Considere una partícula de masa m confinada en un cascarón esférico con un potencial central

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & \text{si } 0 < r < r_0 \\ 0 & \text{si } r_0 < r < r_0 + a \\ +\infty & \text{si } r > r_0 + a, \end{cases}$$

con $r_0, a > 0$.

(a) Considere la parte radial de las autofunciones de $\hat{H}$. Escriba la ecuación diferencial del problema unidimensional equivalente. Para $\ell = 0$, halle las autofunciones normalizadas y encuentre explícitamente los niveles de energía.

(b) Halle la expresión $\Psi(\mathbf{r}, t)$ $\forall t$ sabiendo que $\Psi(\mathbf{r}, 0) = A \operatorname{sen}[4\pi(r - r_0)/a]$ para $r_0 < r < r_0 + a$, y $\Psi(\mathbf{r}, 0) = 0$ en todo otro lado. (Cuidado: $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ *no* es autofunción de $\hat{H}$).

(c) Dada la función de onda del inciso anterior, sabiendo que $a = r_0/12$ y que $A = \sqrt{27/(5r_0^3)}$, hallar $\forall t$ la probabilidad de obtener E_2, E_4 y E_6 como resultado de medir $\hat{H}$, siendo E_n el n-ésimo nivel de energía.

Fórmulas útiles:

$$\int_0^a dx \ \operatorname{sen}(n\pi x/a) \operatorname{sen}(n'\pi x/a) = \frac{a}{2}\delta_{nn'}$$

$$2 \operatorname{sen}\alpha \operatorname{sen}\beta = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$$

$$\int dx\, x \cos[\alpha(x - x_0)] = \tfrac{x}{\alpha} \operatorname{sen}[\alpha(x - x_0)] + \tfrac{1}{\alpha^2} \cos[\alpha(x - x_0)]$$

(a) Como vimos en clase, el problema unidimensional equivalente se obtiene planteando la siguiente forma para las autofunciones de $\hat{H}$:

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

que es una solución con la parte angular y radial separadas, siendo Y_{lm} los armónicos esféricos. Haciendo el cambio de variables (visto en clase) $u(r) = r\, R(r)$ y reemplazándolo en la ecuación diferencial que debe satisfacer R, resulta

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left[-\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m(E - V(r))}{\hbar^2}\right] u = 0, \tag{1}$$

con lo cual el problema radial se reduce a la ecuación de Schrödinger unidimensional con el agregado de un potencial centrífugo dependiente del número cuántico l (el índice del armónico esférico correspondiente).

(b) Para la autofunción con $l = 0$, la ecuación diferencial en la región $r_0 < r < r_0 + a$ es

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0,$$

pues allí $V(r) = 0$. Como además en el resto del espacio el potencial es infinito, proponemos la solución

$$u(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0 \\ A \operatorname{sen} k(r - r_0), & r_0 \leq r \leq r_0 + a \\ 0, & r \geq r_0 + a, \end{cases} \tag{2}$$

con

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{3}$$

El seno se escogió trasladado para que se cumpla automáticamente la condición de continuidad de ψ (que equivale a la de u) en $r = r_0$.

De la condición de continuidad de ψ en $r = r_0 + a$ se desprende que

$$\operatorname{sen} ka = 0$$

(pues $A \neq 0$, porque buscamos soluciones en principio no nulas), lo cual impone una restricción sobre los posibles valores de k:

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n \in \mathbb{N}, \tag{4}$$

que, despejando de (3), determina los niveles de energía:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad n \in \mathbb{N}, \tag{5}$$

donde los n se eligieron sólo en $\mathbb{N}$ (y no sobre $\mathbb{Z}$) para que el conjunto de las ψ_n sea linealmente independiente (esto es, no aparezcan autofunciones repetidas ni la autofunción nula).

