QUIMICA FISICA II. CURSO 2003-2004. SERIE 02.
Problemas de una partícula con solución analítica conocida

1. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger de una partícula libre ($V(\vec{r}) = 0$) son ondas planas $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = Ne^{\pm i(\vec{k}\cdot\vec{r}\mp\omega t)}$, donde $\vec{r}$ es el vector de posición de la partícula, $\vec{k}$ su vector de ondas de módulo $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, y λ y $\omega = E/\hbar$ la longitud de onda y la frecuencia, respectivamente, de la onda plana.

   (a) El vector $\vec{k}$ y la energía de la partícula están ligados por la relación $k^2 = |\vec{k}|^2 = 2mE/\hbar^2$. Deduce esta relación a partir de la ecuación de Schrödinger.

   (b) Normaliza $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$ integrando la densidad de probabilidad en el recinto arbitrario $[0 \leq x \leq a; 0 \leq y \leq b; 0 \leq z \leq c]$.

   (c) Comprueba que las ondas planas tienen momento lineal bien definido y calcula su valor.

   (d) Considera el conjunto de ondas de ondas planas monodimensionales $|k\rangle = \psi_k(x) = e^{ikx}$, donde el momento k puede tomar cualquier valor. Normaliza este conjunto en el recinto arbitrario $[-a/2 \leq x \leq a/2]$ y obtén la integral de solapamiento $\langle k|k'\rangle$ en función de las variables k, k' y a.

   (e) Comprueba que si en el apartado anterior imponemos la condición de contorno $\psi_k(x + a) = \psi_k(x)$, el conjunto de ondas planas se convierte en un conjunto ortonormal.

2. Los estados permitidos de una partícula de masa m encerrada en una caja 1D de lado a en la que el potencial es nulo y que está rodeada de un potencial infinito son $\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\ \mathrm{sen}(n\pi x/a)$. Compara la probabilidad de que la partícula esté en el recinto $[0.45a \leq x \leq 0.55a]$ con la de que esté en el de igual longitud $[0.9a \leq x \leq a]$, para $n = 1$ y $n = 10$.

3. Una partícula macroscópica de masa 1 g se mueve con velocidad 1 cm/s en el interior de un recinto de longitud 1 cm. Suponiendo la validez del modelo de la partícula en la caja, determina el número cuántico n que corresponde a este estado de la partícula.

4. Para la partícula en una caja 1D, determina la probabilidad de encontrar la partícula en el recinto $x_0 - \delta \leq x \leq x_0 + \delta$, y examina el comportamiento de esta probabilidad cuando δ se hace arbitrariamente pequeña. Compara este resultado con el que proporciona la física clásica y verifica si se cumple el Principio de Correspondencia de Bohr.

5. Determina los valores de $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p_x\rangle$, $\langle p_x^2\rangle$, Δx y Δp_x para el estado $\psi_n(x)$ de una partícula en la caja 1D, y utilízalos para verificar que se cumple el principio de incertidumbre de Heisenberg. Determina también los valores esperados de las energías cinética y potencial.

6. Para una partícula en una caja cúbica son degenerados todos los estados tales que $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ sea igual a un mismo valor N. Determina el número de estados degenerados que corresponden a $N : 1, 2, 3, ...25$ y representa este número en una gráfica. Si $g(N)$ representa la degeneración para un N determinado, encuentra y representa también la función *suma de estados* definida por:

$$G(N) = \sum_{k=1}^{N} g(k). \qquad (1)$$

   Con la ayuda de un sencillo programa es fácil extender este ejercicio hasta alcanzar $N = 1000$ ó $N = 10^4$.

7. Dibuja la función de onda y la densidad de probabilidad para los primeros estados de la partícula en una caja 1D, 2D y 3D.

8. El operador hamiltoniano del oscilador armónico monodimensional de masa m y constante recuperadora k es $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$.

   (a) Demuestra que $\hat{H}$ puede escribirse como $\hat{H} = (p^2 + m^2\omega^2x^2)/2m$, donde ω es la frecuencia angular del oscilador.

   (b) Definimos los operadores $\hat{a}_+ = N(p + im\omega x)$ y $\hat{a}_- = N(p - im\omega x)$, con $N = (2m\hbar\omega)^{(-1/2)}$. Demuestra que son adimensionales y que no son hermíticos.

   (c) Obtén la forma de los operadores $\hat{a}_+\hat{a}_-$ y $\hat{a}_-\hat{a}_+$. Con estas formas demuestra que $\hat{a}_+$ y $\hat{a}_-$ no conmutan y que el operador $\hat{H}$ puede escribirse en función de estos operadores y del factor $\hbar\omega$.

