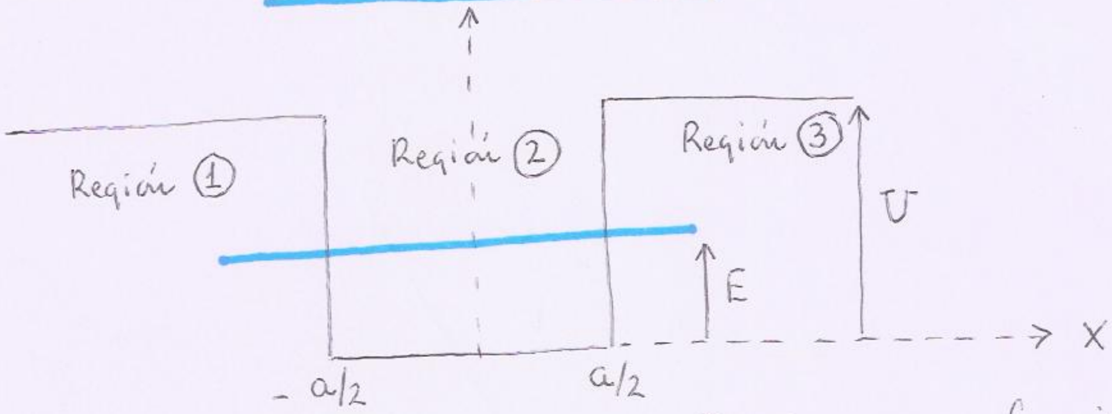
Pozo de potencial



En la región ②, la autofunción $\Phi_2(x)$ es una función oscilatoria porque $E > U$. En las regiones ① y ③, las correspondientes autofunciones no oscilan con x.

$$\Phi_1(x) = A e^{\kappa x} + \cancel{B}^{\,0} e^{-\kappa x} \quad ; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \qquad (1)$$

$$\Phi_2(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx} \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (2)$$

$$\Phi_3(x) = F e^{-\kappa x} + \underset{0}{\cancel{G}} e^{\kappa x} \quad ; \qquad (3)$$

Ya que la energía potencial U es una función par, esto es, $U(-x) = U(x)$, se espera que

$$|\Psi(-x)|^2 = |\Psi(x)|^2 \Rightarrow \Psi(-x) = \pm \Psi(x) \qquad (4)$$

El signo $+$ corresponde a autofunciones pares y el signo $-$ corresponde a autofunciones impares.

Para funciones pares:

$$\Phi_1(-x) = \Phi_3(-x) \Rightarrow A e^{\kappa x} = F e^{\kappa x} \Rightarrow A = F \qquad (5)$$

$$\Phi_2(-x) = \Phi_2(x) \Rightarrow C e^{-ikx} + D e^{ikx} = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$$

$$\Rightarrow C\left(e^{-ikx} - e^{ikx}\right) = D\left(e^{-ikx} - e^{ikx}\right)$$

$$\Rightarrow C = D \qquad (6)$$

(1), (2), (3), (4), (5) y (6) $\Rightarrow$

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A\, e^{\varkappa x} & (7) \\ \Phi_2(x) = C\, e^{ikx} + C\, e^{-ikx} & (8) \\ \Phi_3(x) = A\, e^{-\varkappa x} & (9) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A\, e^{\varkappa x} & (10) \\ \Phi_2(x) = c'\, \cos(kx) & (11) \\ \Phi_3(x) = A\, e^{-\varkappa x} & (12) \end{cases}$$

Condiciones de borde en $x = -a/2$ y $x = a/2$:

$$\Phi_1 \Big|_{x=-a/2} = \Phi_2 \Big|_{x=-a/2} \Rightarrow A\, e^{-\varkappa a/2} = c' \cos\left(-k\tfrac{a}{2}\right) \qquad (13)$$

$$\frac{d\Phi_1}{dx}\Big|_{x=-a/2} = \frac{d\Phi_2}{dx}\Big|_{x=-a/2} \Rightarrow \varkappa A\, e^{-\varkappa a/2} = -k\, c' \operatorname{Sen}\left(-k\tfrac{a}{2}\right) \qquad (14)$$

$$\Phi_2 \Big|_{x=a/2} = \Phi_3 \Big|_{x=a/2} \Rightarrow c' \cos\left(k\tfrac{a}{2}\right) = A\, e^{-\varkappa a/2} \qquad (15)$$

$$\frac{d\Phi_2}{dx}\Big|_{x=a/2} = \frac{d\Phi_3}{dx}\Big|_{x=a/2} \Rightarrow -k\, c' \operatorname{Sen}\left(k\tfrac{a}{2}\right) = -\varkappa A\, e^{-\varkappa a/2} \qquad (16)$$

