

# Ayudantía 5: Cuantificación de la energía en sistemas simples

Fabián Cádiz

## 0.1. Estados ligados y estados de difusión

En mecánica clásica, se distinguen dos regímenes en el movimiento de una partícula en un potencial que posee un límite finito  $V_1$  al infinito. Si el valor de la energía  $E$ , que es una constante de movimiento, es inferior a  $V_1$ , la trayectoria estará confinada en una región finita del espacio, se llama a esto un estado ligado. En el caso contrario  $E > V_1$ , la partícula puede escaparse del campo de fuerzas y alejarse hacia el infinito cuando  $t \rightarrow \infty$ , y se habla entonces de estado de difusión. La misma distinción existe en mecánica cuántica. En la figura (0.2.2) se muestran trayectorias de una partícula clásica para un potencial de la forma  $V(r) = -A/r$ , que tiende a cero en el infinito.

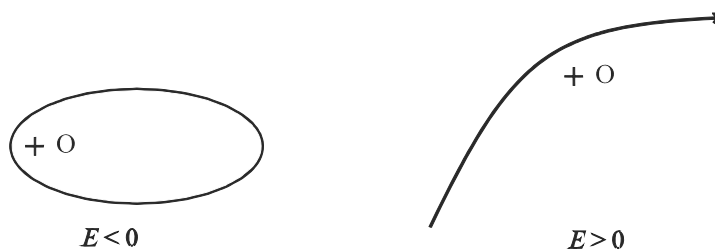


Figura 1: Movimiento clásico en un potencial atractivo de la forma  $V(r) = -A/r$  ( $V_1 = 0$ ) con  $A > 0$ . Una partícula con  $E < 0$  permanece confinada en una región finita del espacio, mientras que una energía con  $E > 0$  se escapa hacia el infinito.

### 0.1.1. Estados estacionarios de la ecuación de Schrödinger

El hamiltoniano que describe el movimiento cuántico de una partícula de masa  $m$  en un potencial  $V(\vec{x})$  tiene la forma:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})$$

El primer paso en este estudio consiste en determinar las funciones propias del hamiltoniano:

$$\hat{H}\psi_\alpha(\vec{x}) = E_\alpha\psi_\alpha(\vec{x}) \quad (1)$$

que son llamadas soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger, y los valores propios  $E_\alpha$  correspondientes. En efecto, todo estado  $\psi(\vec{x}, 0)$  puede escribirse bajo la forma de una combinación lineal de las  $\psi_\alpha(\vec{x})$ :

$$\psi(\vec{x}, 0) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{x})$$

donde el símbolo  $\sum$  representa una suma discreta o una integral. La evolución en el tiempo de escribe inmediatamente:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-iE_{\alpha}t/\hbar} \psi_{\alpha}(\vec{x})$$

Las condiciones de borde que deben verificar las funciones  $\psi_{\alpha}(\vec{x})$  son diferentes dependiendo de si ellas corresponden a un estado ligado o a un estado de difusión.

### 0.1.2. Estados ligados

Los estados ligados estacionarios están caracterizados por soluciones de la ecuación (1) para las cuales la función  $\psi_{\alpha}(\vec{x})$  es de cuadrado sumable, es decir normalizable:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi_{\alpha}(\vec{x})|^2 = 1$$

Se puede demostrar que esto se produce únicamente para un conjunto **discreto** de valores de la energía  $\{E_n\}$ , que son los niveles de energía del sistema: es el origen de la cuantificación de la energía. El hecho de que las funciones de onda sean normalizables corresponde a la situación clásica donde la trayectoria de la partícula permanece confinada en el curso del tiempo a una región finita del espacio. Cada valor de  $E_n$  es inferior al valor  $V_1$  del potencial al infinito, y superior al valor mínimo

$$V_{min} < E_n < V_1$$

### 0.1.3. Estados de difusión

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (1) posee igualmente soluciones para un conjunto continuo de valores de la energía  $E$  superiores a  $V_1$ . Asintóticamente, estas soluciones son ondas planas ya que el potencial es constante cuando  $\vec{r} \rightarrow \infty$ . Estas corresponden a los estados de difusión de partículas asintóticamente libres, que son desviadas por el potencial  $V(\vec{x})$ . Si bien estas autofunciones no son normalizables (y entonces no pueden representar el estado de una partícula), se pueden formar paquetes de onda, que son combinaciones lineales normalizables de estas ondas de difusión.

