# III - Ecuación de Schrödinger.

1. Demostrar que si una función $\Psi(x,t)$ obedece la ec. de Schrödinger en 1D se conserva su "módulo". Es decir que
$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 0$$

2. El estado de una partícula está representado en $t = 0$ por la siguiente función de onda:
$$\phi(x) = A\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right) \quad \text{si} \quad -a/2 \leq x \leq a/2; \quad B\exp(-k|x|) \quad \text{si} \quad |x| \geq a/2$$
siendo $A$, $a$, $B$ y $k$ constantes reales y positivas.
Dicha función de onda corresponde al estado fundamntal de una partícula de masa $m$ sometida a un potencial que se anula en $\pm\infty$.
Cuestiones:
a)Encontrar los valores de las constantes y la energía de la partícula. Se recuerda que la función de onda debe debe estar normalizada y ser continua, así como su derivada (ver problema siguiente). b) Dibujar esquemáticamente $\phi(x)$ como función de $x$. c) Encontrar el potencial $V(x)$ y dibujarlo. d)¿Dónde es más probable encontrar la partícula. e) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de $a/2$?. e) ¿Cuáles son los valores esperados de $x$ y de $p$?. f) Cuánto valen $\Delta x$ y $\Delta p$? ¿Se cumple la relación de incertidumbre?

3. Demostar que si la energía potencial tiene una discontinuidad con un salto finito entonces son continuas la función de onda y su derivada, para un estado de energía definida, pero no lo es la segunda derivada. Sugerencia: suponer que el potencial varía continuamente desde el valor $V_1$ en $x = -\epsilon$ a $V_2$ en $x = +\epsilon$. Calcular la integral de $d^2\phi/dx^2$ entre $-\epsilon$ y $+\epsilon$ y ver a qué tiende el resultado cuando $\epsilon \to 0$, manteniendo fijos los valores $V_1$ y $V_2$.

4. Demostrar que en 1D el "espectro energético no es degenerado", es decir que a cada valor posible de la energía corresponde sólo una función de onda. Sugerencia: Usar la ec. de Schrödinger para probar que si $\phi_1$ y $\phi_2$ son dos funciones de onda correspondientes a la msima energía $E$ entonces $\phi_1''/\phi_1 = \phi_2''/\phi_2$. Mostrar que de ahí se deduce $\phi_2(x) = const \times \phi_1(x)$.

5. Una partícula se encuentra en un estado dado por la función de onda
$$\Psi(x,t) = Ae^{a(-mx^2/\hbar + it)}$$
a) Encontrar un valor adecuado de $A$. b)¿Para qué potencial $V(x)$ se satisface la ec de Schrödinger? c) Calcular los valores esperados de $x$, $x^2$, $p$ y $p^2$. d) Calcular $\Delta x$ y $\Delta p$. ¿Es consistente el resultado conla relación de incertidumbre?

6. Mostrar que no existen estados cuánticos de una partícula en 1D con energía $E < \min(V(x))$. Sugerencia: si $\phi(x)$ es la función de onda (indept. de $t$) de uno de tales estados, mostrar que $\phi(x)$ y $\phi"(x)$ tienen el mismo signo. Mostrar que entonces $\phi(x)$ no puede ser de cuadrado integrable.

7. Pozo cuadrado de potencial en 3D. Una partícula cuántica de masa $m$ se mueve libremente por el interior de una caja paralelepipédica ("caja de zapatos") de lados $a, b$ y $c$. Es decir $V(x,y,z) = 0$ si $0 < x < a$ y $0 < y < b$ y $0 < z < c$, y $V(x,y,z) = \infty$ en cualquier otro sitio. Encontrar las energías y funciones de onda de los estados estacionarios.

8. Una partícula cuántica de masa $m$ está sometida a fuerzas que derivan de la energía potencial:

$$V(x) = 0 \quad \text{si} \quad x > a; \quad -V_0 \quad \text{si} \quad 0 < x < a; \quad \infty \quad \text{si} \quad x < 0 \tag{1}$$

Este potencial representa de forma simplificada la interacción de dos átomos en una molécula y muchos otros casos prácticos. Encontrar las f. d. o. y energías de los estados estacionarios ligados. Encontrar las f. de o. de los estados libres. Determinar el número de niveles de energía ligados en función de $a$ y $V_0$.

