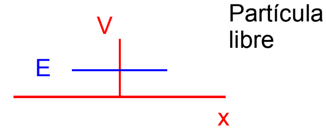
Capítulo 6 Soluciones a la ecuación de Schrödinger en régimen estacionario

Partícula libre

Potencial cero

V(x) = 0



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

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

ψ(x): autofunciones.
E: autovalores

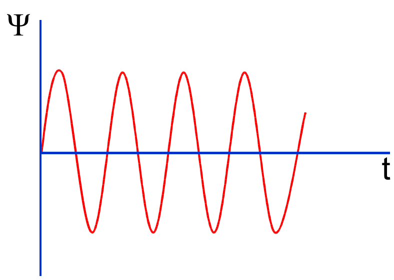
$$\Psi(x,t) = \cos(kx-\omega t) + isen(kx-\omega t)$$

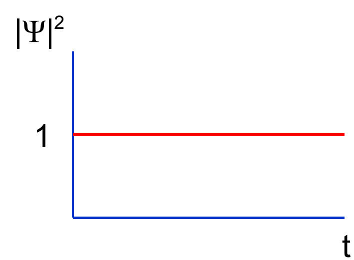
$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\ ,\ \ \omega = \frac{E}{\hbar}$$

donde $\psi(x) = e^{ikx}$;

Parte real de Ψ





Potencial escalón

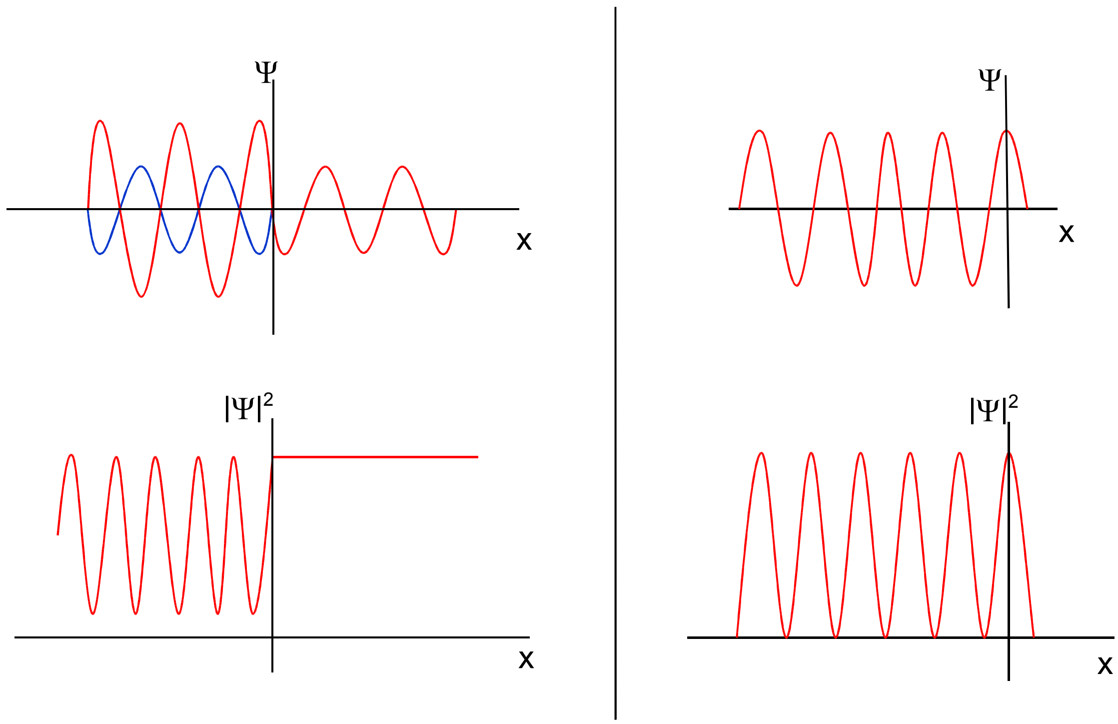
$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\,Et/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad x<0$$

