48

CIÈNCIES APLICADES

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH

UPCGRAU

Física quàntica per a enginyers
Problemes

Núria Ferrer Anglada
David Arcos Gutiérrez

48

UNIVERSITAT POLITÈCNICA
DE CATALUNYA
BARCELONATECH

iniciativa
digital politècnica
Publicacions Acadèmiques UPC

UPCGRAU

Física quàntica per a enginyers

Problemes

Núria Ferrer Anglada
David Arcos Gutiérrez

Primera edició: desembre de 2017

Maquetació: Mercè Aicart

© Iniciativa Digital Politècnica, 2017
Oficina de Publicacions Acadèmiques Digitals de la UPC
Jordi Girona 31,
Edifici Torre Girona, Planta 1, 08034 Barcelona
Tel.: 934 015 885
www.upc.edu/idp
E-mail: info.idp@upc.edu

Dipòsit legal: B 30239-2017
ISBN: 978-84-9880-669-4

Presentació

La teoria quàntica —que va ser desenvolupada a principis del segle XX per Max Planck, Niels Bohr, Erwin Schrödinger i Albert Einstein, entre d'altres— ha modificat profundament la nostra comprensió de com es comporten la matèria i la llum a escales extremament petites. De fet, les meravelloses i sorprenents propietats dels sistemes quàntics sovint s'escapen de la nostra intuïció. Tot i això, el desenvolupament tecnològic dels darrers anys del segle passat i dels primers de l'actual ens ha permès manipular els sistemes quàntics fins a un grau de precisió inimaginable. Actualment, estem vivint el que s'anomena *la segona revolució quàntica*, en què alguns aspectes de la mecànica quàntica, com el col·lapse de la funció d'ona i l'entrellaçament, que inicialment s'utilitzaven per explicar conceptes de caràcter fonamental, tenen cada vegada més aplicacions en camps com les tecnologies de la informació i la metrologia d'alta precisió. La criptografia, la computació i la simulació quàntiques formen part d'aquesta segona revolució i sovint apareixen notícies als mitjans de comunicació que ens expliquen com el nostre futur es veurà influït pel desenvolupament d'aquestes tecnologies. Tanmateix, la recerca de nous productes basats en les tecnologies quàntiques requereix físics, matemàtics i enginyers formats en aquesta disciplina del coneixement.

El llibre FÍSICA QUÀNTICA PER A ENGINYERS. PROBLEMES pretén ser una primera introducció pràctica a la física quàntica, molt recomanable per a alumnes, fonamentalment de l'àmbit de les enginyeries, que tinguin ja coneixements bàsics de física clàssica i una certa habilitat en matemàtiques. Mitjançant la resolució d'exercicis de dificultat gradualment creixent, els alumnes aprendran les principals eines de la mecànica quàntica i entendran les propietats estàtiques i dinàmiques dels sistemes quàntics. El llibre repassa aspectes fonamentals de la física quàntica com ara, per exemple, la quantització dels sistemes físics, la dualitat ona-corpuscle, el principi d'incertesa de Heisenberg, l'equació de Schrödinger, l'oscil·lador harmònic quàntic, les regles de commutació dels operadors quàntics, i el moment angular i l'spin. Es tracta, doncs, d'un llibre extremament útil per a aquells estudiants i enginyers interessats en la física quàntica i que, mitjançant la resolució d'una col·lecció ben triada d'exercicis, vulguin familiaritzar-se i descobrir per ells mateixos les misterioses propietats del fascinant món quàntic.

Jordi Mompart
Professor titular d'universitat
Departament de Física. Universitat Autònoma de Barcelona

Pròleg

Per què els enginyers necessiten la física quàntica? Des que Richard Feynman va pronunciar la seva famosa frase “There’s plenty of room at the bottom” (‘hi ha molt d’espai allà baix’) han passat més de cinquanta anys. Mig segle! Ell va intuir que, si fóssim capaços de controlar els àtoms i l’espai que hi ha entre ells, podríem escriure l’*Enciclopèdia britànica* en una agulla de cap! Es pot dir que ja ens trobem en aquest punt. Per això parlem de nanomaterials, de nanotecnologies i, en general, de nanociència. I quan treballem a nivells “nano”, els efectes quàntics són importants: l’efecte túnel, per exemple, ja ha estat comprovat i s’ha utilitzat en diferents dispositius.

Aquest llibre conté un recull de problemes de l’assignatura de física quàntica de les enginyeries de telecomunicació i electrònica de l’Escola Tècnica Superior d’Enginyeria de Telecomunicació de Barcelona (ETSETB). Es tracta d’una assignatura de sis crèdits per a estudiants que només han cursat dues assignatures quadrimestrals de física. Per aquest motiu, l’enfocament del llibre és essencialment pràctic i no s’endinsa en temes que requereixin uns coneixements amplis de física clàssica, com ara la radiació del cos negre.

L’obra inclou els principis fonamentals de la física quàntica, com la dualitat ona-partícula, la quantització i la incertesa. A més, prenent en consideració el públic objectiu, hem donat importància a les aplicacions que són més comunes per als enginyers, com ara l’efecte túnel, les bandes d’energia dels electrons en els sòlids, els cristalls fotònics o la ressonància magnètica. La comprensió dels fenòmens en què es basen dispositius tan quotidians com els transistors, els fotodetectors, els sensors o les memòries dures requereix obligatòriament uns coneixements bàsics de física quàntica. De fet, per als enginyers de telecomunicació i electrònica, ja és imprescindible conèixer alguns fenòmens o conceptes quàntics i el seu llenguatge (com ara l’existència de l’spin, l’entrellaçament quàntic o la coherència d’estats), perquè estan relacionats amb branques emergents de l’enginyeria, com la spintrònica, la computació quàntica o la criptografia quàntica. L’objectiu del llibre és, doncs, proporcionar aquesta base i fer possible que els alumnes continuïn l’aprenentatge sobre aquests temes quan ho necessitin.

El contingut del llibre es divideix en vuit capítols, que comencen amb una breu introducció teòrica dels conceptes clau que calen per resoldre els problemes corresponents. Per això, en recomanem una lectura lineal que permeti aprofitar els conceptes i les estratègies adquirits a cada capítol per fer front als problemes dels temes següents. Tanmateix, som conscients que els llibres de teoria són necessaris per adquirir els coneixements essencials: copsar clarament les idees, els perquès i les seves conseqüències, i assimilar-los abans de posar-los en pràctica. En la secció de referències, hi ha una petita selecció d'obres que creiem que poden ajudar. El llibre està pensat, doncs, com una eina de treball principalment per als alumnes, però també per als professors.

Núria Ferrer Anglada
David Arcos Gutiérrez

Agraïments

Volem agrair especialment la col·laboració de Xavier Cartoixà, professor del Departament d'Enginyeria Electrònica de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), que ha proposat el bloc de problemes final.

Núria Ferrer Anglada vol agrair l'interès i la dedicació de molts dels alumnes del curs de física quàntica durant aquests anys.

David Arcos Gutiérrez vol donar les gràcies als companys, amics i familiars per tot el suport que ha rebut durant l'elaboració d'aquesta obra i, en especial, a la seva dona, Mireia.

Índex

Constants i aproximacions d'interès

Constants físiques

c	$2{,}998 \cdot 10^{8}$	m/s	velocitat de la llum en el buit
q_e	$1{,}602 \cdot 10^{-19}$	C	càrrega de l'electró
k_e	$8{,}988 \cdot 10^{9}$	N m^2/C^2	constant de Coulomb
h	$6{,}626 \cdot 10^{-34}$	J s	constant de Planck
	$4{,}136 \cdot 10^{-15}$	eV s	
$\hbar$	$1{,}055 \cdot 10^{-34}$	J s	constant de Planck reduïda
	$6{,}583 \cdot 10^{-16}$	eV s	
m_e	$9{,}109 \cdot 10^{-31}$	kg	massa de l'electró en repòs
m_p	$1{,}673 \cdot 10^{-27}$	kg	massa del protó en repòs
m_n	$1{,}675 \cdot 10^{-27}$	kg	massa del neutró en repòs
μ_B	$9{,}274 \cdot 10^{-24}$	J/T	magnetó de Bohr
	$5{,}788 \cdot 10^{-5}$	eV/T	
g_e	2,0023	-	factor de Landé de l'electró lliure
λ_0	0,0243	Å	longitud d'ona de Compton de l'electró

Factors de conversió

1 eV	electró-volt	=	$1{,}602 \cdot 10^{-19}$	J
1 Å	àngstrom	=	10^{-10}	m
1 F	fermi	=	10^{-15}	m
1 T	tesla	=	10^{4}	G

Aproximacions d'interès

E_0^e	0,5110	$\sim 0{,}5$	MeV	energia en repòs de l'electró
E_0^p	938,3	~ 1.000	MeV	energia en repòs del protó
E_0^n	939,6	~ 1.000	MeV	energia en repòs del neutró
hc	$1{,}241 \cdot 10^{-6}$	$\sim 1{,}24 \cdot 10^{-6}$	eV m	producte h per c

Símbols matemàtics

i	$\sqrt{-1}$	unitat complexa
$\mathbb{N}$	$\{0, 1, 2, 3, 4, ...\}$	conjunt dels nombres naturals
$\mathbb{Z}$	$\{..., -2, -1, 0, 1, 2, ...\}$	conjunt dels nombres enters
$\mathbb{Z}^+$	$\{1, 2, 3, 4, ...\}$	conjunt dels nombres enters positius
∇	$\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$	operador nabla en coordenades cartesianes
∇^2	$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$	operador laplacià en coordenades cartesianes

Relacions trigonomètriques

$$\sin^2(\theta) + \cos^2(\theta) = 1$$
$$2\cos^2(\theta) = 1 + \cos(2\theta)$$
$$2\sin^2(\theta) = 1 - \cos(2\theta)$$
$$2\sin(\theta)\cos(\theta) = \sin(2\theta)$$
$$\sin(\alpha + \beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) + \cos(\alpha)\sin(\beta)$$
$$\sin(\alpha - \beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\alpha)\sin(\beta)$$


2
1
3

→ 1

Quantització

1.1. Quàntums de radiació. La hipòtesi de Planck

Les ones electromagnètiques, incloent-hi la llum, tenen una naturalesa dual. Quan viatgen a través de l'espai, es comporten com ones i interfereixen produint patrons constructius i destructius. Però, quan les radiacions electromagnètiques interaccionen amb els àtoms o les molècules, els raigs actuen com un corrent de partícules (corpuscles), uns "paquets" d'energia i quantitat de moviment anomenats *fotons* o *quàntums de llum*. D'aquest fet, se'n va adonar Albert Einstein i el va descriure en el seu article sobre l'efecte fotoelèctric (1905) [1, 2].

L'energia de cada fotó, E_f, està quantitzada i depèn de la freqüència f de la radiació del feix. Utilitzant la velocitat de propagació de les ones electromagnètiques, c, podem expressar-la en funció de la longitud d'ona λ, ja que $c = \lambda f$.

$$E_f = hf = \frac{hc}{\lambda}$$

on $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ J · s és una constant fonamental de la naturalesa que s'anomena *constant de Planck*. Aquesta hipòtesi de la quantització de l'energia va ser proposada per Max Planck l'any 1900 per explicar la radiació del cos negre [1].

1.2. L'efecte fotoelèctric

Si, quan la llum incideix sobre la superfície d'un material, es compleixen unes determinades condicions, se'n desprenen electrons; aquest fenomen és l'*efecte fotoelèctric*. Einstein en va donar la interpretació i va proposar com mesurar la constant h [2]. Va considerar que el fenomen consisteix en un xoc entre dues partícules: el fotó (de la llum) i l'electró (del metall).

Suposem que un fotó d'energia hf xoca amb la superfície d'un metall com en un xoc elàstic. Així, les sumes d'energies abans i després del xoc han de ser iguals. Si el fotó transmet tota la seva energia a l'electró i el treball mínim necessari per alliberar l'electró de la superfície del metall és W (anomenat *funció treball* del metall), aleshores l'energia cinètica màxima de l'electró emès és determinada per l'*equació de l'efecte fotoelèctric d'Einstein* (1.1). És a dir, l'energia inicial del fotó, hf, l'ha utilitzada l'electró per sortir del metall, W, i li queda una certa energia cinètica que proporciona un corrent d'electrons que podem mesurar amb un amperímetre.

$$E_c = \frac{1}{2}mv_{max}^2 = hf - W_{min} \tag{1.1}$$

L'energia de l'electró emès es pot trobar determinant la diferència de potencial V que cal aplicar per aturar-lo (anul·lant el corrent elèctric). Aleshores:

$$qV = \frac{1}{2}mv_{max}^2$$

Perquè en una superfície qualsevol hi hagi efecte fotoelèctric, cal que l'energia del fotó sigui prou gran. En el llindar, l'energia del fotó, hf, és justament igual a la funció treball del material, W. Per als metalls ordinaris, aquest llindar es troba en l'espectre visible o ultraviolat. Així, els raigs X poden provocar l'emissió d'electrons amb facilitat mentre que l'infraroig llunyà no ho fa mai.

1.3. El fotó té massa en repòs zero

Tota la massa del fotó és el resultat del moviment a velocitat c, és a dir, la seva massa en repòs és 0 ($m_0 = 0$). Com que, segons la teoria de la relativitat d'Einstein, es compleix:

$$E = mc^2$$

i com que l'energia d'un fotó és hf, per als fotons tenim la relació següent:

$$mc^2 = hf$$

A més, la quantitat de moviment (o moment lineal), p, d'un fotó és:

$$p = mc = \frac{h}{\lambda}$$

Així, per als fotons es compleix $E = cp$, relació que ja es pot deduir en física clàssica [1].

1.4. L'efecte Compton

Un fotó pot xocar amb una partícula que tingui massa en repòs no nul·la com, per exemple, l'electró. Quan es produeix el xoc, l'energia i la quantitat de moviment dels corpuscles poden variar i el fotó pot desviar-se de la seva trajectòria original. Com en un xoc qualsevol, la suma vectorial de les quantitats de moviment abans i després del xoc s'ha de conservar i, pel fet de ser un xoc elàstic, la suma d'energies també. Expressant aquestes condicions mitjançant equacions, es dedueix λ', la longitud d'ona del fotó emergent.

És a dir, si un fotó de longitud d'ona inicial λ impacta amb una partícula estacionària de massa m i, a causa del xoc, es desvia un angle φ respecte de la direcció d'incidència, aleshores la seva longitud d'ona esdevé λ'.

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos(\varphi))$$

La fracció de canvi en la longitud d'ona és molt petita, excepte per a radiacions d'alta energia com els raigs X i els raigs γ.

Observació: Com que $0 < \cos(\varphi) < 1$ i $\lambda' > \lambda$, l'energia del fotó sortint és menor que l'energia del fotó incident.

1.5. Exercicis

Exercici 1.1. Demostra que l'energia que tenen els fotons d'un feix de llum infraroja (IR) de 1.240 nm és d'1 eV.

Solució: Ho podem demostrar a partir de la relació de Planck entre energia i freqüència:

$$E = hf = h\frac{c}{\lambda} = 4{,}136 \cdot 10^{-15}\frac{3 \cdot 10^8}{1{,}24 \cdot 10^{-6}} = 1{,}00 \text{ eV}$$

Exercici 1.2. Calcula l'energia d'un fotó de llum blava de 450 nm.

Solució: A partir de la relació de Planck entre energia i freqüència:

$$E = hf = h\frac{c}{\lambda} = 4{,}136 \cdot 10^{-15}\frac{3 \cdot 10^8}{450 \cdot 10^{-9}} = 2{,}76 \text{ eV}$$

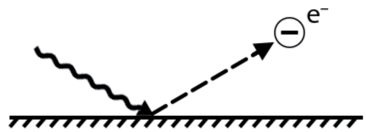
Exercici 1.3. L'acció continuada de la radiació solar sobre la pell humana produeix un efecte nociu: les cremades. Per trencar un enllaç químic de les molècules de la pell, és a dir, per cremar-les, cal que el fotó incident tingui una energia de 3,5 eV com a mínim. A quina longitud d'ona correspon?

Solució: A partir de la relació de Planck entre energia i freqüència:

$$E = hf = h\frac{c}{\lambda} \implies \lambda = h\frac{c}{E} = 4{,}136 \cdot 10^{-15}\frac{3 \cdot 10^8}{3{,}5} = 355 \text{ nm}$$

Aquest és un resultat coherent perquè la llum ultraviolada és la que causa les cremades de la pell.

Exercici 1.4. La funció treball del sodi metàl·lic és $W_{Na} = 2{,}3$ eV. A partir de quina longitud d'ona es pot aconseguir emissió fotoelèctrica?



Solució: Perquè es produeixi efecte fotoelèctric es necessita una energia mínima (la funció treball), que es correspon amb una longitud d'ona màxima. Per tant, podem calcular aquesta cota a partir de la relació de Planck:

$$W_{Na} = E_{min} = hf_{min} = \frac{hc}{\lambda_{max}} \Longrightarrow \lambda_{max} = \frac{hc}{W_{Na}} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{2{,}3} = 540 \text{ nm}$$

Exercici 1.5. Si la funció treball del níquel és $W_{Ni} = 5{,}01$ eV, quina diferència de potencial cal aplicar per frenar els fotoelectrons més ràpids emesos per una superfície de níquel sotmesa a radiació de llum ultraviolada de 2.000 Å?

Solució: En primer lloc, calculem l'energia dels fotoelectrons emesos:

$$E = hf = h\frac{c}{\lambda} = 4{,}136 \cdot 10^{-15} \frac{3 \cdot 10^{8}}{2.000 \cdot 10^{-10}} = 6{,}20 \text{ eV}$$

Com que aquesta energia és superior a la funció treball del níquel (5,01 eV), efectivament es produeix l'efecte fotoelèctric. Per tal de frenar els fotoelectrons emesos, cal aplicar un potencial que en compensi l'excés.

$$E = W_{Ni} + U \cdot q \Longrightarrow U \cdot q = 6{,}20 \text{ eV} - 5{,}01 \text{ eV} = 1{,}19 \text{ eV} \Longrightarrow U = 1{,}19 \text{ V}$$

Exercici 1.6. La funció treball del coure és $W_{Cu} = 4{,}4$ eV. Si s'il·lumina una superfície de coure amb llum visible, hi haurà efecte fotoelèctric?

Solució: La franja de l'espectre de llum visible es correspon amb:

$$\lambda \in [400, 700] \text{ nm} \qquad f \in [430, 750] \text{ THz}$$

Mentre que la longitud d'ona llindar és:

$$W_{Cu} = E_{min} = hf_{min} = \frac{hc}{\lambda_{max}} \Longrightarrow \lambda_{max} = \frac{hc}{W_{Cu}} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{4{,}4} = 282 \text{ nm}$$

Per tant, no hi haurà efecte fotoelèctric, ja que els fotons incidents, de llum visible, tenen una longitud d'ona més gran (energia inferior) a la longitud d'ona llindar (funció treball).

Exercici 1.7. Sigui un fotó amb una longitud d'ona de 3,64 nm que es mou en la direcció $+x$ i sigui un electró que es mou a $2 \cdot 10^{5}$ m/s en la direcció $-x$. Si es produeix un xoc frontal totalment elàstic, troba les condicions després de la col·lisió.

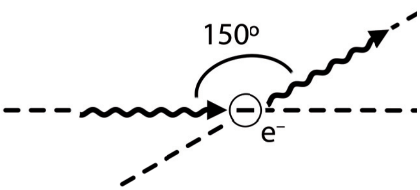
Solució: En qualsevol xoc es conserva la quantitat de moviment total (moment lineal del sistema), $\vec{p}$. Si, a més, es tracta d'una col·lisió elàstica, es conserva l'energia cinètica del sistema i no hi ha transferència de massa. En el moment del xoc, el fotó i l'electró s'intercanvien el moment i, per tant, només hem de calcular els moments inicials:

$$p_f^{final} = p_e^{inicial} = m_e v = 9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 2 \cdot 10^5 = 1{,}82 \cdot 10^{-25} \text{ kg m/s}$$

$$p_e^{final} = p_f^{inicial} = \frac{h}{\lambda} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{3{,}64 \cdot 10^{-9}} = 1{,}82 \cdot 10^{-25} \text{ kg m/s}$$

Com que els moments inicials coincideixen, quan es fa l'intercanvi, cada partícula conserva el seu mòdul i, per tant, l'electró continua movent-se a la mateixa velocitat i la longitud d'ona del fotó no es modifica. És a dir, després del xoc, es mouen en la mateixa direcció i a la mateixa velocitat però viatgen en sentit oposat.

Exercici 1.8. Un fotó de longitud d'ona $\lambda = 0{,}400$ nm col·lideix amb un electró en repòs i rebota en una direcció que forma un angle de 150° respecte de la direcció incident, tal com es mostra en la figura. Calcula la velocitat i la longitud d'ona del fotó després de la col·lisió.



Solució: La velocitat del fotó en el buit sempre és $c = 3{,}00 \cdot 10^8$ m/s. La longitud d'ona es modifica a causa de la col·lisió amb l'electró (efecte Compton):

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c}(1 - \cos(\phi)) = 0{,}4 \cdot 10^{-9} + \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8}(1 - \cos(150°)) = 0{,}405 \text{ nm}$$

Exercici 1.9. Quina és la funció treball del sodi metàl·lic si la longitud d'ona del llindar fotoelèctric és de 680 nm?

Solució: Per definició, quan s'il·lumina un metall amb fotons que tenen la longitud d'ona llindar (λ_{th}), els fotoelectrons emesos tenen l'energia justa per superar la funció treball (W):

$$W_{Na} = h\frac{c}{\lambda_{th}} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^8}{680 \cdot 10^{-9}} = 1{,}82 \text{ eV}$$

Exercici 1.10. Si la longitud d'ona del llindar fotoelèctric del potassi és de 4.400 Å:

a) Determina l'energia cinètica màxima dels fotoelectrons emesos per una superfície de potassi quan s'il·lumina amb llum ultraviolada de longitud d'ona $\lambda = 2.000$ Å.

b) Quina diferència de potencial de frenada es necessita per aturar l'emissió d'electrons?

Solució:

a) En primer lloc, calculem l'energia dels fotons incidents:

$$E_f = h\frac{c}{\lambda} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{2 \cdot 10^{-7}} = 6{,}20 \text{ eV}$$

La funció treball del potassi, W_K, es pot calcular a partir de la longitud d'ona llindar:

$$W_K = h\frac{c}{\lambda_{th}} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{4{,}4 \cdot 10^{-7}} = 2{,}82 \text{ eV}$$

Per tant, l'energia cinètica màxima dels electrons emesos és la que sobra després de superar la funció treball del metall, és a dir:

$$E_c^{max} = E_f - W_K = 6{,}20 - 2{,}82 = 3{,}38 \text{ eV}$$

b) El potencial que cal aplicar ha de frenar els electrons amb aquesta energia. Per tant:

$$U_{aplicat} = 3{,}38 \text{ V}$$

Exercici 1.11. A quina velocitat seran emesos els electrons més ràpids des d'una superfície on la longitud d'ona del llindar és $\lambda_{th} = 600$ nm quan la superfície s'il·lumina amb llum de longitud d'ona $\lambda = 400$ nm?

Solució: Calculem l'energia dels fotons incidents i la funció treball del metall:

$$E_f = h\frac{c}{\lambda} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{400 \cdot 10^{-9}} = 3{,}10 \text{ eV}$$

$$W = h\frac{c}{\lambda_{th}} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{600 \cdot 10^{-9}} = 2{,}07 \text{ eV}$$

L'energia cinètica màxima dels electrons emesos és la diferència entre les energies anteriors:

$$E_c^{max} = E_f - W = 3{,}10 - 2{,}07 = 1{,}03 \text{ eV}$$

Per tant, la velocitat dels electrons més ràpids serà:

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 \quad \Longrightarrow \quad v_{max} = \sqrt{\frac{2E_c^{max}}{m_e}} = 6 \cdot 10^5 \text{ m/s}$$

Exercici 1.12. S'emeten electrons des d'una superfície metàl·lica amb una energia cinètica màxima de 3 eV mitjançant llum ultraviolada de longitud d'ona $\lambda = 1.500$ Å. Determina:

a) La funció treball del metall.

b) La longitud d'ona llindar del metall.

c) La diferència de potencial de retard que cal aplicar per frenar l'emissió d'electrons.

Solució:

a) Els 3 eV corresponen a l'energia que ha sobrat després de superar la funció treball del metall i que prové de la llum ultraviolada.

$$E_f = h\frac{c}{\lambda} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^8}{1.500 \cdot 10^{-10}} = 8{,}27 \text{ eV}$$

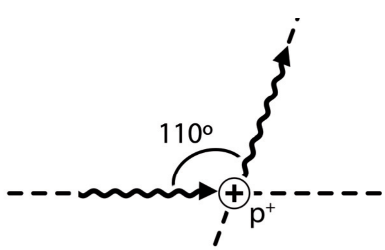
$$W = E_f - 3 \text{ eV} = 8{,}27 - 3 = 5{,}27 \text{ eV}$$

b) En el llindar, els fotons tenen exactament l'energia necessària per superar la funció treball del metall. Per tant:

$$W = h\frac{c}{\lambda_{th}} \quad \Longrightarrow \quad \lambda_{th} = h\frac{c}{W} = \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^8}{5{,}27} = 235 \text{ nm}$$

c) Com que l'energia cinètica màxima dels electrons és de 3 eV, cal aplicar 3 V per frenar l'emissió per efecte fotoelèctric.

Exercici 1.13. Un feix de raigs X de longitud d'ona $\lambda = 5{,}00 \cdot 10^{-14}$ m xoca amb un protó que està en repòs. Si els raigs X es dispersen formant un angle de 110°, quina és la seva longitud d'ona després del xoc?



Solució: La longitud d'ona dels raigs X es modifica a causa de la col·lisió amb el protó (efecte Compton):

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_p c}(1 - \cos(\phi))$$

Amb les dades de l'enunciat:

$$\lambda' = 5 \cdot 10^{-14} + \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{1{,}673 \cdot 10^{-27} \cdot 3 \cdot 10^{8}}(1 - \cos(110^\circ)) = 5{,}18 \cdot 10^{-14} \text{ m}$$

Exercici 1.14. Quan una superfície metàl·lica s'il·lumina amb llum de longitud d'ona λ, l'energia cinètica màxima dels electrons emesos és d'1,20 eV. Si la longitud d'ona de la llum utilitzada és $\lambda' = 0{,}80\lambda$, l'energia cinètica màxima dels electrons augmenta fins a 1,76 eV. Si la longitud d'ona és $\lambda'' = 0{,}60\lambda$, llavors l'energia cinètica màxima dels electrons emesos és de 2,676 eV. Aleshores:

a) Calcula la longitud d'ona, λ.

b) Troba la funció treball del metall, W.

