

# Capítulo 4. Algunos problemas unidimensionales

4.1. La partícula encerrada

4.2. La barrera de potencial finita

4.2.1. Los estados con energía menores que la barrera,  $E < V$

4.2.1.1. Los coeficientes de transmisión y reflexión

4.2.1.2. La densidad de probabilidad de las funciones propias

4.2.2. Los estados con energía mayor que la barrera,  $E > V$

4.2.3. El caso con energía igual a la barrera,  $E = V$

4.3. La paridad de las funciones propias

4.4. El pozo finito

4.5. Problemas

Anexo 4.1. La integración numérica de la ecuación de Schrödinger

## 4. Algunos problemas unidimensionales

La diferencia entre un sistema y otro está en el tipo de fuerzas, o bien en la forma de la energía potencial,

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Para un sistema con una partícula, en una dimensión, la ecuación de Schrödinger se expresa como

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u_E(x) = E u_E(x), \quad (4.2)$$

o bien

$$u_E'' = 2m \frac{V(x) - E}{\hbar^2} u_E. \quad (4.3)$$

Por lo tanto, el signo de la curvatura de la función  $u_E$  depende de la diferencia  $V(x) - E$ .

Cuando  $E > V(x)$ ,  $u_E''$  y  $u_E$  tienen signos contrarios y la función oscila, mientras que cuando  $E < V(x)$ ,  $u_E''$  y  $u_E$  tienen el mismo signo y la función es monótona. En el Anexo 4.1 se muestra un procedimiento de integración numérica en el que se refleja este tratamiento cualitativo.

En este capítulo se resuelve la ecuación de valores propios para algunos sistemas modelo sencillos que permiten analizar comportamientos generales de los sistemas cuánticos.

### 4.1. La partícula encerrada

El caso más sencillo de tratar corresponde al de una partícula libre de fuerzas que se encuentra encerrada en el intervalo  $[-a, a]$ . Esta condición de confinamiento se puede representar por un potencial con barreras de altura infinita,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a \leq x \leq a \\ \infty, & |x| > a \end{cases}. \quad (4.4)$$

En este caso sólo existen estados con energía positiva, ya que la energía total es sólo energía cinética. Además, por el confinamiento, la partícula sólo puede estar entre las paredes. Entonces, para  $|x| > a$ ,  $u_E(x) = 0$ .

Dentro de las paredes,  $|x| < a$ , el potencial es cero,  $V(x) = 0$ , y

$$u_E'' = -k^2 u_E, \quad (4.5)$$

en donde  $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$ . La solución general de la ecuación diferencial es una combinación de funciones trigonométricas,

$$u_E(x) = A \cos kx + B \sin kx, \quad (4.6)$$

en donde  $A$  y  $B$  son constantes por determinar.

Dado que la solución debe ser una función continua, entonces

$$\text{en } x = a: \quad 0 = u_E(a) = A \cos ka + B \sin ka, \quad (4.7)$$

$$\text{en } x = -a: \quad 0 = u_E(-a) = A \cos ka - B \sin ka.$$

La suma y la resta de ambas condiciones lleva a:  $0 = 2A \cos ka$  y  $0 = 2B \sin ka$ .

La primera solución corresponde al caso en que  $A \neq 0$ , por lo tanto  $\cos ka = 0$ , es decir,

$$ka = \frac{2m-1}{2} \pi. \quad (4.8)$$

Además,  $\sin ka \neq 0$ , por lo tanto  $B = 0$ . Así, la solución queda en la forma

$$u_E(x) = A \cos kx, \quad k = \frac{2m-1}{2a} \pi, \quad m = 1, 2, \dots \quad (4.9)$$

Esta solución corresponde a una función par.

La segunda solución corresponde al caso en que  $A = 0$ , por lo tanto  $B \neq 0$  y  $\sin ka = 0$ . Así,

$$ka = m\pi = \frac{2m}{2} \pi. \quad (4.10)$$

En este caso la solución toma la forma

$$u_E(x) = B \sin kx, \quad k = \frac{2m}{2a} \pi, \quad m = 1, 2, \dots \quad (4.11)$$

Observe que ésta es una solución impar.

Para  $|x| \leq a$ , ambas soluciones pueden escribirse con un único índice,

$$u_n(x) = \begin{cases} A \cos \frac{n\pi x}{2a}, & n \text{ impar (solución par)} \\ B \sin \frac{n\pi x}{2a}, & n \text{ par (solución impar)} \end{cases}. \quad (4.12)$$

Para este sistema,  $k$  toma un conjunto discreto de valores,  $k_n = \frac{n\pi}{2a}$ , por tanto, los valores propios de la energía forman un espectro discreto,

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2. \quad (4.13)$$

Aún es necesario determinar la constante de normalización de las funciones propias.

Partiendo de la condición  $\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = 1$ , se tiene que

$$1 = \begin{cases} \int_{-a}^a |A|^2 \cos^2 kx dx \\ \int_{-a}^a |B|^2 \sin^2 kx dx \end{cases} = \begin{cases} |A|^2 \int_{-a}^a \frac{1 + \cos 2kx}{2} dx \\ |B|^2 \int_{-a}^a \frac{1 - \cos 2kx}{2} dx \end{cases} = \begin{cases} |A|^2 \left( a + \frac{\sin 2ka}{2k} \right) \\ |B|^2 \left( a - \frac{\sin 2ka}{2k} \right) \end{cases}, \quad (4.14)$$

y como  $2k_n a = n\pi$ , entonces  $\sin 2k_n a = 0$ , por lo tanto  $|A|^2 = |B|^2 = \frac{1}{a}$ .

