Material didáctico para el curso de Química Cuántica

***Andrés Cedillo**, Departamento de Química, UAM-I*

Mayo de 1997

Espectro discreto del pozo finito unidimensional

A diferencia del problema de la partícula encerrada, la determinación de los valores propios del pozo finito recae en resolver una ecuación trascendente, por lo que sólo se pueden obtener soluciones aproximadas.

Un pozo finito está caracterizado por un potencial discontinuo de la forma,

$$V(x)=\begin{cases} V_0 & ,|x|>a \\ 0 & ,|x|<a \end{cases} \quad , \quad V_0>0 \quad , \tag{1}$$

por lo que la solución de un estado ligado, $E < V_0$, puede escribirse como

$$u(x)=\begin{cases} A\exp(qx) & ,x<-a \\ C\cos(kx)+D\sin(kx) & ,|x|<a \\ B\exp(-qx) & ,x>a \end{cases} \quad , \tag{2}$$

en donde

$$k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \quad q^2\equiv\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E) \quad , \quad L^2\equiv\frac{2mV_0}{\hbar^2}=k^2+q^2 \quad , \tag{3}$$

y los productos ka, qa y La son adimensionales. Dado que el potencial es simétrico, las funciones propias del hamiltoniano deben tener paridad, por lo que las soluciones pueden clasificarse de acuerdo a esta característica:

$$\text{soluciones pares} \qquad\qquad \text{soluciones impares}$$

$$u(x)=\begin{cases} A\exp(qx) & ,x<-a \\ C\cos(kx) & ,|x|<a \\ A\exp(-qx) & ,x>a \end{cases} \qquad u(x)=\begin{cases} -B\exp(qx) & ,x<-a \\ D\sin(kx) & ,|x|<a \\ B\exp(-qx) & ,x>a \end{cases} \tag{4}$$

Utilizando las propiedades de continuidad de la función de onda, y su primera derivada, en los puntos de discontinuidad del potencial, se obtienen las condiciones que determinan los valores propios de la energía:

$$\begin{array}{cc} qa = ka\tan(ka) & -qa = ka\cot(ka) \\ \tan(ka) > 0 & \tan(ka) < 0 \\ n\pi < ka < \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\pi & \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\pi < ka < (n+1)\pi \end{array} \tag{5}$$

Por lo que las soluciones pares están en cuadrantes impares y viceversa.

Utilizando la ecuación (3), es posible escribir las condiciones anteriores en términos de las cantidades adimensionales ka y La,

$$\left(\frac{La}{ka}\right)^2 - 1 = \tan^2(ka) \qquad \left(\frac{La}{ka}\right)^2 - 1 = \cot^2(ka) \tag{6}$$

en donde La es una constante característica del problema.

