Mecánica Cuántica I

Guía 9 – Junio de 2009

Problema 1: Encontrar las autofunciones de una partícula libre en tres dimensiones. Comparar las autofunciones basadas en el conjunto completo de observables H, L^2 y L_z, con las autofunciones de ondas planas en la cual el movimiento está caracterizado por los observables H, p_x, p_y y p_z, los cuales también forman un conjunto completo de observables.

Problema 2: Determine la condición para los autovalores de los estados ligados de pozo de potencial

$$V(r) = \left\{ \begin{array}{rcl} -V_0 \;\; r & < & R \\ 0 \;\; r & > & R \end{array} \right.$$

Compare la ecuación resultante para estados S con la obtenida para el pozo unidimensional y escriba una condición de existencia para estados ligados. Determine una condición para existencia de estados ligados con $l > 0$.

Problema 3: Si H es la suma de un operador hermitiano H_o y una perturbación definida positiva pruebe, con argumentos variacionales, que la energía del estado fundamental de H_o está por debajo de la energía del estado fundamental de H. Aplique este teorema para probar que en un potencial central el estado fundamental de una partícula ligada es un estado S.

Problema 4: a) Dados 2 potenciales centrales $V_1(r)$ y $V_2(r)$ que cumplen

$$\lim_{r\to\infty} V_1(r) = 0 \;\; , \;\; \lim_{r\to\infty} V_2(r) = 0 \;\; \mathrm{y} \;\; V_1(r) \leq V_2(r) \;\; \forall r$$

muestre que $E^{(1)}_{n,l} \leq E^{(2)}_{n,l}$, donde $E^{(i)}_{n,l}$, $i = 1, 2$ es la energía de un estado ligado con n nodos y momento angular l.

b) Use este resultado y el problema 3 de la guía 5 para mostrar que el potencial de Eckart

$$V(r) = -\frac{2c}{a^2} \frac{e^{-r/a}}{(1 + c\, e^{-r/a})^2} \quad a,\, c > 0$$

no tiene estados ligados para $c < 1$.

Problema 5: Considere un oscilador tridimensional isotrópico cuántico, es decir una partícula de masa μ sometida a un potencial radial $V(r) = \mu\omega^2 r^2/2$.

a) Resuelva la ecuación de Schrödinger en coordenadas cartesianas, mediante separación de variables. Verifique que los niveles de energía son de la forma E_n $, n = 0, 1, 2 \cdots$ con $E_0 < E_1 < E_2 \cdots$ y que las multiplicidades correspondientes son $(n + 1)(n + 2)/2$.

Para resolver ahora el problema en coordenadas esféricas, se propone la siguiente función :

$$\psi(r, \theta, \phi) = r^\ell \exp\left(-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2\right) f(r)\, Y^m_\ell(\theta, \phi)$$

b) Muestre que la ecuación que resulta para $f(r)$ permite expresar a $f(r)$ como polinomios asociados de Laguerre $L_n^{(\alpha)}(x)$, los que satisfacen la ecuación diferencial

$$x\,\frac{\partial^2 L_n^{(\alpha)}(x)}{\partial x^2} + (\alpha+1-x)\,\frac{\partial L_n^{(\alpha)}(x)}{\partial x} + n\,L_n^{(\alpha)}(x) \;=\; 0$$

(con n entero), para lo cual es conveniente utilizar la energía reducida $\epsilon = 2E/\hbar\omega$ y hacer la sustitución $x = \mu\omega r^2/\hbar$, identificando luego $\alpha = \ell + 1/2$.

c) Escriba entonces los correspondientes autovalores para la energía E y encuentre alguna correspondencia entre los números cuánticos del punto (a) y del (b).

d) Para los dos autovalores más bajos de energía relacione las autofunciones halladas mediante los dos métodos. Escriba tambien la autofunción con $l = 2$, $m = 0$ cuya parte radial presenta un nodo como expansión de las correspondientes autofunciones en coordenadas cartesianas.

Problema 6: Aplique el método variacional al estado fundamental ($\ell = 0$) de una partícula moviéndose en un potencial atractivo de la forma (Yukawa o Coulomb apantallado):

$$V(r) = -V_o \frac{e^{-r/a}}{r/a}$$

con V_o, $a > 0$. Use como función de prueba $R(r) = e^{-\beta r/a}$ con el parámetro β variable. Obtenga la mejor función de prueba de esta forma y deduzca una relación entre β y $2\mu V_o a^2/\hbar^2$. Evalúe β y calcule un límite superior de la energía para el valor de $2\mu V_o a^2/\hbar^2 = 2,7$.
¿Existe algún estado excitado ligado?
Muestre que en el límite del potencial de Coulomb ($V_o \to 0, a \to \infty, V_o\, a$ finito) se obtienen la energía y la función de onda correctas para el átomo de hidrógeno.