---

*Relaciones trigonométricas*

---

$$\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha = 1 \qquad \cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha = \cos 2\alpha$$

$$2\cos^2 \alpha = 1 + \cos 2\alpha \qquad 2\sin^2 \alpha = 1 - \cos 2\alpha$$


---

Finalmente, las funciones propias toman la forma

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \begin{cases} \cos\frac{n\pi x}{2a}, & n \text{ impar} \\ \sin\frac{n\pi x}{2a}, & n \text{ par} \end{cases}, \quad \text{cuando } |x| \leq a. \quad (4.15)$$

Al estado de menor energía se le denomina estado basal, en este caso el estado basal tiene las propiedades siguientes,

$$u_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\frac{\pi x}{2a}, \quad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}. \quad (4.16)$$

En general, el espectro puede escribirse en la forma,

$$E_n = E_1 n^2. \quad (4.17)$$

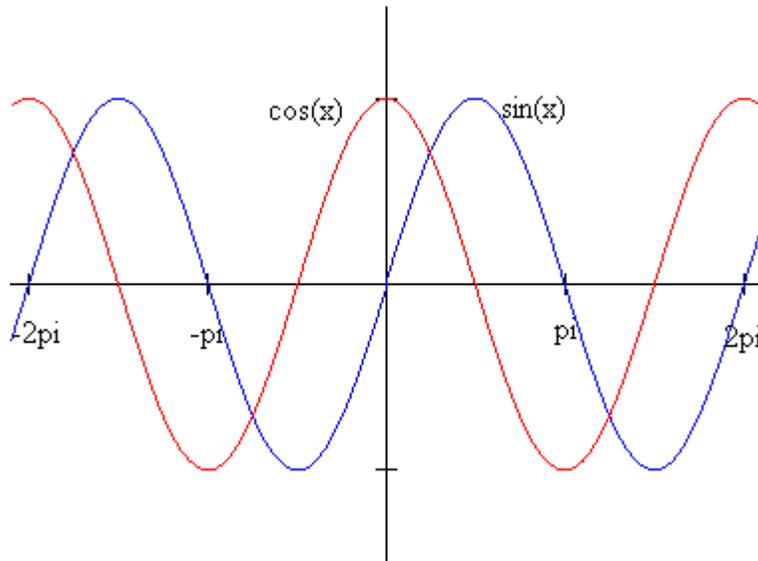


Figura 4.1. La gráfica de las funciones  $\sin(x)$  y  $\cos(x)$ .

Analizando el comportamiento de las funciones propias,  $u_n$ , se puede concluir que  $|u_n|^2$  presenta:

- 1)  $n$  máximos igualmente espaciados,
- 2)  $n-1$  nodos dentro de las paredes.

Los polienos o *trans*-poliacetilenos son moléculas planas con enlaces dobles conjugados. Los electrones  $\pi$  se mueven a lo largo de toda la molécula, pero fuera del plano que contiene a los núcleos. El modelo de partículas encerradas en una dimensión proporciona

una descripción cualitativa de los orbitales moleculares para este tipo de moléculas y se presenta en el material auxiliar *Moléculas poliatómicas con dobles enlaces conjugados en la aproximación de electrones libres*.

Las ecuaciones de este modelo se pueden aplicar a un sistema macroscópico encerrado en una dimensión. Por ejemplo, para un balón, encerrado en un carril sin fricción, se puede analizar el espectro y la densidad de probabilidad de las funciones propias. La interpretación adecuada de las predicciones del modelo cuántico permiten observar que la descripción cuántica de este sistema es similar a la que proporciona la mecánica clásica.

#### 4.2. La barrera de potencial finita

Ahora se analiza el problema de una partícula libre que choca contra una barrera finita de potencial. En este caso el potencial tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} V, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0 \vee x > a' \end{cases} \quad (4.18)$$

con  $V > 0$ , por lo tanto  $E > 0$ . Como el potencial está definido en tramos, es necesario resolver la ecuación diferencial en cada intervalo y posteriormente aplicar las condiciones de continuidad.

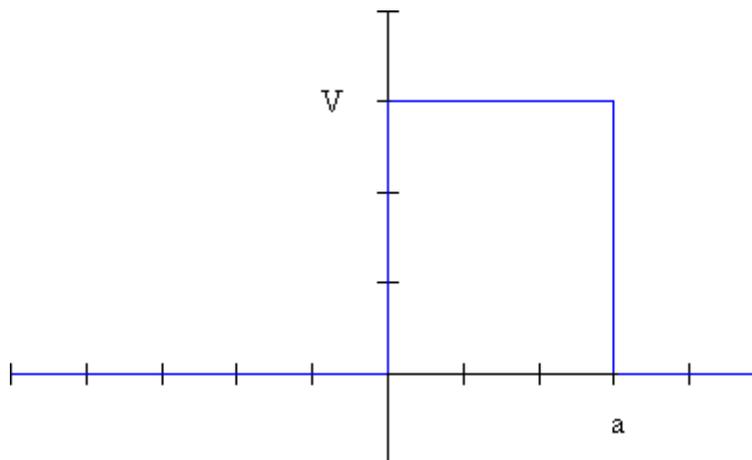


Figura 4.2. La energía potencial para la barrera finita.