#### Notas:

Algunos resultados importantes que conciernen los estados ligados son:

1. Un siempre puede buscar funciones propias  $\psi$  reales. Esto por que si  $\psi$  es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,  $\psi^*$  también lo es, y con el mismo autovalor.
2. El teorema de Sturm-Liouville: Se pueden clasificar los niveles por valor creciente de la energía en función del número de nodos (puntos donde el signo de la función de onda cambia) de la función de onda.
3. En el caso de que el potencial sea simétrico respecto al origen (función par  $V(x) = V(-x)$ ), las funciones propias del hamiltoniano son pares o impares. Dado que una función impar posee un nodo en  $x = 0$ , esto significa que necesariamente el estado fundamental es una función par, el primer estado excitado es impar, el segundo estado excitado es par, etc.

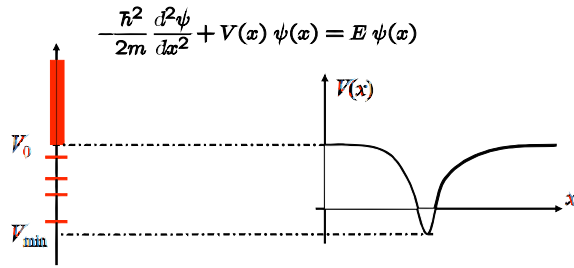
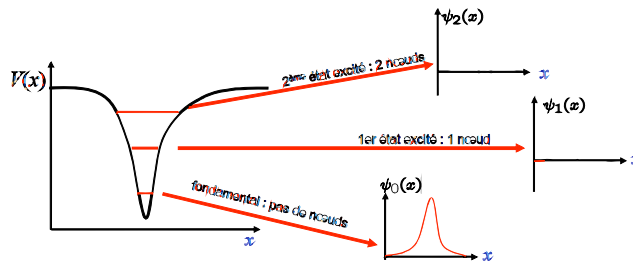


Figura 2: Para un potencial que tiende a una constante  $V_1$  al infinito y posee un mínimo  $V_{min}$ , los valores propios  $E$  del hamiltoniano forman: por un lado un conjunto discreto  $E_n$  entre  $V_{min}$  y  $V_1$  correspondiente a estados ligados, por otro un conjunto continuo de valores superiores a  $V_1$  correspondiente a estados de difusión. Todo estado físicos e puede escribir como una superposición lineal de las funciones propias correspondientes.



## 0.2. El oscilador armónico

### 0.2.1. Oscilador armónico clásico

Se llama un oscilador armónico a un sistema constituido por una partícula de masa  $m$  elásticamente ligada a un centro  $x_0$ , por una fuerza elástica  $F = -k(x - x_0)$ . El coeficiente  $k$  es la constante elástica del oscilador, y la energía potencial es  $V(x) = V_0 + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2$ . La ecuación de movimiento clásica es  $m \frac{d^2x}{dt^2} = -k(x - x_0)$ . El movimiento es una oscilación sinusoidal de frecuencia  $\omega = \sqrt{k/m}$  independiente de la amplitud del movimiento. Para simplificar, escogemos el origen de la posición y de la energía tal que  $x_0 = 0$  y  $V_0 = 0$ . La expresión para la energía total es:

$$E = \frac{1}{2}m \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x^2$$

Esta energía es siempre positiva, y ya que el potencial tiende a infinito para  $|x| \rightarrow \infty$ , solo existen estados ligados.