Problema 7: Considere una partícula de masa m en el potencial central $V(r) = -Ae^{-r/a}$ donde A y a son constantes positivas. Analice el espectro discreto del Hamiltoniano. Nos interesa contestar las siguientes preguntas: ¿hay estados ligados?; ¿cuántos?; ¿qué multiplicidad tienen?; ¿cómo dependen las energías de estos estados de los parámetros del potencial?; ¿qué características tienen las autofunciones asociadas?; etc.

Sugerencias:

- Parta de la ecuación radial reducida para $u(r) = rR(r)$ buscando soluciones con energía $E \leq 0$ (¿por qué no hay estados ligados con $E > 0$?) y con las condiciones de contorno y de integrabilidad adecuadas.

- Introduciendo la transformación de variable $x = e^{-r/(2a)}$, determine la ecuación diferencial para $y(x) = u(-2a\ln(x))$ junto con las condiciones de contorno e integrabilidad.

- Observe que en términos de la variable cx para una constante apropiada c (que depende de los parámetros del potencial), la ecuación diferencial obtenida es la ecuación diferencial de Bessel

$$z^2\,\frac{d^2w}{dz} + z\,\frac{dw}{dz} + (z^2 - \nu^2)w = 0$$

donde, en nuestro caso $\nu = \nu_E$ depende de la energía y de los parámetros del potencial.

- Sabiendo que la solución general de esta ecuación es

$$C_1 J_\nu(z) + C_2 Y_\nu(z)\ , \quad (C_1, C_2 \text{ complejos arbitrarios})\ ,$$

donde la función de Bessel J_ν y la función de Weber Y_ν tienen el siguiente comportamiento cerca de $z = 0$

$$J_\nu(z) \sim z^\nu\ ,\ \ Y_\nu(z) \sim z^{-\nu}\ ;$$

deduzca que la función de Weber debe descartarse y que $J_{\nu_E}(c) = 0$.

- De los ceros de las funciones de Bessel se sabe, entre otras propiedades, que:

  ∘ Para $\nu \geq 0$, J_ν tiene infinitos ceros positivos (además del cero en 0) que son todos simples y no tienen puntos de acumulación. O sea si $\{j_{\nu,n} : n = 1, 2, 3, \cdots\}$ son los ceros de J_ν enumerados crecientemente, se tiene $\lim_{n\to\infty} j_{\nu,n} = \infty$.

  ∘ La función $0 \leq \nu \mapsto j_{\nu,n}$ es creciente para $n = 1, 2, 3, \cdots$.

  ∘ $j_{0,1} \approx 2.40482$ (Euler).

Problema 8: Obtenga explícitamente las funciones de onda radiales del átomo de hidrógeno para $n = 1$, 2 y 3 y grafíquelas.

Problema 9: Muestre que la suma de un pequeño término de la forma $1/r^2$ al potencial de Coulomb remueve la degeneración de los estados con diferente ℓ. Los niveles de energía aún están dados por una fórmula del tipo de Balmer pero n difiere de un entero en una cantidad dependiente de ℓ.

Problema 10: Muestre que la ecuación de Schödinger para el átomo de hidrógeno es separable en coordenadas parabólicas (ξ, η, φ) definidas como:

$$\xi = r + z \quad ; \quad \eta = r - z \quad ; \quad \tan(\varphi) = y/x \quad \text{donde } r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Problema 11: El vector de Lenz se define de la siguiente manera:

$$\vec{K} = \frac{1}{2\mu e^2}\left(\vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L}\right) + \frac{\vec{r}}{r}$$

Muestre lo siguiente:

- $\vec{K}$ es un operador vectorial respecto de $\vec{L}$.
- $\vec{K}$ es una constante de movimiento del Hamiltoniano del átomo de hidrógeno ($H = p^2/2\mu - e^2/r$).
- $\vec{K} \cdot \vec{L} = 0$; $\vec{L} \cdot \vec{K} = 0$.
- $K^2 = \frac{2H}{\mu e^4}(L^2 + \hbar^2) + I$

Definiendo los operadores

$$\vec{J}_1 = \frac{1}{2}\left(\vec{L} + \sqrt{\frac{-\mu e^4}{2H}}\vec{K}\right) \quad ; \quad \vec{J}_2 = \frac{1}{2}\left(\vec{L} - \sqrt{\frac{-\mu e^4}{2H}}\vec{K}\right) ,$$

muestre lo siguiente:

- $\vec{J}_1$ y $\vec{J}_2$ cumplen las relaciones de conmutación de operadores de momento angular.
- $[J_{1,i}, J_{2,j}] = 0$
- $J_1^2 = J_2^2$

Use los resultados anteriores para inferir que la energía de los estados ligados del átomo de hidrógeno debe ser de la forma $E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$, donde n es un entero positivo.