Dado que el signo de la diferencia  $V(x) - E$  determina el comportamiento de las soluciones de la ecuación de valores propios, es conveniente analizar por separado las soluciones de cada caso.

#### 4.2.1. Los estados con energía menor que la barrera, $E < V$

Para  $x < 0$ , la ecuación diferencial toma la forma

$$u_E'' = -k^2 u_E, \quad (4.19)$$

en donde  $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$ , con una solución general que consiste en una combinación lineal de exponenciales imaginarias,

$$u_E(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}. \quad (4.20)$$

Es importante comentar que estas exponenciales,  $\varphi_k = e^{ikx}$ , son funciones propias del operador de momento, con valor propio  $\hbar k$ ,

$$\hat{p}_x \varphi_k = \hbar k \varphi_k. \quad (4.21)$$

Por tanto, el primer término de la solución general corresponde a un haz de partículas de amplitud unitaria que viajan con momento positivo (hacia la barrera), mientras que el segundo puede asociarse con partículas que rebotan con la barrera. Arbitrariamente se ha asignado amplitud unitaria al haz de partículas incidentes.

Para  $0 < x < a$ , la ecuación diferencial puede escribirse como

$$u_E'' = \kappa^2 u_E, \quad (4.22)$$

en donde  $\kappa^2 \equiv 2m \frac{V-E}{\hbar^2} > 0$ , y tiene la solución general siguiente,

$$u_E(x) = Be^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x}. \quad (4.23)$$

Finalmente, en el intervalo  $x > a$ , se tiene la ecuación diferencial

$$u_E'' = -k^2 u_E, \quad (4.24)$$

con solución de la forma

$$u_E(x) = De^{ikx}. \quad (4.25)$$

En este caso sólo aparece un término debido a que el haz incidente tiene momento positivo y, en esta región, sólo hay las partículas que se alejan de la barrera.

La condiciones de continuidad de  $u$  y  $u'$ , en  $x=0$ , toman la forma

$$1+A=B+C, \quad ik(1-A)=\kappa(C-B). \quad (4.26)$$

La combinación de estas ecuaciones permite eliminar a  $A$ ,

$$2ik=-B(\kappa-ik)+C(\kappa+ik). \quad (4.27)$$

Mientras que la constante  $A$  queda en la forma,  $A=B+C-1$ .

De forma similar, en  $x=a$ ,

$$Be^{-\kappa a}+Ce^{\kappa a}=De^{ika}, \quad \kappa(Ce^{\kappa a}-Be^{-\kappa a})=ikDe^{ika}. \quad (4.28)$$

Eliminado a  $D$  de las dos ecuaciones, se obtiene una ecuación en  $B$  y  $C$ ,

$$Be^{-\kappa a}(\kappa+ik)=Ce^{\kappa a}(\kappa-ik). \quad (4.29)$$

Mientras que la constante  $D$  queda como  $D=e^{-ika}(Be^{-\kappa a}+Ce^{\kappa a})$ .

La constantes  $B$  y  $C$  se obtienen resolviendo las ecuaciones (4.27) y (4.29). Primero se despeja  $B$  de la ecuación (4.29),

$$B=Ce^{2\kappa a}\frac{\kappa-ik}{\kappa+ik}. \quad (4.30)$$

---

*Propiedades de las funciones hiperbólicas*

---

$$\begin{aligned} 2\cosh\alpha &= e^\alpha + e^{-\alpha} & 2\sinh\alpha &= e^\alpha - e^{-\alpha} \\ \cosh^2\alpha - \sinh^2\alpha &= 1 & \sinh 2\alpha &= 2\sinh\alpha \cosh\alpha \\ 1 \pm e^{2\alpha} &= e^\alpha e^{-\alpha} \pm e^\alpha e^\alpha = e^\alpha (e^{-\alpha} \pm e^\alpha) = \pm e^\alpha (e^\alpha \pm e^{-\alpha}) \end{aligned}$$


---

Al sustituir en la ecuación (4.27) se obtiene que

$$\begin{aligned} 2ik &= -Ce^{2\kappa a}\frac{(\kappa-ik)^2}{\kappa+ik} + C(\kappa+ik) = C\frac{-e^{2\kappa a}(\kappa-ik)^2 + (\kappa+ik)^2}{\kappa+ik} \\ &= C\frac{(\kappa^2-k^2)[1-e^{2\kappa a}] + 2ik\kappa(1+e^{2\kappa a})}{\kappa+ik}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Usando las funciones hiperbólicas, esta ecuación toma la forma

$$2ik[\kappa + ik] = 2Ce^{\kappa a} \left[ (k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a + 2ik\kappa \cosh \kappa a \right], \quad (4.32)$$

por lo tanto,

$$C = ike^{-\kappa a} \frac{\kappa + ik}{(k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a + 2ik\kappa \cosh \kappa a}. \quad (4.33)$$

