PEC-1 Fundamentos de Física III

Noviembre 2019

1. (4 puntos) Teniendo en cuenta la teoría cuántica del oscilador armónico:

   a) Demuestre por sustitución directa en la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico unidimensional que la función de onda $\psi_1 = 2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}$ donde $\alpha^2 = m\omega_0/\hbar$ es una solución con energía que corresponde a $n = 1$ en la ecuación del oscilador armónico.

   b) Determine la constante de normalización A_1.

   c) ¿Cuál es el valor de la densidad de probabilidad a $x = 0$?. Demuestre que es un mínimo.

   d) ¿Cual es el valor de la densidad de probabilidad a $x = \pm 1/\alpha$?. Demuestre que es un máximo a ese valor.

Solución:

a) La Ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico viene dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \psi_1(x) = E\psi_1(x)$$

Calculamos por tanto:

$$\frac{d\psi_1(x)}{dx} = \frac{d}{dx}\left(2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}\right) = 2A_1 e^{-\alpha^2 x^2/2}\left(1 - x^2\alpha^2\right)$$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = -2A_1\alpha^2 x e^{-\alpha^2 x^2/2}(1 - x^2\alpha^2) - 2A_1 2x\alpha^2 e^{-\alpha^2 x^2/2} = 2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}(x^2\alpha^4 - 3\alpha^2)$$

Sustituyendo tenemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}(x^2\alpha^4 - 3\alpha^2)\right) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2} = E_0 2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(x^2\alpha^4 - 3\alpha^2) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2\right] = E_0 2A_1 x e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

sustituyendo $\alpha^2 = m\omega_0/\hbar$ y reagrupando,

$$-\frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{3}{2}\omega_0\hbar + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 = E$$

$$E = \frac{3}{2}\omega_0\hbar$$

Que se trata de la energía del oscilador armónico en el nivel n=1, ya que $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, para $n = 0, 1, 2, ...$

b) Para calcular el valor de la constante, normalizamos la función:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1|^2 dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} 4A_1^2 x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = 8A_1^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = 1$$

Teniendo en cuenta que:

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

Tenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1|^2 dx = 8A_1^2 \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{(\alpha^2)^3}} = 2A_1^2\sqrt{\pi}\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{3/2} = 1$$

Y por lo tanto

$$A_1^2 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^{3/2}$$

$$A_1 = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^{3/4}$$

c) La densidad de probabilidad es la función $|\psi_1|^2$, que es:

$$|\psi_1|^2 = 4A_1^2 x^2 e^{-\alpha^2 x^2}$$

Vemos que a $x = 0$, $|\psi_1|^2 = 0$. Ahora hacemos $\frac{d|\psi_1|^2}{dx}$:

$$\frac{d|\psi_1|^2}{dx} = 8A_1^2 x e^{-\alpha^2 x^2}(1 - x^2\alpha^2)$$

Vemos nuevamente que a $x = 0$ la derivada primera se anula. Ahora hacemos la derivada segunda para ver si son máximos o mínimos.

$$\frac{d^2|\psi_1|^2}{dx^2} = 8A_1^2 e^{-\alpha^2 x^2}(1 - 2x^2\alpha^2 - 3x^2\alpha^2 + 2x^4\alpha^4)$$

Vemos que para $x = 0$, $\frac{d^2|\psi_1|^2}{dx^2} = 8A_1^2 > 0$ por lo tanto es un mínimo

d) El valor de la función de densidad de probabilidad a $x = \pm\frac{1}{\alpha}$ es:

$$|\psi_1|^2_{x=\pm 1/\alpha} = 4A_1^2(\pm 1/\alpha)^2 e^{-\alpha^2(\pm 1/\alpha)^2} = \frac{4A_1^2}{\alpha^2}e^{-1} = \frac{4A_1^2}{\alpha^2 e} = \frac{2}{e}\left(\frac{m\omega_o}{\pi\hbar}\right)^{1/2}$$

Vemos que $\frac{d|\psi_1|^2}{dx}$ a ese valor se anula y $\frac{d^2|\psi_1|^2}{dx^2} = -\frac{16A_1^2}{e} < 0$, por lo tanto es un máximo.

2. (4 puntos) Calcular la probabilidad de que el electrón en el estado fundamental de un átomo de hidrógeno se encuentre en la región $0 < r < a_0$, $a_0 < r < 3a_0$, $3a_0 < r < 10a_0$.