Solució:

a) Podem relacionar la funció treball del metall (W), l'energia dels fotons incidents (E_f) i l'energia cinètica màxima dels electrons emesos (E_c^{max}) mitjançant l'expressió següent:

$$E_{fot} = W + E_c^{max} \implies W = \frac{hc}{\lambda} - E_c^{max}$$

Per tant, amb les dades de l'enunciat obtenim el sistema sobredeterminat següent:

$$W = \frac{hc}{\lambda} - 1{,}20 \text{ eV} \tag{1.2}$$

$$W = \frac{hc}{0{,}8\lambda} - 1{,}76 \text{ eV} \tag{1.3}$$

$$W = \frac{hc}{0{,}6\lambda} - 2{,}676 \text{ eV} \tag{1.4}$$

De manera que, amb les equacions (1.2) i (1.3), calculem un primer valor per a λ:

$$\frac{hc}{0{,}8\lambda} - \frac{hc}{\lambda} = (1{,}76 - 1{,}2) \text{ eV} \implies \frac{0{,}2}{0{,}8\lambda}hc = 0{,}56 \text{ eV} \implies \lambda = 5{,}54 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

Paral·lelament, si utilitzem les equacions (1.2) i (1.4), trobem un segon valor per a λ:

$$\frac{hc}{0{,}6\lambda} - \frac{hc}{\lambda} = (2{,}676 - 1{,}2) \text{ eV} \implies \frac{0{,}4}{0{,}6\lambda}hc = 1{,}476 \text{ eV} \implies \lambda = 5{,}60 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

Finalment, si calculem λ utilitzant les equacions (1.3) i (1.4), el tercer valor per a λ és:

$$\frac{hc}{0{,}6\lambda} - \frac{hc}{0{,}8\lambda} = (2{,}676 - 1{,}76)\ \text{eV} \implies \frac{0{,}2}{0{,}48\lambda}hc =$$

$$= 0{,}916\ \text{eV} \implies \lambda = 5{,}64 \cdot 10^{-7}\ \text{m}$$

b) Així doncs, podem veure que tots els resultats de l'apartat anterior són similars sense ser idèntics; per tant, no és raonable que ens decantem per cap d'ells. En prenem el valor mitjà aproximat, $\lambda \simeq 5{,}6 \cdot 10^{-7}$ m; aleshores:

$$W = \frac{hc}{\lambda} - 1{,}2\ \text{eV} \simeq \frac{4{,}136 \cdot 10^{-15} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{5{,}6 \cdot 10^{-7}} - 1{,}2\ \text{eV} \simeq 1{,}016\ \text{eV} \simeq 1{,}0\ \text{eV}$$

Exercici 1.15. En un experiment de laboratori d'efecte fotoelèctric, s'ha observat que el potencial mínim per anul·lar totalment el corrent de fotoelectrons, U_s, és 0,25 V quan la longitud d'ona de la llum incident és de 500 nm, i que U_s ha de ser 1,0 V quan la longitud d'ona de la llum incident és de 375 nm. Utilitza aquestes dades per trobar la relació entre la constant de Planck i la càrrega de l'electró, h/q.

Solució: En primer lloc, calculem les energies associades a cada longitud d'ona:

$$E_1 = hf = h\frac{c}{\lambda_1} = h\frac{c}{500 \cdot 10^{-9}}$$

$$E_2 = hf = h\frac{c}{\lambda_2} = h\frac{c}{375 \cdot 10^{-9}}$$

Amb l'equació de l'efecte fotoelèctric, trobem la funció treball en cada cas.

$$W_1 = h\frac{c}{500 \cdot 10^{-9}} - 0{,}25 \cdot q$$

$$W_2 = h\frac{c}{375 \cdot 10^{-9}} - q$$

Com que la funció treball és una constant del material, s'ha de verificar $W_1 = W_2$.

$$h\frac{c}{500 \cdot 10^{-9}} - 0{,}25 \cdot q = h\frac{c}{375 \cdot 10^{-9}} - q$$

$$0{,}75 \cdot q = h\frac{c}{10^{-9}}\left(\frac{1}{375} - \frac{1}{500}\right)$$

Finalment, aïllem la relació $\dfrac{h}{q}$:

$$\frac{h}{q} = \frac{0{,}75 \cdot 10^{-9}}{c}\left(\frac{1}{375} - \frac{1}{500}\right)^{-1} = 3{,}75 \cdot 10^{-15} \approx 4{,}136 \cdot 10^{-15}\ \text{eV s}$$

Exercici 1.16. En un experiment d'efecte fotoelèctric, s'il·lumina una superfície de sodi metàl·lic amb llum de longitud d'ona 420 nm i es troba que el potencial llindar necessari per aturar el corrent és de 0,65 V. Quan es fa el mateix amb llum de 310 nm, el potencial llindar és d'1,69 V. Utilitzant només aquestes dades i els valors de la velocitat de propagació de la llum, c, i la càrrega de l'electró, q_e, troba:

a) La funció treball (o potencial d'extracció) del sodi.

b) Un valor aproximat de la constant de Planck.

Solució:

a) Només podem utilitzar c i q_e; per tant, hem de suposar que no coneixem la constant de Planck, h. Partim de l'equació de l'efecte fotoelèctric:

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = hf - W$$

Per frenar els fotoelectrons, cal aplicar un potencial que compensi l'energia cinètica:

$$q_e V = E_c = hf - W = h\frac{c}{\lambda} - W$$

En aquesta equació, hi ha dos valors desconeguts: la funció treball i la constant de Planck. Tenim, però, dades suficients per construir un sistema de dues equacions independents:

$$\lambda_1 = 420 \cdot 10^{-9} \text{ m}, V_1 = 0{,}65 \text{ V} \quad \Longrightarrow \quad h\frac{c}{\lambda_1} = W + q_e V_1 \tag{1.5}$$

$$\lambda_2 = 310 \cdot 10^{-9} \text{ m}, V_2 = 1{,}69 \text{ V} \quad \Longrightarrow \quad h\frac{c}{\lambda_2} = W + q_e V_2 \tag{1.6}$$

Dividim les equacions, (1.5) entre (1.6), per eliminar la dependència amb la constant h:

$$\frac{hc/\lambda_1}{hc/\lambda_2} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{W + q_e V1}{W + q_e V2}$$

$$W(\lambda_2 - \lambda_1) = (\lambda_1 V_1 - \lambda_2 V_2) q_e \quad \Longrightarrow \quad W = \frac{\lambda_1 V_1 - \lambda_2 V_2}{\lambda_2 - \lambda_1} q_e = 2{,}30 \text{ eV}$$

b) Conegut el valor de la funció treball, podem utilitzar qualsevol de les equacions del sistema anterior per trobar h. Per exemple, si utilitzem (1.5):

$$h\frac{c}{\lambda_1} = W + q_e V_1 \quad \Longrightarrow \quad h = \frac{\lambda_1}{c}(W + q_e V_1) = 4{,}13 \cdot 10^{-15} \text{ eV s} = 6{,}61 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

n'obtenim un valor molt proper al teòric: $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ J s.

→ 2

Dualitat ona-partícula

2.1. Les ones de De Broglie

De la mateixa manera que considerem els fotons com una ona o una partícula, Louis De Broglie va suggerir el 1924 que totes les partícules tenien també entitat d'ona. Les hipòtesis de De Broglie proporcionen la relació entre l'energia, E, i la quantitat de moviment, p, de la "partícula" i la freqüència, f, i la longitud d'ona, λ, de l'ona corresponent.

$$E = hf = \hbar w \quad \text{on } \hbar = \frac{h}{2\pi},\ w = 2\pi f$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \qquad \text{on } k = \frac{\lambda}{2\pi}$$

Es tracta d'unes hipòtesis arriscades, que es van comprovar poc després amb la difracció de raigs X en cristalls [3].

Una aplicació important de la dualitat és el microscopi electrònic, que avui dia presenta una resolució de l'ordre d'una fracció d'àngstrom (1 Å $= 10^{-10}$ m).

Les relacions de De Broglie són vàlides sempre, però la relació $E(p)$ depèn de l'energia cinètica de la partícula, tal com es descriu en l'apartat següent.

2.2. Relació entre energia i moment, $E(p)$

La teoria de la relativitat ens dona la relació entre l'energia total, E, que té una partícula i el seu moment o quantitat de moviment, p. Aquesta relació depèn de l'energia de la massa en repòs, $E_0 = m_0c^2$, i de l'energia cinètica, E_c, com es mostra a continuació.

$$E^2 = E_0^2 + c^2p^2 \qquad \text{on} \qquad E = E_0 + E_c$$

Aquesta relació general es pot simplificar en els casos següents:

1) Quan les partícules es mouen a velocitats molt inferiors a la de la llum ($v \ll c$), s'anomenen *no relativistes* i es compleix la relació clàssica:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

En aquest cas, $E_c \ll E_0 \iff \lambda \gg \lambda_0$, on λ_0 és la longitud d'ona de Compton de la partícula, definida com: $\lambda_0 \equiv h/(m_0 c)$.

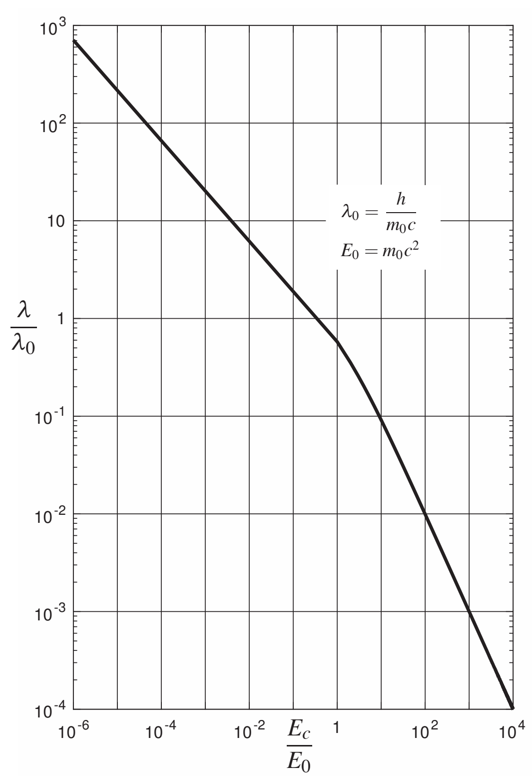
2) Quan la seva velocitat és comparable a c, es tracta de partícules amb energies cinètiques molt superiors a l'energia de la massa en repòs ($E_c \gg E_0$) i s'anomenen *ultrarelativistes*. En aquest cas, les partícules es comporten com els fotons i compleixen:

$$E = cp$$

En aquest cas, $E_c \gg E_0 \iff \lambda \ll \lambda_0$.

Aquest comportament es pot veure en la gràfica de la figura 2.1, on les rectes asimptòtiques es corresponen amb els casos esmentats (comportaments clàssic i ultrarelativista, respectivament) i la zona d'inflexió, amb el cas general.

Fig. 2.1
Longitud d'ona de De Broglie (normalitzada respecte de la longitud d'ona de Compton) en funció de l'energia cinètica (normalitzada respecte de l'energia de la massa en repòs).



2.3. Exercicis

Exercici 2.1. Quina longitud d'ona ha de tenir la radiació electromagnètica si els fotons del feix han de tenir la mateixa quantitat de moviment que un electró que es mou a una velocitat de $2 \cdot 10^5$ m/s?

Solució: Utilitzem les relacions de De Broglie, que es compleixen sempre, i forcem que els moments lineals de l'electró i el fotó siguin iguals ($p_e = p_f$):

$$\lambda = \frac{h}{p_f} = \frac{h}{p_e} = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 2 \cdot 10^5} = 3{,}64 \text{ nm}$$

Exercici 2.2. Calcula la longitud d'ona de De Broglie per a una partícula que es mou a una velocitat $v = 2 \cdot 10^6$ m/s si la partícula és:

a) un electró ($m_e = 9{,}109 \cdot 10^{-31}$ kg);
b) un protó ($m_p = 1{,}673 \cdot 10^{-27}$ kg);
c) una bola de 0,2 kg.

Solució: Com que la velocitat és la mateixa per als tres casos, la longitud d'ona de De Broglie només depèn de la massa de cada partícula. Per tant:

a) Amb una massa m_e, tenim:

$$\lambda_e = \frac{h}{m_e v} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 2 \cdot 10^6} = 0{,}363 \text{ nm}$$

b) Amb una massa m_p, tenim:

$$\lambda_p = \frac{h}{m_p v} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{1{,}673 \cdot 10^{-27} \cdot 2 \cdot 10^6} = 1{,}98 \cdot 10^{-13} \text{ m}$$

c) Amb una massa $m = 0{,}2$ kg, tenim:

$$\lambda_{bola} = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{0{,}2 \cdot 2 \cdot 10^6} = 1{,}66 \cdot 10^{-39} \text{ m}$$

Exercici 2.3. Un electró que inicialment està gairebé en repòs és accelerat per una diferència de potencial de 100 V. Calcula la longitud d'ona de De Broglie d'aquest electró.

Solució: Inicialment, l'electró té una energia cinètica nul·la pel fet d'estar en repòs. Després de ser accelerat per la diferència de potencial, l'electró adquireix una energia cinètica igual a l'energia potencial que l'ha accelerat i la seva velocitat deixa de ser nul·la.

$$100 \text{ eV} = E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 \implies v = \sqrt{\frac{2 \cdot 100 \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19}}{9{,}109 \cdot 10^{-31}}} = 5{,}93 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

A partir de la relació de De Broglie entre moment i longitud d'ona, tenim:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 5{,}93 \cdot 10^{6}} = 0{,}123 \text{ nm} = 1{,}23 \text{ Å}$$

Exercici 2.4. Quina diferència de potencial es requereix en un microscopi electrònic per donar als electrons una longitud d'ona de 0,50 Å?

Solució: En primer lloc, calculem la velocitat que han de tenir els electrons mitjançant la relació de De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \implies v = \frac{h}{m\lambda} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 0{,}5 \cdot 10^{-10}} = 14{,}55 \cdot 10^{6} \text{ m/s}$$

Aquesta velocitat correspon a una energia cinètica que hem de donar als electrons.

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2} \cdot 9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot (14{,}55 \cdot 10^{6})^2 = 9{,}64 \cdot 10^{-17} \text{ J} = 602 \text{ eV}$$

Per tant, hem d'aplicar un potencial de 602 V.

Exercici 2.5. Quina és la velocitat i quina és la quantitat de moviment d'un fotó de 500 nm?

Solució: La velocitat dels fotons en el buit sempre és $c = 3{,}00 \cdot 10^{8}$ m/s. Per calcular el moment, fem servir una de les relacions de De Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{500 \cdot 10^{-9}} = 1{,}33 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$$

Exercici 2.6. Calcula la longitud d'ona de De Broglie d'un electró que hem accelerat mitjançant una diferència de potencial de 9.000 V. Ignora els efectes relativistes.

Solució: En primer lloc, calculem la velocitat de l'electró. Com que tota l'energia potencial s'ha transformat en energia cinètica:

$$9 \cdot 10^{3} \text{ eV } = E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 \implies v = 5{,}63 \cdot 10^{7} \text{ m/s}$$

Calculem la longitud d'ona associada a l'electró mitjançant la relació de De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{9{,}109 \cdot 10^{-31} \cdot 5{,}627 \cdot 10^{7}} = 1{,}29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Exercici 2.7. Quina és la longitud d'ona de De Broglie d'un electró que s'ha accelerat mitjançant una diferència de potencial d'1 MV?

Nota: Amb aquests nivells elevats d'energia, comparables a m_0c^2, cal utilitzar les expressions de massa i energia relativistes.

Solució: Les relacions de De Broglie es compleixen sempre; per tant, per calcular la longitud d'ona:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Hem de calcular el moment lineal de l'electró utilitzant l'expressió d'energia relativista:

$$E^2 = E_0^2 + c^2p^2 \implies p = \frac{1}{c}\sqrt{E^2 - E_0^2}$$

Calculem l'energia cinètica de l'electró després de passar per la diferència de potencial:

$$E_c = q \cdot V = 1{,}602 \cdot 10^{-19} \cdot 10^6 = 1{,}602 \cdot 10^{-13}\ \text{J}$$

Sabem que l'energia en repòs de l'electró és:

$$E_0 = m_e c^2 = 8{,}198 \cdot 10^{-14}\ \text{J} = 0{,}5110 \cdot 10^6\ \text{eV}$$

L'energia total és la suma de l'energia en repòs i la cinètica; per tant:

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - E_0^2}} = \frac{hc}{\sqrt{2E_cE_0 + E_c^2}} = 8{,}72 \cdot 10^{-13}\ \text{m}$$

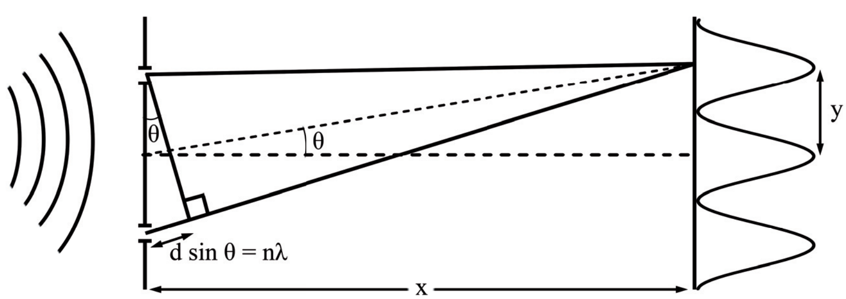
Exercici 2.8. Es vol enviar un feix d'electrons a través d'una xarxa de difracció amb una distància entre escletxes d. Si els electrons tenen una velocitat de 400 m/s, quin ha de ser el valor de d per tal que el primer màxim s'observi a 25° respecte de la direcció d'incidència?

Solució: Calculem la longitud d'ona de De Broglie dels electrons del feix:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{m_e \cdot 400} = 1{,}82\ \mu\text{m}$$

La relació entre la distància entre escletxes i la posició dels màxims és:

$$d \cdot \sin(\theta) = n\lambda \implies d = 4{,}3\,n\ \mu\text{m} \qquad n \in \mathbb{Z}^+$$



Exercici 2.9. Tenim electrons amb energia cinètica, E_c, de valors: *a*) 20 keV, *b*) 250 keV i *c*) 10 MeV. Troba, en cada cas, el mòdul de la seva quantitat de moviment, p, i la longitud d'ona de De Broglie, λ. Troba les mateixes magnituds (p i λ) si són protons que tenen energia cinètica de *d*) 20 keV i *e*) 10 MeV.

Solució: En primer lloc, calculem les energies en repòs, E_0, dels protons i els electrons a partir de les masses en repòs:

$$m_e = 9{,}11 \cdot 10^{-31}\ \text{kg} \quad \Longrightarrow \quad E_0^e = m_e c^2 = 5{,}11 \cdot 10^5\ \text{eV}$$
$$m_p = 1{,}67 \cdot 10^{-27}\ \text{kg} \quad \Longrightarrow \quad E_0^p = m_p c^2 = 9{,}38 \cdot 10^8\ \text{eV}$$

Com que les relacions de De Broglie són vàlides sempre, utilitzem: $p = \dfrac{h}{\lambda}$

a) En el cas dels electrons amb $E_c = 20$ keV:

$$E_c \ll E_0^e \quad \Longrightarrow \quad \text{Podem utilitzar l'aproximació clàssica: } E_c = \frac{p^2}{2m_e}$$

$$p = \sqrt{2m_e E_c} = 7{,}6 \cdot 10^{-23}\ \text{kg m s}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}}{p} = 8{,}7 \cdot 10^{-12}\ \text{m} = 0{,}087\ \text{Å}$$

b) En el cas dels electrons amb $E_c = 2{,}5 \cdot 10^5$ eV:

$$E_c \lesssim E_0^e \quad \Longrightarrow \quad \text{Utilitzem l'expressió relativista completa:} \quad p = \frac{1}{c}\sqrt{2E_0 E_c + E_c^2}$$

$$p = 3{,}0 \cdot 10^{-22}\ \text{kg m s}^{-1}, \ \ \lambda = 2{,}2 \cdot 10^{-12}\ \text{m} = 0{,}022\ \text{Å}$$

c) En el cas dels electrons amb $E_c = 10^7$ eV:

$$E_c \ll E_0^e \quad \Longrightarrow \quad \text{Podem utilitzar l'aproximació ultrarelativista: } E = cp$$

$$p = \frac{E_c}{c} = \frac{10^7}{3 \cdot 10^8} = 5{,}3 \cdot 10^{-21}\ \text{kg m s}^{-1}, \ \ \lambda = 1{,}3 \cdot 10^{-13}\ \text{m} = 0{,}0013\ \text{Å}$$

Finalment, per als protons de $E_c = 20$ keV i $E_c = 10$ MeV, en tots dos casos es verifica:

$$E_c \ll E_0^p \quad \Longrightarrow \quad \text{Podem utilitzar l'aproximació clàssica: } E_c = \frac{p^2}{2m_e}$$

d) $E_c = 20\ \text{keV} \quad \Longrightarrow \quad p = 3{,}27 \cdot 10^{-21}\ \text{kg m s}^{-1}, \quad \lambda = 2{,}0 \cdot 10^{-16}\ \text{m}$

e) $E_c = 10\ \text{MeV} \quad \Longrightarrow \quad p = 7{,}3 \cdot 10^{-20}\ \text{kg m s}^{-1}, \quad \lambda = 9{,}1 \cdot 10^{-15}\ \text{m}$

Exercici 2.10. En un microscopi electrònic, amb quin potencial cal accelerar els electrons per tal que el seu poder de resolució sigui el mateix que el d'un microscopi de raigs γ de 0,200 MeV?

Nota: Com que el poder de resolució és determinat per la longitud d'ona, cal que les λ siguin iguals.

Solució: L'energia en repòs i la longitud d'ona de Compton dels electrons són:

$$E_0 = m_e c^2 = 5{,}11 \cdot 10^5 \text{ eV} \qquad \lambda_0 = 0{,}0243 \text{ Å}$$

mentre que, per a la radiació γ:

$$E_\gamma = 2 \cdot 10^5 \text{ eV} \qquad \lambda_\gamma = \frac{hc}{E_\gamma} = 0{,}0620 \text{ Å}$$

Com que les energies són del mateix ordre ($E_\gamma \lesssim E_0$), hem d'utilitzar l'expressió relativista general $E(p_e)$:

$$E^2 = E_0^2 + c^2 p_e^2 \implies p_e = \frac{1}{c}\sqrt{2E_0E_c + E_c^2}, \qquad p_e = \frac{h}{\lambda_e}$$

Imposant que les longituds d'ona siguin iguals, deduïm el valor de l'energia cinètica que cal aplicar als electrons:

$$\lambda_\gamma = \lambda_e \implies \frac{hc}{E_\gamma} = \frac{h}{p_e} = \frac{hc}{\sqrt{2E_0E_c + E_c^2}} \implies E_c^2 + 2E_0E_c - E_\gamma = 0$$

L'única solució de l'equació amb sentit físic (energia cinètica positiva) correspon al potencial que cal aplicar als electrons:

$$E_c = 37{,}8 \text{ keV} \implies V_{aplicat} = 37{,}8 \text{ kV}$$

Exercici 2.11. Per fer experiments de difracció en cristalls, es necessiten longituds d'ona de l'ordre de $0{,}5 \cdot 10^{-10}$ m $= 0{,}5$ Å.

a) Quines han de ser les energies cinètiques corresponents (en eV) per als fotons, els electrons i els neutrons?

b) A partir de quin valor (aproximat) de la longitud d'ona cal utilitzar la relació relativista per als electrons? I per als neutrons?

Solució: Podem utilitzar les relacions de De Broglie, ja que es compleixen sempre.

a) En el cas dels fotons:

$$E = cp = c\hbar k = \frac{ch}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34}}{5 \cdot 10^{-11}} = 4{,}0 \cdot 10^{-15} \text{ J} = 25 \text{ keV}$$

En el cas dels electrons i els neutrons, si suposem que estem en el cas no relativista, és a dir, la velocitat de les partícules és molt menor que c i l'energia cinètica de les partícules és molt menor que la seva energia en repòs, tenim:

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{l} \text{electrons: } E_c^e = 9{,}6 \cdot 10^{-17}\ \text{J} = 0{,}6\ \text{keV} \\ \text{neutrons: } E_c^n = 5{,}2 \cdot 10^{-20}\ \text{J} = 0{,}33\ \text{eV} \end{array}$$

Les energies que se n'obtenen són molt menors que les energies en repòs.

$$E_c^e \ll 0{,}5\ \text{MeV} \sim E_0^e$$
$$E_c^n \ll 1000\ \text{MeV} \sim E_0^n$$

Per tant, la hipòtesi no relativista és correcta.

b) Per calcular la longitud d'ona llindar, podem agafar diferents criteris i els resultats són molt semblants. Un d'ells és aquest: $E_c \approx m_0c^2$, en què m_0 es correpon amb la massa en repòs de la partícula.

$$E_c = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \approx E_0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda \approx \frac{h}{\sqrt{2mE_0}} \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{l} \text{electrons: } \lambda_e \approx 1{,}7 \cdot 10^{-2}\ \text{Å} \\ \text{neutrons: } \lambda_n \approx 9 \cdot 10^{-16}\ \text{Å} \end{array}$$

que són longituds d'ona molt menors a 0,5 Å, la que es necessita per als experiments de difracció.

Exercici 2.12. En un microscopi electrònic, amb quin potencial s'ha d'accelerar el feix d'electrons si es vol observar:

a) un virus, de 12 nm de diàmetre;
b) un àtom, de 0,12 nm de diàmetre;
c) un protó, d'1,2 fm de diàmetre.

Solució: En primer lloc, hem de recordar que les relacions de De Broglie sempre són vàlides:

$$E = hf = \hbar w \qquad p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

D'altra banda, per tenir una resolució Δx en un microscopi electrònic, cal accelerar els electrons fins que la seva longitud d'ona de De Broglie sigui de l'ordre de Δx.

$$\begin{aligned} \lambda_a &= 12\ \text{nm} = 1{,}2 \cdot 10^{-8}\ \text{m} \\ \lambda_b &= 0{,}12\ \text{nm} = 1{,}2 \cdot 10^{-10}\ \text{m} \\ \lambda_c &= 1{,}2\ \text{fm} = 1{,}2 \cdot 10^{-15}\ \text{m} \end{aligned}$$

Com que la longitud d'ona de Compton de l'electró és $\lambda_0 = 2{,}43 \cdot 10^{-12}$ m, podem utilitzar l'aproximació clàssica per als dos primers apartats, *a* i *b*, i la ultrarelativista per al tercer.

a) i *b)* Tenim $\lambda_a, \lambda_b \ll \lambda_0 \quad \Longrightarrow \quad E(p) = \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{1}{2m}\dfrac{h^2}{\lambda^2}$ (aproximació clàssica)

$$E_a = \frac{1}{2m}\frac{h^2}{\lambda_a^2} = 1{,}05 \cdot 10^{-2}\ \text{eV} \quad \Longrightarrow \quad V_a = 1{,}05 \cdot 10^{-2}\ \text{V}$$

$$E_b = \frac{1}{2m}\frac{h^2}{\lambda_b^2} = 1{,}05 \cdot 10^{2}\ \text{eV} \quad \Longrightarrow \quad V_b = 1{,}05 \cdot 10^{2}\ \text{V}$$

c) En aquest cas, $\lambda_c \ll \lambda_0 \quad \Longrightarrow \quad E(p) = c\,p = c\,\dfrac{h}{\lambda}$ (aproximació ultrarelativista)

$$E_c = c\,\frac{h}{\lambda_c} = 1{,}02 \cdot 10^{9}\ \text{eV} \quad \Longrightarrow \quad V_c = 1{,}02 \cdot 10^{9}\ \text{V}$$

→ 3

Incertesa

3.1. Introducció

En física clàssica, quan construïm paquets d'ones a partir de superposicions lineals d'ones harmòniques, trobem la relació següent entre l'espai de les posicions, x, i l'espai dels nombres d'ona, k:

$$\Delta x \Delta k \geq 1$$

on Δx és l'extensió en longitud (unidimensional) del paquet d'ones i Δk és l'amplada de la banda en l'espai de les k [5].

3.2. El principi d'indeterminació de Heisenberg

En física quàntica, la relació d'incertesa (o d'indeterminació) va ser proposada per Werner Heisenberg l'any 1927. Aquest principi postula que és impossible conèixer amb absoluta precisió dues variables conjugades. Això és, el producte de les incerteses associades a les magnituds conjugades és sempre un valor fitat.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Segons com es defineixin les incerteses, les fites poden ser $\frac{\hbar}{2}$, $\hbar$ o també h.

El principi d'indeterminació de Heisenberg es pot justificar amb experiments, tal com ho descriu Richard Feynman [6].

3.3. Conseqüències

Una conseqüència directa del principi de Heisenberg és que no pot existir una partícula aturada en un lloc concret, ja que les incerteses associades a la posició i al moment serien simultàniament nul·les.

Una altra conseqüència interessant és el cas de l'oscil·lador harmònic. Veurem que ha de tenir una energia mínima (no nul·la), que podem calcular també a partir de l'equació de Schrödinger.