En la solución propuesta queda por determinar el A, que es tarea de la normalización. Para ponerla en juego, escribamos las soluciones para $l = 0$, teniendo en cuenta que $R = u/r$:

$$\psi_{n00}(\mathbf{r}) = A_n \frac{\operatorname{sen} k_n(r - r_0)}{r} Y_{00}(\theta, \varphi), \qquad \text{para } r_0 < r < r_0 + a$$

donde además tuvimos en cuenta que, en Y_{lm}, para $l = 0$ el único valor posible de m es $m = 0$. La condición de normalización se expresa

$$1 = \int_{R^3} d^3r \, |\psi_{n00}(\mathbf{r})|^2,$$

que en coordenadas esféricas es

$$1 = \int_0^{+\infty} dr \, r^2 \int d\Omega \, |\psi_{n00}(\mathbf{r})|^2 = |A_n|^2 \int_{r_0}^{r_0+a} dr \, r^2 \frac{\operatorname{sen}^2 k_n(r - r_0)}{r^2} \int d\Omega \, |Y_{00}|^2.$$

Ahora bien: por la condición de normalización de los Y_{lm}, la integral sobre $d\Omega$ es igual a 1, mientras que la integral sobre r involucra integrar $\operatorname{sen}^2 [n\pi(r - r_0)/a]$. Haciendo una traslación $r - r_0 \to r$, queda la primera integral que se da como ayuda en el enunciado (en el caso especial $m = n$), cuyo resultado, como $m = n$, es $a/2$:

$$1 = |A_n|^2 \, \frac{a}{2}.$$

Por lo tanto, se puede tomar $A_n = \sqrt{2/a}$, con lo que las autofunciones normalizadas resultan ser

$$\psi_{n00}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\operatorname{sen} k_n(r - r_0)}{r} Y_{00}(\theta, \varphi), \qquad \text{para } r_0 < r < r_0 + a. \tag{6}$$

Es útil observar que esta función tiene simetría esférica (o sea, es independiente de (θ, φ)), puesto que $Y_{00} \equiv 1/\sqrt{4\pi}$ es el único armónico esférico que la tiene.

(c) El objetivo es determinar la evolución temporal $\Psi(\mathbf{r}, t)$ conocido $\Psi(\mathbf{r}, 0)$. Como $\hat{H}$ es independiente del tiempo, el problema queda resuelto si se puede expresar $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ como combinación lineal de las autofunciones ψ_{nlm} de $\hat{H}$, puesto que, si

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_{nlm} c_{nlm} \psi_{nlm} \tag{7}$$

entonces la función de onda de la partícula, a tiempo arbitrario, tiene la expresión

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{nlm} c_{nlm} \psi_{nlm} e^{-iE_{nlm}t/\hbar}, \tag{8}$$

donde E_{nlm} es el autovalor asociado a ψ_{nlm}. El problema, entonces, es el de hallar las c_{nlm} para poder escribir concretamente la expresión (8), conocidas las autofunciones ψ_{nlm} y los autovalores E_{nlm}.

Obsérvese, primero, que como $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ es independiente de (θ, ϕ), en la combinación lineal de (7) el único valor admisible de l y de m es 0. Aunque no se pide explícitamente, una forma de pensarlo es la siguiente: fijado r, la función $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ es constante en (θ, φ), de modo que es un múltiplo escalar de Y_{00}, el único armónico esférico constante. Si $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ fuera combinación lineal de Y_{lm} con $(l, m) \neq 0$, entonces se podría escribir Y_{00} como combinación lineal de Y_{lm} distintos, lo cual contradice que los Y_{lm} sean linealmente independientes (que lo son, por ser ortonormales).

Por lo tanto, la expresión (7) se puede escribir un poco más brevemente:

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \sum_n c_n \psi_n, \tag{9}$$

donde escribimos n en vez de $n00$ para descargar la notación. Vemos así que, afortunadamente, para este problema, no es necesario conocer las autofunciones y las energías para $l \neq 0$, de modo que podemos intentar una solución a partir de lo hecho en los incisos anteriores. (Si la función de onda inicial tuviera alguna dependencia angular, no habría salvación posible).

Pasemos al problema de determinar los coeficientes c_n. Reemplacemos miembro a miembro lo que ya conocemos:

$$A \operatorname{sen}\left[\tfrac{4\pi}{a}(r-r_0)\right] = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\operatorname{sen}\left[\frac{n\pi}{a}(r-r_0)\right]}{r} Y_{00}.$$

