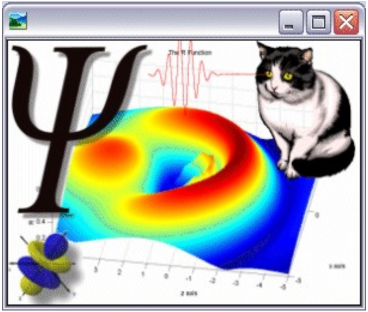
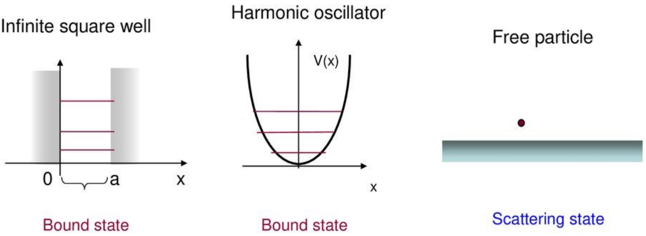
Estados ligados en el pozo finito de potencial

Clara Herrera, Juan Nario



Introducción

En mecánica clásica un potencial independiente del tiempo puede corresponderse con dos tipos de movimiento: con estado ligado o con estado de dispersión.



En definitiva:

- Estado ligado: $E < V(+\infty)$ y $E < V(-\infty)$
- Estado de dispersión: $E > V(+\infty)$ o $E > V(-\infty)$

Introducción

Generalmente tenemos $V(-\infty) = V(+\infty) = 0$, por lo que las condiciones anteriores se convierten en

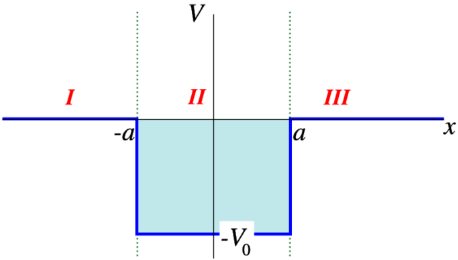
- Estado ligado: $E < 0$
- Estado de dispersión: $E > 0$

Nuestro objetivo es trabajar con un caso análogo para la mecánica cuántica. Buscamos soluciones a la ecuación de Schrödinger que describan estados ligados y sus respectivos niveles de energía.

Pozo finito

El potencial que vamos a estudiar es el llamado pozo finito de potencial.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & si \quad x < -a \\ -V_0 & si \quad -a \leq x \leq a \\ 0 & si \quad x > a \end{cases}$$



Naturalmente, vamos a separar el estudio según las regiones dadas por el potencial.

Prohibido olvidar

- Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u = \frac{2mV}{\hbar^2} u$$

- Las soluciones deben ser de cuadrado integrable, continuas y con derivada continua.

Región 1 ($x < -a$)

Al tener $V = 0$ la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = \underbrace{-\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\alpha^2} u(x)$$

Las soluciones a esta ecuación son de la forma

$$u(x) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{-\alpha x}$$

Notar que $e^{-\alpha x}$ diverge cuando $x \to -\infty$, por lo que $e^{-\alpha x}$ no es de cuadrado integrable en $(-\infty, -a)$. Por otro lado, $e^{\alpha x}$ sí lo es. Entonces nos tomamos

$$u(x) = Ae^{\alpha x} \quad (x < -a)$$

Región 3 ($x > a$)

Este caso es análogo al anterior. Por lo que la solución también ha de ser de la forma

$$u(x) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{-\alpha x}$$

Pero ahora al tomar $x > a$, el término que nos interesa eliminar es $C_1 e^{\alpha x}$, pues diverge al tomar $x \to \infty$. Tenemos así

$$u(x) = Be^{-\alpha x} \qquad (x > a)$$

Región 2 ($-a \leq x \leq a$)

Ahora $V = -V_0$ y la ecuación a resolver es

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}_{q^2} u(x)$$

Recordar que $E - V = K \geq 0$. Además, si $E = V$ tendríamos una ecuación cuya solución es trivial $u = 0$. Obviemos ese caso.