3.4. Exercicis

Exercici 3.1. Troba el primer nivell d'energia de l'electró de l'àtom d'hidrogen (un electró lligat a un nucli de càrrega $+q_e$) a partir del principi d'indeterminació de Heisenberg. Cal suposar que l'electró està tancat en una caixa de dimensió r.

a) Troba r_0, el valor de r que fa mínima l'energia mecànica de l'electró $E = E_c + U$.

Nota: En aquest cas, l'energia potencial és la coulombiana, $U = -\dfrac{k_e}{r}q_e^2$.

b) Troba l'energia per a aquest valor r_0.

c) Quina hauria de ser l'energia mínima d'un electró en el nucli, $r_n \simeq 10^{-15}$ m?

Nota: En aquest problema has d'utilitzar $\Delta x \Delta p_x \approx \hbar$ en comptes de la desigualtat habitual del principi d'indeterminació de Heisenberg.

Solució:

a) La posició i el moment són variables conjugades; per tant, podem relacionar les seves incerteses amb el principi d'indeterminació de Heisenberg. Utilitzem un model unidimensional prenent com a eix la línia que uneix l'electró amb el nucli.

$$\Delta x \Delta p_x \approx \hbar \quad \Longrightarrow \quad \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{r}$$

Calculem la incertesa en el moment lineal a partir de l'expressió general. Fem servir el fet que el valor mitjà del moment és zero ($\langle p \rangle = 0$).

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle$$

Si unim les dues expressions que hem trobat, podem calcular l'energia cinètica mitjana:

$$\langle p^2 \rangle \geq \left(\frac{\hbar}{r}\right)^2 \quad \Longrightarrow \quad \langle E_c \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{r^2}$$

Per tant, per calcular l'energia mecànica total de l'electró en funció de la distància fins al nucli, només cal afegir l'energia potencial coulombiana a la que acabem de deduir:

$$E(r) = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + U(r) = \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{r^2} - \frac{k_e}{r}q_e^2$$

Derivem i igualem a zero per trobar el valor r_0 que minimitza l'energia:

$$\frac{\partial E(r)}{\partial r} = \frac{1}{2m}\frac{(-2)\hbar^2}{r^3} + \frac{k_e}{r^2}q_e^2 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{1}{m}\frac{\hbar^2}{r_0} = k_e q_e^2 \quad \Longrightarrow \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{k_e m q_e^2} = 0{,}529 \text{ Å}$$

b) Només cal substituir aquest valor en l'expressió de l'energia:

$$E(r_0) = \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{r_0^2} - \frac{k_e}{r_0}q_e^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4k_e m q_e^2}{\hbar^2}\right)^2 - \frac{4k_e m q_e^2}{\hbar^2}k_e q_e^2 = -\frac{k_e^2 q_e^4 m}{2\hbar^2} = -13{,}6\ \text{eV}$$

c) Si ara prenem $r = r_n \simeq 10^{-15}$ m, tenim:

$$E(r_n) = \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{r_n^2} - \frac{k_e}{r_n}q_e^2 = \frac{(1{,}055\cdot 10^{-34})^2}{2\cdot 9{,}1\cdot 10^{-31}\cdot(10^{-15})^2} - \frac{9\cdot 10^9}{10^{-15}}(1{,}6\cdot 10^{-19})^2 = 3{,}8\cdot 10^{10}\ \text{eV}$$

Exercici 3.2. Troba l'amplada de la línia espectral emesa per un àtom excitat que cau al seu estat fonamental emetent llum visible de 5.500 Å si la intensitat de la llum emesa decreix com $I(t) = I_0 e^{-bt}$, on $b = 4\cdot 10^6\ \text{s}^{-1}$.

Solució: La longitud d'ona de la llum emesa compleix:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \qquad \lambda = 5.500\ \text{Å} = 5{,}5\cdot 10^{-7}\ \text{m}$$

La incertesa en el temps, Δt, es pot aproximar per la constant de temps en el decreixement de la intensitat de la llum.

$$I(t) = I_0 e^{-bt} = I_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \implies b = 4\cdot 10^6\ \text{s}^{-1} = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\Delta t}$$

El principi d'indeterminació de Heisenberg relaciona les incerteses en l'energia i en el temps, ja que són variables conjugades:

$$\Delta E\,\Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \implies \Delta E = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\Delta t} = \frac{\hbar}{2}b$$

A més, a partir de la derivada de l'expressió de l'energia del fotó, podem trobar una relació entre les incerteses en l'energia i la longitud d'ona de la llum:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \implies \partial E = -\frac{hc}{\lambda^2}\partial\lambda \implies \Delta E = |\partial E| = \frac{hc}{\lambda^2}\Delta\lambda \implies \Delta\lambda = \lambda^2\frac{\Delta E}{hc}$$

Així, combinant les equacions anteriors i utilitzant els valors de l'enunciat, podem trobar la incertesa de la longitud d'ona, que es manifesta com una amplada de la línia espectral emesa per l'àtom:

$$\Delta\lambda = \lambda^2\frac{\Delta E}{hc} = \lambda^2\frac{\hbar b}{2hc} = \lambda^2\frac{b}{4\pi c} = \frac{(5{,}5\cdot 10^{-7})^2\cdot 4\cdot 10^6}{4\cdot\pi\cdot 3\cdot 10^8} = 3{,}2\cdot 10^{-16}\ \text{m}$$

Conclusió: Una relació que potser val la pena recordar i que podem deduir a partir de l'expressió de l'energia del fotó és la següent:

$$\Delta\lambda = \lambda^2\frac{\Delta E}{hc} = \lambda\frac{\Delta E}{E} \implies \frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda}$$

Exercici 3.3. En un tub de descàrrega de gasos, els àtoms excitats pels electrons a $t = 0$ cauen immediatament a l'estat fonamental i emeten llum visible de 550 nm. La intensitat d'aquesta llum disminueix amb el temps segons la llei següent:

$$I(t) = I_0 e^{-bt}, \qquad \text{amb}\, b = 5 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$$

Dedueix l'amplada de la línia espectral.

Solució: En primer lloc, calculem l'energia de la llum visible de 550 nm:

$$E = hf = h\frac{c}{\lambda} = h\frac{c}{550 \cdot 10^{-9}} = 2{,}26 \text{ eV}$$

La constant de temps que apareix en la llei de la intensitat de la llum es pot relacionar directament amb la incertesa associada al temps, és a dir:

$$\Delta t \sim \tau = \frac{1}{b}$$

Per tant, si utilitzem el principi d'indeterminació de Heisenberg per a les variables energia i temps, podem obtenir una cota per a la incertesa en l'energia.

$$\Delta E\, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Longrightarrow \quad \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} b = 1{,}65 \cdot 10^{-8} \text{ eV}$$

En l'exercici anterior, hem demostrat que la relació entre incerteses per a l'energia i la longitud d'ona és la següent:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \quad \Longrightarrow \quad \Delta\lambda = 550 \cdot 10^{-9} \frac{1{,}65 \cdot 10^{-8}}{2{,}26 \cdot 10^{-19}} = 4{,}01 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

Exercici 3.4. Un àtom que està en un estat excitat transita a l'estat fonamental emetent un fotó. Si el període de vida mitjà del procés és de 10^{-8} s i la llum emesa és blava (de 430 nm de longitud d'ona), calcula:

a) l'energia del fotó (en eV);

b) la incertesa en l'energia;

c) la incertesa en la longitud d'ona de la llum emesa (és a dir, l'amplada de la línia espectral).

Solució:

a) Calculem l'energia del fotó:

$$E = hf = h\frac{c}{\lambda} = h\frac{c}{430 \cdot 10^{-9}} = 4{,}62 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2{,}88 \text{ eV}$$

b) Si la incertesa en el temps és de l'ordre del temps de vida mitjà del procés ($\Delta t \sim 10^{-8}$), podem utilitzar la restricció del principi d'incertesa, és a dir:

$$\Delta E\,\Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Longrightarrow \quad \Delta E \geq \frac{\hbar}{2\,\Delta t} = 5{,}27 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{J}$$

c) Partim de la relació entre les incerteses per a l'energia i la longitud d'ona que hem demostrat en l'exercici 3.2.

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \quad \Longrightarrow \quad \Delta\lambda = 430 \cdot 10^{-9}\frac{5{,}27 \cdot 10^{-27}}{4{,}62 \cdot 10^{-19}} = 4{,}9 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{m}$$

Exercici 3.5. En un oscil·lador harmònic unidimensional, la força F és proporcional al desplaçament, $F = -Cx$. L'energia potencial és donada per:

$$V = \frac{1}{2}Cx^2,$$

i, per tant, l'energia total, E, és:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx^2$$

a) Demostra, mitjançant el principi d'indeterminació de Heisenberg, que ha d'existir una energia mínima per a l'oscil·lador.

b) Troba l'energia mínima en funció de la freqüència pròpia de l'oscil·lador. En física clàssica hi hauria també una energia mínima? Quina?

c) En una molècula diatòmica, les vibracions es poden considerar oscil·lacions harmòniques amb una constant de força típica $C = 1.000\ \mathrm{J/m^2}$. Quina és l'energia més baixa de les vibracions moleculars en una molècula d'oxigen $(Z = 16)$?

Solució:

a) Per trobar la incertesa en el moment lineal, considerem que el valor mitjà del moment és zero ($\langle p_x \rangle = 0$) per simetria.

$$(\Delta p_x)^2 = \left\langle p_x^2 \right\rangle - \langle p_x \rangle^2 = \left\langle p_x^2 \right\rangle$$

De la mateixa manera, per a la incertesa en la posició, tenim el resultat següent:

$$(\Delta x)^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 = \left\langle x^2 \right\rangle$$

Amb aquestes relacions, podem escriure l'energia mitjana en funció de les incerteses i, mitjançant el principi d'indeterminació de Heisenberg, obtenir una cota inferior per a l'energia de l'oscil·lador.

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}C\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{1}{2}C\,(\Delta x)^2 \geq \frac{1}{8m}\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}C\,(\Delta x)^2$$

Perquè $\exists$ mínim per a l'energia, és necessari que la derivada s'anul·li, és a dir, $\dfrac{\partial \langle E \rangle}{\partial \Delta x} = 0$.

$$\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\Delta x}=\frac{1}{8m}\frac{\hbar^2(-2)}{(\Delta x)^3}+\frac{1}{2}C2(\Delta x)=\frac{1}{4m}\frac{-\hbar^2}{(\Delta x)^3}+C(\Delta x)=0$$

Sabem [1] que, en un oscil·lador harmònic, la freqüència pròpia és $w_0=\sqrt{\frac{C}{m}}$; aleshores:

$$\frac{1}{4m}\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^3}=C(\Delta x)\implies(\Delta x)^4=\frac{\hbar^2}{4mC}=\frac{\hbar^2}{4m^2w_0^2}\implies(\Delta x)^2=\frac{\hbar}{2mw_0}$$

Finalment, si calculem la segona derivada, el resultat és positiu.

$$\frac{\partial^2\langle E\rangle}{\partial(\Delta x)^2}=\frac{1}{4m}\frac{3\hbar^2}{(\Delta x)^4}+C>0$$

És a dir, $\exists$ mínim per a l'energia i s'assoleix quan $(\Delta x)^2=\dfrac{\hbar}{2mw_0}$.

b) Per trobar el mínim, cal imposar la relació $(\Delta x)^2=\dfrac{\hbar}{2mw_0}$ en l'expressió de l'energia.

$$E_{min}=E\left((\Delta x)^2=\frac{\hbar}{2mw_0}\right)=\frac{1}{8m}\frac{\hbar^2}{(\frac{\hbar}{2mw_0})}+\frac{1}{2}C\frac{\hbar}{2mw_0}=\frac{\hbar w_0}{4}+\frac{\hbar w_0}{4}=\frac{\hbar w_0}{2}$$

És a dir, l'oscil·lador harmònic quàntic presenta una energia mínima no nul·la. Aquest resultat és diferent del que trobem en física clàssica, ja que en aquest cas sí que pot ser nul·la ($E_{min}=0$).

c) A partir de l'expressió d'energia mínima i considerant $m\approx16m_p$, tenim:

$$E_{min}=\frac{\hbar w_0}{2}=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{16m_p}}=\frac{1{,}055\cdot10^{-34}}{2}\sqrt{\frac{1000}{16\cdot1{,}673\cdot10^{-27}}}=1{,}02\cdot10^{-20}\text{ J}$$

o també

$$E_{min}=6{,}37\cdot10^{-2}\text{ eV}$$


2
1
3

→ 4

L'equació de Schrödinger

4.1. L'equació de Schrödinger unidimensional

El comportament d'una ona-partícula es pot descriure mitjançant el concepte de funció d'ona. En particular, si ens limitem a una dimensió, la funció d'ona de l'ona-partícula no relativista amb massa no nul·la es correspon amb la solució de l'anomenada *equació de Schrödinger*.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)=i\hbar\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

L'equació de Schrödinger és l'equació d'ones que han de complir les funcions d'ona. Representa l'operador energia total de la partícula —o operador hamiltonià ($H=E_c+V$)—, que es pot deduir fàcilment en una dimensió. Per fer-ho, cal suposar que es tracta d'una funció d'ona harmònica, imposar que l'energia total és l'energia cinètica (per a una partícula clàssica) més l'energia potencial, $V(x)$, i trobar una relació entre les derivades parcials respecte de la posició i del temps [3]. És a dir, donada una ona-partícula sotmesa a un potencial que depèn de la posició, $V(x)$, el seu estat es pot caracteritzar mitjançant la funció d'ona $\psi(x,t)$ i aquesta funció ha de verificar l'equació de Schrödinger.

4.2. L'equació de Schrödinger general

Generalitzant l'expressió anterior, es pot obtenir l'equació de Schrödinger tridimensional en funció del vector $\vec{r}$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)=i\hbar\,\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

on ∇^2 és l'operador laplacià en coordenades cartesianes $\left(\nabla^2\equiv\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$.

4.3. L'equació de Schrödinger estacionària

Un cas particular de l'equació de Schrödinger és quan l'energia de l'ona-partícula és constant de valor E. En aquest cas, la funció d'ona factoritza en dues funcions d'una variable en una dimensió. Amb aquesta estructura, es pot integrar i, així, trobar la part temporal.

$$\psi(x,t) = \varphi(x) f(t) \quad \Longrightarrow \quad \psi(x,t) = \varphi(x) e^{-i\omega t}$$

Podem observar que correspon al cas d'energia constant, ja que $E = \hbar w$. Per tant, quan l'energia és constant, podem escriure l'equació de Schrödinger estacionària com:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x) = E\varphi(x)$$

La seva resolució ens dona $\varphi(x)$ i la funció d'ona total és $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$.

4.4. Interpretació de la funció d'ona

La funció d'ona complexa, $\psi(x,t)$, que és solució de l'equació de Schrödinger, no té significat físic. Però sí que en té $|\psi(x,t)|^2 = \psi(x,t)^*\psi(x,t)$, que s'interpreta com la densitat de probabilitat que la partícula es trobi en una posició i un temps determinats, sempre que es compleixi la condició de normalització que es mostra a continuació:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Aquesta condició expressa que, si tenim una sola partícula, la probabilitat total de trobar-la en algun lloc de l'espai ha de ser la unitat.

D'altra banda, des d'un punt de vista més formal, les funcions d'ona $\varphi(x)$ són, de fet, les funcions pròpies de l'operador energia, $\hat{E}$. Cada funció pròpia està associada a un valor propi determinat, E, que es correspon amb l'operador energia (que representa l'observable energia).

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Si tenim més d'una funció pròpia $\varphi(x)$ associada a un mateix valor propi, es diu que es tracta d'un estat (o nivell d'energia) degenerat. En veurem alguns exemples.

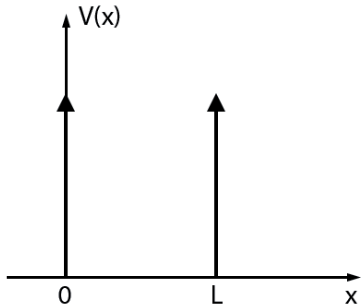
4.5. Exercicis

Exercici 4.1. La funció d'ona d'un electró té l'expressió següent:

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

a) Es pot conèixer alguna magnitud de l'electró? En cas afirmatiu, troba-la.

Suposem que la mateixa funció representa l'estat d'un electró confinat en un pou de potencial infinit de longitud L.



b) Quin valor ha de tenir la funció d'ona en $x = 0$? I en $x = L$?

c) Raona o calcula la forma de la funció $\phi(x)$.

d) Determina la diferència d'energia entre els dos primers nivells d'energia permesos.

e) Per a l'estat de menys energia, compara $|\Psi|^2$ amb $|\phi|^2$.

f) Quin significat té la condició següent?

$$\int_0^L |\Psi|^2 \, dx = 1$$

Solució:

a) Podem obtenir l'energia total de l'electró (magnitud observable) mitjançant l'operador quàntic $\hat{E}$.

$$\hat{E}\,|\Psi(x,t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\,|\Psi(x,t)\rangle$$

Com que $\Psi(x,t)$ és una funció pròpia, els possibles valors observats de l'energia són els autovalors associats a aquest operador.

$$\hat{E}\,|\Psi(x,t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\,|\phi(x)\rangle\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = i\hbar\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)|\phi(x)\rangle\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = E\,|\Psi(x,t)\rangle$$

És a dir, l'energia de l'electró és l'autovalor E.

b) La probabilitat de trobar la partícula en un punt amb energia potencial $V = \infty$ és zero. Com que l'amplitud de la funció d'ona per a un cert valor x està relacionada amb la probabilitat de trobar-hi la partícula, aleshores:

$$\phi(0) = \phi(L) = 0.$$

c) Partim de l'equació de Schrödinger estacionària (independent del temps) i considerem que en $0 \le x \le L$ el potencial és nul ($V(x) = 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V\phi(x) = E\phi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi(x) = 0$$

Les possibles solucions d'aquesta equació diferencial són:

$$\pm e^{\pm ikx}, \quad \sin(kx), \quad \cos(kx) \qquad \text{amb } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Imposem les condicions de contorn en les parets del pou $\phi(0) = 0$ i $\phi(L) = 0$ que hem trobat en l'apartat anterior:

$$\phi(0) = 0 \implies \phi(x) = A\sin(kx)$$
$$\phi(L) = 0 \implies A\sin(k_n L) = 0 \implies k_n L = n\pi, \ n \in \mathbb{Z}^+ \implies k_n = \frac{n\pi}{L} = \frac{2\pi}{\lambda_n}$$

Per tant, la forma de la funció $\phi(x)$ és:

$$\phi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \ n \in \mathbb{Z}^+$$

d) A partir de la relació de De Broglie, podem calcular l'expressió general de l'energia en funció del paràmetre n.

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$$

El primer nivell correspon a $n = 1$:

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \implies E_n = n^2 E_1 \implies E_2 = 4E_1$$

Així, la diferència entre els dos primers nivells és:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 3E_1 = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

e) Podem comparar $|\Psi|^2$ amb $|\phi|^2$ per al cas general:

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* = \phi e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \cdot \phi^* e^{i\frac{Et}{\hbar}} = \phi \cdot \phi^* = |\phi|^2$$

Hem vist que són iguals. Si particularitzem per al cas de menys energia (primer nivell):

$$\phi(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \implies |\Psi|^2 = |\phi|^2 = |A|^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

f) És la condició de normalització, que ens diu que la probabilitat de trobar l'electró a l'interior del pou és del 100 %. De fet, com que $\phi(x) = 0$ per a $x \leq 0$ i per a $x \geq L$, podem partir de la condició de normalització habitual:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\, dx = \int_0^L |\Psi|^2\, dx = 1 = 100\ \%$$

És a dir, la probabilitat de trobar la partícula en algun lloc de l'espai és la mateixa que la de trobar-la en l'interior del pou i ha de ser el 100 %, ja que tenim una i només una partícula. La condició de normalització ens permet determinar el valor de A.

Exercici 4.2. Considerem una partícula tancada en una caixa de parets rígides, és a dir, en un pou de potencial infinit.

a) Determina l'energia de l'estat fonamental $(n = 1)$ i dels dos primers estats excitats d'un neutró en una caixa unidimensional de 0,200 nm de longitud (aproximadament, el diàmetre d'una molècula de H_2).

b) Calcula la longitud d'ona de la radiació electromagnètica emesa quan el neutró fa una transició de l'estat $n = 2$ a $n = 1$ i de $n = 3$ a $n = 2$.

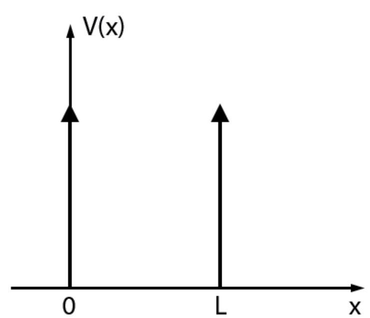
Si la longitud de la caixa ara és de 0,100 nm:

c) Troba els tres primers valors propis de l'energia.

d) Calcula la longitud d'ona de la radiació electromagnètica emesa quan el neutró fa una transició de l'estat $n = 2$ a $n = 1$ i de $n = 3$ a $n = 2$.

Solució:

a) En aquest cas podem utilitzar el model unidimensional del pou de potencial infinit:



Partim de l'equació de Schrödinger i particularitzem per a $0 \leq x \leq L$, on el potencial és nul $(V = 0)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Les solucions d'aquesta equació diferencial són:

$$\pm e^{\pm ikx}, \quad \sin(kx) \ \text{ i } \ \cos(kx), \qquad \text{amb } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Imposem les condicions de contorn en les parets del pou $\varphi(0) = 0$ i $\varphi(L) = 0$:

$$\varphi(0) = 0 \implies \varphi(x) = A\sin(kx)$$

$$\varphi(L) = 0 \implies A\sin(k_n L) = 0 \implies k_n L = n\pi,\ n \in \mathbb{Z}^+ \implies k_n = \frac{n\pi}{L} = \frac{2\pi}{\lambda_n}$$

Per tant, l'energia resultant per a cada valor n és:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \implies E_n = n^2 E_1 = n^2 \frac{(1,055 \cdot 10^{-34} \cdot \pi)^2}{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot (0,2 \cdot 10^{-9})^2}$$

$$E_1 = 0{,}82 \cdot 10^{-21}\ \text{J} \qquad E_2 = 4E_1 = 3{,}29 \cdot 10^{-21}\ \text{J} \qquad E_3 = 9E_1 = 7{,}4 \cdot 10^{-21}\ \text{J}$$

$$E_1 = 5{,}12 \cdot 10^{-3}\ \text{eV} \qquad E_2 = 2{,}05 \cdot 10^{-2}\ \text{eV} \qquad E_3 = 4{,}62 \cdot 10^{-2}\ \text{eV}$$

b) A partir de la relació de Planck entre energia i freqüència:

$$\Delta E_{a\to b} = E_a - E_b = \hbar\omega = hf = \frac{hc}{\lambda_{a\to b}} \implies \lambda_{a\to b} = \frac{hc}{\Delta E_{a\to b}}$$

Per tant, amb els valors que hem trobat en l'apartat *a*:

$$\lambda_{2\to1} = \frac{hc}{\Delta E_{2\to1}} = \frac{hc}{3E_1} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{3 \cdot 0{,}82 \cdot 10^{-21}} = 80{,}8\ \mu\text{m}$$

$$\lambda_{3\to2} = \frac{hc}{\Delta E_{3\to2}} = \frac{hc}{5E_1} = \frac{3}{5}\lambda_{2\to1} = 48{,}5\ \mu\text{m}$$

c) Amb la nova longitud, $L' = 0{,}1$ nm:

$$L' = \frac{L}{2} \implies E_1' = 4E_1 = 3{,}28 \cdot 10^{-21}\ \text{J} = 20{,}5 \cdot 10^{-3}\ \text{eV}$$

$$E_2' = 4E_1' = 16E_1 = 1{,}31 \cdot 10^{-20}\ \text{J} = 82 \cdot 10^{-3}\ \text{eV}$$

$$E_3' = 9E_1' = 36E_1 = 2{,}95 \cdot 10^{-20}\ \text{J} = 184{,}5 \cdot 10^{-3}\ \text{eV}$$

d) Les noves longituds d'ona, les podem deduir a partir dels càlculs dels apartats anteriors:

$$\lambda'_{2\to1} = \frac{hc}{\Delta E'_{2\to1}} = \frac{hc}{12E_1} = \frac{1}{4}\lambda_{2\to1} = 20{,}2\ \mu\text{m}$$

$$\lambda'_{3\to2} = \frac{hc}{\Delta E'_{3\to2}} = \frac{hc}{20E_1} = \frac{3}{20}\lambda_{2\to1} = 12{,}1\ \mu\text{m}$$

Conclusió: Es veu que, en fer el pou més estret, les diferències entre els nivells d'energia són més grans i, com que la freqüència de la radiació emesa és proporcional al salt energètic, les longituds d'ona de les radiacions emeses es redueixen. És a dir:

$$L\downarrow \implies \Delta E\uparrow \implies f\uparrow \iff \lambda\downarrow$$

Aquest resultat és general i ens dona una resposta al canvi de color dels nanoclústers d'or de mida diferent. Més concretament, en considerar agrupacions microscòpiques d'àtoms iguals (que es poden aproximar per pous infinits de potencial), el nombre d'àtoms (que es relaciona amb la longitud del pou) condiciona el color que observem, de manera que les agrupacions més petites ($L\downarrow$) tenen un color més blavós ($\lambda\downarrow$).

Exercici 4.3. Una partícula de massa m es mou en un pla XY sotmesa a un potencial d'energia $V(x,y)$.

a) Escriu l'equació de Schrödinger estacionària per a la partícula.

b) Quina és la probabilitat de trobar la partícula en una àrea Δs petita, centrada en el punt (x_0,y_0) quan la funció d'ona és $\varphi(x,y)$.

Solució:

a) Només cal que generalitzem l'expressió de l'equació de Schrödinger per a una dimensió a dues dimensions:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(x,y)+V(x,y)\varphi(x,y)=E\varphi(x,y)$$

on el símbol ∇^2 correspon a l'operador nabla al quadrat. Si ho apliquem a la funció d'ona $\varphi(x,y)$, tenim:

$$\nabla^2\varphi(x,y)=\frac{\partial^2\varphi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi(x,y)}{\partial y^2}$$

b) El mòdul al quadrat de la funció d'ona ens dona la probabilitat de trobar la partícula en un punt (x,y) determinat. Per calcular la probabilitat de trobar-la en una certa regió, hem d'integrar en la regió; per tant:

$$P(p\in\Delta s)\iint_{\Delta s}|\varphi(x,y)|^2\,ds=|\varphi(x_0,y_0)|^2\Delta s$$

Exercici 4.4. Si la funció d'ona d'una partícula de massa m confinada en una línia és

$$\Phi(x)=Ce^{-\frac{a^2}{2}x^2}$$

a) Calcula C en funció del paràmetre a.

b) Troba l'expressió de l'energia potencial a una distància x de l'origen, $V(x)$, si l'energia total de la partícula és:

$$E=\frac{h^2a^2}{8\pi^2m}$$

c) Escriu la integral que dona la probabilitat de trobar la partícula en l'interval $(4,5)$, és a dir, entre els punts $x=4$ i $x=5$.

Nota: Recorda que $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}dy = \sqrt{\pi}$.

