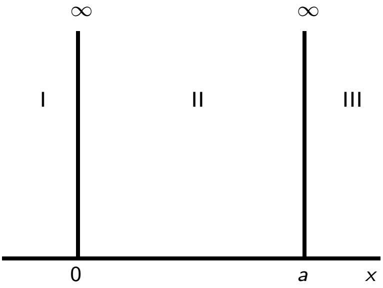
La partícula en una caja

Caja monodimensional I

$$V(x) = V_0 \;\; si \;\; 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = \infty \;\; si \;\; x < 0 \; o \; x > a$$



El potencial confina a la partícula a moverse en la región entre 0 y a en el eje x. Dado que el potencial no depende del tiempo nos interesan las soluciones para estados estacionarios. La ecuación de Schrödinger será: $\widehat{H}\psi = E\psi$

Dividamos el problema en dos regiones, dentro de la caja (II) y fuera de la caja (I-III):

$$\text{(I-III)} \quad \widehat{H}\psi_\infty = E_\infty \psi_\infty$$

$$\text{(II)} \quad \widehat{H}\psi_0 = E_0 \psi_0$$

E imponemos la condición de: $\psi_\infty(0) = \psi_0(0)$ y $\psi_\infty(a) = \psi_0(a)$, para que ψ sea continua. Resolviendo (I-III):

$$\widehat{H}_\infty = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_\infty$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi_\infty}{\partial x^2} + (\infty - E_\infty)\psi_\infty = 0$$

Llegando a que la única solución posible es $\psi_\infty = 0$, por lo tanto: $\psi_0(0) = \psi_0(a) = 0$. Existe una clara interpretación física para esta solución, si $V_\infty = \infty$ la partícula no podrá atravesar la barrera.

Caja monodimensional II

Resolviendo (II):

$$\widehat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_0}{\partial x^2} + V_0\psi_0 = E_0\psi_0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_0}{\partial x^2} + (E_0 - V_0)\psi_0 = 0$$

hacemos el cambio : $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ y tenemos la solución:

$$\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}\cdot x} + Be^{\frac{-i}{\hbar}\sqrt{2mE}\cdot x}$$

o, ya que $e^{\pm ikx} = \cos(kx) \pm i\,\mathrm{sen}(kx)$ se tiene:

$$\psi = C\cos\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x + D\,\mathrm{sen}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x$$

Ahora bien, para $x = 0, \psi = 0$, lo que implica que $C = 0$. Para $x = a, \psi = 0$, condición que imponemos para asegurar la continuidad de la función de onda,

implicando $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n_x\pi$, tal que $n_x \in Z$ y $n_x \neq 0$. De forma que n_x es un número entero distinto de cero, ya que el valor cero hace que ψ tome el valor cero y el sistema no exista. De aquí se deduce que la energía debe tener el valor:

$$2mE = \frac{n_x^2\pi^2\hbar^2}{a^2} \Leftrightarrow E = \frac{n_x^2 h^2}{8ma^2},\quad n_x = 1, 2, 3, \ldots$$

De esta forma, **no** es posible cualquier valor de energía para la partícula confinada, su energía está **¡cuantizada!**. Y D, ¿Cuánto vale?

$$\psi = D\,\mathrm{sen}\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)$$

recurramos a la normalización de la función. Si la partícula existe entre **0** y **a**, el rango de existencia de esta función es entre **0** y **a**:

$$\int_0^a \psi^*\psi dx = 1$$

Caja monodimensional III

$$D^2 \int_0^a \mathrm{sen}^2\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right) dx =$$

$$D^2 \frac{1}{2} \int_0^a \left(1 - \cos\left(\frac{2n_x\pi}{a}x\right)\right) dx =$$

$$D^2 \frac{1}{2} \left| x - \frac{a}{2n_x\pi}\,\mathrm{sen}\left(\frac{2n_x\pi}{a}x\right)\right|_0^a =$$

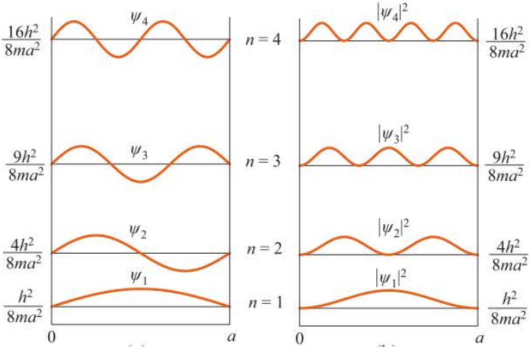
$$D^2 \frac{1}{2}(a-0) = D^2\frac{a}{2} = 1$$

y así la constante D será $D = \sqrt{\frac{2}{a}}$, luego:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\mathrm{sen}\left(n_x\frac{\pi}{a}x\right)\;;\quad E_x = n_x^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

si $n_x = 0$, entonces $E = 0$, pero $\psi = 0$, por lo tanto la partícula no existe. Es decir el estado de reposo no es un estado permitido para la partícula confinada.