Las soluciones a esta ecuación son de la forma

$$u(x) = C \cos qx + D \sin qx \qquad (-a \leq x \leq a)$$

que son de cuadrado integrable en $[-a, a]$ pues son funciones acotadas.

Solución general

Juntando las tres regiones tenemos

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & si \quad x < -a \\ \\ C\cos qx + D\sin qx & si \quad -a \le x \le a \\ \\ Be^{-\alpha x} & si \quad x > a \end{cases}$$

Aún no terminamos, ya que tenemos que imponer las condiciones de borde, lo que nos va a dar relaciones entre los coeficientes A, B, C, D.

Con condiciones de borde nos referimos a que tanto $u(x)$ como $du(x)/dx$ tienen que ser continuas en a y $-a$.

Condiciones de borde

Igualamos $(du/dx)(1/u)$ en $x = a$ y $x = -a$

$$\alpha = \frac{qC \sin qa + qD \cos qa}{C \cos qa - D \sin qa} \tag{1}$$

$$-\alpha = \frac{-qC \sin qa + qD \cos qa}{C \cos qa + D \sin qa} \tag{2}$$

en donde usamos que $\cos(a) = \cos(-a)$ y $\sin(-a) = -\sin(a)$.

Luego operando con estas dos igualdades llegamos a que

$$CD = 0$$

Condiciones de borde

En efecto, de las dos igualdades anteriores deducimos

$$\begin{aligned}
\frac{qC \sin qa + qD \cos qa}{C \cos qa - D \sin qa} &= \frac{qC \sin qa - qD \cos qa}{C \cos qa + D \sin qa} \\
q(C^2 + D^2) \sin qa \cos qa + qCD &= q(C^2 + D^2) \sin qa \cos qa - qCD \\
2qCD &= 0 \\
CD &= 0
\end{aligned}$$

Solución general

Notar que si $D = 0$ la función u va a ser par, pues en $[-a, a]$ es un coseno y de la continuidad de u en los bordes de las regiones deducimos $A = B$. Por otro lado, al tomar $C = 0$ tenemos que u es una función impar, ya que en $[-a, a]$ es un seno y de la condición de borde deducimos $A = -B$.

Esto no es una peculiaridad de este problema, ya que en general vale que cuando el potencial es una función par, i.e $V(x) = V(-x)$, las soluciones van a ser funciones pares o funciones impares.

Caso par

Tomamos $D = 0$. Las ecuaciones (1) y (2) se convierten en

$$\alpha = q \tan qa$$

Notar que α y q están relacionadas: $\alpha^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - q^2$

Si llamamos $y = qa$ y $\lambda = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}$, obtenemos

$$\tan y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} \tag{3}$$

Por lo tanto, al estar cuantizados los valores de y que son solución de (3), también lo están las soluciones a la ecuación de Schrödinger. En particular, están cuantizados los niveles de energía admitidos.

Cuentas

Observar que tenemos

$$\begin{cases} y = qa = a\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \alpha^2} \\ \\ -\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \end{cases}$$

