Mecánica Cuántica I

Guía 4 - Abril 2000

Problema 1: *Operadores de Sturm-Liouville con condiciones de contorno mixtas.* Sean $f : [a,b] \to R$ y $g : [a,b] \to R$ dos funciones, f continuamente diferenciable y positiva, g continua. Considere el operador:

$$\boldsymbol{T}u := -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,x}\left(f\,\frac{\mathrm{d}\,u}{\mathrm{d}\,x}\right) + gu$$

Actuando en el conjunto de funciones u en $L^2[a,b]$ tales que ésta y su derivada son absolutamente continuas y satisfacen las siguientes condiciones de contorno:

$$\begin{aligned}\left.\frac{\mathrm{d}\,u}{\mathrm{d}\,x}\right|_a &= \alpha u(a) + \beta u(b)\\ \left.\frac{\mathrm{d}\,u}{\mathrm{d}\,x}\right|_b &= \gamma u(a) + \delta u(b)\end{aligned}$$

con λ y α reales y $\gamma f(b) + \beta f(a) = 0$

Probar que $\boldsymbol{T}$ es hermitiano. Examinar si es autoadjunto.

Problema 2: *Caja de potencial.* Una partícula de masa m está restringida a moverse en una dimensión entre $x = -L/2$ y $x = L/2$, donde el potencial es nulo.

a) Determine los autovalores E_n y las autofunciones ψ_n del Hamiltoniano imponiendo como condiciones de contorno que las funciones de onda se anulen en los extremos del intervalo.

b) Obtenga una expresión para el operador propagador. Determine la evolución temporal del sistema cuando $\psi(x, t = 0) = \sqrt{30/L}\ [(x/L)^2 - 1/4]$.

c) Cuando los límites para el movimiento son $x = 0$ y $x = L$, muestre que las soluciones pueden escribirse como

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \operatorname{sen}\left(\frac{\mathrm{n}\pi\mathrm{x}}{\mathrm{L}}\right)$$

con $n = 1, 2, ..., \infty$.

Problema 3: *Pozo cuadrado de potencial.* Considere una partícula bajo el siguiente potencial:

$$V\,(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \\ V_o & |x| \geq a \end{cases}$$

a) Encuentre una expresión para las autofunciones, y muestre que las soluciones pares tienen energías que satisfacen la ecuación trascendente

$$k\tan(ka) = \kappa \tag{1}$$

mientras que las impares tendrán energías dadas por

$$k\cot(ka) = -\kappa \tag{2}$$

donde k e $i\kappa$ son las partes real e imaginaria de los números de onda dentro y fuera del pozo, respectivamente. Note que k y κ están relacionadas por

$$k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_o}{\hbar^2} \tag{3}$$

b) Compare las autofunciones de los niveles más bajos con las correspondientes al problema anterior. Verifique que cuando $V_o \to \infty$ las soluciones de ambos problemas coinciden.

c) Las ecuaciones (1) y (2) deben ser resueltas gráfica o numéricamente. Para el primer método, la siguiente ayuda puede resultar útil: en el plano ($\alpha = ka$, $\beta = \kappa a$) imagine un círculo que obedece (3). Los estados ligados están dados por la intersección de la curva $\alpha \tan\alpha = \beta$ o $\alpha \cot\alpha = -\beta$ con el círculo. (Recuerde que α y β son positivos).

d) Muestre que siempre existe una solución par y que no hay soluciones impares a menos que $V_o \geq \hbar^2\pi^2/8ma^2$. ¿Cuál es el valor de E cuando V_o cumple satisface la igualdad?

Problema 4: Considere $V(x) = -aV_o\,\delta(x)$.

a) Muestre que admite un estado ligado de energía $E = -ma^2V_o^2/2\hbar^2$.
Sugerencia: Resuelva la ecuación de Schrödinger fuera de la región de potencial con $E < 0$ y mantenga sólo la solución que tiene el comportamiento correcto en el infinito y es continua en $x = 0$. Dibuje la función de onda y verifique que existe una discontinuidad en la derivada para $x = 0$. Calcule el cambio en la derivada e iguálelo a

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \left(\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\right) \mathrm{d}x$$

(con ϵ infinitesimal) determinado por la ecuación de Schrödinger.

b) Considere el potencial del caso (a) como un límite de un pozo infinitamente profundo y angosto. Partiendo de un pozo de ancho a y profundidad V_o tome los límites $V_o \to \infty$ y $a \to 0$ manteniendo el producto $V_o a$ finito. Muestre que hay un sólo estado ligado y calcule su energía E_L.

Problema 5: Considere una partícula de masa m en el estado ψ_n de una caja de largo L. Encuentre la fuerza $F = -\partial E/\partial L$ que se ejerce cuando las paredes son empujadas lentamente, suponiendo que la partícula permanece en el n-ésimo estado de la caja a medida que su tamaño cambia. Considere una partícula clásica de energía E_n en esta caja. Encuentre su velocidad, frecuencia de colisión sobre una dada pared, la transferencia de momento por colisión y de esta forma la fuerza promedio. Compare este resultado con el obtenido anteriormente por derivación.

Problema 6: Considere la barrera rectangular de potencial definida por

$$V(x) = \begin{cases} V_o & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases}$$

a) Obtenga los coeficientes de transmisión y reflexión tanto para valores de energía $E > V_o$ como $0 < E < V_o$.

Grafique los mismos para valores de E/V_o entre 0 y 3. Compare sus resultados con lo que esperaría en el caso clásico.

b) Considere el caso $a \to 0, V_o \to \infty$, con aV_o=cte.

c) Escribiendo la solución general de la ecuación de Schrödinger como

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < -a \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & x > a \end{cases}$$

encuentre la matriz M que relaciona los parámetros A_1, B_1 con A_2, B_2. ¿Cuánto valen los coeficientes de transmisión y reflexión en términos de los elementos de esta matriz?