Niveles de energía, funciones de onda y densidades de probabilidad de la partícula en una caja



espaciado de energía: $E_{n+1} - E_n = (2n+1)E_1$

número de nodos: $n-1$

el valor de los niveles aumenta al disminuir el tamaño de la caja $E \propto \frac{1}{a^2}$

Caja monodimensional IV

- Los estados obtenidos son estacionarios e independientes del tiempo, por tanto, no se trata de un estudio dinámico. Sabemos que con energía E_2 nunca encontraremos la partícula en $a/2$.
- Principio de correspondencia: el comportamiento discontinuo no se puede apreciar en sistemas macroscópicos (h^2 es del orden de $10^{-67} J^2 s^2$), cuanto mayor es a y m más próximos están los niveles y, en partículas grandes y recintos proporcionales, la Mecánica Cuántica lleva al continuo clásico.
- Dado que tenemos un conjunto $\{\psi_i\}_{i=1}^{\infty}$ de soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, se puede probar que forman un conjunto ortonormal de funciones
- De acuerdo con la expresión general del postulado IV el valor medio o valor esperado del momento lineal valdrá:

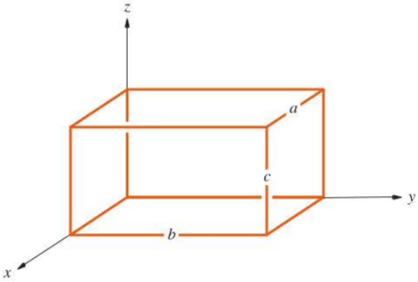
$$< \widehat{p}_x >= \int \psi^*_{n_x} \widehat{p}_x \psi_{n_x} d\tau$$

  esta integral es nula para todos los valores de n_x, es decir, que el valor medio del momento es nulo
- También podemos comprobar que se cumple el principio de incertidumbre de Heisenberg: La partícula puede estar entre 0 y a, luego $\Delta x = a$, mientras que el momento lineal puede valer $\pm\hbar k$, según la partícula se desplace hacia la izquierda o hacia la derecha, luego $\Delta p_x = 2\hbar k$, entonces:

$$\Delta x \Delta p_x = a \cdot 2\hbar k = 2a\hbar \frac{n_x \pi}{a} = (2\pi n_x)\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

Caja tridimensional I

$$V(x,y,z) = V_0 \;\; si \;\; 0 \leq x \leq a$$
$$V(x,y,z) = V_0 \;\; si \;\; 0 \leq y \leq b$$
$$V(x,y,z) = V_0 \;\; si \;\; 0 \leq z \leq c$$
$$V(x,y,z) = \infty \text{ resto del espacio}$$



Entonces :

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V$$

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

Para obtener las soluciones supongamos que la función de onda puede factorizarse en la forma: $\psi(x,y,z) = \psi_x(x)\cdot\psi_y(y)\cdot\psi_z(z)$, por lo que podemos escribir:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_x + \widehat{H}_y + \widehat{H}_z$$

$$\psi_y\psi_z\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_x + \psi_x\psi_z\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi_y + \psi_x\psi_y\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi_z = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$\frac{1}{\psi_x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_x + \frac{1}{\psi_y}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi_y + \frac{1}{\psi_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi_z = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \text{Cte}$$

$$\frac{1}{\psi_x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_x = -\frac{2mE_x}{\hbar^2}$$

tenemos así tres ecuaciones similares a las resueltas previamente de una partícula en una caja, cuya solución era

Caja tridimensional II

$$\psi_x = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n_x \pi}{a} x, \quad \text{y} \quad E_x = n_x^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

La solución final del problema será :

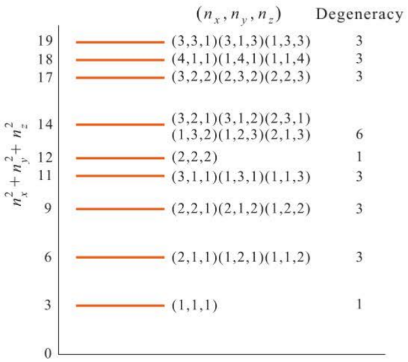
$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \operatorname{sen} \frac{n_x \pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{n_y \pi y}{b} \operatorname{sen} \frac{n_z \pi z}{c}$$

$$E = \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \frac{h^2}{8m}, \quad n_x, n_y, n_z \geq 1$$

pues si alguno vale cero, la función ψ será nula, y el sistema no existe. Si el sistema tiene simetría, por ejemplo, $a = b = c$, entonces:

$$E = \frac{h^2}{8ma^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right)$$

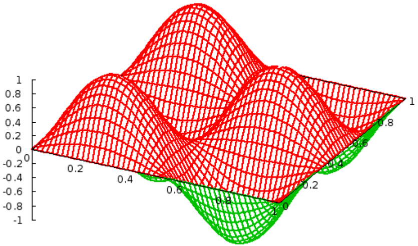
$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \operatorname{sen} \frac{n_x \pi}{a} x \cdot \operatorname{sen} \frac{n_y \pi}{a} y \cdot \operatorname{sen} \frac{n_z \pi}{a} z$$



Los estados ψ_{211}, ψ_{121} y ψ_{112} son estados diferentes, pero con la misma energía, se dice que son estados degenerados. Debido a la simetría del problema nos aparece la **Degeneración**.

Caja tridimensional III

ψ_{231}, z=cte.



ψ_{321}, z=cte.