Solució:

a) Utilitzem la condició de normalització per determinar el paràmetre C, és a dir, imposem que la probabilitat de trobar la partícula en un punt qualsevol de tot l'espai sigui del 100 %.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(x)|^2 dx = 1 \quad \Longrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} Ce^{-\frac{a^2}{2}x^2} Ce^{-\frac{a^2}{2}x^2} dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx = 1$$

Si fem el canvi de variable següent, ens queda la integral de l'enunciat:

$$ax = y \quad \Longrightarrow \quad adx = dy$$

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx = \frac{C^2}{a} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \frac{C^2}{a}\sqrt{\pi} \quad \Longrightarrow \quad C = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}, \;\; a > 0$$

b) Com que tenim la funció d'ona i l'energia total de la partícula, podem aïllar l'energia potencial de l'equació de Schrödinger estacionària:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$$

Calculem la segona derivada de la funció d'ona:

$$\frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} = -a^2xCe^{-\frac{a^2}{2}x^2} = -a^2x\Phi(x)$$

$$\frac{\partial^2\Phi(x)}{\partial x^2} = -a^2\Phi(x) + (-a^2x)\left(-a^2x\Phi(x)\right) = a^2\left(a^2x^2-1\right)\Phi(x)$$

Si substituïm l'energia i l'expressió que acabem de calcular a l'equació de Shrödinger, obtenim:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}a^2\left(a^2x^2-1\right)\Phi(x) + V(x)\Phi(x) = \frac{h^2a^2}{8\pi^2 m}\Phi(x)$$

Sabem que $2\pi\hbar = h$. A més, com que $\Phi(x) \neq 0$, podem simplificar l'equació:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}a^2\left(a^2x^2-1\right) + V(x) = \frac{\hbar^2a^2}{2m}$$

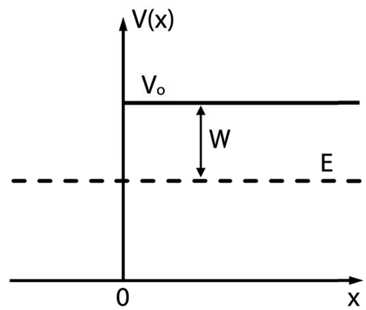
És a dir, el potencial és parabòlic:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}a^4x^2$$

c) Per trobar la probabilitat que la partícula es trobi a l'interval $I = [4,5]$, només cal integrar el mòdul al quadrat de la funció d'ona en aquesta regió:

$$P(p \in I) = \int_4^5 |\Phi(x)|^2 dx = C^2 \int_4^5 e^{-a^2x^2} dx = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_4^5 e^{-a^2x^2} dx$$

Exercici 4.5. *Densitat electrònica a l'exterior de la superfície d'un metall.* La frontera entre l'interior d'un metall i l'aire o el buit es pot modelar mitjançant un potencial esglaó com el que es mostra en la figura. L'alçada de l'esglaó, V_0, excedeix l'energia de la majoria dels electrons de la banda de conducció E. La diferència entre aquestes energies s'anomena *funció treball* (W), amb $W = V_0 - E$.



a) Quina forma té la funció d'ona a l'exterior del metall per als electrons més energètics?

b) Com és la funció que descriu la probabilitat de trobar els electrons a una distància donada de la superficie del metall?

Si la funció treball és $W = 5$ eV, aleshores:

c) Calcula la distància a partir de la qual la funció densitat de probabilitat ha disminuït a una mil·lèsima part ($e^{-7} \approx 10^{-3}$) respecte de la que hi ha a l'interior del metall.

Solució:

a) Tot i que no es demana, en primer lloc plantegem l'equació de Schrödinger estacionària a l'interior del metall.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi_{in}(x)}{\partial x^2} = E\varphi_{in}(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \varphi_{in}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_{in}(x) = 0$$

La solució d'aquesta equació és una combinació lineal d'exponencials complexes.

$$\varphi_{in}(x) = A_0 e^{ikx} + A_1 e^{-ikx}, \qquad \text{amb } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Perquè un electró es trobi a l'exterior del metall, ha de superar el potencial W de la funció treball. En aquestes condicions, l'equació de Schrödinger estacionària que ha de complir la funció d'ona és la següent:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V_0\varphi(x)=E\varphi(x) \quad\Longrightarrow\quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}-\frac{2m}{\hbar^2}W\varphi(x)=0$$

Com que $W>0$, la solució a l'exterior del metall és una exponencial real.

$$\varphi(x)=Be^{-\alpha x}, \qquad \text{amb } \alpha=\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}$$

Hem d'imposar la continuïtat de la funció d'ona i de la seva derivada a l'origen per trobar les relacions entre les constants A_0, A_1 i B.

$$\varphi_{in}(0)=\varphi(0) \quad\Longrightarrow\quad A_0+A_1=B$$

$$\varphi'_{in}(0)=\varphi'(0) \quad\Longrightarrow\quad iA_0k-iA_1k=-\alpha B$$

$b)$ El mòdul al quadrat de la funció d'ona és la probabilitat de trobar la partícula en un punt determinat:

$$p(x)=|\varphi(x)|^2=|B|^2e^{-2\alpha x}$$

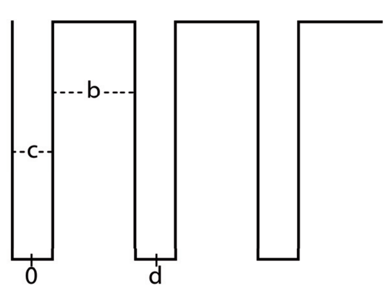
Nota: Aquesta expressió no està normalitzada. Només indica la distribució de probabilitat a una distància x de la superfície del metall.

$c)$ La relació entre la probabilitat de trobar la partícula a l'origen (superfície) respecte a la probabilitat de trobar-la a una distància d ens allibera del paràmetre B. A més, no hem de normalitzar l'expressió de l'apartat anterior, ja que en l'exercici es demana la probabilitat relativa.

$$10^{-3}\approx e^{-7}=\frac{|\varphi(d)|^2}{|\varphi(0)|^2}=\frac{|B|^2e^{-2\alpha d}}{|B|^2}=e^{-2\alpha d} \quad\Longrightarrow\quad 7=2\alpha d=2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}d$$

$$d=\frac{7\hbar}{2\sqrt{2mW}}=\frac{7\cdot 1{,}055\cdot 10^{-34}}{2\sqrt{2\cdot 9{,}109\cdot 10^{-31}\cdot 5\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}}}=0{,}3\text{ nm}$$

Exercici 4.6. Per trobar les bandes d'energia permeses per un electró en un sòlid unidimensional, podem utilitzar el model de Kronig-Penney, el qual aproxima els potencials creats pels nuclis per potencials quadrats. Si l'amplada de cada pou de potencial és c i la periodicitat és d (on $b+c=d$), tal com indica la figura:



es pot demostrar que, si $V(x+d) = V(x)$, les funcions pròpies han de ser de la forma:

$$\Psi(x) = u_k(x)e^{\pm ikx}, \text{ on } u_k(x) \text{ són periòdiques, } u_k(x) = u_k(x+d) \quad \text{(teorema de Bloch)}$$

Si el potencial és donat per:

$$\begin{array}{lll} \text{I)}\ V(x) = 0, & \text{quan} & -\dfrac{c}{2} < x < \dfrac{c}{2} \\ \text{II)}\ V(x) = V_0, & \text{quan} & \dfrac{c}{2} < x < (b + \dfrac{c}{2}) \end{array}$$

a) Considera només $0 < E < V_0$. Escriu l'equació de Schrödinger que s'haurà de verificar a cada regió, I i II. Escriu una possible funció d'ona a cada regió, definint els paràmetres habituals en funció de l'energia i de V_0.

Ara considera funcions de Bloch a cada zona (és a dir, $\Psi(x) = u_k(x)e^{\pm ikx}$).

b) Substituint en les equacions de Schrödinger, troba les equacions que han de verificar les $u_k(x)$ a cada regió.

c) Imposa les condicions de continuïtat i de periodicitat. Obtindràs un sistema de quatre equacions, que condicionaran els valors d'energia permesos. Sense resoldre el sistema d'equacions, digues molt breument quines conseqüències tindrà.

Solució:

a) A cada regió, el potencial és constant ($V(x) = V$). Per tant, l'equació de Schrödinger es pot simplificar:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \implies \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0$$

Així, a la regió I, on el potencial és nul ($V = 0$), tenim:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0 \implies \varphi_I(x) = A_0 e^{ik_1x} + A_1 e^{-ik_1x}, \qquad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A la regió II, tenim un potencial constant de valor ($V = V_0$, $V_0 > E$):

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0$$

$$\varphi_{II}(x) = Be^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}, \qquad \text{amb } \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

b) Si particularitzem per al cas de les funcions de Bloch:

$$\varphi_I(x) = u_{I_k}(x)e^{ikx} \qquad \varphi_{II}(x) = u_{II_k}(x)e^{ikx}$$

Calculem les derivades de $\varphi_I(x)$ que necessitem (les de $\varphi_{II}(x)$ són iguals):

$$\varphi_I'(x) = \frac{\partial \varphi_I(x)}{\partial x} = u_{I_k}'(x)e^{ikx} + iku_{I_k}(x)e^{ikx}$$

$$\varphi_I''(x) = \frac{\partial^2 \varphi_I(x)}{\partial x^2} = u_{I_k}''(x)e^{ikx} + i2ku_{I_k}'(x)e^{ikx} - k^2 u_{I_k}(x)e^{ikx}$$

Substituïm en l'equació de Schrödinger estacionària:

$$u_{I_k}''(x)e^{ikx} + i2ku_{I_k}'(x)e^{ikx} + (k_1^2 - k^2)u_{I_k}(x)e^{ikx} = 0$$

Les solucions d'aquesta equació són de la forma següent:

$$u_{I_k}(x) = A_0 e^{i(k_1+k)x} + A_1 e^{-i(k_1-k)x}$$

Anàlogament, en la regió II, obtenim:

$$u_{II_k}''(x) + i2ku_{II_k}'(x) - (\alpha^2 + k^2)u_{II_k}(x) = 0$$

Amb les solucions de la forma:

$$u_{II_k}(x) = Ce^{(\alpha+ik)x} + De^{-(\alpha-ik)x}$$

$c)$ Tant les funcions com les seves derivades han de ser iguals en el punt $x = \frac{c}{2}$ per tal de verificar la continuïtat. Quant a la condició de periodicitat, també aplicada a les funcions i a les derivades, cal verificar-la en dos punts amb una separació equivalent al període, d. Per exemple, en $x_1 = -\frac{c}{2}$ i $x_2 = b + \frac{c}{2}$, ja que $b + c = d = x_2 - x_1$.

$$\text{Continuïtat} \begin{cases} u_{I_k}\left(\frac{c}{2}\right) = u_{II_k}\left(\frac{c}{2}\right) \\ u_{I_k}'\left(\frac{c}{2}\right) = u_{II_k}'\left(\frac{c}{2}\right) \end{cases} \qquad \text{Periodicitat} \begin{cases} u_{I_k}\left(-\frac{c}{2}\right) = u_{II_k}\left(b + \frac{c}{2}\right) \\ u_{I_k}'\left(-\frac{c}{2}\right) = u_{II_k}'\left(b + \frac{c}{2}\right) \end{cases}$$

Les conseqüències d'aquestes condicions són les bandes d'energia permeses i les bandes d'energia prohibides per a l'electró en el sòlid unidimensional.

→ 5

Difusió

5.1. Introducció

Un procés de difusió (*scattering*) consisteix en un feix de partícules que viatgen en una direcció i es troben amb una força (i, per tant, un potencial) en una certa zona. De fet, no és un fenomen estacionari, especialment si és una sola partícula que incideix o xoca amb un obstacle o centre atractiu. Però, en un feix de partícules que viatgen de manera contínua, el procés es pot considerar estacionari. El que ens interessa saber és quina fracció del feix de partícules és reflectit (ona reflectida) i quina fracció continua viatjant en la mateixa direcció (ona transmesa). Per tal de trobar el cas estacionari —és a dir, independent del temps—, convé definir el concepte de *corrent de probabilitat*, que haurà de ser constant quan el número total de partícules es conservi, com en el cas d'un corrent elèctric estacionari en física clàssica, que dona lloc a l'equació de continuïtat (o lleis de Kirchhoff).

5.2. Corrent de probabilitat

Sigui $\psi(x,t)$ la funció d'ona associada a una ona-partícula de massa m, solució de l'equació de Schrödinger en un problema concret, es defineix el corrent de probabilitat, $J(x,t)$, com:

$$J(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} - \psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\right)$$

El corrent de probabilitat, $J(x,t)$, representa una probabilitat per unitat de volum i de temps; per tant, en una dimensió, les seves dimensions són $[J] = [T]^{-1} = s^{-1}$.

Podem observar que, si l'estat té una sola energia, $\hbar w$, la funció d'ona es pot escriure com:

$$\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-iwt}$$

i, per tant, el corrent de probabilitat queda:

$$J(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\varphi^*(x)\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x} - \varphi(x)\frac{\partial\varphi^*(x)}{\partial x}\right)$$

En el cas particular d'una partícula lliure, tenim:

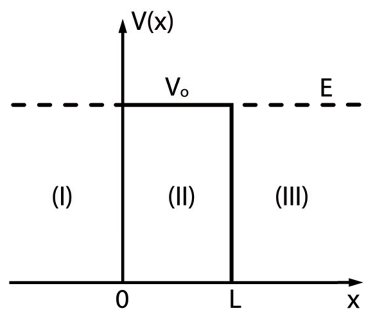
$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-wt)}$$

i, com que $p = \hbar k = mv$, el corrent resultant és:

$$J = v|A|^2$$

5.3. Exercicis

Exercici 5.1. Volem trobar la fracció de partícules transmeses a través d'una barrera de potencial rectangular en el cas particular que l'energia, E, de les partícules incidents sigui exactament igual a l'alçada de la barrera, V_0.



Si k és el nombre d'ones de la partícula incident i L és l'amplada de la barrera, aleshores:

a) Escriu l'equació de Schrödinger a cada regió, a dins i a fora de la barrera. Demostra directament que l'equació de Schrödinger es compleix si la forma de la funció d'ona a l'interior de la barrera és lineal:

$$\varphi_{II}(x) = Bx + C$$

on, en general, B i C poden ser nombres complexos, de manera que la funció d'ona $\varphi_{II}(x)$ no representa una línia recta en el sentit usual.

b) Escriu l'expressió de la funció d'ona a cada una de les tres zones i les equacions que resulten d'imposar les condicions de continuïtat.

c) Demostra que el coeficient de transmissió és:

$$T = \frac{1}{1+(\frac{kL}{2})^2}$$

d) Troba els valors límit de T (per a $L=0$ i $L=\infty$). Són raonables aquests valors?

e) Troba el valor de L/λ que condueix a $T=1/2$.

Solució:

a) i b) Com que, a cada una de les regions, el potencial de la barrera és constant:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V\varphi(x)=E\varphi(x) \implies \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\varphi(x)=0$$

A la regió I, el potencial és nul:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x)=0 \implies \varphi_I(x)=A_0e^{ikx}+A_1e^{-ikx}, \qquad \text{amb } k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

El primer terme (exponencial positiva) representa una ona que viatja en sentit positiu (d'esquerra a dreta), mentre que el segon terme (exponencial negativa) representa una ona que viatja en sentit contrari.

A la regió III, el potencial també és nul i utilitzem el fet que només hi ha ona transmesa (exponencial positiva), ja que considerar l'ona que torna representa un fenomen d'ordre superior (que negligim).

$$\frac{\partial^2\varphi_{III}(x)}{\partial x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_{III}(x)=0 \implies \varphi_{III}(x)=De^{ikx}$$

A la regió II, en canvi, tenim $E=V_0$; per tant, l'equació de Schrödinger se simplifica:

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2}=0$$

Si suposem que $\varphi_{II}(x)=Bx+C$, tenim:

$$\frac{\partial\varphi_{II}(x)}{\partial x}=B \implies \frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2}=0$$

Per tant, si la funció d'ona a l'interior de la barrera és lineal, l'equació de Schrödinger es compleix en la regió II.

A continuació, cal verificar que tant la funció d'ona φ com la seva derivada φ' en els extrems de la barrera ($x=0$ i $x=L$) són contínues:

$$\begin{aligned}
\varphi_I(0)=\varphi_{II}(0) &\implies A_0+A_1=C\\
\varphi_I'(0)=\varphi_{II}'(0) &\implies ik(A_0-A_1)=B\\
\varphi_{II}(L)=\varphi_{III}(L) &\implies BL+C=De^{ikL}\\
\varphi_{II}'(L)=\varphi_{III}'(L) &\implies B=ikDe^{ikL}
\end{aligned}$$

c) Per calcular el coeficient de transmissió, T, hem de trobar la relació següent a partir del sistema anterior (ja que l'energia potencial és igual a les regions I i III):

$$T = \left|\frac{D}{A_0}\right|^2$$

Per eliminar A_1, l'aïllem de la primera equació i el substituïm en la segona.

$$A_1 = C - A_0 \implies ikA_0 - ik(C - A_0) = B \implies B = (2A_0 - C)ik$$

Tot seguit, substituïm B en el segon parell d'equacions.

$$(2A_0 - C)ikL + C = De^{ikL}$$
$$2A_0 - C = De^{ikL}$$

A continuació, podem aïllar C de la segona expressió i substituir-lo en la primera:

$$(2A_0 - (2A_0 - De^{ikL}))ikL + (2A_0 - De^{ikL}) = De^{ikL}$$

$$\implies ikLDe^{ikL} + (2A_0 - De^{ikL}) = De^{ikL} \implies 2A_0 = (2 - ikL)De^{ikL}$$

$$\implies \frac{D}{A_0} = \frac{2e^{-i\alpha L}}{2 - ikL} = \frac{e^{-i\alpha L}}{1 - \frac{ikL}{2}}$$

Per acabar, en calculem el mòdul al quadrat per trobar el coeficient de transmissió:

$$T = \left|\frac{D}{A_0}\right|^2 = \left|\frac{e^{-i\alpha L}}{1 - \frac{ikL}{2}}\right|^2 = \frac{e^{-i\alpha L}e^{i\alpha L}}{(1 - \frac{ikL}{2})(1 + \frac{ikL}{2})} = \frac{1}{1 + (\frac{kL}{2})^2}$$

d) Calculem els límits:

$$T_0 = \lim_{L\to 0} \frac{1}{1 + (\frac{kL}{2})^2} = \lim_{L\to 0} \frac{1}{1 + 0} = 1$$

És raonable, ja que, si l'amplada és 0, no hi ha barrera i tot es transmet.

$$T_\infty = \lim_{L\to \infty} \frac{1}{1 + (\frac{kL}{2})^2} = \lim_{L\to \infty} \frac{1}{1 + \infty} = 0$$

També és raonable, ja que, si l'amplada és ∞, el feix de partícules no pot superar mai la barrera (cas del graó).

e) Partim de l'expressió de T i aïllem:

$$T = \frac{1}{2} \implies \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = 1 \implies \frac{kL}{2} = \pm 1 \implies \frac{2\pi L}{2\lambda} = \pm 1 \implies \frac{L}{\lambda} = \frac{1}{\pi}$$

Exercici 5.2. Un feix d'electrons d'energia E incideix sobre una barrera de potencial d'alçada V_0.

a) Escriu les funcions d'ona a cada una de les tres regions.

b) Imposant condicions de contorn, escriu les equacions que s'han de verificar.

Si $V_0 = 2E$:

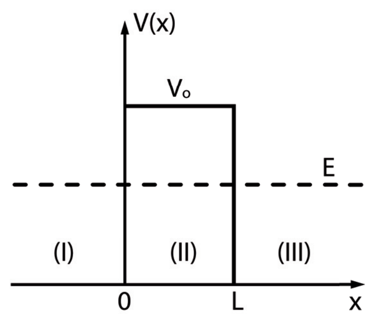
c) Troba, sense cap aproximació, el coeficient de transmissió, T, en funció de l'amplada de la barrera.

d) Considera una barrera d'amplada L gran. Com queda T?

e) Calcula el coeficient T si els electrons del feix tenen energia $E = 2$ eV i la barrera és de $V_0 = 4$ eV d'alçada i $L = 1$ nm d'amplada.

Solució:

a) La barrera de potencial divideix l'espai en tres regions.



Com que a cada regió el potencial és constant:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x) = E\varphi(x) \quad\Longrightarrow\quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\varphi(x) = 0$$

Així, a la regió I, on el potencial és nul:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0 \quad\Longrightarrow\quad \varphi_I(x) = A_0 e^{ikx} + A_1 e^{-ikx}, \qquad \text{amb } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A la regió II, suposem $E < V_0$ com es mostra en la figura:

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0 \quad\Longrightarrow$$

$$\varphi_{II}(x) = Be^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}, \qquad \text{amb } \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

Finalment, a la regió III, tornem a tenir un potencial nul i considerem que no hi ha ona reflectida (exponencial negativa).

$$\frac{\partial^2 \varphi_{III}(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_{III}(x) = 0 \implies \varphi_{III}(x) = De^{ikx}$$

b) Hem d'escriure les equacions per imposar que tant la funció d'ona φ com la seva derivada φ' en els extrems de la barrera ($x = 0$ i $x = L$) són contínues:

$$\begin{aligned}
\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) &\implies A_0 + A_1 = B + C \\
\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) &\implies ik(A_0 - A_1) = \alpha(B - C) \\
\varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) &\implies Be^{\alpha L} + Ce^{-\alpha L} = De^{ikL} \\
\varphi_{II}'(L) = \varphi_{III}'(L) &\implies \alpha Be^{\alpha L} - \alpha Ce^{-\alpha L} = ikDe^{ikL}
\end{aligned}$$

c) En el cas particular en què $V_0 = 2E$, es compleix $k = \alpha$, de manera que el sistema d'equacions de contorn se simplifica.

Per calcular el coeficient T, hem de trobar la relació següent a partir del sistema anterior, que és vàlida quan l'energia potencial a les regions I i III és igual:

$$T = \left|\frac{D}{A_0}\right|^2$$

Per eliminar A_1, l'aïllem de la primera equació i el substituïm en la segona.

$$A_1 = B + C - A_0 \implies iA_0 - i(B + C - A_0) = B - C$$

$$\implies B = \frac{2i}{1+i}A_0 + \frac{1-i}{1+i}C$$

Tot seguit, substituïm B en el segon parell d'equacions.

$$\left(\frac{2i}{1+i}A_0 + \frac{1-i}{1+i}C\right)e^{\alpha L} + Ce^{-\alpha L} = De^{i\alpha L}$$

$$\left(\frac{2i}{1+i}A_0 + \frac{1-i}{1+i}C\right)e^{\alpha L} - Ce^{-\alpha L} = iDe^{i\alpha L}$$

A continuació, cal aïllar C de les dues equacions anteriors i igualar les expressions:

$$\begin{cases} 2iA_0e^{\alpha L} + (1-i)Ce^{\alpha L} + (1+i)Ce^{-\alpha L} = (1+i)De^{i\alpha L} \\ 2iA_0e^{\alpha L} + (1-i)Ce^{\alpha L} - (1+i)Ce^{-\alpha L} = i(1+i)De^{i\alpha L} \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} \left((1-i)e^{\alpha L} + (1+i)e^{-\alpha L}\right)C = (1+i)De^{i\alpha L} - 2iA_0e^{\alpha L} \\ \left((1-i)e^{\alpha L} - (1+i)e^{-\alpha L}\right)C = i(1+i)De^{i\alpha L} - 2iA_0e^{\alpha L} \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{(1+i)De^{i\alpha L}-2iA_0e^{\alpha L}}{(1-i)e^{\alpha L}+(1+i)e^{-\alpha L}}=\frac{i(1+i)De^{i\alpha L}-2iA_0e^{\alpha L}}{(1-i)e^{\alpha L}-(1+i)e^{-\alpha L}}$$

Arreglem la igualtat anterior per deduir la relació $\frac{D}{A_0}$.

$$((1-i)(1-i)e^{\alpha L}-(1+i)(1+i)e^{-\alpha L})De^{i\alpha L}+4iA_0=0$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{D}{A_0}=\frac{4ie^{-i\alpha L}}{(1+i)(1+i)e^{-\alpha L}-(1-i)(1-i)e^{\alpha L}}=\frac{4ie^{-i\alpha L}}{\chi}$$

Per acabar, en calculem el mòdul al quadrat per trobar el coeficient de transmissió:

$$T=\left|\frac{D}{A_0}\right|^2=\frac{16}{\chi\chi^*}=\frac{16}{4(e^{2\alpha L}+e^{-2\alpha L})-(1-i)^4-(1+i)^4}$$

$$\Longrightarrow \quad T=\frac{4}{e^{2\alpha L}+e^{-2\alpha L}+2}=\frac{2}{\cosh(2\alpha L)+1}$$

d) Hem de calcular el límit quan L tendeix a infinit de l'expressió anterior.

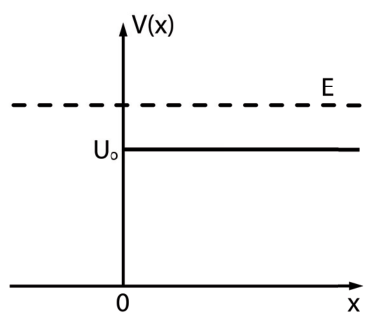
$$\hat{T}=\lim_{L\to\infty}T=\lim_{L\to\infty}\frac{4}{e^{2\alpha L}+e^{-2\alpha L}+2}=\frac{4}{\infty+0+2}=0$$

Aquest resultat és coherent, ja que, si l'amplada de la barrera es fa molt gran, esdevé un potencial esglaó del qual sabem que el coeficient de transmissió és nul.

e) Només hem de substituir els valors de l'enunciat.

$$\alpha=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=7{,}2\cdot 10^9\ \mathrm{m}^{-1} \quad \Longrightarrow \quad T=\frac{4}{e^{2\alpha L}+e^{-2\alpha L}+2}=2{,}03\cdot 10^{-6}$$

Exercici 5.3. Un feix de partícules incideix sobre un esglaó de potencial d'alçada U_0 amb energia E $(E>U_0)$.



a) Demostra que els nombres d'ona a les dues regions, k_1 i k_2, estan relacionats per:

$$\frac{k_1}{k_2} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}$$

b) Escriu l'equació de Schrödinger que s'ha de complir a cada regió i les funcions d'ona estacionàries.

c) Imposa les condicions de continuïtat i troba el factor de reflexió, R. Demostra que val:

$$R = \frac{(1-r)^2}{(1+r)^2}, \qquad \text{amb } r = \frac{k_1}{k_2}$$

d) Compara-ho amb el resultat que tindries en el cas clàssic: quant valdria R?

Si ara l'energia és $E < U_0$:

e) Escriu novament les funcions d'ona estacionàries a cada regió.

f) Imposa les condicions de continuïtat i troba el nou factor de reflexió R'.

g) Quina seria la probabilitat de trobar la partícula a una distància x_0 de l'esglaó? Compara-ho amb el cas clàssic.

Solució:

a) i *b)* A les dues regions, tenim un potencial constant; per tant, a partir de l'equació de Schrödinger estacionària:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\varphi(x) = 0$$

Definim la regió I ($x<0$), on el potencial és nul:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \varphi_I(x) = A_0 e^{ik_1x} + A_1 e^{-ik_1x}, \qquad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A la regió II ($x \geq 0$), amb $E > U_0$:

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \varphi_{II}(x) = Be^{ik_2x}, \quad \text{amb } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

Per tant, el quocient que ens demanen és:

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}$$

Nota: En la regió II, hem considerat que no hi ha ona reflectida (exponencial negativa).

c) Imposem la continuïtat de φ i de la seva derivada a l'origen ($x = 0$) per tal de determinar les relacions entre les constants A_0, A_1 i B. Això és:

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \implies A_0 + A_1 = B$$

$$\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) \implies ik_1A_0 - ik_1A_1 = ik_2B \implies k_1(A_0 - A_1) = k_2B$$

Per trobar el coeficient de reflexió, $R = \left|\frac{A_1}{A_0}\right|^2$, resolem el sistema anterior.

$$A_0 + A_1 = \frac{k_1}{k_2}(A_0 - A_1) \implies A_0\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) = -A_1\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \implies -\frac{A_1}{A_0} = \frac{1 - \frac{k_1}{k_2}}{1 + \frac{k_1}{k_2}}$$

$$\implies R = \left|\frac{A_1}{A_0}\right|^2 = \frac{\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)^2}{\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)^2} = \frac{(1-r)^2}{(1+r)^2}$$

d) En física clàssica, com que les partícules tenen prou energia per superar el potencial U_0, passen totes a la regió II ($x \geq 0$). Per tant:

$$T = 1 \implies R = 1 - T = 0$$

És un resultat clarament diferent del quàntic.

e) Si considerem $E < U_0$, tenim un canvi a la regió II. Ara la solució és una exponencial real decreixent.