### 0.2.2. Oscilador armónico cuántico

En el problema cuántico, el hamiltoniano tiene la forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$$

y se debe resolver la ecuación a valores propios:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) \psi(x) = E \psi(x)$$

Este problema no posee estados de difusión, solo nos interesan los valores de la energía  $E$  para los cuales las soluciones son de cuadrado sumable. El problema se puede tratar utilizando unidades adimensionales, definiendo  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$  y :

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad y = x/a$$

y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\frac{1}{2} \left( y^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right) \phi(y) = \varepsilon \phi(y)$$

con  $\phi(y) = \psi(x)/\sqrt{a}$ . Esta ecuación diferencial es conocida, sus soluciones de cuadrado sumable son las funciones de Hermite:

$$\phi_n(y) = c_n e^{-y^2/2} H_n(y)$$

donde  $c_n = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2}$  y donde  $H_n(y)$  es un polinomio de grado  $n$ , que posee únicamente potencias pares (respectivamente, impares) de  $y$  si  $n$  es par (respectivamente impar):

$$H_n = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2})$$

los valores propios correspondientes son  $\varepsilon = n + \frac{1}{2}$ , con  $n$  natural o nulo. Los niveles de energía de un oscilador armónico a una dimensión son entonces:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

La constante aditiva  $\hbar\omega/2$ , llamada energía de punto cero, es esencial para satisfacer las relaciones de incertidumbre. Las funciones propias del hamiltoniano son finalmente:

$$\psi_n(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!} a} e^{-x^2/2a^2} H_n(x/a)$$

Estas funciones son reales y ortogonales, es decir:

$$\int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) = \delta_{nn'}$$

A partir de la definición, se pueden verificar que estas funciones satisfacen las relaciones de recurrencia:

$$x\sqrt{2}\psi_n(x) = a\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x) + a\sqrt{n}\psi_{n-1}(x) \quad (2)$$

$$a\sqrt{2}\frac{d}{dx}\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x) - \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x) \quad (3)$$

Estas relaciones, de gran utilidad práctica, dan el resultado de la acción de los operadores  $\hat{x}$  y  $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$  sobre las funciones  $\psi_n(x)$ .

### Problema 1: Interacción protón-neutrón

Considere los estados ligados estacionarios de una partícula de masa  $m$  en el pozo de potencial:

$$V = \infty \text{ para } x < 0, \quad V = -V_0 \text{ para } 0 \leq x \leq a, \quad V = 0 \text{ para } x > a$$

Uno escribe la función de onda de un estado ligado ( $E < 0$ )

$$\psi(x) = A \sin kx \text{ para } x \leq a, \quad \psi(x) = B e^{-Kx} \text{ para } x > a$$

- Justifique brevemente esta expresión para las funciones de onda, y exprese  $k$ ,  $K$  en términos de  $E$  y  $V_0$
- Escriba las condiciones de continuidad en  $x = a$ . Deduzca la condición de cuantificación. Existen estados ligados para cualquier valor de  $V_0$ ?
- Se utiliza este modelo para describir la interacción nuclear entre un neutrón y un protón. La experiencia muestra que existe solo un estado ligado, el deuterón. Deduzca que  $V_0$  está acotado entre dos límites  $V_{min}$  y  $V_{max}$  que se deben calcular en MeV ( $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$ ). Se toma  $a = 2 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 2 \text{ fm}$ . La masa  $m$  es la masa reducida  $m = m_p m_n / (m_p + m_n) \approx m_p / 2$ . Esto da  $mc^2 \sim 470 \text{ MeV}$ , y  $\hbar c \sim 197 \text{ MeV fm}$
- Cuál es la energía de ligazón para  $V_0 = V_{min}$ ? La energía de ligazón del deuterón es  $E_d = -2,2 \text{ MeV}$ . Utilice el hecho de que  $|E_d|$  es pequeño comparado a  $V_{min}$  para linealizar las ecuaciones y calcular  $V_0$ .