Dividiendo (14) entre (13) ó (16) entre (15) :

$$k \tan\left(k\tfrac{a}{2}\right) = \varkappa \qquad (17)$$

$$k\tfrac{a}{2} \tan\left(k\tfrac{a}{2}\right) = \varkappa\tfrac{a}{2} \qquad (18)$$

con $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ y $\varkappa = \dfrac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$ (19)

Definiendo $k\dfrac{a}{2} = x$ (20) $\qquad \varkappa\dfrac{a}{2} = y$ (20)'

$$\frac{\sqrt{2mU}}{\hbar}\frac{a}{2} = r \qquad (21)$$

$$(19) \Rightarrow y = \kappa \frac{a}{2} = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}\,\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}\left(\frac{a}{2}\right)^2}$$

$$y = \kappa \frac{a}{2} = \sqrt{\frac{m(U-E)a^2}{2\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mUa^2}{2\hbar^2} - \frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \qquad (22)$$

$$(20) \Rightarrow x = k\frac{a}{2} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\,\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \qquad (23)$$

$$(21) \Rightarrow r = \frac{\sqrt{2mU}}{\hbar}\,\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{mUa^2}{2\hbar^2}} \qquad (24)$$

$$(22), (23) \text{ y } (24) \Rightarrow y = \sqrt{r^2 - x^2} \qquad (25)$$

La ecuación (25) representa una circunferencia de radio r definido por la ecuación (24), donde las coordenadas x y Y son:

$$x = k\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \qquad (26)$$

$$y = \kappa\frac{a}{2} = \sqrt{\frac{mUa^2}{2\hbar^2} - \frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \qquad (27)$$

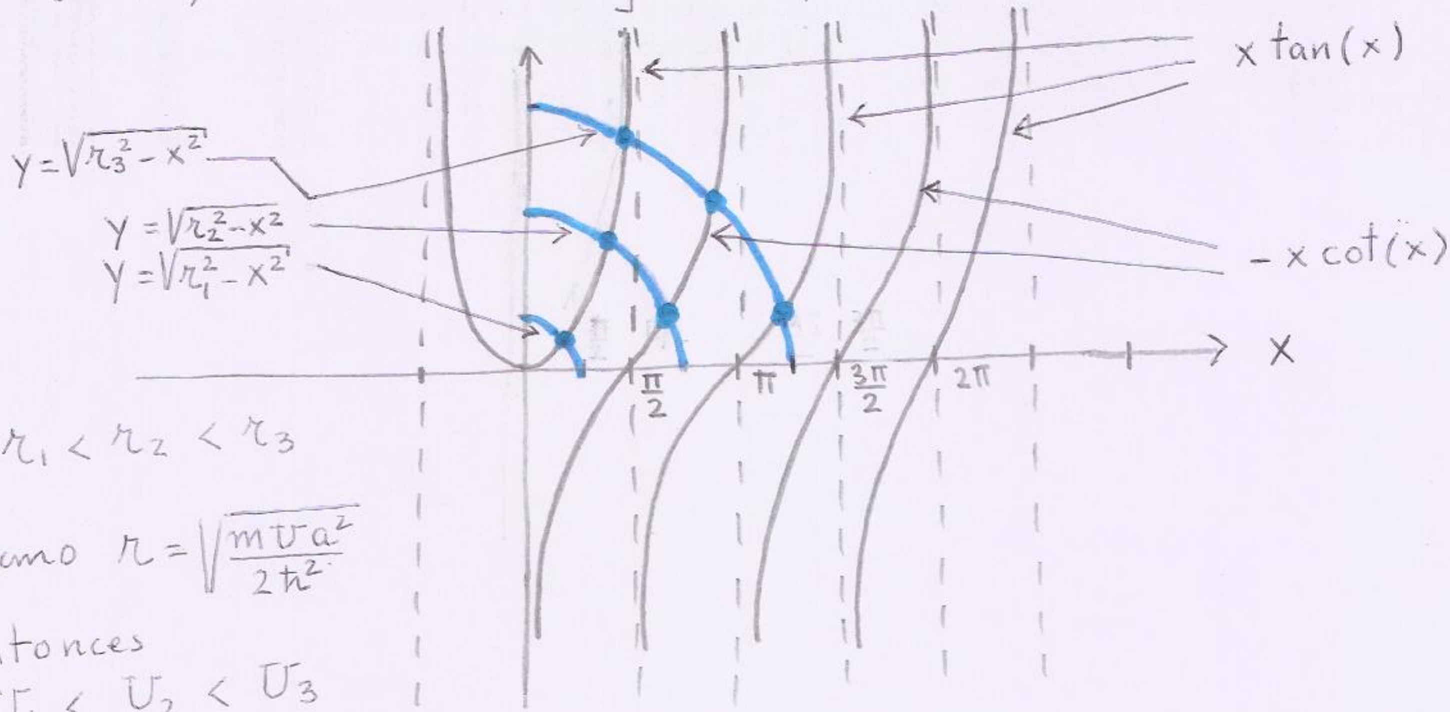
Por otro lado, la ecuación (18), usando las ecuaciones (26) y (27), puede expresarse como