   (d) Muestra que si $\hat{H}\psi_v(x) = E_v\psi_v(x)$, entonces $\hat{H}(\hat{a}_-\psi_v(x)) = (E_v - \hbar\omega)\hat{a}_-\psi_v(x)$ y por tanto $\hat{a}_-\psi_v(x) = C\psi_{v-1}(x)$; análogamente, muestra que $\hat{a}_+\psi_v(x) = C\psi_{v+1}(x)$.

   (e) Dado que $\langle\hat{H}\rangle \geq 0$, existe un estado fundamental ψ_0 tal que $\hat{a}_-\psi_0 = 0$. Usando el conmutador $[\hat{a}_-, \hat{a}_+]$, muestra que $E_0 = {}^1\!/\!{}_2\hbar\omega$.

   (f) Resuelve la ecuación diferencial $\hat{a}_-\psi_0(x) = 0$ para encontrar $\psi_0(x)$.

   (g) Comprueba que, actuando sucesivamente con el operador $\hat{a}_+$ sobre la función $\psi_0(x)$, se obtienen las funciones de los sucesivos estados excitados del oscilador para $v = 1, 2, ...$

9. Hay varias relaciones muy útiles a la hora de trabajar con los polinomios de Hermite, $H_n(\xi)$. Entre ellas está la fórmula de Rodrigues,

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{+\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2},$$

   la derivada de un polinomio,

$$H'_n = 2nH_{n-1},$$

   la fórmula de diferencias,

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi),$$

   y la expresión explícita:

$$H_n(\xi) = \sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^k\frac{n!}{k!(n-2k)!}(2\xi)^{n-2k},$$

   donde $[x]$ representa la parte entera de x. Utiliza la fórmula de Rodrigues para obtener la constante de normalización de las soluciones del oscilador armónico: $\psi_n(\xi) = N_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$. Demuestra, asimismo, que las funciones $\psi_n(\xi)$ forman un conjunto ortonormal.

10. Determina los valores promedio de las energías cinética y potencial para el estado fundamental del oscilador armónico unidimensional. Comprueba que $\langle T\rangle = \langle V\rangle$ en este caso.

11. La probabilidad de hallar a un oscilador armónico clásico en un punto intermedio del recorrido se puede considerar que es inversamente proporcional a la velocidad del oscilador en ese punto: $P_{clas}(x) \simeq 1/v(x)$. Partiendo de: $x(t) = A\,\mathrm{sen}(\omega t)$, y $E = \frac{1}{2}kA^2$, donde A es la amplitud, demuestra que

$$P_{clas}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{\frac{2E}{k} - x^2}}.$$

Compara este comportamiento con las densidades de probabilidad mecanocuánticas y determina si se cumple el pricipio de correspondencia.

12. Considera un oscilador armónico isótropo 3D, cuyo potencial es $V(x,y,z) = \frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2)$.

    (a) Emplea la técnica de separación de variables para obtener sus funciones de estado y energías estacionarias a partir de las correspondientes al problema 1D.

    (b) Escribe las funciones de onda y energías de todos los estados correspondientes a los tres primeros niveles de energía.

    (c) Escribe el hamiltoniano en coordenadas esféricas, y comprueba que éste es un problema de campo central. Por tanto, se pueden encontrar funciones propias de $\hat{H}$, $\hat{l}^2$ y $\hat{l}_z$ simultáneamente.

    (d) Comprueba que las funciones del segundo apartado no son todas ellas propias de $\hat{l}^2$ y $\hat{l}_z$. Explícalo.

13. Demuestra las siguientes relaciones entre operadores de momento angular: (a) $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z$; (b) $\hat{\vec{l}} \times \hat{\vec{l}} = i\hbar\hat{\vec{l}}$; (c) $[\hat{l}_x, \hat{l}^2] = [\hat{l}_y, \hat{l}^2] = [\hat{l}_z, \hat{l}^2] = 0$.

14. Representa las funciones $Y_{lm}(\theta,\phi)$ y $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$ para $l = 0,1,2$ de la siguiente forma: para cada (θ,ϕ), se toma el valor absoluto de la función como coordenada r; como esto corresponde a una superficie 3D, se representan sus cortes con los planos $x = 0$ y $z = 0$. Como las funciones con $m \neq 0$ son complejas, se representa sólo su parte real. Las regiones en las que la función es negativa se suelen representar en un color diferente. En ocasiones se define también el conjunto de armónicos esféricos reales,

$$S_{lm}(\theta,\phi) = \begin{cases} \frac{(-1)^m}{\sqrt{2}}(Y_{lm} + Y_{lm}^*) & \text{si } m > 0, \\ Y_{l0} & \text{si } m = 0, \\ \frac{(-1)^m}{i\sqrt{2}}(Y_{l|m|} - Y_{l|m|}^*) & \text{si } m < 0. \end{cases} \tag{2}$$

    Encuentra las expresiones para estas funciones con $l = 0,1,2$, y represéntalas. Puedes encontrar una representación 3D en perspectiva de estas funciones en `http://web.uniovi.es/qcg/harmonics/harmonics.html`.