UNIVERSIDAD DE MURCIA
Miguel Albaladejo Serrano
Licenciatura en Física
mas4@alu.um.es

Pozo de Potencial Infinito

Miguel Albaladejo Serrano

Resumen

Tratamos el estudio del pozo de potencial infinito, resolviendo la ecuación de Schrödinger, hallando las autofunciones y autoenergías. Estudiamos los casos en que el potencial está centrado y aquel en el que no lo está.

1. Ecuación de Schrödinger

Partimos de la ecuación de Schrödinger (a partir de ahora ES) dependiente del tiempo:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\bar{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\bar{r},t)+V(x)\Psi(\bar{r},t) \tag{1}$$

Al tratarse de una dimensión, $\bar{r}$ se reduce a $\bar{r}=x$. Por separación de variables llegamos, haciendo $\Psi(x,t)=\phi(t)\psi(x)$, a la ES independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi \tag{2}$$

En general, necesitaremos aplicar:

- Condiciones de contorno

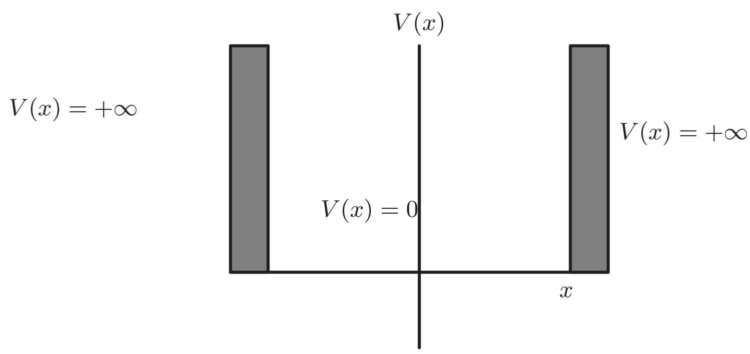
- Función de onda aceptable (normalizada, regular)
- Forma de potencial

2. Centrado en el origen

En la figura 1 podemos observar como es este potencial. Matmáticamente, viene descrito por las partes:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad |x| < a \\ +\infty & \text{si} \quad |x| > a \end{cases} \tag{3}$$

Figura 1: Pozo de potencial infinito centrado en el origen



La forma de potencial nos asegura tajantemente que la función de onda se anulará en los extremos del potencial, es decir, tendremos las condiciones de contorno:

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0 \tag{4a}$$

$$\psi(x; |x| > a) = 0 \tag{4b}$$

En la zona central, como el potencial es cero, podremos escribir la ES como ecuación diferencial ordinaria de segundo grado con coeficientes constantes de la manera siguiente:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0 \tag{5a}$$

Siendo

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{5b}$$

Las autofunciones de esta ecuación las podemos tomar como:

$$\psi(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx} = C_1 e^{ik(x-a)} + C_2 e^{-ik(x-a)} \tag{6}$$

El cambio en la segunda igualdad lo podemos hacer sin pérdida de generalidad ninguna sin más que reabsorber la constante $e^{\pm ika}$ en las distintas constantes A y B. Aplicando las condiciones de contorno dadas por 4, obtenemos:

$$\psi(a) = C_1 + C_2 = 0 \Rightarrow C_1 = -C_2 \Rightarrow \psi(x) = C_1 \left(e^{ik(x-a)} - e^{-ik(x-a)} \right) \tag{7a}$$

Podemos reescribir la anterior expresión en forma sinusoidal:

$$\psi(x) = 2iC_1 \sin\left(k(x-a)\right) = \overline{C}_1 \sin\left(k(x-a)\right) \tag{7b}$$

Aplicando la otra condición de contorno, hallamos:

$$\psi(-a) = \overline{C}_1 \sin(-2ka) = 0 \Rightarrow 2ka = n\pi, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{7c}$$

Esto quiere decir que *la energía está cuantizada*, dada la relación que existe entre k y E, según 5b:

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2, \qquad n = 1, 2, \ldots} \tag{8}$$