### Solución

a) La ecuación de Schrodinger independiente del tiempo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Para  $0 \leq x \leq a$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) \psi(x) = 0$$

La solución general es:

$$\psi(0 \leq x \leq a) = A e^{ikx} + A' e^{-ikx}$$

con  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 + E)}$

Para  $x > a$ , se tiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

Como  $E < 0$ , la solución general es:

$$\psi(x > a) = B e^{Kx} + B' e^{-Kx}$$

con  $K = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}$ . Las condiciones en los extremos son:

$$\psi(0) = 0 \quad \text{y} \quad \psi(\infty) = 0$$

La primera de ellas impone  $A + A' = 0$ , lo que significa:

$$\psi(0 \leq x \leq a) = A \sin kx$$

donde se ha redefinido la constante  $A$ . La condición en el infinito significa  $B' = 0$ . Finalmente se tiene:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ A \sin kx & 0 \leq x \leq a \\ B e^{-Kx} & x > a \end{cases}$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 + E)}, \quad K = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}$$

b) En  $x = a$  la función de onda y su derivada son continuas, esto significa:

$$A \sin ka = B e^{-Ka}$$

$$Ak \cos ka = -BK e^{-Ka}$$

Dividiendo ambas y multiplicando por  $a$ :

$$ka \cotg ka = -Ka \tag{4}$$

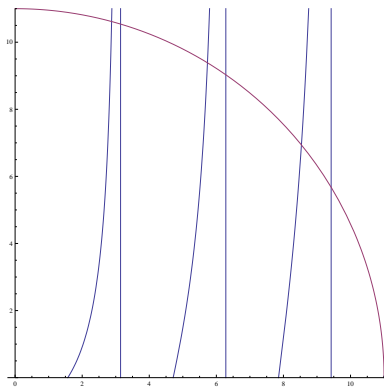
Con

$$K^2 a^2 + k^2 a^2 = 2mV_0 a^2 / \hbar^2 \tag{5}$$

El sistema (4) y (5) no se puede resolver analíticamente. Sin embargo, el número de soluciones puede ser encontrado fácilmente de forma gráfica, definiendo  $y = Ka$ ,  $x = ka$ , entonces:

$$y = -x \cotg x, \quad y^2 + x^2 = 2mV_0 a^2 / \hbar^2$$

Las soluciones (que son finitas en número) se obtienen intersectando en el primer cuadrante del plano  $x - y$  la circunferencia de radio  $r = \sqrt{2mV_0 a^2} / \hbar$ , con la curva  $y = -x \cotg x$ . En la siguiente figura se muestra el caso para  $r = 11$ , donde hay 3 soluciones.



Esta última función es negativa para  $x < \pi/2$ , se anula en  $x = \pi/2$  y diverge para  $x = \pi$ . (Este comportamiento se reproduce cualitativamente con un período igual a  $\pi$ ). Se deduce que si

el radio de la circunferencia es menor que  $\pi/2$ , no existe solución y por lo tanto no habrá ningún estado ligado. Sólo hay estados ligados si:

$$\sqrt{2mV_0a^2\hbar^2} \geq \frac{\pi}{2}$$

c) Hay ún solo estado ligado si se cumple  $\pi/2 \leq r \leq 3\pi/2$ , es decir:

$$\frac{\pi}{2} \leq \frac{\sqrt{2mV_0a^2}}{\hbar} \leq \frac{3\pi}{2}$$

Es decir,  $V_{min} \leq V_0 \leq V_{max}$ , con

$$V_{min} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} = \frac{\pi^2}{8a^2} \frac{(hc)^2}{mc^2} = \frac{\pi^2}{8} \frac{197^2}{2^2 \cdot 470} = 25,5 \text{ MeV}$$