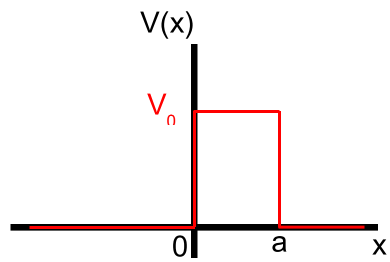
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E-V_0)\psi \qquad x>0$$

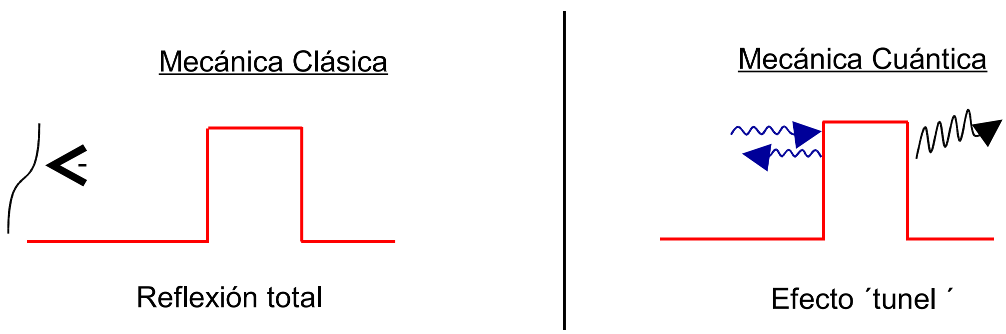
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad x<0$$

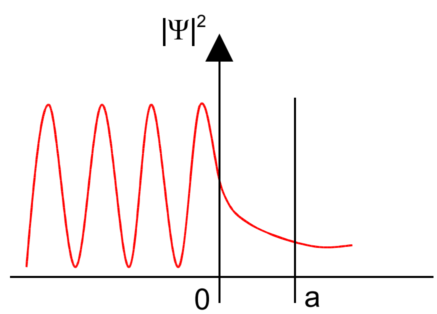
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \qquad x>0$$



Barrera de potencial

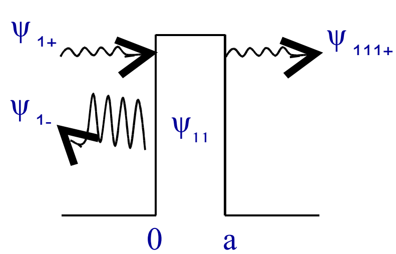






Función de densidad de probabilidad con ´penetración de barrera´.

Probabilidad de penetración de una barrera de potencial



$$I: \quad \psi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
$$II: \quad \psi_1 = Fe^{ik_1x} + Ce^{-ik_1x}$$

onda reflejada

$$\psi_{1-} = Be^{-ik_1r}$$
$$\psi_1 = \psi_{1+} + \psi_{1-}$$

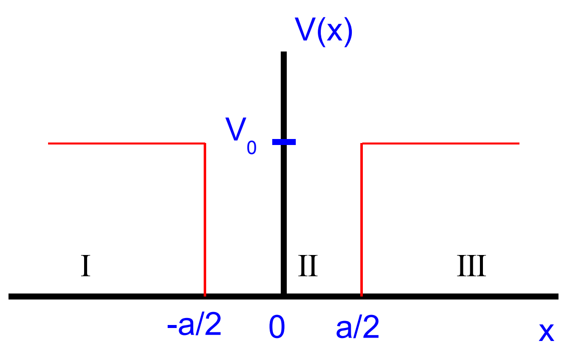
onda transmitida

$$\psi_{111+} = Fe^{ik_1x} \qquad\qquad C = 0$$

La probabilidad de transmisión T para que una partícula pase la berrera es

$$T = \frac{|\psi_{111}|^2}{|\psi_1|^2} = \frac{F^*F}{A^*A}$$

Potencial de pozo cuadrado



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2, \quad x > a/2 \\ 0 & -a/2 < x < a/2 \end{cases}$$

Si la energía total $E<V_0$, los resultados cuánticos implican cuantización de la energía.

El problema consiste en encontrar las funciones para las 3 regiones I, II, III.

Para la región interior II la solución general a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad ; \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

para $-a/2 < x < +a/2$

que son ondas viajeras en ambas direcciones del eje x.