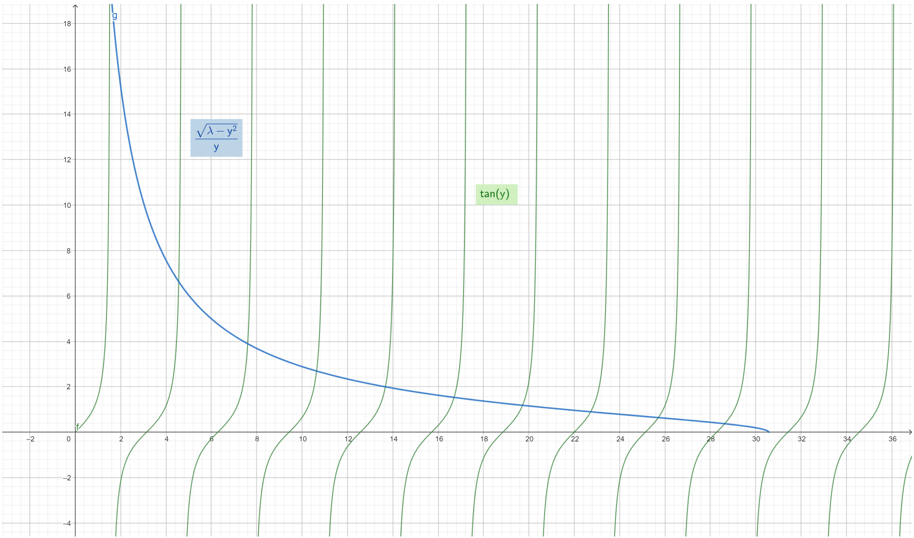
Luego podemos despejar E.

$$y = a\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$y = a\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

$$\left(\frac{y}{a}\right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$E = V_0 + \frac{y^2\hbar^2}{a^2 2m}$$



Gráfica interactiva

Comentarios

- No importa que tan chico sea el valor de λ, siempre hay al menos un punto de intersección. Esto significa que no importa que tan débil sea el potencial, siempre hay al menos un estado ligado.
- Al aumentar el λ, la cantidad de estados ligados aumenta.
- Cuando el potencial es profundo, λ es grande y los puntos de intersección se parecen a $y = (n + \frac{1}{2})\pi$. Notar que es lo mismo que tomar $y = \frac{n\pi}{2}$ con n impar. (Coherente con el resultado para un pozo infinito)

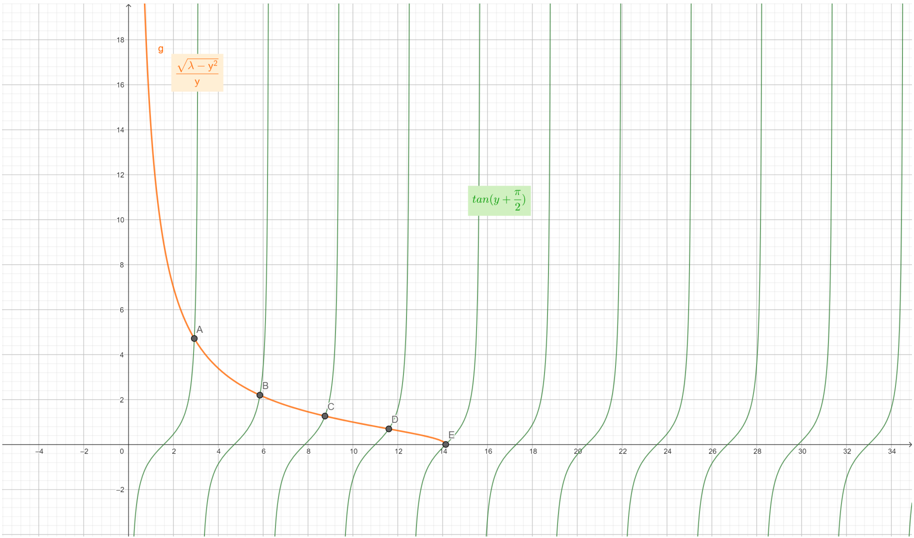
Caso impar

Tomemos $C = 0$. Las ecuaciones (1) y (2) se convierten en

$$\alpha = -q \cot(q\alpha) = q \tan\left(qa + \frac{\pi}{2}\right)$$

Razonando análogamente la energía queda cuantizada en este caso también.

- En este caso, observamos que hay un potencial mínimo, pues λ debe ser mayor a $\frac{\pi}{2}$
- Aumenta la cantidad de estados ligados al aumentar λ



Gráfica interactiva caso impar