Ahora normalizaremos la función de onda para obtener el valor de la constante $\overline{C}_1$:

$$\begin{aligned} & \int_{-a}^{a} |\overline{C}_1|^2 \sin^2(k(x-a)) \mathrm{d}x = |\overline{C}_1|^2 \int_{-2a}^{0} \sin^2(k(z-a)) \mathrm{d}z \\ = \quad & |\overline{C}_1|^2 \left[\frac{z}{2} - \frac{\sin(2kz)}{4k} \right]_{-2a}^{0} = |\overline{C}_1|^2 a = 1 \Rightarrow \boxed{|\overline{C}_1| = \frac{1}{\sqrt{a}}} \end{aligned} \tag{9}$$

Por lo tanto, podemos escribir la solución como sigue:

$$\boxed{\psi(x) = \overline{C}_1 \sin(k(x-a)) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots} \tag{10}$$

Sin embargo, es más cómodo desarrollar el seno de la diferencia como una diferencia de senos y cosenos, pues la situación se simplifica. En efecto, tenemos:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x - \frac{n\pi}{2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \end{aligned} \tag{11}$$

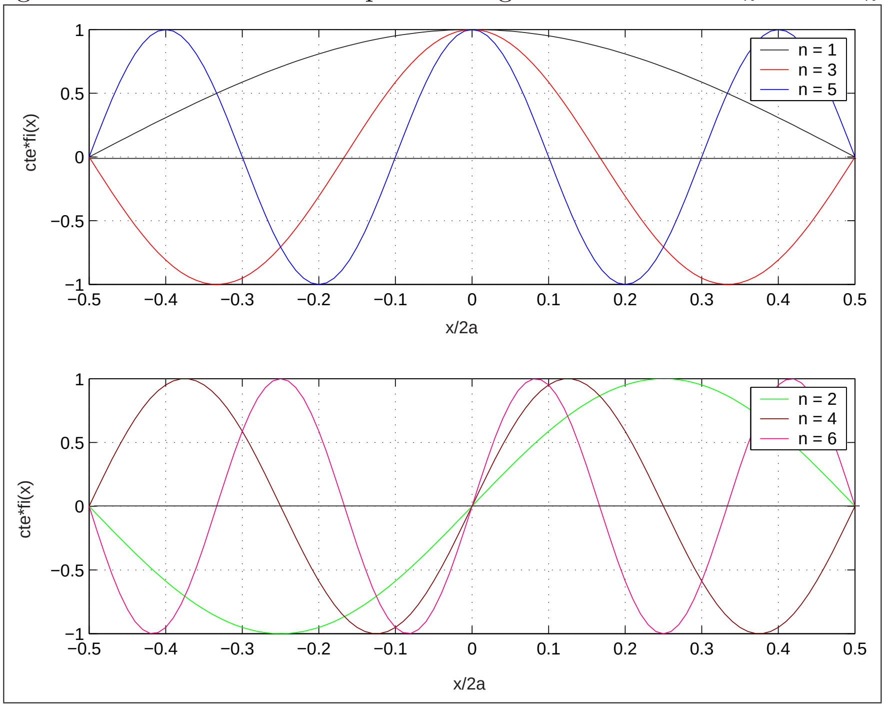
Ahora tenemos en cuenta que:

$$n \text{ impar} \quad \Rightarrow \quad \sin\frac{n\pi}{2} = 1 \qquad \cos\frac{n\pi}{2} = 0$$
$$n \text{ par} \quad \Rightarrow \quad \cos\frac{n\pi}{2} = 1 \qquad \sin\frac{n\pi}{2} = 0$$

Podemos entonces separar la solución en los dos casos posibles señalados arriba, n par o impar, y obtener, como solución final (ver representación en las figuras 2 y 3):

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\dfrac{n\pi}{2a}x\right) & n = 1,3,5,\ldots \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi}{2a}x\right) & n = 2,4,6,\ldots \end{cases} \tag{12}$$