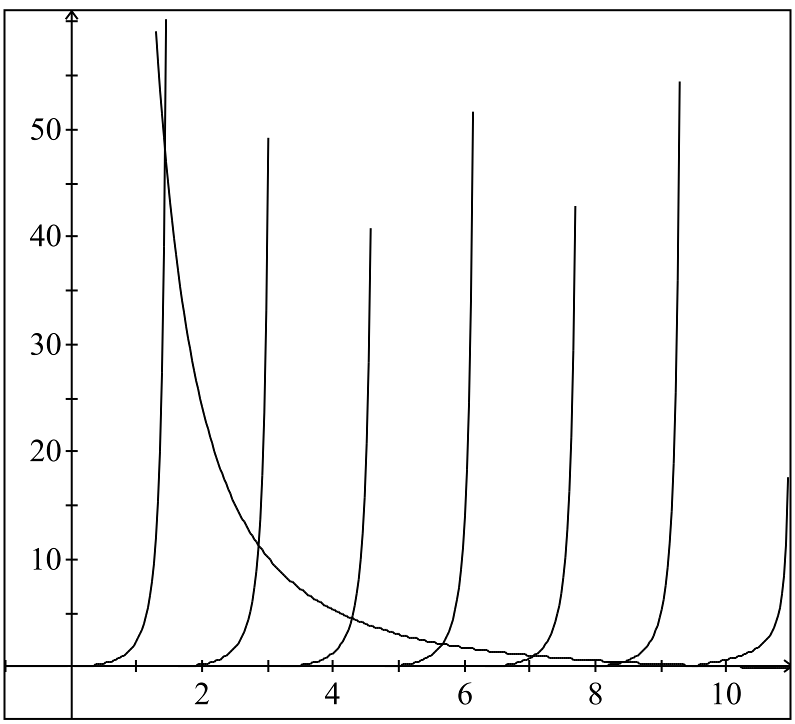

Figura 1. La gráfica de las funciones que aparecen en la ecuación (6), para *La*=10. El eje horizontal corresponde a la variable *ka*.

En la Figura 1 se muestran las gráficas de las funciones involucradas en la ecuación (6). Las intersecciones que corresponden a los valores permitidos para ka, y de aquí se obtienen los valores propios de la energía, a través de la ecuación (3). Es importante notar que las funciones de la gráfica presentan variaciones muy rápidas, por lo que la escala utilizada es muy amplia.

Una forma más sencilla de encontrar los valores propios proviene de transformar la ecuación (6):

$$\cos(ka) = \pm\frac{ka}{La} \qquad\qquad \sin(ka) = \pm\frac{ka}{La} \tag{7}$$

En este caso, las funciones que aparecen están acotadas al intervalo $\left[-1,1\right]$, ya que $ka < La$.

La Figura 2 muestra las gráficas correspondientes a la ecuación (7). En este caso se observa un número muy grande de intersecciones. Sin embargo, no toda intersección corresponde a un estado, ya que en cada cuadrante sólo pueden haber estados de una paridad.

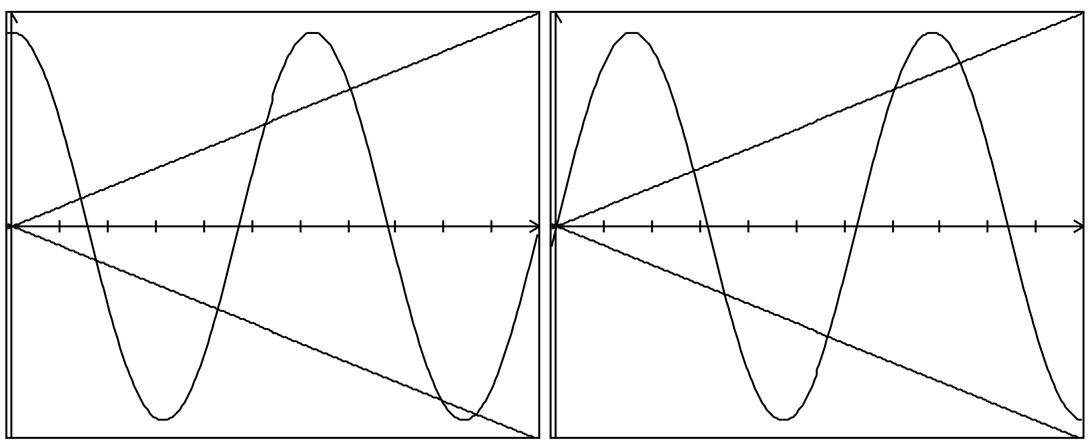

Figura 2. La gráfica de las funciones de la ecuación (7), *La*=10.

La ecuación (5) define los cuadrantes asociados con cada tipo de paridad. En la Figura 3 se han eliminado los cuadrantes que no satisfacen las condiciones antes mencionadas. Al contabilizar las intersecciones, se obtiene el número de estados correcto.