Comentar los resultados obtenidos (para ello represente la gráfica de la distribución de probabilidad radial)

Solución:

La probabilidad de encontrar a un electrón en un intervalo de radio dado, nos viene definida por la densidad de probabilidad radial, que es:

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2$$

Como el electrón se encuentra en el estado fundamental: $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$, por lo que:

$$P(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0}$$

La probabilidad entonces de encontrar al electrón en un intervalo dado vendrá determinada por la integral de esa función en ese intervalo (área bajo la curva). Así pues, para $0 < r < a_0$:

$$P(0 < r < a_0) = \int_0^{a_0} \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

Se trata de una integral del tipo $\int x^2 e^{-ax} dx$, que puede ser resuelta por ejemplo, por el método de integración por partes, llegando a la solución:

$$\int x^2 e^{-ax} dx = -\frac{e^{-ax}}{a} \left(x^2 + \frac{2x}{a} + \frac{2}{a^2}\right),$$

Sustituyendo en la expresión de $P(r)$, y teniendo en cuenta que $a = 2/a_0$, podemos llegar a la fórmula:

$$[P(r)]_{r_1}^{r_2} = \left[\frac{2}{a_0^2} e^{-2r/a_0} \left(r^2 + r a_0 + \frac{a_0^2}{2}\right)\right]_{r_2}^{r_1}$$

Para el caso de $r_1 = 0$ y $r_2 = a_0$, sustituyendo tendríamos:

$$[P(r)]_0^{a_0} = 1 - \frac{5}{e^2} = 0{,}3233$$

Para el caso de $r_1 = a_0$ y $r_2 = 3a_0$, sustituyendo tendríamos:

$$[P(r)]_{a_0}^{3a_0} = \frac{5}{e^2} - \frac{25}{e^6} = 0{,}6147$$

Para el caso de $r_1 = 3a_0$ y $r_2 = 10a_0$, sustituyendo tendríamos:

$$[P(r)]_{3a_0}^{10a_0} = \frac{25}{e^6} - \frac{223}{e^{20}} = 0{,}061968$$

Si representamos $P(r)$:

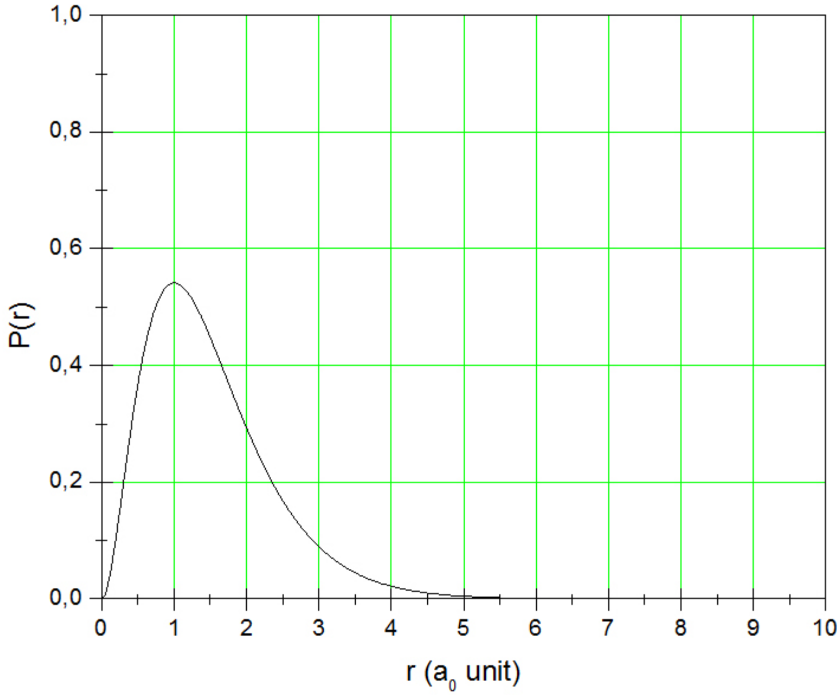

Figura 1: Distribución de Probabilidad Radial para el orbital ψ_{100} del hidrógeno

Como se puede ver, concuerda con los valores obtenidos, encontrándose la mayoría de la probabilidad entre 1 y $3a_0$. Si se suma toda la probabilidad desde 0 a $10a_0$, nos da un valor de 0,99997, es decir, casi probabilidad 1 de encontrar al electrón, como podía ser esperado.

---

3. (2 puntos) La longitud de onda de una línea espectral del átomo de hidrógeno es 1093,8 nm. Identificar la transición que da lugar a esta línea espectral.

Solución:

Haciendo uso de la fórmula de Rydberg-Ritz, junto con la interpretación dada en el modelo de Bohr, podemos predecir el valor de la longitud de onda de un tránsito espectral para el átomo de Hidrógeno, sabiendo el nivel n de partida y de llegada del electrón:

$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$, siendo $R_H = 1{,}097776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

No conocemos n_f ni n_i, por lo que construimos la siguiente tabla (calculando los valores de λ máxima y mínima) simplemente para identificar a qué serie pertenece esta transición.

n_f	λ_{min} (nm)	λ_{max} (nm)
1	121,46	91,09
2	655,88	364,37
3	1875,94	819,85
4	4048,65	1457,51

Queda claro que la línea espectral pertenece a un tránsito a $n_f = 3$. Sustituyendo en la expresión anterior o simplemente probando algunos posibles tránsitos, fácilmente identificamos la transición $6 \rightarrow 3$.