multiplicamos la primera ecuación por ψ^*, la segunda por ψ y tomamos la diferencia entre las dos resultantes:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - \psi \vec{\nabla}^2 \psi^* + \frac{ie}{\hbar} [\psi^* \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi + \psi^* \vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\psi) + \psi \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi^* + \psi \vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\psi^*)] \right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left\{ \psi^* [\vec{\nabla} + i\frac{e}{\hbar} \vec{A}] \psi - \psi [\vec{\nabla} - i\frac{e}{\hbar} \vec{A}] \psi^* \right\}$$

Dividiendo a ambos lados de la ecuación por $i\hbar$, obtenemos la ecuación de continuidad para la densidad de probabilidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Multiplicando finalmente por la carga $-e$, obtenemos la ecuación de continuidad para la carga, con una densidad de carga :

$$\rho_c = -e\psi^* \psi$$

la densidad de corriente correspondiente es:

$$\vec{J}_c = -e\frac{\hbar}{2im} \left\{ \psi^* [\vec{\nabla} + \frac{ie}{\hbar} \vec{A}] \psi - \psi [\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}] \psi^* \right\}$$

Problema 5: Invarianza de Gauge

Muestre que la forma de la ecuación de Schrodinguer es invariante bajo transformaciones de gauge dependientes del tiempo.

Solución

Nuevamente consideramos la ecuación de Schrodinguer dependiente del tiempo en un campo electromagnético $(\phi, \vec{A})$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q\vec{A}\right)^2\psi + q\phi\psi$$

Se sabe que el electromagnetismo es invariante (los campos eléctrico y magnético no son alterados) ante una transformación de gauge para los potenciales:

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda \tag{2}$$

$$\phi' = \phi - \frac{\partial\Lambda}{\partial t} \tag{3}$$

Para que la mecánica cuántica sea invariante ante transformaciones de Gauge, se propone una transformación unitaria para la función de onda :

$$\psi' = e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}\psi \tag{4}$$

Se dice que las ecuaciones (2), (3), (4) definen una transformación de gauge. Veamos que la forma de la ecuación de Schrodinguer es la misma:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q\vec{A}\right)^2\psi + q\phi\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi'] = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q(\vec{A'} - \vec{\nabla}\Lambda)\right)^2 e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + q(\phi' + \frac{\partial\Lambda}{\partial t})e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi'$$

El lado izquierdo es:

$$\hbar\frac{q}{\hbar}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}$$

Además:

$$\left(\hat{p} - q(\vec{A'} - \vec{\nabla}\Lambda)\right)e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' = -i\hbar\vec{\nabla}(e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi') + (-q\vec{A}' + q\vec{\nabla}\Lambda)e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi'$$

$$= -e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}i\hbar\vec{\nabla}\psi' - q\vec{\nabla}\Lambda e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + (-q\vec{A}' + q\vec{\nabla}\Lambda)e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' = -e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}i\hbar\vec{\nabla}\psi' - q\vec{A}'e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi'$$

Finalmente:

$$\left(\hat{p} - q(\vec{A'} - \vec{\nabla}\Lambda)\right)e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' = e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\left(\hat{p} - q\vec{A}'\right)\psi'$$

y entonces, llamando $\psi'' = e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}(\hat{p} - q\vec{A}')\psi'$ y aplicando $(\hat{p} - q(\vec{A} - \vec{\nabla}\Lambda))$ sobre ψ'' se demuestra:

$$\left(\hat{p} - q(\vec{A'} - \vec{\nabla}\Lambda)\right)^2 e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' = e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\left(\hat{p} - q\vec{A}'\right)^2\psi'$$

De esta forma:

$$q\frac{\partial \Lambda}{\partial t}e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}i\hbar\frac{\partial \psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q\vec{A}'\right)^2 e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + q\phi' e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + q\frac{\partial \Lambda}{\partial t}e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi'$$

$$e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}i\hbar\frac{\partial \psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q\vec{A}'\right)^2 e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi' + q\phi' e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\psi'$$

Eliminando el factor de fase a ambos lados, obtenemos:

$$i\hbar\frac{\partial \psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q\vec{A}'\right)^2 \psi' + q\phi'\psi'$$

Es decir, la forma de la ecuación de Schrodinguer es invariante bajo una transformación de gauge.