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2} - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0 \implies \varphi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x}, \quad \text{amb } \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

A la regió I, el potencial continua essent nul, de manera que:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0 \implies \varphi_I(x) = A_0e^{ik_1x} + A_1e^{-ik_1x}, \quad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

f) Tornem a imposar la continuïtat de φ i de la seva derivada a l'origen ($x = 0$) per tal de determinar les relacions entre les constants A_0, A_1 i C. Això és:

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \implies A_0 + A_1 = C$$

$$\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) \implies ik_1A_0 - ik_1A_1 = -\alpha C \implies ik_1(A_1 - A_0) = \alpha C$$

Resolem el sistema per trobar el nou coeficient de reflexió, R':

$$A_0 + A_1 = \frac{ik_1}{\alpha}(A_1 - A_0) \implies A_0\left(1 + \frac{ik_1}{\alpha}\right) = A_1\left(\frac{ik_1}{\alpha} - 1\right) \implies \frac{A_1}{A_0} = \frac{ik_1 + \alpha}{ik_1 - \alpha}$$

$$\Longrightarrow \quad R' = \left|\frac{A_1}{A_0}\right|^2 = \left(\frac{A_1}{A_0}\right)\left(\frac{A_1}{A_0}\right)^* = \frac{(\alpha+ik_1)(\alpha-ik_1)}{(-\alpha+ik_1)(-\alpha-ik_1)} = 1$$

Per tant, el nou coeficient de transmissió és: $T' = 1 - R' = 0$.

g) El mòdul al quadrat de la funció d'ona ens dona la probabilitat de trobar la partícula en una certa posició:

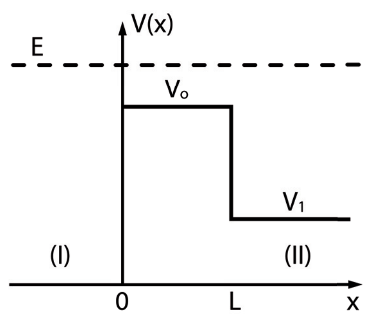
$$P(x = x_0) = \varphi_{II} * (x_0)\varphi_{II}(x_0) = Ce^{-2\alpha x_0} \neq 0.$$

En física clàssica, en canvi, tindríem:

$$P(x = x_0) = 0, \quad \forall x_0 \geq 0$$

Conclusió: En aquest darrer apartat, hem vist que la probabilitat de penetració en el cas quàntic és no nul·la (efecte túnel). Tot i això, el coeficient de transmissió, T, és nul (coincideix amb el del cas clàssic) ja que, encara que l'ona penetra la barrera, com que l'esglaó arriba a ∞, l'ona no en pot sortir per transmissió i, per aquest motiu, finalment també és reflectida.

Exercici 5.4. Una barrera de potencial unidimensional té la forma indicada.



Si $E > V_0$, compara qualitativament les magnituds següents de la zona I ($x < 0$) i de la zona II ($x \gg L$):

a) Les energies cinètiques, E_c^1 i E_c^2.

b) Les longituds d'ona, λ_1 i λ_2.

c) Els nombres d'ona, k_1 i k_2.

d) Les quantitats de moviment, p_1 i p_2.

e) Les amplituds de les funcions d'ona, A_1 i A_2.

Solució:

a) L'energia total és constant i es correspon amb la suma de les energies cinètica i potencial:

$$\text{zona I} \quad \Longrightarrow \quad E_c^1 = E - 0 = E$$

$$\text{zona II} \quad \Longrightarrow \quad E_c^2 = E - V_1 < E_c^1$$

Aprofitem una de les relacions de De Broglie per caracteritzar la resta de paràmetres:

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

b) Les longituds d'ona: $E_c^1 > E_c^2 \quad \Longleftrightarrow \quad \lambda_1 < \lambda_2$

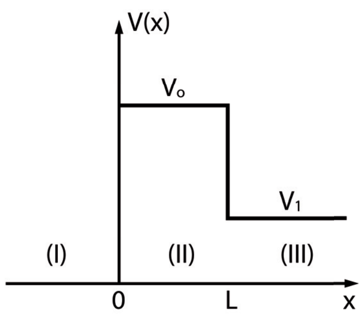
c) Els nombres d'ona: $E_c^1 > E_c^2 \quad \Longleftrightarrow \quad k_1 > k_2$

d) Les quantitats de moviment: $E_c^1 > E_c^2 \quad \Longleftrightarrow \quad p_1 > p_2$

e) La probabilitat de trobar la partícula està relacionada amb l'amplitud de la funció d'ona i és més gran quan la velocitat és menor [3]; per tant:

$$E_c^1 > E_c^2 \quad \Longrightarrow \quad v_1 > v_2 \quad \Longrightarrow \quad A_2 > A_1$$

Exercici 5.5. Tenim una barrera de potencial rectangular, d'amplada L i alçada V_0, no simètrica, tal com indica el dibuix:



Sigui una partícula que viatja d'esquerra a dreta (des de la regió I) amb una energia $E > V_1$:

a) Escriu l'equació de Schrödinger estacionària a cada una de les tres regions i les funcions d'ona pròpies de l'energia corresponents.

Si es compleix que $V_0 > E > V_1$:

b) Escriu les equacions de contorn que han de verificar les funcions d'ona, i el sistema d'equacions que han de verificar els coeficients. Troba el coeficient de transmissió, T.

c) Utilitza les funcions d'ona a les regions dels extrems (regions I i III) per trobar els corrents de probabilitat en aquestes regions, J_I i J_{III}.

d) Utilitza J_I, J_{III} que has trobat per demostrar que, en una situació estacionària, els coeficients de transmissió i de reflexió compleixen $T+R=1$, independentment de la forma del potencial a la zona II.

Solució:

a) Com que, a cada una de les regions, el potencial és constant:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V\varphi(x)=E\varphi(x) \implies \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\varphi(x)=0$$

Així, a la regió I, on el potencial és nul:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x)=0 \implies \varphi_I(x)=A_0e^{ik_1x}+A_1e^{-ik_1x}, \quad \text{amb } k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A la regió II, hem de distingir dos casos possibles:

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2}+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x)=0$$

Si $E<V_0$, aleshores:

$$\varphi_{II}(x)=Be^{\alpha x}+Ce^{-\alpha x}, \quad \text{amb } \alpha=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \quad \text{(solució real)}$$

Si $E>V_0$, aleshores:

$$\varphi_{II}(x)=B'e^{ik_2x}+C'e^{-ik_2x}, \quad \text{amb } k_2=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{(solució imaginària)}$$

Finalment, a la regió III, tenim:

$$\frac{\partial^2\varphi_{III}(x)}{\partial x^2}+\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}\varphi_{III}(x)=0$$

Com que $E>V_1$, la solució és:

$$\varphi_{III}(x)=De^{ik_3x}, \quad \text{amb } k_3=\sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}} \quad \text{(solució imaginària)}$$

Nota: A la regió III, hem considerat que, en primer ordre, no hi ha ona reflectida (exponencial negativa).

b) Si $V_0>E>V_1$, tenim:

$$\varphi_I(x)=A_0e^{ik_1x}+A_1e^{-ik_1x} \qquad \varphi_{II}(x)=Be^{\alpha x}+Ce^{-\alpha x} \qquad \varphi_{III}(x)=De^{ik_3x}$$

A continuació, imposem la continuïtat de φ i de la seva derivada en els extrems de la barrera de potencial ($x = 0$ i $x = L$) per tal de determinar les relacions entre les constants A_0, A_1, B, C i D. Això és:

$$\begin{aligned}
\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \quad &\Longrightarrow \quad A_0 + A_1 = B + C \\
\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) \quad &\Longrightarrow \quad ik_1A_0 - ik_1A_1 = \alpha B - \alpha C \\
\varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) \quad &\Longrightarrow \quad Be^{\alpha L} + Ce^{-\alpha L} = De^{ik_3L} \\
\varphi_{II}'(L) = \varphi_{III}'(L) \quad &\Longrightarrow \quad \alpha Be^{\alpha L} - \alpha Ce^{-\alpha L} = ik_3De^{ik_3L}
\end{aligned}$$

Podem calcular el coeficient de transmissió, $T = \frac{k_3}{k_1}\left|\frac{D}{A_0}\right|^2$, resolent el sistema d'equacions.

Aïllem A_1 de la primera equació i el substituïm en la segona:

$$A_1 = B + C - A_0 \quad \Longrightarrow \quad ik_1A_0 - ik_1(B + C - A_0) = \alpha B - \alpha C$$

$$\Longrightarrow \quad B = \frac{2k_1 i}{\alpha + ik_1}A_0 + \frac{\alpha - ik_1}{\alpha + ik_1}C$$

En substituir B en les dues equacions restants, el sistema es redueix a un sistema d'ordre 2 (amb un paràmetre lliure):

$$\left(\frac{2k_1 i}{\alpha + ik_1}A_0 + \frac{\alpha - ik_1}{\alpha + ik_1}C\right)e^{\alpha L} + Ce^{-\alpha L} = De^{ik_3L}$$

$$\alpha\left(\frac{2k_1 i}{\alpha + ik_1}A_0 + \frac{\alpha - ik_1}{\alpha + ik_1}C\right)e^{\alpha L} - \alpha Ce^{-\alpha L} = ik_3De^{ik_3L}$$

A continuació, aïllem C de les dues equacions anteriors i igualem les expressions:

$$\begin{cases} 2k_1iA_0e^{\alpha L} + (\alpha - ik_1)Ce^{\alpha L} + (\alpha + ik_1)Ce^{-\alpha L} = (\alpha + ik_1)De^{ik_3L} \\ 2k_1iA_0e^{\alpha L} + (\alpha - ik_1)Ce^{\alpha L} - (\alpha + ik_1)Ce^{-\alpha L} = \dfrac{ik_3}{\alpha}(\alpha + ik_1)De^{ik_3L} \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} \left((\alpha - ik_1)e^{\alpha L} + (\alpha + ik_1)e^{-\alpha L}\right)C = (\alpha + ik_1)De^{ik_3L} - 2k_1iA_0e^{\alpha L} \\ \left((\alpha - ik_1)e^{\alpha L} - (\alpha + ik_1)e^{-\alpha L}\right)C = \dfrac{ik_3}{\alpha}(\alpha + ik_1)De^{ik_3L} - 2k_1iA_0e^{\alpha L} \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{(\alpha + ik_1)De^{ik_3L} - 2k_1iA_0e^{\alpha L}}{(\alpha - ik_1)e^{\alpha L} + (\alpha + ik_1)e^{-\alpha L}} = \frac{\frac{ik_3}{\alpha}(\alpha + ik_1)De^{ik_3L} - 2k_1iA_0e^{\alpha L}}{(\alpha - ik_1)e^{\alpha L} - (\alpha + ik_1)e^{-\alpha L}}$$

D'aquesta igualtat en podem deduir la relació $\frac{D}{A_0}$.

$$((1-\frac{ik_3}{\alpha})(\alpha-ik_1)e^{\alpha L}-(1+\frac{ik_3}{\alpha})(\alpha+ik_1)e^{-\alpha L})De^{ik_3L}+4k_1iA_0=0$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{D}{A_0}=\frac{4\alpha k_1 ie^{-ik_3L}}{(\alpha+ik_3)(\alpha+ik_1)e^{-\alpha L}-(\alpha-ik_3)(\alpha-ik_1)e^{\alpha L}}=\frac{4\alpha k_1 ie^{-ik_3L}}{\chi}$$

Finalment, calculem el mòdul al quadrat per trobar el coeficient de transmissió:

$$T=\frac{k_3}{k_1}\left|\frac{D}{A_0}\right|^2=\frac{k_3}{k_1}\frac{16\alpha^2k_1^2}{\chi\chi^*}$$

$$\chi\chi^*=(\alpha^2+k_3^2)(\alpha^2+k_1^2)(e^{2\alpha L}+e^{-2\alpha L})-(\alpha-ik_3)^2(\alpha-ik_1)^2-(\alpha+ik_3)^2(\alpha+ik_1)^2$$

$$T=\frac{8\alpha^2k_1k_3}{(\alpha^2+k_3^2)(\alpha^2+k_1^2)\cosh(2\alpha L)-\alpha^4+\alpha^2(k_1^2+k_3^2)+4\alpha^2k_1k_3-k_1^2k_3^2}$$

c) Podem calcular el corrent de probabilitat a la regió I, on la funció d'ona és $\varphi_I(x)$.

$$J_I(x)=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\varphi_I^*(x)\frac{\partial\varphi_I(x)}{\partial x}-\varphi_I(x)\frac{\partial\varphi_I^*(x)}{\partial x}\right)$$

Per tant, necessitem la derivada i les funcions conjugades.

$$\varphi_I(x)=A_0e^{ik_1x}+A_1e^{-ik_1x} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial\varphi_I(x)}{\partial x}=ik_1A_0e^{ik_1x}-ik_1A_1e^{-ik_1x}$$

$$\varphi_I(x)=A_0e^{ik_1x}+A_1e^{-ik_1x} \quad \Longrightarrow \quad \varphi_I^*(x)=A_0^*e^{-ik_1x}+A_1^*e^{ik_1x}$$

$$\varphi_I^*(x)=A_0^*e^{-ik_1x}+A_1^*e^{ik_1x} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial\varphi_I^*(x)}{\partial x}=-ik_1A_0^*e^{-ik_1x}+ik_1A_1^*e^{ik_1x}$$

Si substituïm a la definició de $J_I(x)$:

$$J_I(x)=-\frac{i\hbar}{2m}((A_0^*e^{-ik_1x}+A_1^*e^{ik_1x})(ik_1A_0e^{ik_1x}-ik_1A_1e^{-ik_1x})$$

$$-(A_0e^{ik_1x}+A_1e^{-ik_1x})(-ik_1A_0^*e^{-ik_1x}+ik_1A_1^*e^{ik_1x}))$$

$$J_I(x)=\frac{k_1\hbar}{2m}((A_0^*e^{-ik_1x}A_0e^{ik_1x}+A_1^*e^{ik_1x}A_0e^{ik_1x}-A_1e^{-ik_1x}A_0^*e^{-ik_1x}-A_1e^{-ik_1x}A_1^*e^{ik_1x})$$

$$-(-A_0^*e^{-ik_1x}A_0e^{ik_1x}-A_0^*e^{-ik_1x}A_1e^{-ik_1x}+A_1^*e^{ik_1x}A_0e^{ik_1x}+A_1^*e^{ik_1x}A_1e^{-ik_1x}))$$

$$J_I(x)=\frac{k_1\hbar}{2m}(2|A_0|^2+A_0A_1^*e^{i2k_1x}-A_1A_0^*e^{-i2k_1x}-2|A_1|^2+A_0^*A_1e^{-i2k_1x}-A_1^*A_0e^{i2k_1x})$$

$$J_I(x)=J_I=\frac{k_1\hbar}{m}(|A_0|^2-|A_1|^2)$$

Fem el mateix amb $\varphi_{III}(x)$ per trobar el corrent de probabilitat a la regió III:

$$J_{III}(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\varphi_{III}^*(x)\frac{\partial\varphi_{III}(x)}{\partial x} - \varphi_{III}(x)\frac{\partial\varphi_{III}^*(x)}{\partial x}\right)$$

En calculem la derivada i les funcions conjugades, i substituïm les expressions.

$$\varphi_{III}(x) = De^{ik_3x} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial\varphi_{III}(x)}{\partial x} = ik_3De^{ik_3x}$$

$$\varphi_{III}(x) = De^{ik_3x} \quad \Longrightarrow \quad \varphi_{III}^*(x) = D^*e^{-ik_3x}$$

$$\varphi_{III}^*(x) = D^*e^{-ik_3x} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial\varphi_{III}^*(x)}{\partial x} = -ik_3D^*e^{-ik_3x}$$

$$J_{III}(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(D^*e^{-ik_3x}ik_3De^{ik_3x} + De^{ik_3x}ik_3D^*e^{-ik_3x}\right) \quad \Longrightarrow \quad J_{III} = \frac{k_3\hbar}{m}|D|^2$$

d) Els corrents de probabilitat a les regions I i III han de ser iguals en situació estacionària.

$$J_I = J_{III} \quad \Longrightarrow \quad \frac{k_1\hbar}{m}(|A_0|^2 - |A_1|^2) = \frac{k_3\hbar}{m}|D|^2 \quad \Longrightarrow \quad (|A_0|^2 - |A_1|^2) = \frac{k_3}{k_1}|D|^2$$

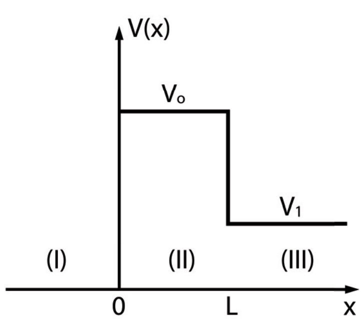
Si dividim per $|A_0|^2$ a cada membre de la igualtat:

$$1 - \left|\frac{A_1}{A_0}\right|^2 = \frac{k_3}{k_1}\left|\frac{D}{A_0}\right|^2 = T$$

Tenint en compte que $R = \left|\frac{A_1}{A_0}\right|^2$, veiem que efectivament es compleix la igualtat:

$$T + R = 1$$

Exercici 5.6. Una barrera de potencial unidimensional té la forma indicada en la figura.



a) Escriu l'equació de Schrödinger a cada regió (I, II i III).

b) Escriu la funció d'ona a cada regió per al cas $E > V_0$.

c) Escriu la funció d'ona a cada regió per al cas $V_1 < E < V_0$.

d) En aquest darrer cas, $V_1 < E < Vo$, escriu les condicions de contorn a les fronteres de la barrera $x = 0$ i $x = L$.

Per tal de simplificar el sistema d'equacions anterior, considera el cas particular en què $V_0 = 2E$ i $V_1 = 3E/4$.

e) Resol el sistema d'equacions per trobar el coeficient de transmissió, T.

f) Per a $E > V_0$, compara algunes magnituds a les regions I i III, expressant amb una desigualtat quina és la més gran:

- Les longituds d'ona, λ_1 i λ_3.
- Les energies cinètiques, E_{c1} i E_{c2}.
- Els nombres d'ona, k_1 i k_3.
- Les quantitats de moviment, p_1 i p_3.
- Les amplituds de les funcions d'ona, A_1 i A_3.

Solució:

a) A cada una de les regions, el potencial és constant:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0$$

Per tant, l'equació que s'ha de resoldre a cada regió és:

$$\frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2\varphi_{III}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}\varphi_{III}(x) = 0$$

b) En el cas $E > V_0 > V_1$, s'obtenen solucions imaginàries:

$$\varphi_I(x) = A_0 e^{ik_1 x} + A_1 e^{-ik_1 x}, \qquad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \text{(solució imaginària)}$$

$$\varphi_{II}(x) = B' e^{ik_2 x} + C' e^{-ik_2 x}, \qquad \text{amb } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \qquad \text{(solució imaginària)}$$

$$\varphi_{III}(x) = D e^{ik_3 x}, \qquad \text{amb } k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}} \qquad \text{(solució imaginària)}$$

c) En canvi, si $V_0 > E > V_1$, la funció d'ona a la regió II esdevé real:

$$\varphi_I(x) = A_0 e^{ik_1x} + A_1 e^{-ik_1x}, \quad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{(solució imaginària)}$$

$$\varphi_{II}(x) = Be^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}, \quad \text{amb } \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{(solució real)}$$

$$\varphi_{III}(x) = De^{ik_3x}, \quad \text{amb } k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}} \quad \text{(solució imaginària)}$$

d) Imposem la continuïtat de φ i de la seva derivada en els extrems de la barrera de potencial per tal de determinar les relacions entre les constants A_0, A_1, B, C i D.

$$\begin{aligned}
\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) &\implies A_0 + A_1 = B + C \\
\varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0) &\implies ik_1A_0 - ik_1A_1 = \alpha B - \alpha C \\
\varphi_{II}(L) = \varphi_{III}(L) &\implies Be^{\alpha L} + Ce^{-\alpha L} = De^{ik_3L} \\
\varphi'_{II}(L) = \varphi'_{III}(L) &\implies \alpha Be^{\alpha L} - \alpha Ce^{-\alpha L} = ik_3De^{ik_3L}
\end{aligned}$$

e) Si $V_0 = 2E$ i $V_1 = 3E/4$, tenim:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = k_1 \qquad k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(E - \frac{3E}{4})}{\hbar^2}} = \frac{\alpha}{2}$$

En l'exercici 5.5, ja s'ha vist que el coeficient de transmissió en funció de k_1, k_3 i α respon a l'expressió general següent:

$$T = \frac{8\alpha^2 k_1 k_3}{(\alpha^2 + k_3^2)(\alpha^2 + k_1^2)\cosh(2\alpha L) - \alpha^4 + \alpha^2(k_1^2 + k_3^2) + 4\alpha^2 k_1 k_3 - k_1^2 k_3^2}$$

Per tant, en aplicar les relacions entre k_1, k_3 i α, obtenim:

$$T = \frac{4\alpha^4}{(\alpha^2 + \frac{1}{4}\alpha^2)(\alpha^2 + \alpha^2)\cosh(2\alpha L) - \alpha^4 + \alpha^2(\alpha^2 + \frac{1}{4}\alpha^2) + 2\alpha^4 - \frac{1}{4}\alpha^4} \implies$$

$$T = \frac{2}{\frac{5}{4}\cosh(2\alpha L) + 1}$$

f) L'energia total, E, és constant i es correspon amb la suma de les energies cinètica i potencial. Això és:

$$\begin{aligned}
\text{Zona I} &\implies E_{c1} = E - 0 = E \\
\text{Zona II} &\implies E_{c2} = E - V_1 < E_{c1}
\end{aligned}$$

Aprofitem una de les relacions de De Broglie per caracteritzar la resta de paràmetres:

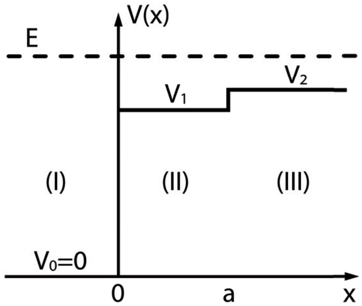
$$E_c = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

$$E_{c1} > E_{c2} \iff \lambda_1 < \lambda_2 \iff k_1 > k_2 \iff p_1 > p_2$$

La probabilitat de trobar la partícula està relacionada amb l'amplitud de la funció d'ona i és més gran quan la velocitat és menor; per tant:

$$E_{c1} > E_{c2} \implies v_1 > v_2 \implies A_2 > A_1$$

Exercici 5.7. La manera més senzilla de fer menys abrupte un potencial esglaonat ideal és tractar-lo com un doble esglaó ascendent, tal com es mostra en la figura. L'amplada del primer esglaó és a, que ens dona una dimensió característica per al conjunt considerat. Ignora, de moment, les alçades relatives de cada esglaó i considera únicament que es compleix la condició: $V_0 < V_1 < V_2$.



Utilitza k_1, k_2 i k_3 com a nombres d'ona de cada regió.

a) Suposant que $E > V_2$, escriu la funció d'ona a cada una de les tres regions.

b) Escriu les condicions de contorn a les fronteres $x = 0$ i $x = a$. Obtindràs un sistema d'equacions amb quatre incògnites.

c) Per resoldre el sistema d'equacions, imposarem el cas particular en què $k_1 = 2k_2 = 4k_3$. Usant la relació no relativista entre l'energia cinètica i la quantitat de moviment (p), demostra que les relacions entre les alçades dels esglaons són:

$$V_0 = 0 \qquad V_1 = \frac{3}{4}E \qquad V_2 = \frac{15}{16}E$$

d) Amb les condicions anteriors, les equacions de l'apartat b se simplifiquen molt. Escriu-les i resol el sistema d'equacions per trobar el coeficient de reflexió, R. Quant val el coeficient de transmissió, T?

e) Compara el resultat obtingut en l'apartat anterior amb el que s'obtindria en el cas d'un sol esglaó, és a dir, si $a = 0$:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

f) Troba el coeficient de reflexió del doble esglaó per als tres casos particulars següents:

$$a = \frac{\lambda}{4}, \frac{\lambda}{2}, \lambda \qquad \text{on } \lambda = \frac{2\pi}{k_1}$$

Solució:

a) A cada regió, el potencial és constant i l'equació de Schrödinger se simplifica:

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0$$

Per tant, l'equació que s'ha de resoldre per a cada regió és:

$$x < 0,\ \ V = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0$$

$$\varphi_I''(x) + k_1^2 \varphi_I(x) = 0, \qquad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$0 < x < a,\ \ V = V_1 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \varphi_{II}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0$$

$$\varphi_{II}''(x) + k_2^2 \varphi_{II}(x) = 0, \qquad \text{amb } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}}$$

$$a < x,\ \ V = V_2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \varphi_{III}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}\varphi_{III}(x) = 0$$

$$\varphi_{III}'''(x) + k_3^2 \varphi_{III}(x) = 0, \qquad \text{amb } k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}}$$

Les funcions d'ona són:

$$\varphi_I(x) = A_0 e^{ik_1 x} + A_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_{II}(x) = B e^{ik_2 x} + C e^{-ik_2 x}$$

$$\varphi_{III}(x) = D e^{ik_3 x}$$

b) Imposem la continuïtat de φ i de la seva derivada en els punts $x = 0$ i $x = a$.

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \quad \Longrightarrow \quad A_0 + A_1 = B + C$$
$$\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) \quad \Longrightarrow \quad k_1(A_0 - A_1) = k_2(B - C)$$

$$\varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a) \implies Be^{ik_2a} + Ce^{-ik_2a} = De^{ik_3a}$$
$$\varphi'_{II}(a) = \varphi'_{III}(a) \implies k_2(Be^{ik_2a} - Ce^{-ik_2a}) = k_3De^{ik_3a}$$

c) Si $k_1 = 2k_2 = 4k_3$, aleshores s'obté la parella d'equacions següent:

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = 2\sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}} = 4\sqrt{\frac{2m(E-V_2)}{\hbar^2}}$$

Ho elevem al quadrat i en simplifiquem el resultat.

$$2mE = 4 \cdot 2m(E-V_1) \implies E = 4(E-V_1)) \implies V_1 = \frac{3}{4}E$$
$$2mE = 16 \cdot 2m(E-V_2) \implies E = 16(E-V_2)) \implies V_2 = \frac{15}{16}E$$

d) Si imposem $k_1 = 2k_2 = 4k_3$, el sistema de l'apartat *b* es redueix a:

$$A_0 + A_1 = B + C \tag{1.7}$$
$$2(A_0 - A_1) = B - C \tag{1.8}$$
$$Be^{i\frac{k_1}{2}a} + Ce^{-i\frac{k_1}{2}a} = De^{i\frac{k_1}{4}a} \tag{1.9}$$
$$2(Be^{i\frac{k_1}{2}a} - Ce^{-i\frac{k_1}{2}a}) = De^{i\frac{k_1}{4}a} \tag{1.10}$$

A partir de les dues primeres equacions, s'obtenen les equacions següents:

$$(1.7) + (1.8) \implies 3A_0 - A_1 = 2B \tag{1.11}$$
$$(1.7) - (1.8) \implies 3A_1 - A_0 = 2C \tag{1.12}$$

A continuació, igualem les expressions de l'esquerra de les equacions (1.9) i (1.10).

$$Be^{i\frac{k_1}{2}a} + Ce^{-i\frac{k_1}{2}a} = 2(Be^{i\frac{k_1}{2}a} - Ce^{-i\frac{k_1}{2}a}) \implies Be^{ik_1a} = 3C \tag{1.13}$$

Seguidament, substituïm les constants B i C de l'equació (1.13) mitjançant les expressions corresponents a les equacions (1.11) i (1.12) per tal d'obtenir una equació que només depèn dels paràmetres A_0 i A_1.

$$(3A_0 - A_1)e^{ik_1a} = 3(3A_1 - A_0) \implies 3(1+e^{ik_1a})A_0 = (9+e^{ik_1a})A_1 \tag{1.14}$$

Finalment, calculem els coeficients de reflexió, R, i transmissió, T:

$$R = \left|\frac{A_1}{A_0}\right|^2 = 9\left|\frac{(1+e^{ik_1a})}{(9+e^{ik_1a})}\right|^2 = 36\frac{\cos^2(\frac{k_1}{2}a)}{|(9+e^{ik_1a})|^2}$$

$$T = 1 - R$$

e) Amb $a = 0$, el coeficient de reflexió és:

$$R|_{a=0} = 36\frac{\cos^2(0)}{|(9+e^0)|^2} = \frac{36}{100} = 36\ \%$$

En el cas d'un únic esglaó ($a = 0$), només tenim les regions I (k_1) i III (k_3); per tant, imposem la relació $k_1 = 4k_3$ en l'expressió del coeficient de reflexió d'un sol esglaó (consulta l'exercici 5.3).

$$R = \frac{(k_1-k_3)^2}{(k_1+k_3)^2} = \frac{(4k_3-k_3)^2}{(4k_3+k_3)^2} = \frac{(3k_3)^2}{(5k_3)^2} = \frac{9}{25} = 36\ \%$$

És a dir, n'obtenim el mateix resultat.

f) En substituir els valors, es pot veure que el coeficient de reflexió, R, està clarament afectat per la longitud del primer esglaó (fins i tot, es pot anul·lar).