$$x\tan(x) = Y \qquad (28)$$

Las ecuaciones (10), (11) y (12) nos dan las expresiones de las autofunciones pares que son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

¿Cómo podemos calcular la energía E asociada a cada autofunción par?

Hay que interceptar la ecuación (25) con la (28), obtener x y luego determinar E.



$r_1 < r_2 < r_3$

Como $r = \sqrt{\frac{mU a^2}{2\hbar^2}}$

entonces
$U_1 < U_2 < U_3$

$\Downarrow$

Mientras más profundo es el pozo, más estados con diferentes energías E existen.

Sugerencia para el estudiante: a) Demostrar que para autofunciones impares se cumple que $-x\cot(x) = y$.

b) Obtener las autofunciones impares.

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A\, e^{\kappa x} & (29) \\ \Phi_2(x) = C'\,\mathrm{Sen}(kx) & (30) \\ \Phi_3(x) = -A\, e^{-\kappa x} & (31) \end{cases}$$

¿Cómo se obtienen las constantes A y c' de las autofunciones pares (Ecs. (10), (11) y (12)) y de las autofunciones impares (Ecs. (29), (30), (31))?

Para autofunciones pares:

$$(13) \Rightarrow \quad A = c' e^{\kappa a/2} \cos\left(k \frac{a}{2}\right) \qquad (32)$$

Podemos re-escribir las autofunciones pares como

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = c' e^{\kappa a/2} \cos\left(k \frac{a}{2}\right) e^{\kappa x} & (33) \\ \Phi_2(x) = c' \cos(kx) & (34) \\ \Phi_3(x) = c' e^{\kappa a/2} \cos\left(k \frac{a}{2}\right) e^{-\kappa x} & (35) \end{cases}$$

Para obtener c', normalizamos la función de onda:

$$\int_{-\infty}^{-a/2} \Phi_1^*(x)\,\Phi_1(x)\,dx + \int_{-a/2}^{a/2} \Phi_2^*(x)\,\Phi_2(x)\,dx + \int_{a/2}^{\infty} \Phi_3^*(x)\,\Phi_3(x)\,dx = 1 \quad (3$$

si se conoce a, U y E

De (36) obtenemos c'. Es claro que en este punto del cálculo k y κ son conocidas porque se ha determinado E a partir de las ecuaciones (25) y (28). Hay que recordar que a partir de estas dos ecuaciones se obtiene κ (puntos de intercepción de las curvas de la figura mostrada en la pag. 4 de este documento) y a partir de

$x = \sqrt{\dfrac{mEa^2}{2\hbar^2}}$ se obtiene E si se conoce

m, a y U (ver también ecs. (24) y (25)).