Problema 6: Niveles de Landau

Buscamos determinar los niveles de energía de una partícula sin spin y de carga q, colocada en un campo magnético $\vec{B}$ constante y uniforme, alineado según el eje z, $\vec{B} = B\hat{z}$. Se escoge aquí el gauge de Landau $\vec{A} = Bx\hat{y}$.
a) Escriba la ecuación a valores propios para el hamiltoniano $\hat{H}$. Notaremos $\psi(\vec{r})$ una función propia y E_{tot} al valor propio correspondiente.
b) Buscamos soluciones de $\hat{H}$ bajo la forma factorizada:

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_x z}\psi(x, y)$$

Muestre que $\psi(x, y)$ satisface la ecuación a valores propios:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} - i\frac{qB}{\hbar}x\right)^2\right)\psi(x, y) = E\psi(x, y)$$

con $E = E_{tot} - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}$
c) Ahora nos interesamos por la ecuación recién encontrada que describe el movimiento de la carga en el plano $x - y$. Buscamos soluciones bajo una forma factorizada:

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y}\chi(x)$$

Cuál es la ecuación que verifica $\chi(x)$? A qué problema físico corresponde? Definiremos $w_c = qB/m$ como la frecuencia de ciclotrón.

d) Muestre que los valores propios de la energía (para el problema unidimensional en x) son:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar w_c$$

Dependen estos valores de k_y? Los niveles de energía son llamados niveles de Landau.

Solución

a) La ecuación a valores propios se escribe:

$$-\frac{\hbar 2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\frac{\partial}{\partial y} - iq\frac{B}{\hbar}x)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, z) = E_{tot}\psi(x, y, z)$$

b) La ecuación recién escrita es separable y es inmediato verificar que las funciones del tipo $\psi(x, y, z) = e^{ik_z z}\psi(x, y)$ son efectivamente soluciones con valor propio $E = E_{tot} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$. Al igual que en el problema clásico, el movimiento según z es rectilíneo uniforme.

c) La sustitución $\psi(x, y) = e^{ik_y y}\chi(x)$ conduce a la ecuación siguiente para χ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dx^2} + \frac{1}{2}mw_c^2(x - x_c)^2\chi = E\chi$$

donde hemos definido $x_c = \frac{\hbar k_y}{qB}$.

Se trata de la ecuación de autovalores de un oscilador armónico de frecuencia $w_c/2\pi$, centrado en x_c. De esta forma, los valores propios de la energía son

$$E = \hbar w_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

donde n es un entero positivo o nulo. Estos valores son independientes de k_y.

Problema 7: Niveles de energía en un potencial lineal

El objetivo es estudiar los niveles de energía de un electrón en la vecindad de la armadura de un condensador plano. Suponga que el electrón está restringido a desplazarse según el eje vertical (Ver la figura). Su movimiento es unidimensional, y anotamos z su posición y suponemos que la armadura inferior del condensador (cargado positivamente) es una pared inpenetrable. La carga del electrón es $-e$ ($e > 0$) y m su masa. La energía potencial electrostática del electrón es $V(z) = eEz$ para $z \geq 0$ y $V(z) = \infty$ para $z < 0$. En esta expresión, el campo eléctrico constante E es positivo, $E > 0$. Suponga, por simplicidad, que la placa superior se encuentra a una distancia muy grande (en $z = \infty$).

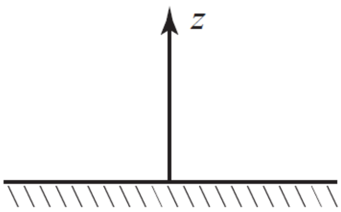

Figura 1:

a) Escribir la ecuación que determina las funciones propias $\psi_n(x)$ y los valores propios E_n correspondientes.
b) Qué condiciones limites en $z = 0$ y $z = \infty$ deben satisfacer las funciones propias?
c) Poniendo $z = z_0 x$ y $E = E_0 \varepsilon$, reemplaze la ecuación a valores propios por la ecuación adimensional

$$-\phi''(x) + x\phi(x) = \varepsilon\phi(x)$$

De la expresión de E_0 y z_0
d) Las soluciones de la ecuación diferencial $u''(\eta) - \eta u(\eta) = 0$ son funciones especiales llamadas funciones de Airy. La solución $A(\eta)$ que se anula en el infinito se representa en la figura:

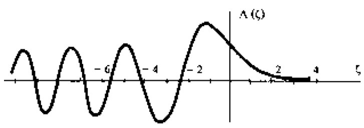

Figura 2:

Se tiene

$$\eta \to \infty, \quad A(\eta) \sim \frac{\alpha}{2\eta^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\eta^{3/2}}$$

$$\eta \to -\infty, \quad A(\eta) \sim \frac{\alpha}{|\eta|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\eta^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)$$

donde α es una constante de normalización. Los primeros ceros η_n de $A(\eta)$ son $\eta_1 = -2{,}338$, $\eta_2 = -4{,}088$, $\eta_3 = -5{,}521$. Cuales son los niveles de energía del electrón? Como se obtienen las funciones de onda correspondientes?

e) Calcule los dos primeros niveles de energía para un campo de magnitud $E = 10^6$ V/m. Cuál es la frecuencia de un fotón emitido o absorbido durante la transición entre estos dos estados?

f) Se debe tener encuenta la cuantificación de la energía a la temperatura habitual ($kT \sim 1/40\ eV$)?. A qué temperatura se debe bajar para observar el fenómeno correctamente?

g) Cuál es el orden de magnitud de la altura media del electrón en el estado fundamental?

h) Con técnicas de manipulación de neutrones ultra frios, se ha podido en Grenoble (Francia) medir los estados estacionarios de neutrones en el campo de gravedad, sobre un espejo situado en $z = 0$.

- Sabiendo que la masa del neutrón es $M \approx 1{,}676\ 10^{-27}\ kg$, y tomando $g = 9{,}8\ \ ms^{-2}$ para la aceleración de gravedad, cuáles son las energías de los dos primeros niveles gravitacionales del neutrón?

- Cuál es el orden de magnitud de la altura media del neutrón sobre el espejo en el estado fundamental?

- Por el teorema del virial, se puede mostrar que para todo estado estacionario, se tiene $2 < p^2/2M > = < V(z) >$. Calcule el valor exacto de $< z >$ en el estado fundamental.

- Compare la energía del estado fundamental con la energía potencial clásica de una partícula de esta masa a altura $< z >$. Explique la diferencia.

Solución
a) La ecuación de Schrodinguer independiente del tiempo se escribe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\psi_n(z) + eEz\psi_n(z) = E_n\psi_n(z)$$

b) Las autofunciones se deben anular en el infinito y en la placa del condensador.

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(\infty) = 0$$

c) Considerando $z = z_0 x$, y $E_n = E_0\varepsilon_n$,la ecuación de Schrödinger se puede reescribir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\psi_n(z_0x) + eEz_0x\psi_n(z_0x) = E_0\varepsilon_n\psi_n(z_0x)$$

pero $d/dz = d/dx\ dx/dz = \frac{1}{z_0}\ d/dz$:

$$-\frac{\hbar^2}{2mz_0^2}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(z_0x) + eEz_0x\psi_n(z_0x) = E_0\varepsilon_n\psi_n(z_0x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mE_0z_0^2}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(z_0x) + \frac{eEz_0}{E_0}\psi_n(z_0x) = \varepsilon_n\psi_n(z_0x)$$

Luego, se debe tener:

$$\frac{\hbar^2}{2mE_0 z_0^2} = 1, \quad \frac{eEz_0}{E_0} = 1$$

De la segunda, se tiene $E_0 = eEz_0$, luego:

$$\frac{\hbar^2}{2meEz_0^3} = 1, \quad \rightarrow \quad z_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2meE}\right)^{1/3}$$

y

$$E_0 = \left(\frac{\hbar^2 e^2 E^2}{2m}\right)^{1/3}$$

con esto, se tiene la ecuación a valores propios adimensional:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(z_0x) + x\psi_n(z_0x) = \varepsilon_n\psi_n(z_0x)$$