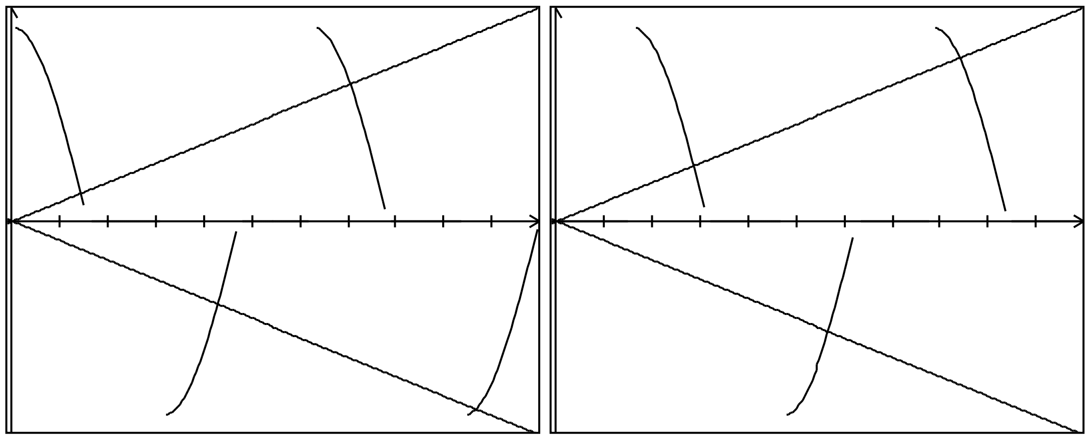

Figura 3. La gráfica de las funciones de la ecuación (7), incluye sólo los cuadrantes relevantes. (*La*=10).

Aparentemente es más sencillo obtener los valores propios usando la Figura 1 que con la Figura 3. Si se toma el valor absoluto de las funciones trigonométricas de la Figura 3, las intersecciones aparecen sólo en la parte superior de la gráfica, Figura 4.

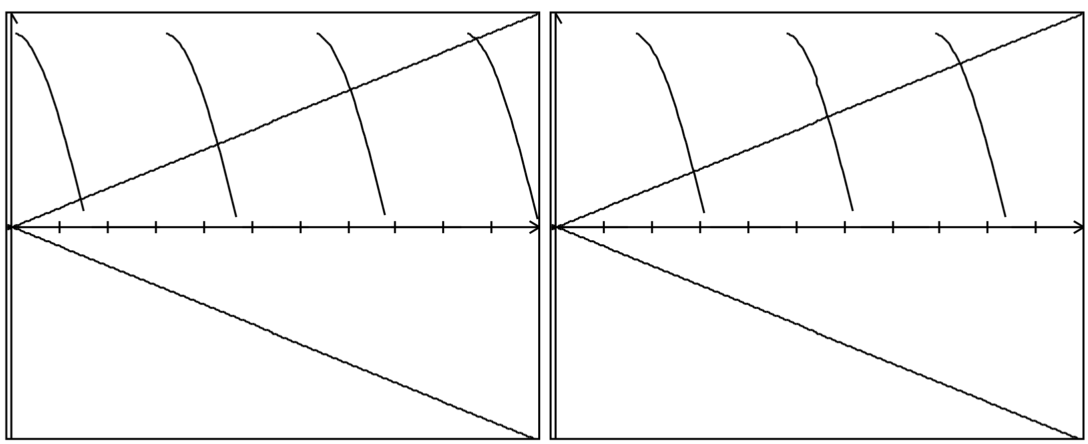

Figura 4. La gráfica del valor absoluto de las funciones de la ecuación (7), *La*=10.