En términos de

$$F \equiv (k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a + 2ik\kappa \cosh \kappa a, \quad (4.34)$$

todas las constantes de la función propia se expresan así:

$$C = ike^{-\kappa a} \frac{\kappa + ik}{F}, \quad B = ike^{-\kappa a} \frac{\kappa + ik}{F} e^{2\kappa a} \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} = ike^{\kappa a} \frac{\kappa - ik}{F},$$

$$D = ike^{-ika} \frac{\kappa - ik + \kappa + ik}{F} = \frac{2ik\kappa}{F} e^{-ika}, \quad (4.35)$$

$$A = \frac{ik}{F} \left( e^{\kappa a} [\kappa - ik] + e^{-\kappa a} [\kappa + ik] \right) - 1 = \frac{ik}{F} \left( \kappa [e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}] + ik [e^{-\kappa a} - e^{\kappa a}] \right) - 1$$

$$= \frac{2ik\kappa \cosh \kappa a + 2k^2 \sinh \kappa a - (k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a - 2ik\kappa \cosh \kappa a}{F} = \frac{L^2}{F} \sinh \kappa a,$$

en donde  $L^2 \equiv 2mV/\hbar^2 = k^2 + \kappa^2$ . Así, una vez resueltas todas las constantes, las funciones propias toman su forma final,

$$u_E(x) = \begin{cases} e^{ikx} + L^2 \sinh \kappa a e^{-ikx} / F & , \quad x < 0 \\ i \left[ (\kappa - ik) e^{\kappa(a-x)} + (\kappa + ik) e^{\kappa(x-a)} \right] k / F & , \quad 0 < x < a \\ 2ik\kappa e^{ik(x-a)} / F & , \quad x > a \end{cases} \quad (4.36)$$

Para  $x > a$  se puede observar que la función exponencial tiene un desplazamiento en la variable  $x$ . Este efecto es debido a la interacción con la barrera y se le denomina corrimiento de fase. El análisis de los corrimientos de fase es de gran utilidad para estudio de las interacciones entre los proyectiles y el blanco.

En este problema, no hay ninguna restricción sobre la energía. Por esta razón, se concluye que el espectro es continuo.

#### 4.2.1.1. Los coeficientes de transmisión y reflexión

Al analizar el comportamiento de la función de onda, ésta no es cero en  $x > a$ . Por tanto hay transmisión de partículas a través de la barrera, aún cuando, desde el punto de vista clásico, no poseen energía suficiente para remontar el obstáculo. Este fenómeno tiene un origen cuántico y se le denomina efecto túnel.

Los coeficientes de reflexión,  $R$ , y transmisión,  $T$ , se pueden obtener a partir de la densidad de probabilidad de la función de onda. El coeficiente de reflexión es la amplitud de la onda con momento  $-hk$  en  $x < 0$ , mientras que el coeficiente de transmisión es la amplitud de la onda con momento  $hk$  en  $x > a$ ,

$$T \equiv |D|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{|F|^2}, \quad R \equiv |A|^2 = \frac{L^4 \sinh^2 \kappa a}{|F|^2}, \quad (4.37)$$

en donde

$$\begin{aligned} |F|^2 &= (k^2 - \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4k^2\kappa^2 \cosh^2 \kappa a \\ &= (k^2 - \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a + 4k^2\kappa^2 (1 + \sinh^2 \kappa a). \\ &= 4k^2\kappa^2 + L^4 \sinh^2 \kappa a \end{aligned} \quad (4.38)$$

Por lo tanto,

$$T = \left[ 1 + \left( \frac{L^2}{2k\kappa} \sinh \kappa a \right)^2 \right]^{-1}, \quad R = \left[ 1 + \left( \frac{2k\kappa}{L^2 \sinh \kappa a} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (4.39)$$

Además, ambos coeficientes satisfacen la ecuación  $T + R = 1$ .

La forma explícita del coeficiente de transmisión en función de la energía se obtiene

mediante la expresión  $\kappa = \sqrt{L^2 - k^2} = L\sqrt{1 - (k/L)^2} = L\sqrt{1 - E/V}$ ,

$$T(E) = \left[ 1 + \left( \frac{\sinh \left\{ La \sqrt{1 - E/V} \right\}}{2\sqrt{(E/V)(1 - E/V)}} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (4.40)$$

Cuando  $E \ll V$ , se obtiene un comportamiento lineal en  $E/V$ , y exponencial decreciente en el ancho de la barrera,

$$T \approx \left[ 1 + \frac{V \sinh^2 La^2}{4E} \right]^{-1} \approx \frac{4E}{V \sinh^2 La} \approx 16 \frac{E}{V} e^{-2La}. \quad (4.41)$$

Para energías cercanas a la altura de la barrera,  $k \leq L$ , es conveniente introducir una

medida de esta cercanía,  $\varepsilon \equiv \sqrt{1 - (k/L)^2} = \sqrt{1 - E/V} \ll 1$ , así

$$T = \left[ 1 + \frac{E}{V} \left( \frac{\sinh La \varepsilon}{2\varepsilon} \right)^2 \right]^{-1} \approx \left[ 1 + \frac{ma^2}{2\hbar^2} E \right]^{-1}. \quad (4.42)$$

Por lo tanto, aún cuando la energía puede ser prácticamente igual a la altura de la barrera, el coeficiente de transmisión no se acerca a uno,

$$\lim_{E \rightarrow V} T(E) = \left[ 1 + \left( \frac{La}{2} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (4.43)$$