9. Una partícula cuántica en 2D (el problema es casi igualmente sencillo en 3D) se mueve sometida al potencial (escalón de potencial)

$$V(x, y) = 0 \quad \text{si} \quad x < 0; \quad = V_0 \quad \text{si} \quad x > 0 \tag{2}$$

Obtener las energías y f.'s de o. de los estados estacionarios. Sugerencia: la ec de Schrödinger se resuelve muy fácilmente por separaciónn de variables. La solución más general posible se puede escribir como combinación de ondas planas. Considerar el caso en que la función de onda en el $1^{er}$ medio ($V = 0$) es la superposición de dos ondas planas "monocromáticas", una incidente y otra reflejada, y en el 2º medio ($V =_V 0$) una onda transmitida. Determinar los factores de reflexión y de transmisión en función de la energía y el ángulo de incidencia. Compara y la Óptica Geométrica. Comparar con las fórmulas de Fresnel de la Óptica Física, en los casos en que $V_0 > 0$ (escalón ascendente) o $V_0 < 0$ (escalón descendente).

10. Rotor libre 1D. Consideremos un sólido rígido que puede rotar alrededor de un eje fijo, que elegimos como eje $z$. El momento angular clásico cumple $L_z = I\omega$ (aquí $I$ = momento de inercia y $\omega$ = la velocidad angular de rotación) y la energía clásica $(1/2)I\omega^2 + V(\theta)$, donde $V$ es la energía potencial dependiente del ángulo de rotación $\theta$. Los mismos argumentos que condujeron a Schrödinger a su famosa ecuación dan una ecuación de la rotación de un sólido cuántico:

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + V(\theta) = E\phi(\theta) \tag{3}$$

donde $\phi$ es la función de onda, que es totalmente análoga a la de traslación de una partícula 1D, cambiando $m \to I$, $x \to \theta$ y $p \to L_z$, con la única, pero importante diferencia de que $\phi(0) = \phi(2\pi)$.

a) Determinar las energías y funciones de onda de los estados estacionarios de un rotor libre ($V(\theta) = cte \equiv 0$).

b) Mostrar que $L_z$ está siempre cuantificado y obtener los valores que puede tener (valores propios del operador cuántico $L_z$).

11. Obtener por diferencias finitas calculando a mano la energía y la f. de o. del estado fundamental de una partícula en un pozo cuadrado de potencial de paredes infinitas ($V(x) = 0$ si $0 < x < a$, $\infty$ en otro caso), de la siguiente forma: a) Ecuación adimensional. Tomando un incremento finito "pequeñoz fijo $\Delta$ y aproximando

$(d^2\phi/dx^2)_i \simeq (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)/\Delta^2$, mostrar que la ec de Schrodinger se reduce al sistema lineal homogéneo $-\phi_{i-1} + 2\phi_i - \phi_{i+1} = \lambda\phi_i$, donde el número puro $\lambda = 2mE\Delta^2/\hbar^2$, es la energía multiplicada por constantes.

b) Escribir el sistema mediante la siguiente aproximación: Consideramos los valores de la función sólo en los puntos $x_1 = \Delta = a/4, x_2 = 2\Delta = a/2$ y $x_3 = 3\Delta = 3a/4$, y suponemos que es cero en $x = 0$ y en $x = a$ (que en este ejemplo debe ser así rigurosamente).

c) Obtener los autovalores y autovectores del sistema lineal por el método tradicional (raíces del polinomio característico).

d) Obtener la energía y los 3 valores de la función de onda del estado fundamental. Compararla con los valores exactos. La aproximación es bastante buena considerando su simplicidad.

¿Por qué la aproximación es buena para el estado fundamental pero no para los demás niveles?¿Cómo se podría aplicar este método para obtener más niveles con precisión?

12. Se tiene una partícula sometida a un potencial en 1 D en $V(x) = Cx$ si $x > 0$ y $V(x) = \infty$ si $x < 0$ . Determinar el movimiento clásico de una partícula con energía $E$, especialmente la amplitud y frecuencia de oscilación (corresponde a una pelota que bota en el suelo sometida a la gravedad). Determinar la energía $E_0$ del estado fundamental suponiendo la igualdad en la relación de incertidumbre $\Delta x \Delta p \leq \hbar/2$, que $\Delta x$ es igual a la amplitud clásica y $\Delta p$ el momento máximo del movimiento clásico con esa energía. Modificando ligeramente el programa Schrödinger.exe determinar los niveles de energía y funciones de onda de una partícula cuántica de $m = 1$ uma y $C = 1$ eV/Å. Determinar las frecuencias de Bohr de los tres primeros niveles y comparar con la frecuencia clásica.