Para las autofunciones impares:

El método para obtener A y C' (ver ecuaciones (29), (30) y (31)) es similar al realizado con las autofunciones pares. Se deja a los estudiantes.

Ver Fig. 6.26, pag. 256, Eisberg - Resnick.
(Las tres autofunciones correspondientes a los estados de más baja energía de un pozo de potencial finito)

Nota: ① Observe la simetria de cada autofunción.

② Cada vez que se tenga que $U = U(-x)$, es decir, cuando la energie potencial es una función par (escogiendo un sistema de coordenadas apropiado), las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente de t serán autofunciones pares o impares. Esto solamente ocurre cuando se usa un sistema de coordenadas donde U sea una función par.

¿Qué pasa cuando $U \to \infty$?

$\Rightarrow$ Pozo de potencial infinito

¿Autofunciones?

Veamos : $\quad \chi = \dfrac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \chi \to \infty \qquad (37)$

Recordemos que :

a) Autofunciones pares
$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A\, e^{\chi x} & x \leq -a/2 \quad (38) \\ \Phi_2(x) = c' \, Cos(kx) & -a/2 \leq x \leq a/2 \quad (39) \\ \Phi_3(x) = A\, e^{-\chi x} & x \geq a/2 \quad (40) \end{cases}$$

b) Autofunciones impares
$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A\, e^{\chi x} & x \leq -a/2 \quad (41) \\ \Phi_2(x) = c' \, Sen(kx) & -a/2 \leq x \leq a/2 \quad (42) \\ \Phi_3(x) = -A\, e^{-\chi x} & x \geq a/2 \quad (43) \end{cases}$$

$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (44)$

✓ Cuando $U \to \infty$ y por lo tanto $\chi \to \infty$ las autofunciones Φ_1 y Φ_3 (tanto pares como impares) son nulas.

✓ Esto quiere decir que la partícula experimenta una repulsión "infinita" que "no le permite" a la partícula existir en $x \geq +a/2$ y $x \leq -a/2$.

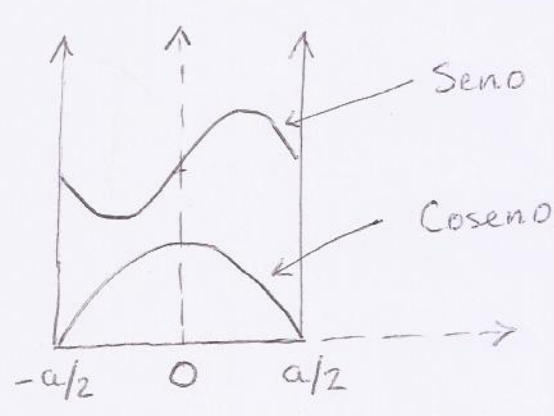
✓ Para que haya continuidad en la autofunción $\Phi_2(x)$ (par o impar) debe ser nula en $x = -a/2$ y $x = a/2$.

✓ No hay continuidad en la primera derivada de la autofunción porque la derivada segunda $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}$ es infinita pues $U \to \infty$. Recuérdese que

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U-E)\,\Phi(x) \qquad (45)$$

de tal forma que si $U \to \infty$ (caso hipotético) entonces $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} \to \infty$ y por consiguiente $\frac{d\Phi}{dx}$ es discontinua.

✓ La "primera" autofunción $\Phi_2(x)$ es un coseno, la "segunda" es un seno, la tercera es un coseno, ... <u>OJO</u>: La alternancia entre funciones cosenos y senos se debe a la escogencia del sistema de coordenadas con el origen en la mitad del pozo. Si se selecciona otro origen, las autofunciones no alternarán entre funciones pares e impares.



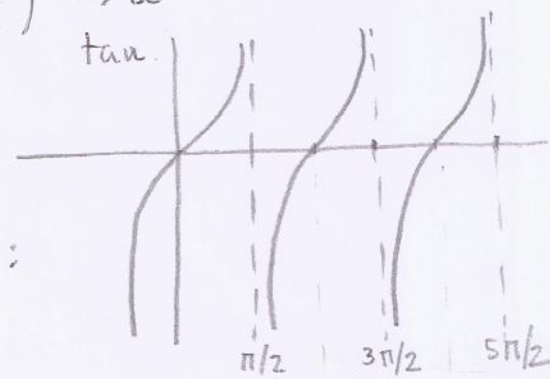
¿Qué ocurre con los valores de E cuando el pozo es "infinito" $(U \to \infty)$?