#### 4.2.1.2. La densidad de probabilidad de las funciones propias

Para  $x < 0$ , la función de onda se separa en sus partes real e imaginaria,

$$\begin{aligned} u_k(x) &= \frac{1}{F} \left\{ (k^2 + \kappa^2) \sinh \kappa a e^{-ikx} + (k^2 - \kappa^2) \sinh \kappa a e^{ikx} + 2i\kappa \cosh \kappa a e^{ikx} \right\} \\ &= \frac{1}{F} \left\{ \sinh \kappa a (k^2 2 \cos kx - \kappa^2 2i \sin kx) + 2\kappa \cosh \kappa a (i \cos kx - \sin kx) \right\}, \quad (4.44) \\ &= \frac{2}{F} \left\{ k^2 \sinh \kappa a \cos kx - \kappa \cosh \kappa a \sin kx + \right. \\ &\quad \left. i(\kappa \cosh \kappa a \cos kx - \kappa^2 \sinh \kappa a \sin kx) \right\} \end{aligned}$$

por lo que el cuadrado de su modulo queda en la forma

$$\begin{aligned}
|u_k|^2 &= \frac{4}{|F|^2} \left\{ \begin{aligned} &k^4 \sinh^2 \kappa a \cos^2 kx - 2\kappa k^3 \sinh \kappa a \cosh \kappa a \cos kx \sin kx \\ &+ k^2 \kappa^2 \cosh^2 \kappa a \sin^2 kx + k^2 \kappa^2 \cosh^2 \kappa a \cos^2 kx \\ &- 2\kappa^3 k \cosh \kappa a \sinh \kappa a \cos kx \sin kx + k^4 \sinh \kappa a \sin kx \end{aligned} \right\} \\
&= \frac{4}{|F|^2} \left\{ \begin{aligned} &\sinh^2 \kappa a (k^4 \cos^2 kx + \kappa^4 \sin^2 kx) + k^2 \kappa^2 \cosh^2 \kappa a \\ &-\frac{1}{2} \kappa k (k^2 + \kappa^2) \sin 2kx \sinh 2\kappa a \end{aligned} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.45}$$

De igual manera para el intervalo  $0 < x < a$ ,

$$\begin{aligned}
|u_k|^2 &= 4k^2 \left| \kappa \cosh \kappa (x-a) + ik \sinh \kappa (x-a) \right|^2 / |F|^2 \\
&= 4k^2 \left[ \kappa^2 \cosh^2 \kappa (a-x) + k^2 \sinh^2 \kappa (x-a) \right] / |F|^2.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Y cuando  $x > a$ ,

$$|u_k|^2 = 4k^2 \kappa^2 / |F|^2, \tag{4.47}$$

en donde

$$|F|^2 = 4k^2 \kappa^2 + L^4 \sinh^2 \kappa a. \tag{4.48}$$

Así, la densidad de probabilidad de las funciones propias para la barrera de potencial están dadas en cada región de la recta real por las ecuaciones (4.45)-(4.48). Su representación gráfica se muestra en la Figura 4.3.

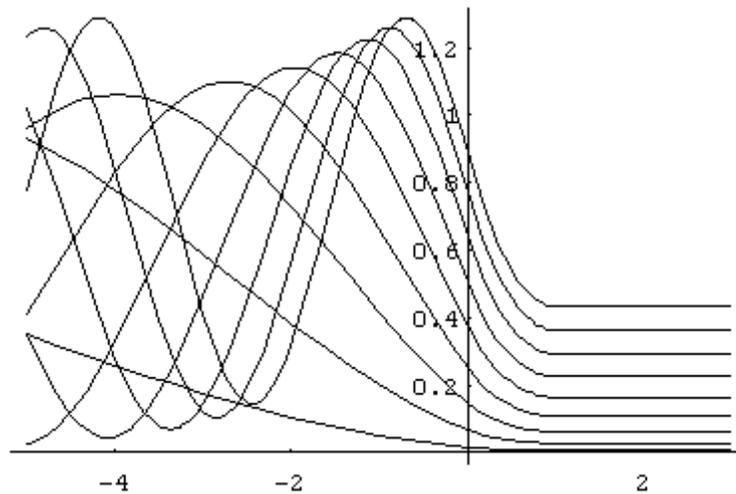


Figura 4.3. La densidad de probabilidad de las funciones propias de la barrera finita para  $ka = 0.1, 0.2, \dots, 0.9$  ( $L=1, a=1$ ).

#### 4.2.2. Los estados con energía mayor que la barrera, $E > V$

En este caso,  $V - E$  es negativo y es conveniente definir otro parámetro,

$$\kappa'^2 = 2m \frac{V - E}{\hbar^2} \equiv -\kappa'^2 < 0. \quad (4.49)$$

De esta forma, se puede reemplazar  $\kappa = i\kappa'$  en todas la ecuaciones del caso previo, tomando en cuenta que  $\kappa'$  es una cantidad real.

*Relación entre las funciones trigonométricas e hiperbólicas*

$$\cosh i\alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}) = \cos \alpha \quad \cos i\alpha = \frac{1}{2}(e^{-\alpha} + e^{\alpha}) = \cosh \alpha$$

$$\sinh i\alpha = \frac{1}{2}(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) = i \sin \alpha \quad \sin i\alpha = \frac{1}{2i}(e^{-\alpha} - e^{\alpha}) = i \sinh \alpha$$

Así,

$$\begin{aligned} \kappa'^2 = -\kappa^2 = k^2 - L^2, \quad A' = iL^2 \sin \kappa' a / F', \quad B' = ke^{i\kappa' a} (k - \kappa') / F', \\ C' = -ke^{-i\kappa' a} (k + \kappa') / F', \quad D' = -2k\kappa' e^{-i\kappa' a} / F', \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$F' = -2k\kappa' \cos \kappa' a + i(k^2 + \kappa'^2) \sin \kappa' a, \quad |F'|^2 = 4k^2 \kappa'^2 + L^2 \sin^2 \kappa' a,$$

$$T' = |D'|^2 = \frac{4k^2 \kappa'^2}{|F'|^2} = \left[ 1 + \left( \frac{L^2 \sin \kappa' a}{2k\kappa'} \right)^2 \right]^{-1} = \left[ 1 + \left( \frac{L^2 \sin(a\sqrt{k^2 - L^2})}{2k\sqrt{k^2 - L^2}} \right)^2 \right]^{-1}.$$

En estas condiciones, nuevamente se tiene un espectro continuo.