Figura 2: Primeros estados separados según su forma: $\cos k_n x$ o $\sin k_n x$

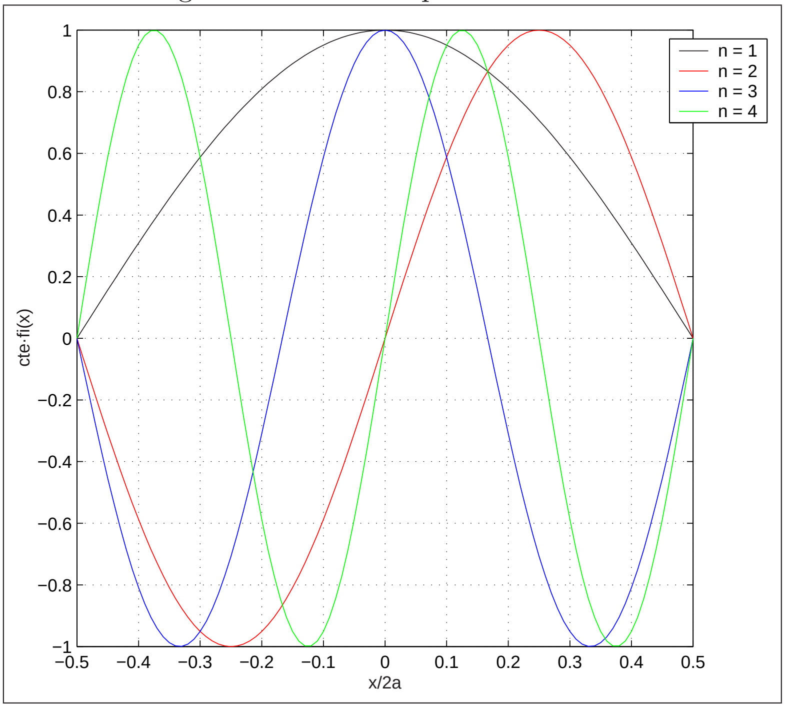


Podemos calcular el valor del incremento relativo de energía entre dos niveles consecutivos:

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{En} = \frac{\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}(n+1)^2 - \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2}{\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2} = \frac{2n-1}{n^2} =_{n\to\infty} \frac{2}{n} \tag{13}$$

Es decir, para números cuánticos suficientemente grandes, el espectro de energías parece casi continuo (*ley de los números grandes*).

Figura 3: Los cuatro primeros estados



3. Pozo asimétrico

El potencial ahora es de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 < x < 2a \\ +\infty & \text{si} \quad x < 0 \quad \text{ó} \quad x > 2a \end{cases} \tag{14}$$

Las autofunciones son las mismas que antes, salvo que ahora no conviene tomar como argumentos de las exponenciales complejas los valores $x - a$, sino simplemente x:

$$\psi(x) = C_1 e^{-ikx} + C_2 e^{ikx} \tag{15}$$

Las condiciones de contorno son ahora:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \tag{16a}$$
$$\psi(x; 0 < x < 2a) = 0 \tag{16b}$$

Aplicándolas, obtenemos de nuevo $C_1 = -C_2$, y por tanto:

$$\psi(x) = 2iC_1 \sin kx = \overline{C}_1 \sin kx \tag{17a}$$

Y también:

$$\psi(2a) = \overline{C}_1 \sin(2ka) = 0 \Rightarrow 2ka = n\pi, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{17b}$$

Evidentemente, la energí también está cuantizada y los posibles valores que obtenemos para la energía son los mismos que en el caso anterior:

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2, \qquad n = 1, 2, \ldots} \tag{17c}$$

La constante de normalización es también la misma, $|\overline{C}_1| = \frac{1}{\sqrt{a}}$. Y obtenemos, como resultado final:

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots} \tag{18}$$

Todas las consideraciones hechas respecto al caso anterior son válidas en este caso, con la salvedad de la aparición de los estados “pares” e “impares”. Aquí obtenemos solo un tipo de resultados. En realidad, el resultado tampoco es tan distinto del que obtuvimos en el apartado 2. La equivalencia la tenemos que buscar entre esta expresión 18 y la ecuación 10 y no la 12. De hecho, si hacemos un cambio de variable $x \to x - a$ volvemos a obtener el caso anterior. Todo esto se debe a que en el primer caso el potencial tiene simetría par, por lo que el operador potencial conmuta con el operador hamiltoniano, y entonces podemos elegir (en ciertos casos y bajo ciertas condiciones) las soluciones cmo pares o impares. En este segundo caso, el potencial asimétrico, su operador no conmuta con el hamiltoniano, y no podemos hacer esta elección.