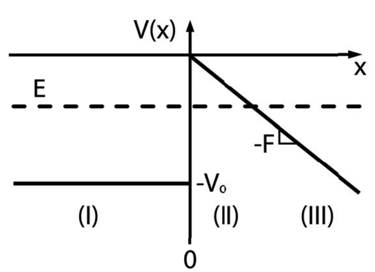
$$R|_{a=\frac{\lambda}{4}} = 36\frac{\cos^2(\frac{\pi}{4})}{\left|(9+e^{\frac{\pi}{2}i})\right|^2} = 36\frac{(\frac{\sqrt{2}}{2})^2}{|(9+i)|^2} = \frac{18}{82} = 21{,}95\ \%$$

$$R|_{a=\frac{\lambda}{2}} = 36\frac{\cos^2(\frac{\pi}{2})}{|(9+e^{\pi i})|^2} = 36\frac{0}{|(9-1)|^2} = 0\ \%$$

$$R|_{a=\lambda} = 36\frac{\cos^2(\pi)}{|(9+e^{2\pi i})|^2} = 36\frac{1}{|(9+1)|^2} = \frac{36}{100} = 36\ \%$$

Observació: Per al cas $a = \frac{\lambda}{2}$, hi ha una transmissió total, $T = 1$ i $R = 0$. Es tracta d'un resultat equivalent i utilitzat en òptica quan s'interposa una làmina de gruix $\frac{\lambda}{2}$ en el camí òptic.

Exercici 5.8. *Emissió per efecte de camp*. Els electrons de conducció d'un metall poden escapar-se fàcilment quan aquest és sotmès a un camp elèctric, F, que els accelera cap a l'exterior. Si tenim en compte que en $x < 0$ hi ha el metall, que en $x > 0$ hi ha el buit i que el camp elèctric, F, és uniforme, aleshores el potencial (i també l'energia potencial en eV) vist per un electró d'energia $-E$ es pot representar com es mostra a continuació.



Com que no és un pou quadrat, l'amplada del «pou» és determinada pels punts de retorn que tindríem en física clàssica, $x = 0$ i $x = x_0 = |E|/F$ (si l'energia E és en eV).

a) Escriu l'equació de Schrödinger que ha de verificar la funció d'ona a cada regió.

b) Escriu la funció d'ona a cada regió i les equacions de continuïtat que s'han de complir a les fronteres en funció de V_0, E i F.

Per descriure la penetrabilitat (o coeficient de transmissió) en el cas d'una barrera no rectangular, podem considerar que tenim una successió de barreres rectangulars d'amplada dx i utilitzar el resultat aproximat trobat per al cas de la barrera rectangular, que és:

$$T(E) \approx e^{-2\alpha L}, \tag{1.15}$$

on ara tindríem: $\alpha L = \displaystyle\int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar}\, dx.$

Amb aquesta aproximació, el coeficient de transmissió dels electrons, T, a través de la superfície del metall sota l'acció del camp elèctric és donat aproximadament per:

$$T(E) \approx e^{\left[-2\int_0^{x_0} \frac{\sqrt{2m(|E|-Fx)}}{\hbar}\, dx\right]}.$$

c) Troba T a partir de l'expressió anterior.

d) Si la funció treball del metall és $W = 4$ eV (en aquest cas, $W = |E|$), troba T per a un camp elèctric de 10^9 V/m. Quant val x_0?

e) Quin factor de transmissió hi hauria en el mateix metall per a una barrera de potencial quadrada d'amplada x_0?

Nota: Amb les aproximacions habituals (és a dir, $\alpha x_0 >> 1$) pots utilitzar (1.15).

Solució:

a) Com que el camp elèctric és F en la direcció de x positiu, el potencial és donat per l'expressió següent:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x \leq 0 \\ -Fx, & x > 0 \end{cases}$$

En la primera regió ($x \leq 0$), el potencial és constant, $V = -V_0$. A més, l'energia total també és negativa, $E = -|E|$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad\Longrightarrow\quad \frac{\partial^2\varphi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(-|E|+V_0)}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0$$

$$\varphi_I''(x) + k_1^2\varphi_I(x) = 0, \qquad \text{amb } k_1 = \sqrt{\frac{2m(-|E|+V_0)}{\hbar^2}}$$

En les regions II i III ($x > 0$), el potencial és lineal:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(-|E|+Fx)}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Com que en la regió II es compleix $|E| > Fx$, s'obtenen solucions reals.

$$|E| > Fx \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi_{II}(x)}{\partial x^2} - \frac{2m(|E|-Fx)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0$$

$$\varphi''_{II}(x) - \alpha^2\varphi_{II}(x) = 0, \qquad \text{amb } \alpha = \sqrt{\frac{2m(|E|-Fx)}{\hbar^2}}$$

Per contra, com que en la regió III es compleix $|E| < Fx$, en aquest cas s'obtenen solucions imaginàries.

$$|E| < Fx \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi_{III}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(Fx-|E|)}{\hbar^2}\varphi_{III}(x) = 0$$

$$\varphi''_{III}(x) + k_3^2\varphi_{III}(x) = 0, \qquad \text{amb } k_3 = \sqrt{\frac{2m(Fx-|E|)}{\hbar^2}}$$

b) Les funcions d'ona a cada regió són, doncs:

$$\varphi_I(x) = A_0e^{ik_1x} + A_1e^{-ik_1x}$$

$$\varphi_{II}(x) = Be^{-\alpha x} + Ce^{\alpha x}$$

$$\varphi_{III}(x) = De^{ik_3x}$$

Imposant la continuïtat de φ i de la seva derivada en els punts $x = 0$ i $x = x_0$, s'obtenen les quatre equacions següents:

$$\begin{aligned}
\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \quad &\Longrightarrow \quad A_0 + A_1 = B + C\\
\varphi'_I(0) = \varphi'_{II}(0) \quad &\Longrightarrow \quad ik_1(A_0 - A_1) = -\alpha\alpha'(B - C)\\
\varphi_{II}(x_0) = \varphi_{III}(x_0) \quad &\Longrightarrow \quad Be^{-\alpha x_0} + Ce^{\alpha x_0} = De^{ik_3x_0}\\
\varphi'_{II}(x_0) = \varphi'_{III}(x_0) \quad &\Longrightarrow \quad \alpha\alpha'(Ce^{\alpha x_0} - Be^{-\alpha x_0}) = ik_3k'_3De^{ik_3x_0}
\end{aligned}$$

Cal recordar que tant α com k_3 depenen de x.

c) Partim de l'expressió donada per calcular el coeficient de transmissió.

$$\alpha L = \int_{x_1}^{x_2}\frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar}\,dx$$

$$T(E) = e^{\left[-2\int_0^{x_0} \frac{\sqrt{2m(|E|-Fx)}}{\hbar}\,dx\right]} = e^{\frac{-2\sqrt{2m}}{\hbar}I}$$

on I correspon al resultat de la integral següent:

$$I = \int_0^{x_0} \sqrt{(|E|-Fx)}\,dx$$

Aplicant el canvi $y = |E| - Fx$, queda:

$$y = |E| - Fx \implies dy = -F\,dx$$

$$I = -\int_{|E|}^{0} \frac{\sqrt{y}}{F}\,dy = -\frac{1}{F}\left[\frac{2}{3}\sqrt{y^3}\right]_{|E|}^{0} = \frac{2}{3F}\left[\sqrt{y^3}\right]_0^{|E|} = \frac{2}{3F}\left[\sqrt{|E|^3} - 0\right] = \frac{2\sqrt{E^3}}{3F}$$

És a dir, el coeficient de transmissió és:

$$T(E) = e^{\frac{-2\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{2\sqrt{E^3}}{3F}} = e^{\frac{-4\sqrt{2mE^3}}{3F\hbar}}$$

d) Amb els valors de l'enunciat, el coeficient de transmissió és:

$$T(E) = e^{\frac{-4\sqrt{2mE^3}}{3F\hbar}} = e^{\frac{-4\sqrt{2\cdot 9{,}109\cdot 10^{-31}(4\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19})^3}}{3\cdot 10^9\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}\cdot 1{,}055\cdot 10^{-34}}} = e^{-54{,}6} =$$
$$= 1{,}9\cdot 10^{-24}$$

D'altra banda, el segon punt de retorn és:

$$x_0 = \frac{|E|}{F} = \frac{4}{10^9} = 4 \text{ nm}$$

e) Per a la comparació amb el cas de la barrera quadrada, utilitzem el valor $L = x_0$ com a amplada de la barrera i el valor $|E| = 4$ eV com a alçada.

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2\cdot 9{,}109\cdot 10^{-31}\cdot 4\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}}{(1{,}055\cdot 10^{-34})^2}} = 1{,}024\cdot 10^{10}\ \text{m}^{-1}$$

$$\implies T_\square \approx e^{-2\alpha x_0} = e^{-2\cdot 1{,}024\cdot 10^{10}\cdot 4\cdot 10^{-9}} = e^{-81{,}93} = 2\cdot 10^{-36} \ll T$$

Exercici 5.9. Volem trobar el coeficient de transmissió (o penetrabilitat), T, d'una partícula incident d'esquerra a dreta en una barrera de potencial triangular, tal que:

$$\begin{cases} V(x) = 0, & \text{per } |x| > a, \\ V(0) = V_0, \\ V(-a) = V(a) = 0 \end{cases}$$

Si l'energia de la partícula és $E < V_0$:

a) Comprova que l'energia potencial és donada per la funció:

$$V(x) = \left(1 + \frac{x}{a}\right) V_0, \quad \text{per } -a < x < 0$$

$$V(x) = \left(1 - \frac{x}{a}\right) V_0, \quad \text{per } 0 < x < a$$

b) Escriu l'equació de Schrödinger estacionària que s'ha de verificar a cada regió:

regió I) $x < -a$; regió II) $-a < x < 0$

regió III) $0 < x < a$; regió IV) $x > a$

Nota: Utilitza les definicions: $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ i $\gamma^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$.

c) Escriu les funcions d'ona a les regions I i IV. Troba els corrents de probabilitat, J_I i J_{IV}, en aquestes regions.

d) Utilitza els J_I i J_{IV} que has trobat per demostrar que, en una situació estacionària, els coeficients de transmissió, T, i de reflexió, R, verifiquen $T + R = 1$, independentment del que passi a les zones II i III.

e) A les zones II i III, es pot fer un canvi de variables per simplificar notablement les equacions de Schrödinger, que queden:

$$\text{II)} \qquad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} - \zeta \varphi = 0 \qquad (*)$$

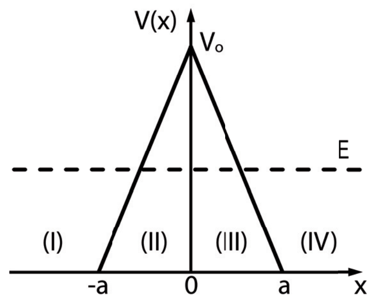
$$\text{III)} \qquad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} - \eta \varphi = 0 \qquad (**)$$

Les seves solucions són conegudes: les funcions d'Airy. Troba el canvi de variables que cal fer en cada cas, $\zeta(x)$ i $\eta(x)$, i demostra que l'equació de Schrödinger ara queda com $(*)$ i $(**)$, respectivament.

f) Escriu les equacions de contorn que han de verificar les funcions d'ona φ.

Solució:

a) Amb les dades de l'enunciat, podem dibuixar la gràfica del potencial:



Les expressions que tenim a cada tram són rectes (equacions lineals en una variable); per tant, si es compleixen en dos punts, hem acabat.

A la regió II, tenim: $V(-a) = 0$, $V(0) = V_0$

$$V(x) = \left(1 + \frac{x}{a}\right) V_0 \quad \Longrightarrow \quad V(0) = V_0$$
$$V(-a) = (1-1)V_0 = 0$$

A la regió III, tenim: $V(0) = V_0$, $V(a) = 0$

$$V(x) = \left(1 - \frac{x}{a}\right) V_0 \quad \Longrightarrow \quad V(0) = V_0$$
$$V(a) = (1-1)V_0 = 0$$

També es pot veure fàcilment observant la figura que els pendents de les rectes són $\pm\frac{V_0}{a}$.

b) Plantegem l'equació de Schrödinger, que s'ha de complir a les quatre regions:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x) = 0$$

A les regions I i IV, on el potencial és nul, tenim:

$$\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0$$

Si utilitzem la definició de k que ens donen i una notació més compacta per a les derivades:

$$\varphi_I''(x) + k^2\varphi_I(x) = 0 \qquad \varphi_{IV}''(x) + k^2\varphi_{IV}(x) = 0$$

A les regions II i III, on el potencial val $V(x) = \left(1 \pm \frac{x}{a}\right)V_0$, tenim:

$$\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\left(\left(V_0 \pm \frac{x}{a}V_0\right) - E\right)\varphi(x) = 0$$

Per tant, amb les definicions (de k i γ) i el canvi de notació:

$$\varphi''_{II}(x)+\left((k^2-\gamma^2)-\gamma^2\frac{x}{a}\right)\varphi_{II}(x)=0 \qquad \varphi''_{III}(x)+\left((k^2-\gamma^2)+\gamma^2\frac{x}{a}\right)\varphi_{III}(x)=0$$

c) La funció d'ona a la regió I és:

$$\varphi_I(x)=A_0e^{ikx}+A_1e^{-ikx}$$

Calculem la conjugada i les derivades, i substituïm a la definició del corrent de probabilitat:

$$J_I(x)=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\varphi_I^*(x)\frac{\partial\varphi_I(x)}{\partial x}-\varphi_I(x)\frac{\partial\varphi_I^*(x)}{\partial x}\right)\implies J_I(x)=J_I=\frac{k\hbar}{m}(|A_0|^2-|A_1|^2)$$

A la regió IV, només tenim l'exponencial positiva, ja que no hi ha cap ona reflectida:

$$\varphi_{IV}(x)=De^{ikx}\implies J_{IV}(x)=J_{IV}=\frac{k\hbar}{m}|D|^2$$

d) En una situació estacionària, imposem que els corrents de probabilitat a les regions I i IV siguin iguals:

$$J_I=J_{IV}\implies\frac{k\hbar}{m}(|A_0|^2-|A_1|^2)=\frac{k\hbar}{m}|D|^2\implies 1-\frac{|A_1|^2}{|A_0|^2}=\frac{|D|^2}{|A_0|^2}$$

Els coeficients de reflexió i transmissió són $R=\frac{|A_1|^2}{|A_0|^2}$ i $T=\frac{|D|^2}{|A_0|^2}$, respectivament. Així:

$$1-\frac{|A_1|^2}{|A_0|^2}=\frac{|D|^2}{|A_0|^2}\iff 1-R=T\iff 1=R+T$$

e) Plantegem els canvis de variables següents:

$$\zeta(x)=C_1\left(\gamma^2-k^2+\gamma^2\frac{x}{a}\right)\qquad \eta(x)=C_2\left(\gamma^2-k^2-\gamma^2\frac{x}{a}\right)$$

on C_1 i C_2 són constants que hem de determinar. A continuació, calculem els diferencials en cada cas a partir de la regla de la cadena:

$$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial\zeta}\frac{\partial\zeta}{\partial x}=C_1\frac{\gamma^2}{a}\frac{\partial}{\partial\zeta}\qquad \frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x}=-C_2\frac{\gamma^2}{a}\frac{\partial}{\partial\eta}$$

Com que els canvis de variables són lineals, tindrem:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}=\left(C_1\frac{\gamma^2}{a}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2}=\left(C_2\frac{\gamma^2}{a}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}$$

Si substituïm a les equacions de l'apartat *b)*:

$$\varphi''_{II}(\zeta)\left(C_1\frac{\gamma^2}{a}\right)^2-\frac{\zeta}{C_1}\varphi_{II}(\zeta)=0 \qquad \varphi''_{III}(\eta)\left(C_2\frac{\gamma^2}{a}\right)^2-\frac{\eta}{C_2}\varphi_{III}(\eta)=0$$

Multipliquem les equacions per C_1 i C_2, respectivament, i en calculem el valor imposant que el coeficient se simplifiqui per tal d'obtenir les equacions de la forma $(*)$ i $(**)$:

$$\varphi''_{II}(\zeta)(C_1)^3\left(\frac{\gamma^2}{a}\right)^2-\zeta\varphi_{II}(\zeta)=0 \qquad \varphi''_{III}(\eta)(C_2)^3\left(\frac{\gamma^2}{a}\right)^2-\eta\varphi_{III}(\eta)=0$$

$$(C_1)^3\left(\frac{\gamma^2}{a}\right)^2=1,\quad (C_2)^3\left(\frac{\gamma^2}{a}\right)^2=1 \quad\Longrightarrow\quad C_1=C_2=\left(\frac{a}{\gamma^2}\right)^{2/3}$$

Per tant, els canvis de variables per obtenir les funcions d'Airy són:

$$\zeta(x)=\left(\frac{a}{\gamma^2}\right)^{2/3}\left(\gamma^2-k^2+\gamma^2\frac{x}{a}\right) \qquad \eta(x)=\left(\frac{a}{\gamma^2}\right)^{2/3}\left(\gamma^2-k^2-\gamma^2\frac{x}{a}\right)$$

f) Hem de garantir la continuïtat de la funció d'ona i de la seva derivada a les fronteres de les regions. Això dona lloc a les sis equacions de contorn següents:

$$\begin{aligned} \varphi_I(-a)&=\varphi_{II}(-a) \qquad & \varphi'_I(-a)&=\varphi'_{II}(-a)\\ \varphi_{II}(0)&=\varphi_{III}(0) & \varphi'_{II}(0)&=\varphi'_{III}(0)\\ \varphi_{III}(a)&=\varphi_{IV}(a) & \varphi'_{III}(a)&=\varphi'_{IV}(a) \end{aligned}$$

2 1 3

→ 6

L'oscil·lador harmònic

6.1. L'oscil·lador harmònic clàssic

En física clàssica veiem que, quan la força i el desplaçament són proporcionals, el moviment és oscil·latori harmònic [1].

$$F = -Kx \qquad\qquad \text{(llei de Hooke)}$$

En un sistema massa-molla, x és el desplaçament respecte de la posició d'equilibri i K és la constant de la molla. És un exemple de "resposta lineal" entre causa (F) i efecte (x).

Es pot demostrar fàcilment que l'energia potencial, $V(x)$, és:

$$V(x) = -\int F(x)dx = \frac{1}{2}Kx^2 \qquad\qquad \text{si } V(0) = 0$$

També es pot deduir la freqüència pròpia, w_0, en funció de la massa, m [1].

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}$$

6.2. L'oscil·lador harmònic quàntic

En física quàntica podem resoldre l'equació de Schrödinger corresponent utilitzant l'energia potencial, $V(x)$, i podem trobar els valors propis, E_n, i les funcions pròpies, $\varphi_n(x)$, de l'energia [3, 4].

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega_0, \qquad n \in \mathbb{N}$$

$$\varphi_0(x) = A_0 e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \qquad \varphi_1(x) = A_1 \frac{x}{a} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \quad \dots$$

En aquest cas, els valors propis de l'energia són equidistants.

Tal com ja vam veure en aplicar el principi d'indeterminació de Heisenberg, en física quàntica no podem tenir un oscil·lador aturat en el seu punt d'equilibri, ja que l'oscilador ha de tenir una energia mínima, E_0.

Les molècules diatòmiques es comporten com un oscil·lador harmònic. Sovint, un àtom enllaçat (amb un altre o amb molts altres) es considera, en una primera aproximació, un sistema massa-molla i, per això, té una freqüència pròpia, w_0, que podem trobar experimentalment [3].

6.3. Exercicis

Exercici 6.1. Per a un oscil·lador harmònic simple (OHS):

a) Escriu l'equació de Schrödinger per a les funcions d'ona estacionàries de l'OHS. Cal recordar que l'energia potencial de l'OHS és $U(x) = \frac{1}{2}Kx^2$ i que la freqüència angular pròpia, ω, verifica: $m\omega^2 = K$, on K és la constant de la molla i m és la massa de l'oscil·lador.

b) Demostra que la funció $\phi_0(x) = A_0 e^{-ax^2}$ n'és solució. Té algun zero? Troba el valor propi de l'energia corresponent, E_0, en funció de la freqüència pròpia.

c) Demostra que la funció $\phi_1(x) = A_1 x e^{-ax^2}$ és també solució (d'energia superior a l'anterior) i troba'n el valor propi associat, E_1. Té algun zero? Quina és la diferència d'energies entre els dos valors propis calculats?

Solució:

a) Només hem d'escriure l'equació de Schrödinger i particularitzar-la per al potencial de l'OHS:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + U(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\varphi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \left(\frac{2mE - m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right)\varphi(x) = 0$$

b) Calculem la segona derivada de $\phi_0(x)$ i la substituïm a l'equació de l'apartat *a*:

$$\phi_0(x) = A_0 e^{-ax^2}$$

$$\phi_0(x)' = \frac{\partial\phi_0(x)}{\partial x} = A_0(-2ax)e^{-ax^2}$$

$$\phi_0(x)'' = \frac{\partial^2\phi_0(x)}{\partial x^2} = A_0(-2a)e^{-ax^2} + A_0(-2ax)^2 e^{-ax^2} = 2a(2ax^2 - 1)\phi_0(x)$$

$$4a^2x^2\phi_0(x) - 2a\phi_0(x) + \left(\frac{2mE_0}{\hbar^2}\right)\phi_0(x) - \left(\frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right)\phi_0(x) = 0$$

Per tal que es compleixi per a tot valor de x, s'han de cancel·lar els termes en x^2 i els termes independents. D'aquesta manera, obtenim dues equacions:

$$4a^2x^2 = \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2} \implies a = \frac{m\omega}{2\hbar} \qquad \frac{2mE_0}{\hbar^2} = 2a \implies E_0 = \frac{\hbar^2 a}{m} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Per tant, $\phi_0(x)$ és solució de l'equació si $E = E_0$ o, equivalentment, $\phi_0(x)$ és una funció pròpia del valor propi E_0.

La funció $\phi_0(x)$ només s'anul·la quan $x \to \pm\infty$.

c) Com en l'apartat anterior, calculem la segona derivada de $\phi_1(x)$ i la substituïm a l'equació de l'apartat *a*):

$$\phi_1(x) = A_1 x e^{-ax^2}$$

$$\phi_1(x)' = \frac{\partial \phi_1(x)}{\partial x} = A_1 e^{-ax^2} - 2ax^2 A_1 e^{-ax^2}$$

$$\phi_1(x)'' = \frac{\partial^2 \phi_1(x)}{\partial x^2} = -2axA_1e^{-ax^2} - 4axA_1e^{-ax^2} + 4a^2x^3A_1e^{-ax^2} = (4a^2x^2 - 6a)\phi_1(x)$$

$$4a^2x^2\phi_1(x) - 6a\phi_1(x) + \left(\frac{2mE_1}{\hbar^2}\right)\phi_1(x) - \left(\frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right)\phi_1(x) = 0$$

Les noves equacions són:

$$4a^2x^2 = \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2} \implies a = \frac{m\omega}{2\hbar} \qquad \frac{2mE_1}{\hbar^2} = 6a \implies E_1 = \frac{3\hbar^2 a}{m} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

Per tant, $\phi_1(x)$ és una funció pròpia del valor propi E_1 i la diferència entre els dos valors propis calculats és:

$$E_1 - E_0 = \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \hbar\omega$$

La funció $\phi_1(x)$ s'anul·la en $x = 0$ i $\phi_1(0) = 0$.

Conclusió: Si continuem l'exercici amb els següents valors propis de l'energia, arribem a aquesta expressió general:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \;\; n \in \mathbb{N}$$

A més, si calculem la diferència entre dos nivells consecutius, obtenim sempre $\hbar\omega$. És a dir, en aquest problema, els valors propis de l'energia són equidistants.

Exercici 6.2. En un projecte de recerca, es demana una subvenció per observar visualment, amb un microscopi, el comportament quàntic d'un petit oscil·lador harmònic. Segons el projecte, l'oscil·lador consisteix en un objecte de 10^{-4} cm de diàmetre i una massa de 10^{-12} g, que, col·locat a l'extrem d'una fibra prima, vibra a una freqüència de 1.000 Hz i amb una amplitud màxima de 10^{-3} cm.

a) Segons la física quàntica aplicada a l'oscil·lador harmònic simple, quin és el nombre quàntic aproximat de l'oscil·lador descrit?

b) Quina seria la seva energia (en eV), si es trobés a l'estat d'energia més baixa?

c) Quina seria l'amplitud de vibració clàssica, si es trobés a l'estat d'energia més baixa? Compara aquesta amplitud amb la longitud d'ona de la llum visible, aproximadament 5.000 Å, que és amb la que s'hauria d'observar. Segons això, seria factible l'experiment proposat en el projecte?

Solució:

a) L'expressió general dels valors propis de l'energia de l'oscil·lador és:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n \in \mathbb{N}$$

A més, sabem que l'energia de l'oscil·lador depèn de l'amplitud màxima, A, al quadrat:

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

Per tant, a partir de les dades de l'enunciat podem deduir-ne el nombre quàntic associat:

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \implies \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{4\pi^2}{2h}m f A^2 = \frac{2\cdot\pi^2\cdot 10^{-15}}{6{,}626\cdot 10^{-34}}\cdot 10^3\cdot(10^{-5})^2$$

$$\implies n = \frac{2\cdot\pi^2}{6{,}626}\cdot 10^{12} - \frac{1}{2} = 2{,}979\cdot 10^{12} \approx 3\cdot 10^{12}$$

b) Es tracta de calcular el valor propi de l'energia per a $n = 0$, és a dir, E_0:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}hf = \frac{1}{2}\cdot 6{,}626\cdot 10^{-34}\cdot 10^3 = 3{,}31\cdot 10^{-31}\ \text{J} = 2{,}07\cdot 10^{-12}\ \text{eV}$$

c) Aïllem l'amplitud màxima en l'expressió de l'energia de l'oscil·lador i hi substituïm el valor de l'energia que hem trobat en l'apartat anterior:

$$E_0 = \frac{1}{2}m\omega^2 A_0^2 \implies A_0 = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E_0}{m}} = \frac{1}{2\cdot\pi\cdot 10^3}\sqrt{\frac{2\cdot 3{,}31\cdot 10^{-31}}{10^{-15}}} = 4{,}09\cdot 10^{-12}\ \text{m}$$

Com que l'amplitud de vibració de l'oscil·lador és molt inferior a la longitud d'ona de la llum visible (és a dir, $4{,}09\cdot 10^{-2}$ Å $\ll$ 5.000 Å), aquest experiment no es pot dur a terme amb un microscopi òptic.