Definiendo $\phi_n(x) = \psi_n(z_0x)$:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\phi_n(x) + x\phi_n(x) = \varepsilon_n\phi_n(x) \tag{5}$$

con $\phi_n(0) = \phi_n(\infty) = 0$.

d) Le ecuación 5 se puede reescribir de la forma:

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi_n(x) - (x - \varepsilon_n)\phi_n(x) = 0$$

Considerando el cambio de variable $x - \varepsilon_n = \eta$, $u(\eta) = \phi_n(x) = \phi_n(\eta + \varepsilon_n)$:

$$\frac{d^2}{d\eta^2}u(\eta) - \eta u(\eta) = 0$$

con las condiciones $u(\infty) = 0$, $u(-\varepsilon_n) = 0$. De esta última condición surge la condición de cuantificación de la energía, los ε_n son los ceros de la función de Airy, es decir

$$E_n = -E_0\eta_n \tag{6}$$

Las autofunciones se obtienen directamente a partir de la función de Airy:

$$\psi_n(z) = \phi_n(z/z_0) = A(z/z_0 + \eta_n), \quad z \geq 0$$

o bien:

$$\psi_n(z) = \lambda A(z/z_0 + \eta_n), \quad z \geq 0$$

donde λ es una constante de normalización.

e) Para $E = 10^6 \ \ V/m$, se obtiene $E_0 = 3{,}36\ 10^{-3} \ \ eV$. Los dos primeros niveles de energía son

$$E_1 = 7{,}85\ 10^{-3} \ \ eV \quad \text{y} \quad E_2 = 13{,}73\ 10^{-3} \ \ eV$$

la frecuencia de un fotón emitido mediante la transición desde E_2 a E_1 es:

$$\nu = \frac{E_2 - E1}{h} = 1420 \ \ Ghz$$

la longitud de onda asociada es

$$\lambda = 0{,}21 \ \ nm$$

f) El espaciamiento entre los niveles, $E_2 - E_1 \sim 6 \ 10^{-3} \quad eV$ es débil ante la energía de agitación térmica, $kT \sim 0{,}025 \quad eV$. Para evitar que la agitación térmica perturbe las observaciones, se debe tener

$$kT \sim 10^{-3} \ \ eV$$

Esto da:

$$T \sim \frac{10^{-3}}{8{,}6 \times 10^{-5}} \sim 10 \ K$$

g) Para $E = 10^6 \ V/m$, se tiene $z_0 = 3{,}4 \ nm$, que es el orden de magnitud para $< z >$.

h) En el caso de los neutrones y el campo de gravedad, se puede reemplazar la energía potencial electrostática $V(z) = eEz$ por el potencial gravitacional $V(z) = Mgz$, lo que equivale a escribir $Mg = eE$ en el cálculo anterior. Entonces

$$z_0 = \left(\frac{h^2}{2M^2G}\right)^{1/3} \sim 5{,}86 \ nm \quad \text{y} \quad E_0 = \left(\frac{h^2G^2M}{2}\right)^{1/3} \sim 1{,}4 \ 10^{-12} \ \ eV$$

Por el teorema del virial, se tiene $2\langle p^2/2M\rangle = \langle V(z)\rangle$. Por otra parte, para todo estado estacionario ψ_n:

$$E_n = \langle p^2/2M\rangle + \langle V(z)\rangle$$

En consecuencia:

$$E_n = \frac{3}{2}\langle V(z)\rangle = \frac{3}{2}Mg\langle z\rangle$$

De aquí se obtiene el valor exacto:

$$\langle z\rangle = \frac{2}{3}E_1 Mg = 9 \ \ \mu m$$

La energía potencial de un neutrón clásico a esta altura sería

$$V_{clas} = Mg\langle z\rangle = \frac{2}{3}E_1$$

igual al valor medio de la energía potencial cuántica. Corresponde a $2/3$ de la energía total cuántica que evidentemente contiene una parte de energía cinética, que pone en levitación cuántica al neutrón (debido al principio de incertidumbre, pues clásicamente el estado fundamental correspondería al neutrón a una altura bien definida, $z = 0$).