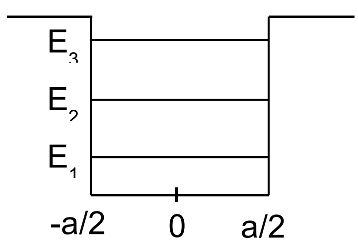
Para las regiones externas

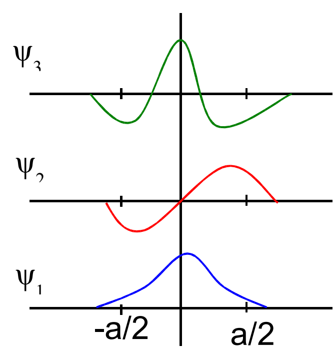
$$x < -a/2 \qquad \psi(x) = Ce^{K_{11}X} + De^{-K_{11}X}$$

$$x > a/2 \qquad \psi(x) = Fe^{K_{11}X} + Ge^{-K_{11}X}$$

Exigiendolas condiciones de frontera para $\Psi(x)$, $\frac{d\psi}{dx}$ podemos determinar las constantes.

Una vez resueltas las ecuaciones llegamos a las condiciones de cuantización de la energía y se encuentran <u>tres</u> condiciones





Ejemplo (sección 6.8)
Resolver el caso para el pozo cuadrado infinito.

Oscilador armónico

Ley de Hooke F= - kx

<u>Oscilador clásico</u>

$$-kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0$$

$$x = A\cos(2\pi\nu t + \phi)$$

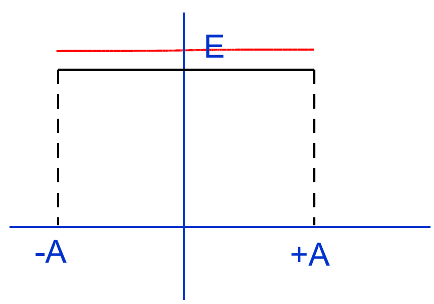
$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

<u>Oscilar cuántico</u>

1. E está cuantizada
2. $E_1 = E_0 \neq 0$
3. probabilidad de penetración de barrera.
4. $V(x) = \int F dx = \frac{1}{2}kx^2$

Ecuación de Schrödinger

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



$$y = \left(\frac{\sqrt{km}}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad x = \sqrt{\frac{2\pi m\nu}{\hbar}}x$$

$$\alpha = \frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{h\nu}$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\alpha + y^2)y = 0$$

Esta ecuación solo tiene soluciones aceptables.

$\psi \rightarrow 0 \qquad y \rightarrow \infty$

$\int \psi^2 dx = 1$

Cuando $\alpha = 2n + 1$, $n=0,1,2,3,\ldots$

Luego $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu$, $n,0,1,2,\ldots.$

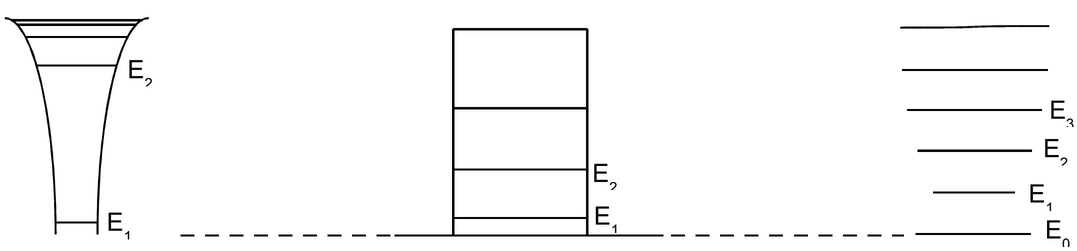
($E_0 = \frac{1}{2} h\nu$, energía del nodo fundamental)

La formula general para las autofunciones

$$\psi(x) = \left(\frac{2m\nu}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(2^n\, n!\right)^{-\frac{1}{2}} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Donde H_n es la serie de polinomios de Hermite.

- <u>Pozos de potenciales cuánticos</u>



$E_n \propto \frac{1}{n^2}$ $\qquad E_n \propto n^2$ $\qquad E_n \propto \left(n + \frac{1}{2}\right)$

Átomo H

Caja o pozo infinito