$$V_{max} = 9V_{min}$$

d) Si  $V = V_{min}$ , se tiene una sola solución con  $y = 0$ , equivalentemente  $K = E = 0$ . Que  $|E_d|$  sea pequeño significa  $V \sim V_0$ . Usando entonces que  $x = ka \sim \frac{\pi}{2}$ , un desarrollo a primer orden en serie de Taylor da:

$$Ka = \frac{d}{d(ka)} (-ka \cotg ka) \Big|_{ka=\pi/2} (ka - \pi/2)$$

$$Ka = \left( \frac{ka \sec^2 ka}{\tan^2 ka} \right) \Big|_{ka=\pi/2} (ka - \pi/2) = \frac{\pi}{2} (ka - \pi/2) = \frac{a}{\hbar} \sqrt{-2mE}$$

y

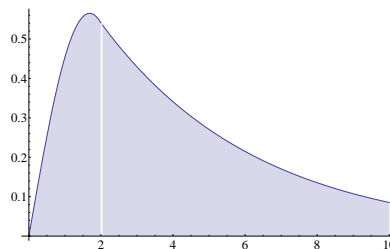
$$ka \approx \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

Finalmente:

$$\frac{a}{\hbar} \sqrt{-2mE} = \frac{\pi}{2} \left( \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} - \frac{\pi}{2} \right) = \frac{2a}{\pi\hbar} \sqrt{-2mE} + \frac{\pi}{2} = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left\{ \frac{\pi}{2} + \frac{2a}{\pi\hbar} \sqrt{-2mE/\hbar^2} \right\} \approx 35,9 \text{ MeV}$$

La siguiente figura muestra la función de onda para el deuterón, la línea vertical blanca indica  $x = 2$  (fm).



## Problema 2: Relaciones de incertidumbre para el oscilador armónico

A partir de las relaciones de recurrencia de las funciones de Hermite, muestre que en un estado de energía  $E_n$  dada por  $E_n = \hbar\omega(1/2 + n)$ , se tiene  $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ . Calcule  $\langle x^2 \rangle$ , y  $\langle p^2 \rangle$  y muestre que la energía de punto cero  $\hbar\omega/2$  es indispensable para preservar las relaciones de incertidumbre.

### Solución

Un estado de energía  $E_n$  bien definido corresponde a una función de onda  $\psi_n(x)$  que es autofunción del hamiltoniano con autovalor  $E_n$ . Dado que ellas son pares o impares, la densidad de probabilidad  $|\psi_n(x)|^2$  es una función par, de forma que:

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n(x)^* \hat{x} \psi_n(x) = \int_{\mathbb{R}} dx x |\psi_n(x)|^2 = 0$$

El operador momentum cambia la paridad de las funciones de onda, esto se puede ver a partir de la relación de recurrencia (3) :

$$a\sqrt{2}\frac{d}{dx}\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x) - \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)$$

De esta forma,  $\psi_n(x)\hat{p}\psi_n(x)$  es una función impar, y luego:

$$\langle p \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n(x)^* \hat{p} \psi_n(x) = 0$$

En resumen, para un estado estacionario del oscilador armónico,  $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ .

Ahora calculemos:

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 = \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \hat{x}^2 \psi_n(x) = \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x)$$

A partir de la relación de recurrencia (2):

$$x\psi_n(x) = \frac{a}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x) + \sqrt{n}\psi_{n-1}(x) \right)$$

Se obtiene:

$$x^2\psi_n(x) = \frac{a^2}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{n+1}x\psi_{n+1}(x) + \sqrt{nx}\psi_{n-1}(x) \right)$$

$$x^2\psi_n(x) = \frac{a^2}{2} \left\{ \sqrt{n+1} \left( \sqrt{n+2}\psi_{n+2}(x) + \sqrt{n+1}\psi_n(x) \right) + \sqrt{n} \left( \sqrt{n}\psi_n(x) + \sqrt{n-1}\psi_{n-2}(x) \right) \right\}$$

Como las funciones de Hermite son ortogonormales:

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) = \delta_{nn'}$$

Entonces:

$$\Delta x^2 = \frac{a^2}{2}(2n+1) \int_{\mathbb{R}} dx \psi_n^*(x) \psi_n(x) = \frac{a^2}{2}(2n+1)$$

pero  $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , luego:



$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2mw}(2n+1)$$

(En particular, para el ground state,  $\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2mw}$ ). Para calcular  $\langle p^2 \rangle = \Delta p^2$ , usemos el hecho siguiente:

$$\langle E \rangle = E_n = \hbar\omega(n+1/2) = \frac{1}{2m}\Delta p^2 + \frac{1}{2}mw^2\Delta x^2$$

Luego:

$$\hbar\omega(n+1/2) - \frac{1}{2}mw^2\frac{\hbar}{2mw}(2n+1) = \frac{1}{2m}\Delta p^2$$

$$m\hbar\omega(n+1/2) = \Delta p^2$$

Con esto:

$$\Delta x\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}(2n+1)m\hbar\omega(n+1/2)} = \frac{\hbar}{2}(2n+1) \geq \frac{\hbar}{2}$$

Para  $n = 0$ , la desigualdad  $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$  se encuentra saturada: el ground state es una gaussiana.

### Problema 3: Evolución de un oscilador unidimensional

Sea un oscilador armónico de hamiltoniano  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + mw^2\hat{x}^2/2$  y sus dos primeras funciones de onda normalizadas  $\phi_0(x)$  y  $\phi_1(x)$ . Consideremos un sistema que en  $t = 0$  está descrito por la función de onda:

$$\psi(x, t = 0) = \cos \vartheta \psi_0(x) + \sin \vartheta \psi_1(x), \quad \text{con } 0 \leq \vartheta < \pi$$

- Cuál es la función de onda  $\psi(x, t)$  al instante  $t$ ?
- Calcular los valores medios  $\langle E \rangle$ ,  $\langle E^2 \rangle$  y  $\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ . Explique la dependencia temporal de estas cantidades.
- Calcule la evolución temporal de  $\langle x \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$  y  $\Delta x$ .

#### Solución

a) Se tiene, inmediatamente:

$$\psi(x, t) = \cos \vartheta e^{-iE_0 t/\hbar} \psi_0(x) + \sin \vartheta e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1(x)$$

b) Tenemos:

$$\langle E \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x, t) \hat{H} \psi(x, t)$$

Utilizando que:

$$\hat{H} \psi(x, t) = E_0 \cos \vartheta e^{-iE_0 t/\hbar} \psi_0(x) + E_1 \sin \vartheta e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1(x)$$

Sabiendo que  $\psi_0$  y  $\psi_1$  son ortonormales:

$$\langle E \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx (E_0 \cos^2 \vartheta |\psi_0(x)|^2 + E_1 \sin^2 \vartheta |\psi_1(x)|^2)$$

$$\langle E \rangle = E_0 \cos^2 \vartheta + E_1 \sin^2 \vartheta = \frac{\hbar \omega}{2} (\cos^2 \vartheta + 3 \sin^2 \vartheta)$$

Para  $\langle E^2 \rangle$ , se obtiene de forma análoga:

$$\langle E^2 \rangle = E_0^2 \cos^2 \vartheta + E_1^2 \sin^2 \vartheta = \frac{\hbar^2 \omega^2}{4} (\cos^2 \vartheta + 9 \sin^2 \vartheta)$$

De esta manera:

$$\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\hbar^2 \omega^2}{4} \left\{ (\cos^2 \vartheta + 9 \sin^2 \vartheta) - (\cos^2 \vartheta + 3 \sin^2 \vartheta)^2 \right\}$$

$$\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\hbar^2 \omega^2}{4} 4 \cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta = \frac{\hbar^2 \omega^2}{4} \sin^2 2\vartheta$$

Los valores medios de funciones de la energía son todas independientes del tiempo, es una consecuencia de la conservación de la energía.