Veamos que pasa con las autofunciones pares:

Para ellas se cumple que

$$k \tan\left(k \frac{a}{2}\right) = \chi \qquad (46)$$

Si $U \to \infty \Rightarrow \chi \to \infty \Rightarrow \tan\left(k\frac{a}{2}\right) \to \infty$ (47)



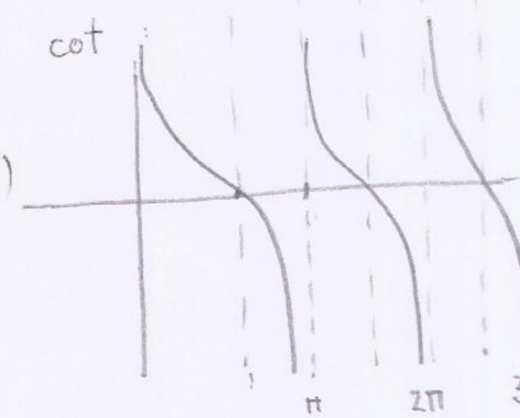
$$k\frac{a}{2} = \frac{\pi}{2},\ 3\frac{\pi}{2},\ 5\frac{\pi}{2} \qquad (48)$$

Y ahora las autofunciones impares:

$$-k \cot\left(k\frac{a}{2}\right) = \chi \qquad (49)$$

$$\cot\left(k\frac{a}{2}\right) = -\frac{\chi}{k} \qquad (50)$$

$$\chi \to \infty \Rightarrow \cot\left(k\frac{a}{2}\right) \to -\infty \qquad (51)$$



$$k\frac{a}{2} = \pi,\ 2\pi,\ 3\pi,\ \ldots\ldots \qquad (52)$$

(48) y (52) $\Rightarrow$ los valores de $k\frac{a}{2}$ son

$$k\frac{a}{2} = \frac{\pi}{2},\ \pi,\ \frac{3\pi}{2},\ 2\pi,\ 5\frac{\pi}{2},\ 3\pi,\ \ldots\ldots$$

$$= \frac{\pi}{2},\ \frac{2\pi}{2},\ 3\frac{\pi}{2},\ 4\frac{\pi}{2},\ 5\frac{\pi}{2},\ 6\frac{\pi}{2},\ \ldots\ldots \qquad (53)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (54)$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}\frac{a}{2} = n\frac{\pi}{2} \qquad \text{con} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\frac{2mE_n a^2}{\hbar^2 \; 4} = n^2\frac{\pi^2}{4} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \qquad (55)$$

Autofunciones de onda pares

n = impar = 1, 3, 5, 7, ... $\qquad E_n = \dfrac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad (56)$

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = 0 & (57) \\ \Phi_2(x) = c' \cos(kx) & (58) \\ \Phi_3(x) = 0 & (59) \end{cases}$$

$$k = ? \qquad k = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = \frac{\sqrt{\frac{2m\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a}$$

$$\Phi_2 = c' \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$c' = ?$

Normalización $\Rightarrow \displaystyle\int_{-a/2}^{a/2} \Phi_2^* \Phi_2 \, dx = 1$

$$c'^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 2c'^2 \int_0^{a/2} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 2c'^2 \frac{a}{n\pi}\int_0^{a/2} \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) d\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$= 2c'^2 \frac{a}{n\pi}\int_0^{n\pi/2} \cos^2\xi \, d\xi = 2c'^2\frac{a}{n\pi}\int_0^{n\pi/2}\left(\frac{\cos 2\xi + 1}{2}\right) d\xi = c'^2 \frac{a}{n\pi}\left(\frac{\operatorname{Sen} 2\xi}{2} + \xi\right)\Bigg|_0^{\frac{n\pi}{2}}$$

$$= c'^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow c' = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \text{(independiente de } n\text{)}$$