Al sobreponer las gráficas para los estados pares e impares, se obtiene la Figura 5a. En este caso las intersecciones que corresponden a los estados pares e impares aparecen alternadas, iniciando en el estado basal que es par. Con excepción de la línea recta, la Figura 5a muestra una estructura periódica, que corresponde a la repetición de la función $\cos ka$ en el intervalo $\left[0,\pi/2\right]$. En lugar de repetir la función coseno, se pueden trazar los tramos de recta que se intersectan con las repeticiones de la función trigonométrica, esto equivale a cortar la figura en $x=0,\pi/2,\pi,3\pi/2,\ldots$ y sobreponer los cortes, Figura 5b. Dado que la recta original satisface la ecuación $F(x) = x/La$, y que los cortes ocurren en $x_n = (n-1)\pi/2$, entonces las ordenadas al origen de las rectas de la Figura 5b toman el valor $F(x_n)$. Así, estas líneas satisfacen la ecuación

$$f_n(x) = \frac{x}{La} + (n-1)\frac{\pi}{2La} = \frac{x + (n-1)\pi/2}{La} \quad , \quad n = 1,2,\ldots \quad . \tag{8}$$

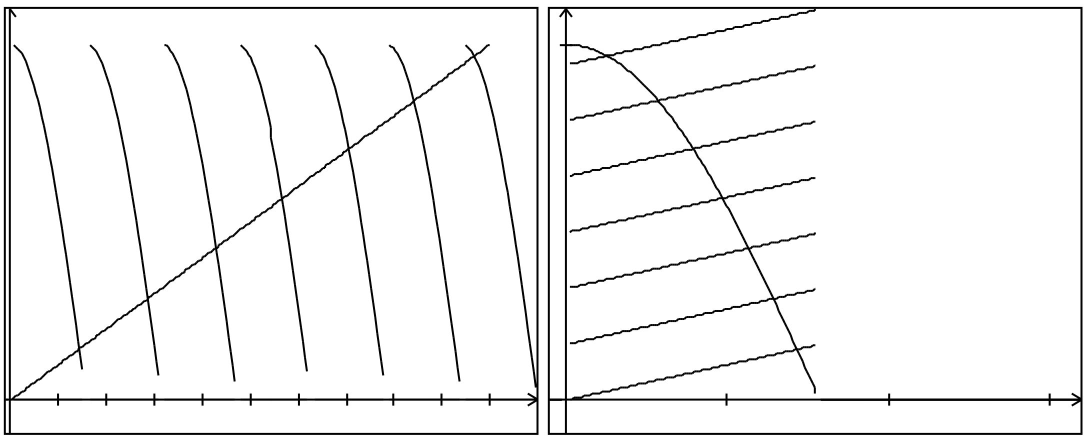

Figura 5. La superposición de las gráficas de los estados pares e impares.
(*La*=10.)

Sea el punto ξ_n la intersección definida por la ecuación $f_n(\xi_n) = \cos\xi_n$, en el intervalo $[0, \pi/2]$. Ya que la Figura 5b proviene de sobreponer las partes de la Figura 5a, entonces los valores de ka, asociados con los estados del pozo, están dados por la ecuación siguiente,

$$k_n a = \xi_n + (n-1)\frac{\pi}{2} \quad . \tag{9}$$

Finalmente, la energía de estos estados se obtiene a partir de la ecuación (3).

De la Figura 5 se puede concluir que el número de estados, para un pozo dado, dependerá del inverso de la pendiente de las rectas, es decir, será proporcional a La. Para que haya una intersección es necesario que la ordenada al origen sea menor que la unidad, si el estado N es el último estado ligado, su ordenada al origen debe ser cercana a uno, entonces el número de estados puede aproximarse por

$$N \approx \frac{2La}{\pi} + 1 \quad . \tag{10}$$

Es importante identificar que, independientemente del valor de la pendiente de la línea recta, existe al menos un estado ligado para todo pozo.

Actividades adicionales

1. Encuentre la energía de todos los estados ligados del pozo finito con $La = 2\pi$.

2. Obtenga la energía de todos los estados ligados del pozo finito con $La = 2$. Además obtenga las funciones propias y haga una gráfica de ellas.

Versión modificada en abril de 2020.