c) Para la distribución en posición, obtenemos:

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x) x \psi(x)$$

Pero:

$$x\psi(x) = \cos \vartheta e^{-iE_0t/\hbar} x\psi_0(x) + \sin \vartheta e^{-iE_1t/\hbar} x\psi_1(x)$$

Utilizando las relaciones de recurrencia de las funciones de Hermite:

$$x\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \cos \vartheta e^{-iE_0t/\hbar} a\psi_1(x) + \sin \vartheta e^{-iE_1t/\hbar} \left( a\sqrt{2}\psi_2(x) + a\psi_0(x) \right) \right\}$$

$$x^2\psi(x) = \frac{1}{2} \left\{ \cos \vartheta e^{-iE_0t/\hbar} a^2 \left( \sqrt{2}\psi_2(x) + \psi_0(x) \right) + \sin \vartheta e^{-iE_1t/\hbar} a^2 \sqrt{2} \left( \sqrt{3}\psi_3(x) + \frac{3}{\sqrt{2}}\psi_1(x) \right) \right\}$$

Considerando la ortogonalidad de las funciones de Hermite:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{\mathbb{R}} dx \left\{ \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i(E_1-E_0)t/\hbar} a |\psi_1(x)|^2 + \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i(E_0-E_1)t/\hbar} a |\psi_0(x)|^2 \right\}$$

$$\langle x \rangle = \sin 2\vartheta \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \left\{ e^{i(E_1-E_0)t/\hbar} + e^{i(E_0-E_1)t/\hbar} \right\}$$

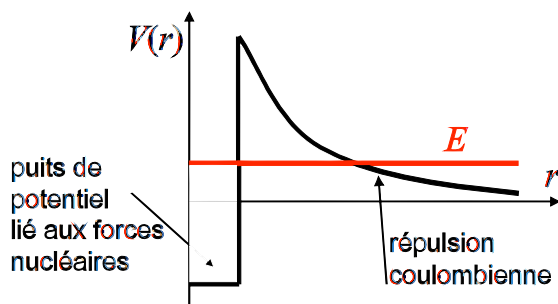
$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} \sin 2\vartheta \cos wt$$

El valor medio de la posición oscila a una frecuencia característica  $w$ . Finalmente para  $\langle x^2 \rangle$ :

$$\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{2} \left\{ \cos^2 \vartheta + 3 \sin^2 \vartheta \right\} = \frac{\hbar}{2mw} (1 + 2 \sin^2 \vartheta)$$

### Problema 4: Radiactividad alfa

Una de las primeras aplicaciones del efecto túnel consistió en explicar el fenómeno de emisión alfa desde un núcleo ( $X_Z^A \rightarrow Y_{Z-2}^{A-4} + He_2^4$ ). Estudios de scattering de partículas alfa mostraban que a distancias levemente cercanas al núcleo, la energía potencial era simplemente el potencial coulombiano repulsivo, y que la altura de este potencial era mucho más grande que la energía cinética de una partícula alfa emitida por el núcleo. Esto era un gran misterio, ya que si la partícula alfa venía desde el núcleo, y hubiera tenido energía suficiente para atravesar la barrera, su energía cinética habría sido mucho más grande de lo observado. El efecto túnel, puramente cuántico, puede explicar este fenómeno. Considere un potencial como se indica en la figura:



Es decir, de la forma  $V(x) = -V_0$  para  $0 \leq x \leq R$  (atracción debido a la fuerza nuclear),  $V(x) = 2e^2(Z-2)/x$  (repulsión coulombiana del resto del núcleo sobre la partícula alfa). Recuerde que la probabilidad de transmisión a través de una barrera tiene la forma:

$$t = Ae^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m(V(x)-E)}}$$

donde  $[x_1, x_2]$  es el rango de valores de  $x$  en el cual la energía  $E$  es menor que el potencial.