De aquí en más omitiremos que la igualdad es válida para $r_0 < r < r_0 + a$. Pasando lo que no depende de n al miembro izquierdo:

$$A\sqrt{2\pi a}\, r \operatorname{sen}\left[\tfrac{4\pi}{a}(r-r_0)\right] = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \operatorname{sen}\left[\tfrac{n\pi}{a}(r-r_0)\right], \tag{10}$$

vemos que del lado derecho tenemos una serie trigonométrica de Fourier. Uno puede recordar la fórmula de los coeficientes de la serie:

$$c_n = \frac{2}{a}\int_{r_0}^{r_0+a} dr\, A\sqrt{2\pi a}\, r \operatorname{sen}\left[\tfrac{4\pi}{a}(r-r_0)\right] \operatorname{sen}\left[\tfrac{n\pi}{a}(r-r_0)\right]. \tag{11}$$

Los límites de integración pueden resultar un tanto extraños: ¿la integral no va de 0 a a en estos casos? Pero por otro lado, ¿qué sentido tendría integrar en el intervalo $[0,a]$ la función del miembro izquierdo de (10), si en ese intervalo no describe a la función de onda? La salida, en Física 2 y Mate 4, consistía en reconocer la validez de (10) en el intervalo $[r_0, r_0+a]$, y después pasar a extender esa igualdad a toda la recta, suponiendo que la función de la izquierda repite su *forma* a ambos lados del intervalo $[r_0, r_0+a]$. Entonces, como la igualdad ahora involucra de *ambos* lados una función que tiene período a en toda la recta, la integral se puede hacer sobre cualquier intervalo de longitud a; y se elige el intervalo $[r_0, r_0+a]$ para que la fórmula coincida con el miembro izquierdo de (10). Hay que notar que la igualdad (10), independientemente del dominio en el que se la exprese, es matemática, y no tiene nada que ver con lo que ocurra con $\Psi(\mathbf{r},0)$ fuera del intervalo $[r_0, r_0+a]$.

Para los que no recuerdan la fórmula de los coeficientes de la serie, está la ayuda que pusimos en el enunciado. Una forma natural de involucrarla es haciendo el cambio de variables $r - r_0 = x$, luego multiplicar ambos lados de (10) por $\operatorname{sen}(m\pi x/a)$, e integrar en $x \in [0,a]$. A la derecha, se obtiene

$$\begin{aligned}\int_0^a dx \sum_{n=1}^{\infty} c_n \operatorname{sen}(n\pi x/a)\operatorname{sen}(m\pi x/a) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a dx \operatorname{sen}(n\pi x/a)\operatorname{sen}(m\pi x/a) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \frac{a}{2}\delta_{nm} = c_m \frac{a}{2}. \end{aligned} \tag{12}$$

A la izquierda, integrar con $x \in [0, a]$ es equivalente a integrar con $r \in [r_0, r_0 + a]$ con lo cual, deshaciendo el cambio de variables $x = r - r_0$, se obtiene

$$\int_{r_0}^{r_0+a} dr\, A\sqrt{2\pi a}\, r \operatorname{sen}[\tfrac{4\pi}{a}(r - r_0)] \operatorname{sen}[\tfrac{m\pi}{a}(r - r_0)]. \tag{13}$$

De comparar (12) y (13) se ve que llegamos a (11), salvo por un cambio de nombre del índice n.

Para atacar el problema del cálculo de la integral para cada n, usamos la ayuda para escribir

$$\operatorname{sen}[\tfrac{4\pi}{a}(r - r_0)] \operatorname{sen}[\tfrac{n\pi}{a}(r - r_0)] = \frac{1}{2}\{\cos[\tfrac{(4-n)\pi}{a}(r - r_0)] - \cos[\tfrac{(4+n)\pi}{a}(r - r_0)]\}. \tag{14}$$

Cada uno de estos cosenos va multiplicado por r e integrado en $r \in [r_0, r_0 + a]$. Las primitivas se dan en la ayuda del enunciado, pero conviene echar un ojo a la situación antes de escribirlas: al reemplazar los límites de integración, los argumentos de las funciones trigonométricas darán 0 o un múltiplo de π. Por lo tanto, al aplicar la regla de Barrow, los términos con senos se anulan; de las integrales, con $\alpha = \frac{(4\mp n)\pi}{a}$, sale

$$\begin{aligned} &\frac{a^2}{\pi^2}\left(\frac{\cos(4-n)\pi - \cos 0}{(4-n)^2} - \frac{\cos(4+n)\pi - \cos 0}{(4+n)^2}\right) \\ &\qquad = \frac{a^2}{\pi^2}[(-1)^n - 1]\left[\frac{1}{(n-4)^2} - \frac{1}{(n+4)^2}\right], \end{aligned} \tag{15}$$

donde se usó, por ejemplo, que $\cos(4-n)\pi = (-1)^{4-n} = (-1)^{-n} = (-1)^n$. Finalmente, juntando todas las constantes, los coeficientes se expresan

$$c_n = A\sqrt{\frac{2a^3}{\pi^3}}[(-1)^n - 1]\left[\frac{1}{(n-4)^2} - \frac{1}{(n+4)^2}\right]. \tag{16}$$