De la expresión para el coeficiente de transmisión,  $T'$ , se puede observar que, en general,  $T'$  es menor que la unidad aún cuando las partículas tienen energía mayor que la barrera, por tanto no todas la atravesarán. Adicionalmente,  $T'$  es máximo cuando  $\sin \kappa' a = 0$ ,  $T'_{\max} = 1$  y  $R = 0$ , esto es, sólo para estos valores de  $\kappa'$  no hay reflexión. Este efecto se ha interpretado como una interferencia total entre las funciones de onda de la partículas reflejadas por las dos paredes de la barrera. La transmisión total ocurre cuando  $\kappa' a = n\pi$ , es decir, cuando

$$k^2 = L^2 + \kappa'^2 = L^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2, \quad E = V + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2. \quad (4.51)$$

Observe que estas energías son similares al espectro de una partícula encerrada entre 0 y  $a$ , bajo un potencial constante igual a  $V$ . Adicionalmente, para estas energías se tiene que  $A' = 0$ , por lo que, para  $x < 0$ ,  $u_E = e^{ikx}$ , esto es, no hay reflexión. Más allá de la barrera, para  $x > a$ , se tiene que  $F' = (-1)^{n+1} 2\kappa'k$  y  $u_E = (-1)^n e^{ik(x-a)}$ .

También hay valores de la energía para los cuales  $T'$  es un mínimo local. Esto ocurre cuando  $\sin \kappa'a = \pm 1$ , es decir  $\kappa'a = \frac{1}{2}(2n+1)\pi$  y  $(ka)^2 = (\kappa'a)^2 + L^2$ , y la reflexión presenta un máximo,

$$T'_{\min} = \left[ 1 + \frac{L^4 a^2}{k^2 (2n+1)^2 \pi^2} \right]^{-1}. \quad (4.52)$$

Al aumentar la energía, el coeficiente de transmisión tiende asintóticamente a uno.

#### 4.2.3. El caso con energía igual a la barrera, $E = V$

Cuando  $E = V$ ,  $\kappa = 0$ , además,

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV}{\hbar^2} = L^2. \quad (4.53)$$

En este caso, las soluciones tienen un comportamiento diferente. Al resolver, se obtiene que

$$T_0 \equiv |D_0|^2 = \left[ 1 + (ka/2)^2 \right]^{-1}. \quad (4.54)$$

Este resultado coincide con el límite calculado en el caso  $E < V$ .

### 4.3. La paridad de las funciones propias

Sea  $\hat{P}$  el operador de paridad,  $\hat{P}f(\mathbf{r}) = f(-\mathbf{r})$ . Sus funciones propias satisfacen la ecuación valores propios correspondiente,

$$\hat{P}f(\mathbf{r}) = \lambda f(\mathbf{r}), \quad (4.55)$$

pero,

$$\hat{P}^2 f(\mathbf{r}) = \lambda^2 f(\mathbf{r}) = \hat{P}f(-\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}), \quad (4.56)$$

entonces,  $\lambda^2 = 1$ , por lo tanto  $\lambda = \pm 1$  y las funciones pares e impares son las funciones propias del operador de paridad.

#### Funciones pares

$$\lambda = 1, \quad p(-\mathbf{r}) = p(\mathbf{r}). \quad (4.57)$$

#### Funciones impares

$$\lambda = -1, \quad p(-\mathbf{r}) = -p(\mathbf{r}). \quad (4.58)$$

Si la energía potencial es una función par,  $V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$ , entonces,

$$\hat{P}(\hat{H}g) = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{P}(\nabla^2 g) + \hat{P}(Vg) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \hat{P}g + V\hat{P}g = \hat{H}(\hat{P}g), \quad (4.59)$$

por lo tanto  $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ , y ambos operadores tienen funciones propias comunes.

**Teorema.** Si la función de energía potencial es simétrica, entonces las funciones propias de  $\hat{H}$  tienen paridad definida.

Un ejemplo de este caso es el de la partícula encerrada en el intervalo  $[-a, a]$ . Al elegir que el origen esté situado en el centro del recipiente, ocasiona que las funciones propias tengan paridad.

#### 4.4. El pozo finito

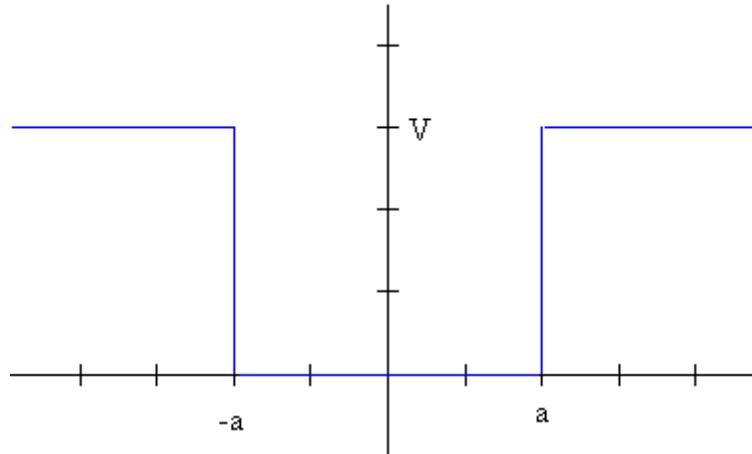


Figura 4.4. La energía potencial del pozo finito.