2
1
3

→ 7

Operadors. Commutadors

7.1. Introducció

L'equació de Schrödinger es pot considerar una equació de valors propis de l'operador energia (anomenat també *hamiltonià*, ja que correspon a l'operador hamiltonià de la mecànica clàssica lagrangiana) [5].

En resoldre l'equació de Schrödinger, trobem els valors propis de l'energia, E_n, i les funcions pròpies corresponents, φ_n.

A qualsevol magnitud física, li podem associar un operador i, a partir de la seva equació de valors propis, en trobarem els valors propis i les funcions pròpies corresponents.

7.2. Operadors destacats

Ens interessa trobar funcions pròpies dels operadors associats a les magnituds més significatives en física. En particular, a les magnituds que es conserven, com ara la quantitat de moviment, p, que es conserva si no hi ha forces externes, o el moment angular, L, que es conserva si no hi ha moments de forces. Els operadors que els representen són:

Posició	$\hat{x} = x;$	$\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$
Moment lineal	$\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x};$	$\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$
Moment angular	$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}};$	$\hat{L}_x = \dfrac{\hbar}{i}\left(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}\right)$
Energia	$\hat{E} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$	
Hamiltonià	$\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$	

que s'han expressat utilitzant la representació de posicions.

7.3. El valor esperat d'un operador

Sigui $\psi(x,t)$ una funció d'ona corresponent a un estat del sistema considerat i sigui $\hat{o}$ l'operador associat a la magnitud o. Aleshores, en una dimensió, es defineix el valor esperat de l'operador $\hat{o}$ com:

$$\langle\hat{o}\rangle = \langle\psi|\hat{o}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\, \hat{o}\, \psi(x,t)\, dx$$

En tres dimensions, la integral és triple i hem de multiplicar pel diferencial de volum, dv.

7.4. Commutadors

Es defineix el commutador de dos operadors, $\hat{A}$ i $\hat{B}$, com un nou operador que es calcula de la manera següent:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad \longrightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}]\varphi = (\hat{A}\circ\hat{B})\varphi - (\hat{B}\circ\hat{A})\varphi$$

on el símbol $\circ$ indica la composició d'operadors habitual (primer s'aplica el de la dreta).

7.5. Operadors compatibles

Si dos operadors $\hat{A}$ i $\hat{B}$ commuten, això és, el seu commutador $[\hat{A},\hat{B}]$ és nul, aleshores existeix un conjunt de funcions que són pròpies dels dos operadors simultàniament. En aquest cas, es diu que els operadors són compatibles.

En canvi, es pot demostrar fàcilment que, si els dos operadors no commuten, no pot existir un conjunt de funcions que siguin pròpies simultàniament de tots dos operadors.

7.6. Exercicis

Exercici 7.1. Troba el valor esperat del moment $\langle p\rangle$ i del seu quadrat $\langle p^2\rangle$ per a la funció d'ona de l'estat fonamental del pou quadrat unidimensional infinit d'amplada L.

Nota: La funció d'ona i l'operador moment són [3, 4]:

$$|\varphi\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \qquad\qquad \tilde{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Solució: A partir de la definició de valor mitjà d'un operador i aprofitant que, en aquest cas, φ és real ($\varphi = \varphi^*$):

$$\langle p\rangle = \langle\varphi|\tilde{p}|\varphi\rangle = \langle\varphi| -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\varphi\rangle = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx =$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)(-i\hbar)\frac{\pi}{L}\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx = \frac{2\pi}{L^2}(-i\hbar)\int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

Com que $2\sin(\theta)\cos(\theta)=\sin(2\theta)$, tenim:

$$\langle p\rangle = \frac{\pi}{L^2}(-i\hbar)\int_0^L \sin\left(2\frac{\pi}{L}x\right)dx = \frac{\pi}{L^2}(-i\hbar)\left[-\frac{L}{2\pi}\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right]_0^L =$$

$$= \frac{i\hbar}{2L}\left[\cos\left(\frac{2\pi}{L}L\right)-\cos(0)\right] = \frac{i\hbar}{2L}[1-1]=0$$

Pel que fa al valor mitjà del quadrat del moment:

$$\left\langle p^2\right\rangle = \langle\varphi|\tilde{p}^2|\varphi\rangle = \langle\varphi|-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}|\varphi\rangle = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx =$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\hbar^2\frac{\pi^2}{L^2}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx = \frac{2\pi^2\hbar^2}{L^3}\int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

Com que $2\sin^2(\theta)=1-\cos(2\theta)$, tenim:

$$\left\langle p^2\right\rangle = \frac{\pi^2\hbar^2}{L^3}\int_0^L 1-\cos\left(2\frac{\pi}{L}x\right)dx = \frac{\pi^2\hbar^2}{L^3}\left[x-\frac{L}{2\pi}\sin\left(2\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L =< 4$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{L^3}\left[\left(L-\frac{L}{2\pi}\sin\left(2\frac{\pi}{L}L\right)\right)-\left(0-\frac{L}{2\pi}\sin(0)\right)\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{L^2}$$

Exercici 7.2. Siguin x i p_i els operadors associats a la posició lineal i a la component i del moment.

a) Troba el commutador $[p_x,x]$.

b) Troba el commutador $[p_x,p_y]$.

Si es defineixen els operadors L_x i L_y com es mostra a continuació:

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

c) Troba el commutador $[L_y,L_x]$ i escriu-lo en funció de L_z.

d) A partir del resultat anterior, troba el commutador $[L_x,L^2]$.

e) A partir dels resultats anteriors, quins operadors poden tenir funcions pròpies simultàniament i quins no?

Nota: Els operadors moment i posició són, respectivament:

$$\tilde{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{i} \qquad \tilde{x}=x$$

Solució:

a) Per definició, el commutador $[p_x, x]\varphi = (p_x \circ x)\varphi - (x \circ p_x)\varphi$, on el símbol $\circ$ denota la composició dels operadors. Calculem el primer terme utilitzant la regla de la cadena quan derivem el producte $x\varphi$.

$$(p_x \circ x)\varphi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\varphi = -i\hbar\varphi - i\hbar x\frac{\partial\varphi}{\partial x} \qquad (x \circ p_x)\varphi = -i\hbar x\frac{\partial\varphi}{\partial x}$$

de manera que el resultat del commutador és:

$$[p_x, x]\varphi = -i\hbar\varphi - i\hbar x\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \left(-i\hbar x\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) = -i\hbar\varphi$$

b) Ara fem el mateix amb els operadors p_x i p_y:

$$(p_x \circ p_y)\varphi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\varphi = \hbar^2\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\partial y}$$

$$(p_y \circ p_x)\varphi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi = \hbar^2\frac{\partial^2\varphi}{\partial y\partial x}$$

Si suposem que φ és una funció de classe C^2 i que, per tant, les derivades parcials creuades són iguals (teorema de Clairaut), tenim:

$$[p_x, p_y]\varphi = (p_x \circ p_y)\varphi - (p_y \circ p_x)\varphi = \hbar^2\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\partial y} - \hbar^2\frac{\partial^2\varphi}{\partial y\partial x} = 0$$

c) En primer lloc, calculem el commutador $[L_y, L_x]\varphi = (L_y \circ L_x)\varphi - (L_x \circ L_y)\varphi$.

$$(L_y \circ L_x)\varphi = \left(\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right)\left(\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)\varphi =$$

$$= -\hbar^2\left(zy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + x\frac{\partial}{\partial y} + xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\right)\varphi$$

$$(L_x \circ L_y)\varphi = \left(\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)\left(\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right)\varphi =$$

$$= -\hbar^2\left(y\frac{\partial}{\partial x} + yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} - yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} + zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}\right)\varphi$$

Tornem a suposar que φ és una funció de classe C^2, però aquest cop no es cancel·len tots els termes:

$$[L_y, L_x] = -\hbar^2\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}L_z = -i\hbar L_z$$

d) Per calcular l'últim commutador, hem d'utilitzar la propietat vectorial següent:

$$L = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2} \implies L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Així, el commutador $[L_x, L^2]$ es pot descompondre com la suma de tres commutadors.

$$[L_x, L^2] = [L_x, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_x, L_x^2] + [L_x, L_y^2] + [L_x, L_z^2]$$

És fàcil veure que el primer terme és zero:

$$[L_x, L_x^2]\varphi = (L_x \circ L_x \circ L_x)\varphi - (L_x \circ L_x \circ L_x)\varphi = 0$$

Per calcular els altres dos termes podem utilitzar la definició, però és més interessant fer servir altres tècniques que ens estalviïn càlculs:

$$[L_x, L_y^2]\varphi = (L_x \circ L_y \circ L_y)\varphi - (L_y \circ L_y \circ L_x)\varphi =$$

Si restem i sumem el terme $(L_y \circ L_x \circ L_y)\varphi$, obtenim:

$$= \underbrace{(L_x \circ L_y \circ L_y)\varphi - (L_y \circ L_x \circ L_y)\varphi}_{[L_x, L_y]\circ L_y} + \underbrace{(L_y \circ L_x \circ L_y)\varphi - (L_y \circ L_y \circ L_x)\varphi}_{L_y \circ [L_x, L_y]} =$$

Com que $[L_x, L_y] = -[L_y, L_x] = i\hbar L_z$, tenim:

$$= [L_x, L_y] \circ L_y + L_y \circ [L_x, L_y] = i\hbar L_z \circ L_y + L_y \circ i\hbar L_z$$

Per tant, el resultat que obtenim és:

$$[L_x, L_y^2] = i\hbar\,(L_z \circ L_y + L_y \circ L_z)$$

Podem aplicar el mateix raonament per calcular l'altre terme:

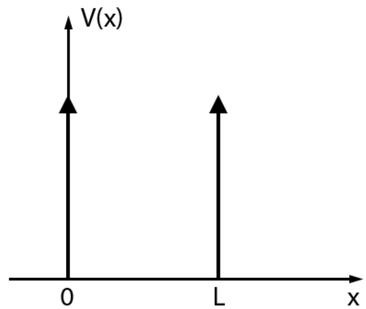
$$[L_x, L_z^2] = -i\hbar\,(L_z \circ L_y + L_y \circ L_z)$$

de manera que el commutador global s'anul·la:

$$[L_x, L^2] = 0 + i\hbar\,(L_y \circ L_z + L_z \circ L_y) - i\hbar\,(L_z \circ L_y + L_y \circ L_z) = 0$$

e) Si dos operadors $\tilde{a}$ i $\tilde{b}$ commuten (és a dir, $[\tilde{a}, \tilde{b}] = 0$), aleshores són compatibles i admeten funcions pròpies simultàniament. Per tant, dels quatre casos de l'enunciat, els operadors que n'admeten són $\tilde{p}_x$ i $\tilde{p}_y$, d'una banda, i $\tilde{L}_x$ i $\tilde{L}^2$, de l'altra.

Exercici 7.3. En un pou de potencial unidimensional infinit:



a) Troba el valor mitjà de la quantitat de moviment, $\langle p \rangle$, i del seu quadrat, $\langle p^2 \rangle$, per a les funcions pròpies φ_n.

b) Demostra que el valor mitjà de la posició al quadrat és $\langle x^2 \rangle = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right)$.

c) Utilitzant aquests resultats, troba $\Delta x \cdot \Delta p$ per al primer nivell d'energia $(n = 1)$. Compara-ho amb la predicció del principi d'indeterminació de Heisenberg.

Nota: Recorda que $\Delta a = (\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2)^{1/2}$ és una expressió general vàlida per a x i p.

Solució:

a) Les funcions pròpies (i les conjugades) per al pou unidimensional infinit d'amplada L són les següents:

$$|\varphi\rangle = \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \qquad \langle\varphi| = \varphi_n^*(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)$$

D'altra banda, l'operador quantitat de moviment és:

$$\tilde{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

A partir de les expressions anteriors, podem calcular el valor mitjà de l'operador, $\langle p \rangle$:

$$\langle p \rangle = \langle\varphi|\tilde{p}|\varphi\rangle = \langle\varphi| - i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\varphi\rangle = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) dx =$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)(-i\hbar)n\frac{\pi}{L}\cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right) dx = \frac{2n\pi}{L^2}(-i\hbar)\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right) dx$$

Com que $2\sin(\theta)\cos(\theta) = \sin(2\theta)$, tenim:

$$\langle p \rangle = \frac{n\pi}{L^2}(-i\hbar)\int_0^L \sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right) dx = \frac{n\pi}{L^2}(-i\hbar)\left[-\frac{L}{2n\pi}\cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]_0^L =$$

$$= \frac{i\hbar}{2L}\left[\cos\left(\frac{2n\pi}{L}L\right) - \cos(0)\right] = \frac{i\hbar}{2L}[1-1] = 0$$

Procedim de manera anàloga per calcular el valor mitjà de l'operador al quadrat, $\langle p^2 \rangle$:

$$\langle p^2 \rangle = \langle \varphi | \tilde{p}^2 | \varphi \rangle = \langle \varphi | -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} | \varphi \rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)dx =$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\hbar^2 n^2 \frac{\pi^2}{L^2}\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)dx = \frac{2\pi^2 n^2\hbar^2}{L^3}\int_0^L \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

Com que $2\sin^2(\theta) = 1-\cos(2\theta)$, tenim:

$$\langle p^2 \rangle = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^3}\int_0^L 1-\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^3}\left[x - \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L =$$

$$= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^3}\left[\left(L - \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}L\right)\right) - \left(0 - \frac{L}{2n\pi}\sin(0)\right)\right] = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{L^2}$$

b) Per calcular el valor mitjà de la posició al quadrat, utilitzem $\tilde{x} = x$:

$$\langle x^2 \rangle = \langle \varphi | \tilde{x}^2 | \varphi \rangle = \langle \varphi | x^2 | \varphi \rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x^2 \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

De nou, com que $2\sin^2(\theta) = 1-\cos(2\theta)$, tenim:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{L}\int_0^L x^2\left(1-\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right)dx = \frac{1}{L}\int_0^L x^2 dx - \frac{1}{L}\int_0^L x^2\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

La primera integral és immediata i la segona la calculem integrant per parts. Definim la integral I_2 i utilitzem la fórmula general:

$$I_2 = \int_0^L x^2\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx = \int_0^L u\,dv = uv - \int_0^L v\,du$$

Si fem els canvis següents:

$$u = x^2, \quad dv = \cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx \quad \Longrightarrow \quad du = 2x\,dx, \quad v = \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)$$

$$I_2 = \left[x^2\frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L - \int_0^L \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)2x\,dx = 0 - \frac{L}{n\pi}\int_0^L x\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

Definim I_3 i tornem a aplicar la integració per parts:

$$I_3 = -\frac{n\pi}{L}I_2 = \frac{L}{n\pi}\int_0^L x\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx = \int_0^L t\,dw = tw - \int_0^L w\,dt$$

Utilitzem uns canvis anàlegs als que hem definit per a I_2:

$$t = x, \quad dw = \sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx \quad \Longrightarrow \quad dt = dx, \quad w = -\frac{L}{2n\pi}\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)$$

$$I_3 = \left[-x\frac{L}{2n\pi}\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L + \int_0^L \frac{L}{2n\pi}\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx =$$

$$= \left[-L\frac{L}{2n\pi}\cos\left(2n\frac{\pi}{L}L\right) + 0\right] + \frac{L}{2n\pi}\left[\frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L =$$

$$= -\frac{L^2}{2n\pi} + \frac{L^2}{4n^2\pi^2}\left[\sin\left(2n\frac{\pi}{L}L\right) - \sin(0)\right] = -\frac{L^2}{2n\pi}$$

de manera que el valor mitjà de la posició al quadrat és:

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{L}\left[\frac{x^3}{3}\right]_0^L - \frac{1}{L}I_2 = \frac{L^2}{3} + \frac{1}{n\pi}I_3 = \frac{L^2}{3} - \left(\frac{L^2}{2n^2\pi^2}\right) = L^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right)$$

c) Com que $\Delta x = (\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2)^{1/2}$, hem de calcular el valor mitjà de la posició, $\langle x\rangle$.

$$\langle x\rangle = \langle\varphi|\tilde{x}|\varphi\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

De la mateixa manera que en l'apartat anterior, utilitzem que $2\sin^2(\theta) = 1 - \cos(2\theta)$:

$$\langle x\rangle = \frac{1}{L}\int_0^L x\left(1 - \cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right)dx = \frac{1}{L}\int_0^L x\,dx - \frac{1}{L}\int_0^L x\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

Obtenim una integral immediata i una altra que calculem mitjançant la integració per parts. Definim la integral I_4 i utilitzem la fórmula general:

$$I_4 = \int_0^L x\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx = \int_0^L t\,dv = tv - \int_0^L v\,dt$$

Si fem els canvis corresponents:

$$t = x, \quad dv = \cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx \quad \Longrightarrow \quad dt = dx, \quad v = \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)$$

$$I_4 = \left[x\frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L - \int_0^L \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)dx = 0 - 0 = 0$$

obtenim que el valor mitjà de la posició és:

$$\langle x\rangle = \frac{1}{L}\left[\frac{x^2}{2}\right]_0^L - \frac{1}{L}I_4 = \frac{L}{2} + 0 = \frac{L}{2}$$

Aquest resultat és coherent i intuïtiu: la partícula tendeix a posicionar-se al centre del pou, és a dir, tan lluny com pot de les parets de potencial infinit.

Trobem la incertesa en la posició i en el moment per al primer nivell $(n = 1)$ a partir dels resultats anteriors:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{L^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right) - \frac{L^2}{4}} = L\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\pi^2\hbar^2}{L^2}} = \frac{\pi\hbar}{L}$$

En fem el producte:

$$\Delta x \cdot \Delta p = L\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} \cdot \frac{\pi\hbar}{L} \approx 0{,}568\hbar > \frac{\hbar}{2}$$

de manera que es compleix el principi d'indeterminació de Heisenberg:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Exercici 7.4. Troba el valor dels commutadors: $[x, p_x]$, $[x, p_y]$ i $[L_y, L_z]$. Segons això, pot haver-hi un conjunt de funcions pròpies simultàniament de L_y i L_z? Per què?

Solució: Per definició, el commutador $[x, p_x]\varphi = (x \circ p_x)\varphi - (p_x \circ x)\varphi$. A més, com ja hem vist en l'exercici 7.2:

$$(x \circ p_x)\varphi = -i\hbar x\frac{\partial \varphi}{\partial x} \qquad (p_x \circ x)\varphi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\varphi = -i\hbar\varphi - i\hbar x\frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

de manera que el resultat del commutador és:

$$[x, p_x]\varphi = -i\hbar x\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \left(-i\hbar\varphi - i\hbar x\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right) = i\hbar\varphi$$

Per al cas del commutador $[x, p_y]\varphi = (x \circ p_y)\varphi - (p_y \circ x)\varphi$, és fàcil veure que s'anul·la:

$$(x \circ p_y)\varphi = -i\hbar x\frac{\partial \varphi}{\partial y} \qquad (p_y \circ x)\varphi = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)x\varphi = -i\hbar x\frac{\partial \varphi}{\partial y} \quad \Longrightarrow [x, p_y] = 0$$

Per calcular el darrer commutador cal recordar l'expressió dels operadors L_y i L_z:

$$L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

El que s'ha de calcular és: $[L_y, L_z]\varphi = (L_y \circ L_z)\varphi - (L_z \circ L_y)\varphi$.

$$(L_y \circ L_z)\varphi = \left(\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right)\left(\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\varphi =$$

$$= -\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial y} + xz\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - x^2\frac{\partial^2}{\partial z\partial y} - yz\frac{\partial^2}{\partial x^2} + yx\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\right)\varphi$$

$$(L_z \circ L_y)\varphi = \left(\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\left(\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right)\varphi =$$

$$= -\hbar^2\left(zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - zy\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial z} + y\frac{\partial}{\partial z} + xy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z}\right)\varphi$$

Com ja hem vist en altres problemes, pel fet que φ és una funció de classe C^2, les derivades creuades coincideixen. Per tant, després de cancel·lar els termes iguals, el resultat del commutador és:

$$[L_y, L_z] = -\hbar^2\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) = i\hbar L_x \neq 0$$

Hem vist que els operadors L_y i L_z no commuten, cosa que implica que no són compatibles i, en conseqüència, no admeten funcions pròpies simultàniament.

2
1
3

→ 8

Moment angular i spin. Àtoms

8.1. El moment angular

Anàlogament a l'equació de Schrödinger, que és l'equació de valors propis de l'operador energia ($\hat{H}\varphi = E\varphi$), podem escriure una equació de valors propis per a cada operador. Hem demostrat (exercicis 7.2 i 7.4) que dues components diferents del moment angular no commuten, però que una component qualsevol sí que commuta amb L^2.

$$[L_i, L_j] \neq 0, \qquad [L_i, L^2] = 0$$

A més, és clar que L^2 i L_z commuten amb l'operador energia. Per tant —i considerant que H, L_z i L^2 formen un conjunt complet d'observables compatibles—, podem trobar funcions pròpies que ho siguin simultàniament dels operadors $\hat{H}$, $\hat{L}_z$ i $\hat{L}^2$. Les equacions de valors propis per a aquests operadors són:

$$\hat{L}_z\varphi = m\hbar\varphi, \qquad m \in \mathbb{Z}$$

$$\hat{L}^2\varphi = l(l+1)\hbar^2\varphi, \qquad l \in \mathbb{N}$$

i les funcions pròpies són els harmònics esfèrics $Y_{l,m}(\theta,\phi)$.

8.2. Spin

Segons l'experiment de Stern i Gerlach (1922), els electrons han de tenir un moment angular intrínsec, anomenat *spin*, que dona lloc a un moment magnètic de spin. L'spin és una característica essencial de les partícules —com ho són la càrrega o la massa— i no es correspon amb cap fenomen clàssic. A més, també és la causa del magnetisme i de la superconductivitat.

Per als electrons, els protons i els neutrons, l'spin val $\frac{1}{2}$. La funció d'ona total de l'electró pot estar formada per una part orbital, φ (la que hem tractat fins aquí), i una part de spin, φ_s. Anàlogament al moment angular orbital, podem escriure les equacions de valors propis dels operadors de spin, on $s = \frac{1}{2}$ i $s_z = \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$.

$$\hat{s}_z \varphi_s = s_z \hbar \varphi_s = \pm \frac{1}{2} \hbar \varphi_s \qquad \text{(per això, es parla de } \textit{spin up} \text{ i } \textit{spin down}\text{)}$$

$$\hat{s^2} \varphi_s = s(s+1)\hbar^2 \varphi_s = \frac{3}{4}\hbar^2 \varphi_s$$

El moment magnètic de spin de l'electró és igual al magnetó de Bohr, μ_B, que és també el quàntum de moment magnètic.

$$\mu_z = -g_e s_z \mu_B$$

on g_e és el factor de Landé de l'electró.

8.3. L'àtom d'hidrogen

En el cas de l'àtom d'hidrogen, considerat com un electró lligat a un protó, l'energia potencial es pot avaluar com l'energia potencial coulombiana:

$$V(r) = -\frac{k_e e^2}{r}$$

Aleshores, podem trobar les funcions pròpies de l'energia, $\hat{H}$, de $\hat{L}^2$ i de $\hat{L}_z$. Tant les funcions d'ona com els valors propis són descrits pels nombres quàntics: n, l i m.

$$n \longrightarrow E_n = \frac{E_1}{n^2} \qquad \forall n \in \mathbb{Z}^+$$

$$l = n-1, n-2, \cdots, 1, 0 \qquad l \in \mathbb{N} \text{ (donat } n\text{, n'hi ha } n \text{ de diferents)}$$

$$m = \pm l, \pm(l-1), \cdots, \pm 1, 0 \qquad m \in \mathbb{Z} \text{ (donat } l\text{, n'hi ha } 2l+1 \text{ de diferents)}$$

Així, resulta que la degeneració del nivell d'energia n és n^2 (sense considerar l'spin). Considerant que a cada nivell hi caben dos electrons amb spins diferents, $+\frac{1}{2}$ i $-\frac{1}{2}$, la degeneració és $2n^2$. En aplicar un camp magnètic, la degeneració queda totalment eliminada, ja que cada estat amb algun nombre quàntic diferent té una energia diferent (efecte Zeeman).

8.4. La interacció spin-òrbita

Quan els moments angulars orbital i de spin interaccionen, cal definir el moment angular total, J. Aleshores, els estats poden ser estats propis de $\hat{J}^2$ i de $\hat{J}_z$, i en podrem trobar els valors propis i les funcions pròpies resolent les equacions següents:

$$\hat{J}_z \varphi = m_J \hbar \varphi, \qquad m_J \in \mathbb{Z}$$

$$\hat{J}^2 \varphi = j(j+1)\hbar^2 \varphi, \qquad j \in \mathbb{N}$$

En canvi, a causa de la interacció spin-òrbita, ja no existeixen estats propis de $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ ni de $\hat{S}^2$ i $\hat{S}_z$.

En el cas d'àtoms diferents de l'àtom d'hidrogen —que poden tenir molts electrons—, cal considerar a vegades L total i S total de l'àtom (és a dir, per a tots els electrons situats en capes incompletes) i, a vegades, J total, que inclou la part orbital i de spin. Un àtom amb un moment angular total, J, conegut té una degeneració $2J+1$, ja que J_z pren els valors següents:

$$J_z = \{-J, -J+1, \cdots, -1, 0, 1, \cdots, J-1, J\}$$

D'altra banda, com que $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (suma vectorial), es compleix:

$$|L-S| \leq J \leq |L+S|$$

És a dir, hi ha el mateix nombre de subestats (i subnivells) en els estats caracteritzats pels valors propis de $\hat{J}^2$ i $\hat{J}_z$ que en els caracteritzats pels operadors $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$, i $\hat{S}^2$ i $\hat{S}_z$. Aquests subestats o subnivells corresponen a l'estructura fina dels nivells electrònics dels àtoms [1, 3].

8.5. Ressonància magnètica

La ressonància magnètica electrònica (ESR, *electron spin resonance*, o EPR, *electron paramagnetic resonance*) i també la ressonància magnètica nuclear (RMN, *nuclear magnetic resonance*) es basen en l'efecte Zeeman (1896). Aquest efecte consisteix en el desdoblament dels nivells d'energia per efecte d'un camp magnètic extern, $\vec{B}$. La degeneració queda totalment eliminada a causa de l'energia de la interacció entre el moment magnètic de l'àtom i el camp $\vec{B}$. La separació energètica entre dos nivells consecutius, caracteritzats per J_z i $J_z - 1$, és:

$$\Delta E = |-g\mu_B J_z B_z + g\mu_B (J_z - 1) B_z| = g\mu_B B_z$$

El cas més senzill és el d'un sol electró amb $l = 0$ i spin $s = \frac{1}{2}$. En aquest cas, no hi ha moment orbital i tenim només dos subnivells, corresponents a $S_z = \{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\}$, amb una separació $\Delta E = g\mu_B B_z$.

Si, a més del camp magnètic estàtic $\vec{B}$, fem incidir sobre el nostre material una radiació electromagnètica de freqüència adequada, f_0, tal que la seva energia hf_0 sigui exactament igual a ΔE, podrem induir transicions entre els dos subnivells. És a dir, observarem que el material absorbeix energia de la radiació. La condició perquè això passi és:

$$\Delta E = g\mu_B B_z = hf_0$$

i s'anomena *condició de ressonància*.

La RMN consisteix en el mateix fenomen, però és deguda als spins nuclears: poden ser els spins dels protons ($s = \frac{1}{2}$) o d'algun àtom que tingui un nucli amb spin resultant no nul (sovint es fa RMN dels protons de l'aigua en els éssers vius, ja que els teixits biològics en contenen molta).