Evidentemente esta expresión es válida sólo para $n \neq 4$, puesto que la integral (12) debe ser acotada para todo n. Un vistazo a los cosenos (14) del integrando hace ver qué ocurre en el caso $n = 4$: el primero de ellos es igual a la función 1, y por lo tanto, al estar multiplicado por r, el primer término en (15) se integra a $[(r_0 + a)^2 - r_0^2]/2$, mientras que el segundo, al quedar como está, da igual a 0. Luego

$$c_4 = A\sqrt{\frac{\pi}{8a}}[(r_0 + a)^2 - r_0^2] = A\sqrt{\frac{\pi a}{8}}(2r_0 + a). \tag{17}$$

Finalmente, ya hallada la expresión explícita de los c_n, dejamos expresada la evolución del estado de la partícula:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{18}$$

donde las ψ_n y las E_n fueron encontradas en el inciso (b).

(d) Como vimos en clase, los posibles valores medibles de un observable $\hat{A}$ son sus autovalores a_k, y dado un sistema con estado ψ, la probabilidad de obtener el número a_k como resultado de medir $\hat{A}$ viene dada por su descomposición en una base de autofunciones de $\hat{A}$, de la siguiente manera: si es posible expresar

$$\psi = \sum_k b_k \varphi_k,$$

donde φ_k es un autovector *normalizado* de $\hat{A}$ asociado al autovalor a_k, entonces la interpretación probabilística dice que la probabilidad de obtener el número a_k como resultado de medir $\hat{A}$ viene dada por

$$\text{prob}(\hat{A} = a_k) = |b_k|^2.$$

La expresión anterior sirve para el caso en que para cada autovalor de $\hat{A}$ hay un único autovector linealmente independiente (caso *no degenerado*). Si para un autovalor a_k hay varios autovectores linealmente independientes, digamos $\varphi_{k,\alpha}$ decimos que a_k, o el autoespacio asociado a a_k, está *degenerado*. En ese caso la descomposición más general es

$$\psi = \sum_{k,\alpha} b_{k,\alpha}\varphi_{k,\alpha},$$

donde, fijado k, todos los $\varphi_{k,\alpha}$ son autovectores normalizados asociados al mismo autovalor a_k. En esta situación, la probabilidad de más arriba tiene la expresión

$$\text{prob}(\hat{A} = a_k) = \sum_{\alpha} |b_{k,\alpha}|^2,$$

es decir, hay que sumar los módulos al cuadrado de todos los coeficientes de todas las autofunciones asociadas al autovalor considerado.

En este caso no existe degeneración, así que con la primera fórmula alcanza. Al considerar una medición de $\hat{H}$, hay que manejarse con una descomposición de $\Psi\mathbf{r}, t$ en base de autofunciones de $\hat{H}$. Pero eso ya lo hemos encontrado: es justamente (18), con lo cual

$$\text{prob}(\hat{H} = E_n) = |c_n e^{-iE_n t/\hbar}|^2 = |c_n|^2,$$

donde la expresión de los c_n está en (16) y (17). Obsérvese que todas las probabilidades son independientes de t. Para calcular las probabilidades de medir E_2 y E_6, usando (16), vemos que

$$\text{prob}(\hat{H} = E_2) = \text{prob}(\hat{H} = E_6) = 0, \tag{19}$$

y que lo mismo pasa para cualquier otro n par. Pero el caso $n = 4$ es diferente. Reemplazando en (17) los datos del enunciado, llegamos a que

$$\text{prob}(\hat{H} = E_4) = \left| \sqrt{\frac{27}{5\pi r_0^3}} \sqrt{\frac{\pi(r_0/12)}{8}} (2r_0 + r_0/12) \right|^2 = \frac{125}{128}. \tag{20}$$