Finalmente, se considera a una partícula dentro de un pozo finito de potencial. La energía potencial de este problema tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} V, & |x| > a \\ 0, & |x| < a \end{cases} \quad (4.60)$$

con  $V > 0$ , por lo que la energía es positiva,  $E > 0$ .

Dado que este potencial es simétrico, las soluciones tienen paridad definida, por tanto se pueden separar en soluciones pares e impares.

Considere el caso en que  $E < V$ . Al resolver la ecuación diferencial en cada uno de los segmentos, se obtienen las soluciones siguientes,

$$\begin{aligned} k^2 &\equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0, & \kappa^2 &\equiv 2m \frac{V-E}{\hbar^2} > 0, \\ x < -a, & u_E'' = \kappa^2 u_E, & u_E(x) &= Ae^{\kappa x}, \\ |x| < a, & u_E'' = -k^2 u_E, & u_E(x) &= \begin{cases} C \cos kx & , \text{par} \\ D \sin kx & , \text{impar} \end{cases} \\ x > a, & u_E'' = \kappa^2 u_E, & u_E(x) &= Be^{-\kappa x}. \end{aligned} \quad (4.61)$$

Aplicando las condiciones de continuidad a  $u$  y  $u'$  en cada una de las paredes del pozo,  $x = \pm a$ , se obtienen las constantes de las funciones propias:

soluciones pares

$$A = B,$$

$$Be^{-\kappa a} = C \cos ka,$$

$$-\kappa Be^{\kappa a} = -kC \sin ka,$$

$$\kappa a = ka \tan ka,$$

$$\tan ka > 0,$$

$$\Rightarrow n\pi < ka < n\pi + \frac{1}{2}\pi$$

soluciones impares

$$-A = B,$$

$$Be^{-\kappa a} = D \sin ka,$$

$$-\kappa Be^{-\kappa a} = kD \cos ka,$$

$$-\kappa a = ka \cot ka,$$

$$\cot ka < 0,$$

$$\Rightarrow n\pi + \frac{1}{2}\pi < ka < (n+1)\pi,$$

$$L^2 \equiv \frac{2mV}{\hbar^2} = \kappa^2 + k^2 > 0, \quad (4.62)$$

$$\begin{aligned} (La)^2 &= (ka)^2 (\tan^2 ka + 1), \\ &= (ka)^2 \sec^2 ka \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (La)^2 &= (ka)^2 (\cot^2 ka + 1), \\ &= (ka)^2 \csc^2 ka \end{aligned}$$

$$\cos ka = \pm \frac{ka}{La},$$

$$\sin ka = \pm \frac{ka}{La}.$$

Los valores de la energía provienen de la solución de las ecuaciones trascendentes anteriores y se requiere un método numérico para resolverlas. En el material auxiliar *Espectro discreto del pozo finito unidimensional* se muestra un método sencillo para encontrar las soluciones.

Para energías menores que la altura de la barrera, el espectro del pozo es discreto y existe al menos un estado que está limitado a permanecer en el pozo (estado ligado).

Para cada energía del espectro, las soluciones quedan en la forma:

solución par:

solución impar

$$u_E(x) = C \begin{cases} e^{\kappa(x+a)} \cos ka \\ \cos kx \\ e^{-\kappa(x-a)} \cos ka \end{cases}, \quad u_E(x) = D \begin{cases} -e^{\kappa(x+a)} \sin ka & , x < -a \\ \sin kx & , |x| < a \\ e^{-\kappa(x-a)} \sin ka & , x > a \end{cases}$$

(4.63)

en donde los valores de  $C$  y  $D$  están fijos por la condición de normalización y se usaron las relaciones  $A = Ce^{\kappa a} \cos ka$  y  $A = -De^{\kappa a} \sin ka$ , para el caso par e impar, respectivamente.

A partir de la forma de la función de onda, en la región de las paredes, se puede concluir que aunque el sistema no tenga energía suficiente para escapar, la probabilidad de encontrarlo fuera del pozo no es cero, aunque esta probabilidad decae exponencialmente conforme se aleja de las paredes del pozo.

Al comparar este caso con el de la partícula encerrada, se puede observar que para garantizar que el sistema que limitado a permanecer en pozo (pero no en las paredes), el valor de  $\kappa$  debe ser infinito. Por esta razón, el potencial en las paredes de un sistema confinado debe ser infinito. Desde el punto de vista microscópico, las paredes impenetrables se representan por barreras de potencial infinitamente altas

Para el caso en que la energía es mayor que la altura de la barrera,  $E > V$ , las soluciones son semejantes a las del problema de la barrera y esta parte del espectro es continua. Por lo tanto, en este problema el espectro tiene una parte continua y una discreta.