- Calcule la probabilidad de transmisión para una partícula  $\alpha$  en función de su energía  $E$ .
- Simplifique la expresión suponiendo que la energía  $E$  es mucho menor a la altura de la barrera de potencial.
- Encuentre una expresión estimada para el tiempo de vida de una partícula alfa en el núcleo.

### Solución

a) La probabilidad de transmisión tiene la forma:

$$t = Ae^{-G}$$

con

$$G = 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_R^b dx \sqrt{\frac{2e^2(Z-2)}{x} - E}$$

donde  $b$  es el valor de  $x$  (con  $x > R$ ) para el cual la energía es igual al potencial. Eso es:

$$E = \frac{2e^2(Z-2)}{b}, \quad \rightarrow b = \frac{2e^2(Z-2)}{E}$$

La integral queda:

$$\int_R^b dx \sqrt{\frac{2e^2(Z-2)}{x} - \frac{2e^2(Z-2)}{b}} = \sqrt{2e^2(Z-2)} \int_R^b dx \sqrt{\frac{1}{x} - \frac{1}{b}}$$

$$\int_R^b dx \sqrt{\frac{2e^2(Z-2)}{x} - \frac{2e^2(Z-2)}{b}} = \sqrt{2e^2(Z-2)b} \int_{R/b}^1 du \sqrt{\frac{1}{u} - 1}$$

Utilizando el cambio de variable  $\cos^2 \vartheta = u$ , obtenemos  $2 \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = du$ :

$$\begin{aligned} &= \sqrt{2e^2(Z-2)b} \int_{\cos^{-1}\sqrt{R/b}}^0 d\vartheta 2 \cos \vartheta \sin \vartheta \sqrt{\sec^2 \vartheta - 1} = \sqrt{2e^2(Z-2)b} \int_{\cos^{-1}\sqrt{R/b}}^0 d\vartheta 2 \sin^2 \vartheta \\ &= \sqrt{2e^2(Z-2)b} \int_{\cos^{-1}\sqrt{R/b}}^0 d\vartheta (1 - \cos 2\vartheta) = \sqrt{2e^2(Z-2)b} \left\{ \cos^{-1} \sqrt{R/b} + \frac{1}{2} \sin 2 \left( \cos^{-1} \sqrt{R/b} \right) \right\} \end{aligned}$$

Finalmente:

$$G = 4 \sqrt{\frac{2me^4(Z-2)^2}{\hbar^2 E}} \left\{ \cos^{-1} \sqrt{R/b} + \frac{1}{2} \sin 2 \left( \cos^{-1} \sqrt{R/b} \right) \right\}$$

$$t \sim e^{-G}$$

b) Si la energía de la partícula  $\alpha$  es mucho menor que la altura de la barrera coulombiana, entonces  $b/R \gg 1$ , se tiene entonces  $\cos^{-1} \sqrt{R/b} \approx \pi/2$  y  $\sin 2 \left( \cos^{-1} \sqrt{R/b} \right) \approx \sin \pi \approx 0$  :  
y entonces:

$$t \sim e^{-2\pi \sqrt{\frac{2me^4(Z-2)^2}{\hbar^2 E}}}$$

c) Supongamos que la partícula  $\alpha$  se encuentra rebotando constantemente entre la barrera infinita en  $x = 0$  y en la barrera coulombiana en  $x = R$ . En cada encuentro con esta última, la partícula tiene una probabilidad del orden de  $e^{-G}$  de escapar por efecto túnel. Luego, el número de encuentros necesarios para salir será, en media,  $n = e^G$ . Cada encuentro toma  $2R/v$  segundos, donde  $v$  es la velocidad de la partícula  $\alpha$  dentro del pozo,  $v = \sqrt{2E/m}$ . De esta manera:

$$\tau \approx \frac{2R}{v} e^G$$

$$\tau \approx 2R \sqrt{\frac{m}{2E}} e^{2\pi \sqrt{\frac{2me^4(Z-2)^2}{\hbar^2 E}}}$$