El factor giromagnètic nuclear, γ, és molt més petit que l'electrònic μ_B, ja que la massa del protó és molt més gran que la de l'electró ($m_p > m_e$).

$$\gamma = \frac{e\hbar}{2m_p} \qquad\qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Per això, els subnivells (d'estructura hiperfina deguts als nuclis) produïts per l'efecte Zeeman dels nuclis tenen separacions $(\Delta E)_n = g\gamma B \approx 10^{-8}$ eV. Això fa que puguem discernir diferències d'energia molt petites (de l'ordre de 10^{-8} eV).

8.6. Exercicis

Exercici 8.1. Un àtom d'hidrogen es troba en un estat amb $l = 2$.

a) Quins són els valors propis de L^2?
b) Quins són els valors propis de L_z?
c) Quins són els valors possibles de la component z del moment magnètic μ_z?

Solució:

a) En substituir $l = 2$ en l'equació de valors propis, obtenim:

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\psi\rangle = 6\hbar^2 |\psi\rangle$$

És a dir, el valor propi de L^2 és $6\hbar^2$.

b) L'equació de valors propis per al cas de l'operador L_z és:

$$\hat{L}_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle$$

Com que $m = 2,\ 1,\ 0,\ -1,\ -2$, els valors propis de L_z són:

$$2\hbar,\ \hbar,\ 0,\ -\hbar,\ -2\hbar$$

c) Finalment, pel que fa a la component z del moment magnètic:

$$\mu_z = m\mu_B \quad \Longrightarrow \quad 2\mu_B,\ \mu_B,\ 0,\ -\mu_B,\ -2\mu_B$$

on $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2mc} = 9{,}27 \cdot 10^{-24}$ J/T $= 5{,}8 \cdot 10^{-5}$ eV/T és el magnetó de Bohr.

Exercici 8.2. El nombre quàntic principal d'un electró en un àtom és $n = 3$.

a) Quins són els valors possibles de l? Quines són les combinacions possibles de l i m? Quina és la degeneració d'aquest estat tenint en compte l'spin?
b) Per a un electró atòmic amb $l = 2$, escriu l'equació de valors propis de L^2 i de L_z. Troba'n els valors propis corresponents.

c) Si $n = 3$ i $l = 2$, quina és la degeneració de l'estat corresponent sense considerar l'spin?

En el cas de l'ió Fe^{3+}, l'última capa electrònica és $3d^5$: hi ha 5 electrons de spins paral·lels que ocupen tot l'orbital corresponent a $l = 2$ $(m = 2, 1, 0, -1, -2)$. Per tant, és equivalent a un estat de spin $S = \frac{5}{2}$ i $L = 0$.

d) Si ara hi apliquem un camp magnètic extern de 0,5000 T, en quants subnivells d'energia queda desdoblat el nivell? Quina és la separació energètica (en eV) entre dos nivells consecutius? (Utilitza el factor de Landé, $g = 2$.)

e) *Ressonància de spin electrònic*. En l'ió Fe^{3+}, per tal d'induir transicions entre dos dels subnivells consecutius, hi apliquem també una radiació electromagnètica de freqüència adequada. Segons la condició de ressonància, quina ha de ser la freqüència de la radiació electromagnètica? Quina és la longitud d'ona?

Solució:

a) Si $n = 3$, els valors possibles de l són 0, 1 i 2. Per a cada valor de l, podem determinar els valors que pot prendre m considerant els enters amb mòdul menor o igual a l, és a dir:

$$\begin{array}{lcll} l = 0 \text{ (orbital s)} & \Longrightarrow & m = 0 & \text{(degeneració 1)} \\ l = 1 \text{ (orbital p)} & \Longrightarrow & m = 1,\ 0,\ -1 & \text{(degeneració 3)} \\ l = 2 \text{ (orbital d)} & \Longrightarrow & m = 2,\ 1,\ 0,\ -1,\ -2 & \text{(degeneració 5)} \end{array}$$

La degeneració és n^2 si no tenim en compte l'spin i $2n^2$ si el tenim en compte. Per tant:

$$\text{degeneració total (amb spin)} = 2n^2 = 2 \cdot 3^2 = 18$$

b) Amb $l = 2$, tenim:

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\psi\rangle = 6\hbar^2 |\psi\rangle \qquad \hat{L}_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle$$

Com que $m = 2,\ 1,\ 0,\ -1,\ -2$, els valors propis de L_z són:

$$2\hbar,\ \hbar,\ 0,\ -\hbar,\ -2\hbar$$

c) Com hem vist en l'apartat *a*, la degeneració en el cas $n = 3$, $l = 2$ és $2l + 1 = 5$.

De manera general, la degeneració sense tenir en compte l'spin per a un l donat és $2l + 1$ (els enters amb valor absolut menor o igual que l).

d) Tenim l'ió Fe^{3+} amb un estat equivalent de spin, $S = \dfrac{5}{2}$ i $L = 0$. Per tant:

$$S_z = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}, \frac{-3}{2}, \frac{-5}{2} \quad \Longrightarrow \quad 2 \cdot \frac{5}{2} + 1 = 6 \quad \text{subnivells d'energia}$$

En aplicar el camp extern, $\vec{B}_{ext} = 0,5\,\vec{u}$ T, el moment magnètic de spin queda projectat a la direcció del camp (que anomenem $\vec{u} = \vec{z}$). Així, el hamiltonià de l'efecte Zeeman és:

$$E_m = \mathcal{H}_{Zeeman}\,|\psi\rangle = -\vec{\mu}_0 \cdot \vec{B}_{ext} = -\mu_z B_{ext} = gm\mu_B B_{ext}$$

Amb els valors del magnetó de Bohr, $\mu_B = 5{,}788 \cdot 10^{-5}$ eV/T, i el factor de Landé que ens donen a l'enunciat, $g = 2$, podem calcular la diferència entre dos nivells consecutius:

$$\Delta E = E_m - E_{m-1} = g\mu_B B_{ext} = 2 \cdot 5{,}788 \cdot 10^{-5} \cdot 0{,}5 = 5{,}788 \cdot 10^{-5}\ \text{eV}$$

e) La condició de ressonància és que la radiació electromagnètica incident tingui la mateixa energia que la separació entre nivells. Per tant:

$$\Delta E = hf \quad \Longrightarrow \quad f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{5{,}788 \cdot 10^{-5}}{4{,}136 \cdot 10^{-15}} = 1{,}399 \cdot 10^{10}\ \text{Hz} \approx 14\ \text{GHz}$$

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{3 \cdot 10^{8}}{1{,}4 \cdot 10^{10}} = 2{,}1\ \text{cm}$$

Exercici 8.3. Sigui un àtom d'hidrogen descrit per la funció d'ona que es mostra a continuació (en considerem només la part orbital):

$$\psi(\vec{r},t) = \sqrt{\frac{2}{3}}\,\psi_{100}(\vec{r})\,e^{-iE_1t/\hbar} + \sqrt{\frac{1}{3}}\,\psi_{211}(\vec{r})\,e^{-iE_2t/\hbar}$$

on les ψ_{nlm} són les funcions d'ona pròpies estacionàries de l'electró en el potencial coulombià del nucli, situat a l'origen, i són ortonormals.

a) Quin és el valor esperat de E, de L^2 i de L_z?

b) Quina és la probabilitat que, fent mesures, s'obtinguin com a resultats $E = E_2$, $L^2 = 2\hbar^2$ i $L_z = \hbar$?

c) Digues de quines variables depèn la densitat de probabilitat $|\psi|^2$. Depèn de t, $\vec{r}$, θ, ϕ?

Solució:

a) Les funcions d'ona pròpies verifiquen les equacions de valors propis següents:

$$\mathcal{H}\,|\psi_{nlm}\rangle = E_n\,|\psi_{nlm}\rangle$$

$$\hat{L}^2\,|\psi_{nlm}\rangle = l(l+1)\hbar^2\,|\psi_{nlm}\rangle$$

$$\hat{L}_z\,|\psi_{nlm}\rangle = m\hbar\,|\psi_{nlm}\rangle$$

A més, com que són ortonormals, han de complir:

$$\langle \psi_{n'l'm'} | \psi_{nlm} \rangle = \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

on δ_{ij} és la funció delta de Kronecker:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{quan} \quad i = j \\ 0 & \text{quan} \quad i \neq j \end{cases}$$

Segons això, per les funcions pròpies donades, ψ_{100} i ψ_{211}, tenim:

$$\mathcal{H} |\psi_{100}\rangle = E_1 |\psi_{100}\rangle \qquad \mathcal{H} |\psi_{211}\rangle = E_2 |\psi_{211}\rangle$$

$$\hat{L}^2 |\psi_{100}\rangle = 0 \qquad \hat{L}^2 |\psi_{211}\rangle = 2\hbar^2 |\psi_{211}\rangle$$

$$\hat{L}_z |\psi_{100}\rangle = 0 \qquad \hat{L}_z |\psi_{211}\rangle = \hbar |\psi_{211}\rangle$$

Per calcular el valor esperat de l'energia, partim de la definició de valor esperat d'un operador i particularitzem per al cas en qüestió (per comoditat, usem $\alpha_x = iE_x t/\hbar$):

$$\langle E \rangle = \langle \psi(\vec{r},t) | \mathcal{H} | \psi(\vec{r},t) \rangle = \langle \psi(\vec{r},t) | \left(\sqrt{\frac{2}{3}} E_1 |\psi_{100}\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} + \sqrt{\frac{1}{3}} E_2 |\psi_{211}\rangle e^{-iE_2 t/\hbar} \right) =$$

$$= \left(\sqrt{\frac{2}{3}} E_1 \langle \psi_{100} | e^{\alpha_1} + \sqrt{\frac{1}{3}} E_2 \langle \psi_{211} | e^{\alpha_2} \right) \left(\sqrt{\frac{2}{3}} E_1 |\psi_{100}\rangle e^{-\alpha_1} + \sqrt{\frac{1}{3}} E_2 |\psi_{211}\rangle e^{-\alpha_2} \right) =$$

$$= E_1 \sqrt{\frac{2}{3}}^2 \langle \psi_{100} | \psi_{100} \rangle + 0 + 0 + E_2 \sqrt{\frac{1}{3}}^2 \langle \psi_{211} | \psi_{211} \rangle = \frac{2}{3} E_1 + \frac{1}{3} E_2$$

Per als altres operadors, podem realitzar el mateix procediment:

$$\langle L^2 \rangle = \langle \psi(\vec{r},t) | \hat{L}^2 | \psi(\vec{r},t) \rangle = \langle \psi(\vec{r},t) | \left(0 + \sqrt{\frac{1}{3}} 2\hbar^2 |\psi_{211}\rangle e^{-\alpha_2} \right) = \frac{1}{3} 2\hbar^2 = \frac{2}{3} \hbar^2$$

$$\langle L_z \rangle = \langle \psi(\vec{r},t) | \hat{L}_z | \psi(\vec{r},t) \rangle = \langle \psi(\vec{r},t) | \left(0 + \sqrt{\frac{1}{3}} \hbar |\psi_{211}\rangle e^{-\alpha_2} \right) = \frac{1}{3} \hbar$$

b) Amb els valors esperats calculats en l'apartat anterior, podem concloure que:

- La probabilitat d'obtenir el valor propi E_2 per a l'energia és $\frac{1}{3}$.
- La probabilitat d'obtenir el valor propi $2\hbar$ per al quadrat del moment angular és $\frac{1}{3}$.
- La probabilitat d'obtenir el valor propi $\hbar$ per a la component z del moment angular és també $\frac{1}{3}$.

c) Tot i que $\psi(\vec{r},t)$ depèn del temps, quan es calcula el mòdul al quadrat, la dependència del temps de $|\psi(\vec{r},t)|^2$ desapareix, ja que es cancel·len les funcions exponencials. En canvi, la dependència de $\vec{r}$, θ i φ es manté, ja que les funcions ψ_{100} i ψ_{211} en depenen i no es produeix la cancel·lació.

Exercici 8.4. Sense camp magnètic, i negligint l'spin, quina seria la degeneració de:

a) Els estats electrònics de l'àtom d'hidrogen Ψ_{100} i Ψ_{211}, com els que apareixen en el problema anterior (amb Ψ_{nlm})?

b) Un electró en un nivell energètic 3p sense considerar l'spin? I si considerem l'spin?

Ara considerem l'spin i la interacció spin-òrbita:

c) Amb quants nivells d'energia quedaria desdoblat el multiplet corresponent a $J = 3/2$ en aplicar-hi un camp magnètic de 0,50 T?

Solució:

a) Per a Ψ_{100}, tenim: $n = 1$ i $l = m = 0$; per tant, la degeneració (sense spin) és:

$$\text{degeneració (sense spin)} = 2l + 1 = 1$$

És a dir, un singlet (o estat no degenerat).

En canvi, per a Ψ_{211}, tenim: $n = 2$ i $l = m = 1$; per tant, la degeneració (sense spin) és:

$$\text{degeneració (sense spin)} = 2l + 1 = 3$$

És a dir, un triplet (o estat amb degeneració 3).

b) Un orbital de tipus p correspon a $l = 1$; per tant, si no considerem l'spin, tenim:

$$\text{degeneració (sense spin) de l'electró} = 2l + 1 = 3$$

Si es considera l'spin de l'electró, la degeneració es dobla; per tant:

$$\text{degeneració (amb spin) de l'electró} = 2 \cdot (2l + 1) = 6$$

c) El moment angular total és $J = 3/2$; per tant:

$$\text{degeneració} = 2J + 1 = 2 \cdot \frac{3}{2} + 1 = 4$$

Per mostrar l'analogia entre l'electromagnetisme i la mecànica quàntica

Bloc de problemes proposats per Xavier Cartoixà,
professor del Departament d'Enginyeria Electrònica de la UAB

Exercici 8.5. Partint de les equacions de Maxwell, deriva l'equació d'ona per al camp elèctric

$$\nabla^2\mathbf{E} - \varepsilon(\mathbf{r})\mu\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = 0,$$

anota totes les suposicions que facis i indica en quin punt les has usades. Seguint un procediment anàleg, troba l'equació més general que inclogui només $\mathbf{E}$, de manera que ε i μ tinguin una dependència espacial, però tractant-les com a escalars (no com a tensors).

Solució: Si prenem el rotacional de

$$\nabla\times\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial\mathbf{t}}$$

i canviem la derivada espacial i temporal, obtenim que

$$\nabla\times[\nabla\times\mathbf{E}] = -\frac{\partial}{\partial\mathbf{t}}[\nabla\times\mathbf{B}]. \tag{1.16}$$

Ara, utilitzant identitats vectorials

$$\begin{aligned}\nabla\times(\nabla\times\mathbf{A}) &= \nabla(\nabla\cdot\mathbf{A}) - \nabla^2\mathbf{A}\\ \nabla\times(\psi\mathbf{A}) &= \psi\nabla\times\mathbf{A} + \nabla\psi\times\mathbf{A}\end{aligned} \tag{1.17}$$

i la relació constitutiva $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$, l'equació (1.16) esdevé

$$\nabla(\nabla\cdot\mathbf{E}) - \nabla^2\mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t}[\mu\nabla\times\mathbf{H} + (\nabla\mu)\times\mathbf{H}]. \tag{1.18}$$

Per la llei de Gauss, podem veure que

$$\nabla\cdot\mathbf{E} = \varepsilon^{-1}\rho_f - \varepsilon^{-1}(\nabla\varepsilon)\cdot\mathbf{E}$$

En aquest punt, inserim les equacions de Maxwell relacionades amb la presència de fonts per tal d'obtenir

$$\nabla(\varepsilon^{-1}\rho_f) - \nabla[\varepsilon^{-1}(\nabla\varepsilon)\cdot\mathbf{E}] - \nabla^2\mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t}[\mu(\mathbf{J}_f + \frac{\partial\varepsilon\mathbf{E}}{\partial t}) + (\nabla\mu)\times\mathbf{H}], \tag{1.19}$$

que es pot reordenar per aconseguir un resultat sense suposicions, i que té en compte la naturalesa d'una possible variació espacial[1] de $\varepsilon(\mathbf{r})$ i $\mu(\mathbf{r})$:

[1] L'equació 1.20 s'ha de modificar si $\varepsilon(\mathbf{r})$ i $\mu(\mathbf{r})$ tenen caràcter de tensor.

$$\nabla^2\mathbf{E} - \mu\varepsilon\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = \nabla(\varepsilon^{-1}\rho_f) - \nabla[\varepsilon^{-1}(\nabla\varepsilon)\cdot\mathbf{E}] + \mu\frac{\partial\mathbf{J}_f}{\partial t} + (\nabla\mu)\times\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}. \tag{1.20}$$

Ara, per tal d'obtenir l'equació més general que inclou només la $\mathbf{E}$, hem de suposar una $\mu(\mathbf{r})$ homogènia o que varia lentament —aquesta és, de fet, la situació més comuna—, que permet negligir el darrer terme i obtenir

$$\nabla^2\mathbf{E} - \mu\varepsilon\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = \nabla(\varepsilon^{-1}\rho_f) - \nabla[\varepsilon^{-1}(\nabla\varepsilon)\cdot\mathbf{E}] + \mu\frac{\partial\mathbf{J}_f}{\partial t}. \tag{1.21}$$

En aquest punt, si considerem un sistema amb ρ_f homogènia i $\mathbf{J}_f$ constant (o simplement un sistema sense corrents o càrregues lliures), obtenim

$$\nabla^2\mathbf{E} - \mu\varepsilon\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = -\nabla[\varepsilon^{-1}(\nabla\varepsilon)\cdot\mathbf{E}]. \tag{1.22}$$

L'equació d'ona final

$$\nabla^2\mathbf{E} - \mu\varepsilon(\mathbf{r})\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \tag{1.23}$$

es pot recuperar, en general, si la longitud d'ona associada a canvis a $\varepsilon(\mathbf{r})$ és molt més llarga que la longitud d'ona de l'ona. Bastant sovint, també trobem que $(\nabla\varepsilon)\cdot\mathbf{E} = 0$, per exemple, en blocs periòdics 1D amb incidència normal de llum.

Exercici 8.6. Escollim una longitud característica d'un problema, L_o, i definim una variable $\mathbf{x} \equiv \mathbf{r}/L_o$ sense dimensions. Demostra que tant *a*) l'equació d'ona estàndard que has derivat en l'exercici anterior (equació 1.23), suposant una dependència temporal harmònica d'$\mathbf{E}$, com *b*) l'equació de Schrödinger independent del temps, es poden escriure de la forma

$$\nabla^2_{\mathbf{x}}y(\mathbf{x}) + k^2(\mathbf{x})y(\mathbf{x}) = 0 \tag{1.24}$$

i troba l'expressió per a $k^2(\mathbf{x})$ per a cada una de les equacions.

Què succeeix quan un problema quàntic i un d'electromagnètic tenen el mateix $k^2(\mathbf{x})$?

Solució: Una dependència temporal harmònica de $\mathbf{E}$ vol dir que $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_o(\mathbf{r})e^{i\omega t}$. Si ho introduïm a l'equació (1.23) i usem $\mu\varepsilon(\mathbf{r}) = n^2(\mathbf{r})/c^2$, obtenim que

$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \frac{n^2(\mathbf{r})}{c^2}\omega^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \tag{1.25}$$

i si simplement ens preocupem per l'amplitud del camp elèctric, és a dir, $\mathbf{E}_o(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r})\hat{\mathbf{u}}$, l'equació anterior esdevé

$$\nabla^2 A(\mathbf{r}) + \frac{n^2(\mathbf{r})}{c^2}\omega^2 A(\mathbf{r}) = 0. \tag{1.26}$$

Aquesta equació s'ha de comparar amb una reordenació de l'equació de Schrödinger independent del temps

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})]\phi(\mathbf{r}) = 0, \tag{1.27}$$

de la qual es desprèn que l'estructura matemàtica és idèntica.

Ara, introduint la variable adimensional $\mathbf{x} \equiv \mathbf{r}/L_o$, veiem immediatament que $A(\mathbf{r}) \to A(\mathbf{x})$, $\phi(\mathbf{r}) \to \phi(\mathbf{x})$ i que $\nabla^2 \to L_o^{-2}\nabla^2_{\mathbf{x}}$, de manera que ambdues equacions es poden escriure com

$$\nabla^2_{\mathbf{x}} y(\mathbf{x}) + k^2(\mathbf{x})y(\mathbf{x}) = 0 \tag{1.24}$$

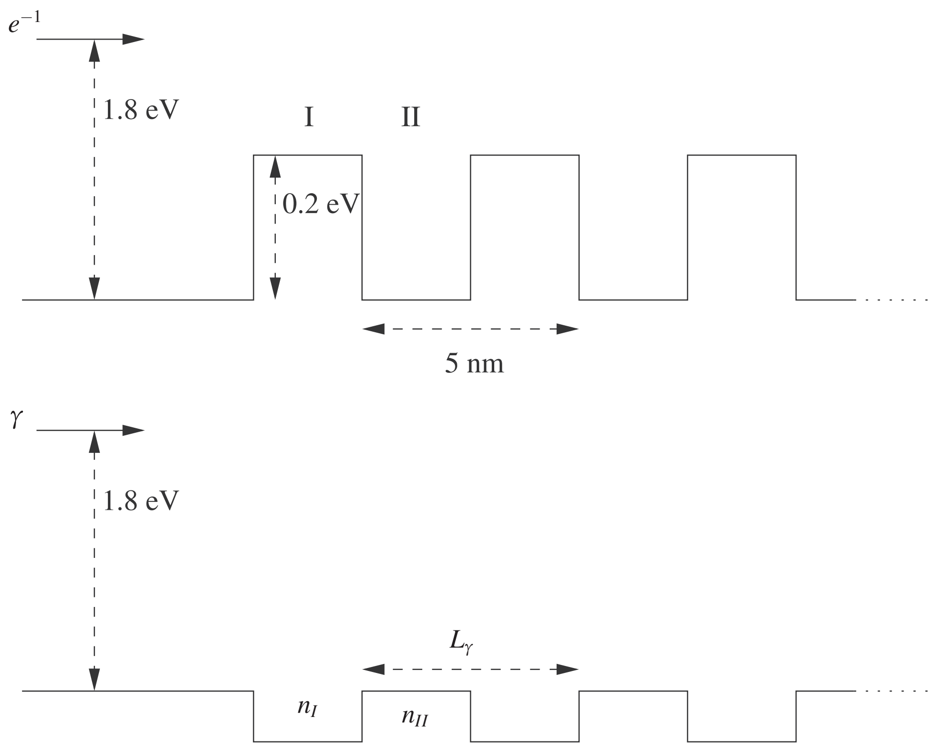
sempre que haguem definit

$$k^2_{em}(\mathbf{x}) = L^2_{o,em}\frac{n^2(\mathbf{r})}{c^2}\omega^2 \qquad \text{o} \qquad k^2_q(\mathbf{x}) = L^2_{o,q}\frac{2m_0}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})], \tag{1.28}$$

en què k^2_{em} (k^2_q) és la funció que ve del problema electromagnètic (quàntic), i $L_{o,em}$ i $L_{o,q}$ són dues longituds característiques de magnituds anàlogues en cada problema. Per exemple, poden ser la longitud d'ona d'un electró i un fotó anàlegs, el període d'una superxarxa per a electrons/fotons o el radi de la regió de confinament d'un nanofil (problema quàntic) i el nucli d'una fibra òptica (problema electromagnètic).

Si un problema electromagnètic i un de quàntic comparteixen la mateixa funció $k^2(\mathbf{x})$, són matemàticament equivalents, i la intuïció que es desenvolupa en un serà útil per analitzar l'altre. Així, veiem que la variació d'espai de l'índex de refracció n pot donar lloc als mateixos fenòmens que els coneguts efectes quàntics originats per una V canviant. En concret, una regió d'n alta (baixa) per fotons és anàloga a una regió de V baixa (alta) per electrons, de manera que el camp electromagnètic té preferència per les regions d'n alta. Això és conseqüència del caràcter d'ona que tenen tant la llum com els electrons. Qualsevol altra entitat descrita per una equació en forma d'ona (els fonons en els sòlids, el so en l'aire, l'aigua en un estany...) també poden, en principi, presentar la mateixa col·lecció d'efectes quàntics.

Exercici 8.7. Un electró amb una energia d'1,8 eV té un gap de transmissió quan entra en una superxarxa amb un període de 5 nm i una altura de barrera de 0,2 eV. Troba el perfil espacial a n que fa que un fotó anàleg d'1,8 eV es comporti de la mateixa manera, en què l'aire sigui un dels materials.



Solució: En el problema quàntic, podem prendre la longitud característica com el període de la superxarxa, $L_{o,q} = 5$ nm. La ràtio de les funcions k per a les regions I i II serà

$$\frac{k^2_{q,I}}{k^2_{q,II}} = \frac{E - V_I}{E - V_{II}} = \frac{1{,}6}{1{,}8} = 0{,}89. \tag{1.29}$$

Ara ho imposem a la ràtio de les funcions k en el problema electromagnètic. Com que se'ns diu que un dels materials és aire ($n = 1$) i sabem que, en principi, $n < 1$ és impossible i, per l'exercici anterior, sabem que les regions amb n baixa corresponen a regions amb V alta, tenim que $n_I = 1$. Per tant:

$$0{,}89 = \frac{k^2_{em,I}}{k^2_{em,II}} = \frac{n_I^2}{n_{II}^2} = \frac{1}{n_{II}^2}, \tag{1.30}$$

d'on obtenim que $n_{II} = 1{,}06$. Veiem que una variació relativament petita de l'índex de refracció en un problema electromagnètic correspon a una variació considerable del potencial experimentat per un electró anàleg.

Per tal de trobar el període de la superxarxa dielèctrica, igualem les funcions k a la regió I, per exemple:

$$k_{q,I}^2 = k_{q,II}^2 \quad \rightarrow \quad L_{o,em}^2 \frac{n_I^2}{c^2}\omega^2 = L_{o,q}^2 \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})] \quad \rightarrow$$

$$\rightarrow \quad L_{o,em}^2 = L_{o,q}^2 \frac{\hbar^2 c^2}{n_I^2 \hbar^2 \omega^2} \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - V(\mathbf{r})], \tag{1.31}$$

i substituïm tots els nombres

$$L_{o,em}^2 = (50\ \text{Å})^2 \frac{(1.973{,}27\ eV \cdot \text{Å})^2}{(1{,}8\ eV)^2} \frac{2}{7{,}62\ eV \cdot \text{Å}^2} 1{,}6\ eV = 1{,}26 \times 10^9 \text{Å}^2. \tag{1.32}$$

I finalment

$$L_{o,em} = 3{,}55\ \mu m \tag{1.33}$$

serà el període de la superxarxa dielèctrica equivalent. Això és bastant usual, atès que les longituds d'ona dels electrons són habitualment un factor 10^3 més petites que les longituds d'ones òptiques dels fotons quan l'electró i el fotó tenen la mateixa energia, dins el rang de $10^{-1} - 10^1$ eV.

Referències

1 Tipler, P.A.; Mosca, G. (2010). *Física per a la ciència i la tecnologia*. Vol. II: *Electricitat i magnetisme, la llum, física moderna: mecànica quàntica, relativitat i estructura de la matèria*. Barcelona: Reverté.

2 Einstein, A. (1999). *Einstein en català*: *Els tres cèlebres articles de 1905 publicats amb motiu del 75è aniversari de la seva visita a Barcelona*. Barcelona: Institut d'Estudis Catalans.

3 French, A.P.; Taylor, E.F. (1982). *Introducción a la física cuántica*. Barcelona: Reverté.

4 Brandt, S.; Dahmen, H.D. (2012). *The Picture Book of Quantum Mechanics*. Nova York: Springer.

5 Lüth, H. (2012). *Quantum Physics in the Nanoworld*: *Schrödinger's cat and the dwarfs*. Nova York: Springer.

6 Feynman, R.P; Leighton, R.B.; Sands, M. (1987). *Física*. Vol. III: *Mecánica cuántica*. Argentina: Addison-Wesley Iberoamericana.