## 4.5. Problemas

1. Para una partícula encerrada, calcule  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$ ,  $\Delta x \Delta p$  y  $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$ .
2. Si  $\psi(x) = A(x^2 - a^2)$  es la función de onda de una partícula encerrada, calcule la constante de normalización y el valor esperado de la energía. Compare el último resultado con la energía del estado basal, ¿cuántas veces es más grande o más pequeño?
3. Considere un balón de 10.0 g moviéndose en un carril sin fricción de 1.00 m. Utilizando el modelo de la partícula encerrada : (a) Calcule la energía del estado basal. (b) Si el balón

se mueve a una velocidad de  $1.00 \text{ m s}^{-1}$ , ¿cuánto vale  $n$ ? (c) Obtenga  $\Delta E_n$  para el valor de  $n$  obtenido en el inciso anterior. (d) Describa cómo es  $|\Psi(x)|^2$ .

4. Para el problema del pozo finito: a) Encuentre  $C$  y  $D$  para que la función de onda esté normalizada. b) Si  $a = 1 \text{ \AA}$  y  $La = 10$ , hay siete estados ligados:  $ka = 1.4276, 2.8523, 4.2711, 5.6792, 7.0689, 8.4232, 9.6789$ . Verifique que estos valores corresponden a los estados propios. Calcule

$$P(a, \infty) = \int_a^{\infty} |u_E(x)|^2 dx$$

para los siete estados ligados y grafique  $P$  vs  $ka$ .

5. Obtenga las funciones propias y los valores propios de la energía para una partícula en el potencial:

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

en donde  $V_0 > 0$ . Considere sólo el caso de energías menores que  $V_0$ .

### Anexo 4.1. La integración numérica de la ecuación de Schrödinger

Considere en desarrollo en series de Taylor de  $f(x+h)$  alrededor de  $x$ ,

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + O(h^3).$$

En forma análoga,

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + O(h^3),$$

por tanto, sumando ambas ecuaciones se tiene que

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + O(h^4).$$

Aplicando esta aproximación a la ecuación de Schrödinger, para  $h = \Delta$ , se obtiene la ecuación de recurrencia siguiente,

$$\begin{aligned}\Psi(x+\Delta) &= 2\Psi(x) - \Psi(x-\Delta) + \Delta^2 \Psi''(x) + O(\Delta^4) \\ &= 2\Psi(x) + \Delta^2 \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi(x) - \Psi(x-\Delta) + O(\Delta^4). \\ &= 2\Psi(x) \left\{ 1 + \Delta^2 \frac{m}{\hbar^2} [V(x) - E] \right\} - \Psi(x-\Delta) + O(\Delta^4)\end{aligned}$$

Tomando una malla formada por un conjunto de puntos igualmente espaciados,

$x_j = x_0 + j\Delta$ , se puede calcular la función de onda en estos puntos,  $\Psi_j = \Psi(x_j)$ , mediante la ecuación anterior,

$$\Psi_{j+1} \approx 2\Psi_j \left\{ 1 + \Delta^2 \frac{m}{\hbar^2} [V(x_j) - E] \right\} - \Psi_{j-1}.$$

Por ejemplo, la solución numérica para el potencial

$$V(x) = 10 \frac{\hbar^2}{ma_0^2} \exp\left(-0.5 \left[\frac{x}{a_0} - 5\right]^2\right),$$

correspondiente a una energía  $E = 4\hbar^2/(ma_0^2)$ , con  $\Delta = 0.05a_0$ , se muestra en la Figura 4.5. De acuerdo con lo esperado, la solución presenta un comportamiento oscilatorio en el extremo derecho de la figura, en donde  $E > V$ , mientras que la función es monótona en el centro, cuando  $E < V$ ; en el lado izquierdo, la probabilidad constante representa a la partícula viajando con momento fijo. En la sección 4.2 se ha resuelto el problema de una barrera rectangular y su solución exacta muestra las mismas características.

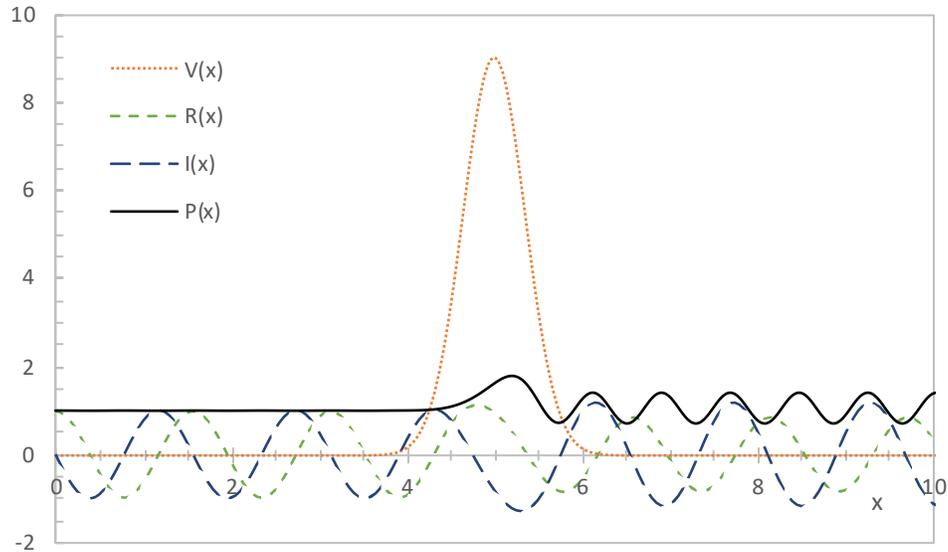


Figura 4.5. Solución numérica de la ecuación de Schrödinger con el potencial descrito en el texto. Las funciones son V: energía potencial, R: la parte real de la función de onda, I: la parte imaginaria y P: la densidad de probabilidad.