Pozo unidimensional finito

Repaso. Potencial infinito

$$V_\infty(x) = \begin{cases} 0 & (-a \leqslant x \leqslant a), \\ \infty & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

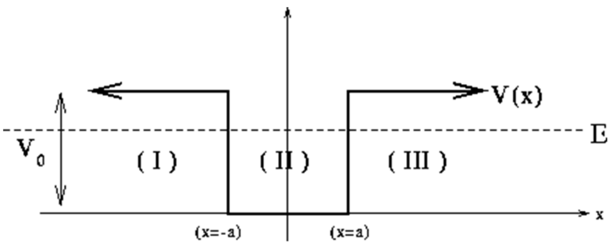
Soluciones para potencial infinito

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{1/a}\cos(k_n x) & (n = 1,3,5,\ldots), \\ \sqrt{1/a}\sin(k_n x) & (n = 2,4,6,\ldots), \end{cases} \quad (\psi = 0 \ \text{at} \ x = \pm a). \qquad \begin{gathered} k_n \equiv \sqrt{2mE_n}/\hbar \\ k_n = n\pi/2a \end{gathered}$$

energías para potencial infinito

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \quad (n = 1,2,3,\ldots).$$

Potencial finito



$$V(x) = \begin{cases} 0 & (-a \leqslant x \leqslant a), \\ V_0 & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

Dentro del pozo

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

Fuera del pozo

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = (E - V_0)E\psi(x)$$

Soluciones pares

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n e^{\kappa_n x} & (x \leqslant -a), \\ B_n \cos(k_n x) & (|x| \leqslant a) \ (n = 1,3,5,\ldots), \\ A_n e^{-\kappa_n x} & (x \geqslant a), \end{cases} \qquad \begin{gathered} k_n \equiv \sqrt{2mE_n}/\hbar \\ \kappa_n \equiv \sqrt{2m(V_0 - E_n)}/\hbar. \end{gathered}$$

Soluciones impares

$$\psi_n(x) = \begin{cases} -A_n e^{\kappa_n x} & (x \leqslant -a), \\ B_n \sin(k_n x) & (|x| \leqslant a) \; (n = 2,4,6, \dots), \\ A_n e^{-\kappa_n x} & (x \geqslant a), \end{cases}$$

Por continuidad de ψ

$$A_n = \begin{cases} e^{\kappa_n a} \cos(k_n a) B_n & (n = 1,3,5, \dots), \\ e^{\kappa_n a} \sin(k_n a) B_n & (n = 2,4,6, \dots). \end{cases}$$

Por normalización se determinará B_n

Por continuidad de ψ'

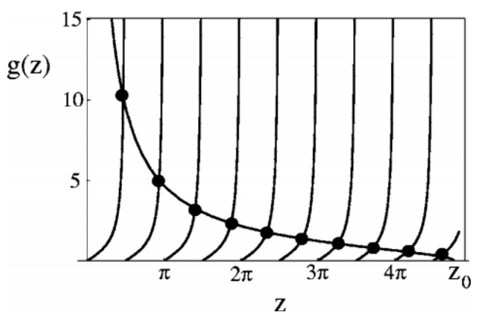
$$\kappa_n = \begin{cases} k_n \tan(k_n a) & (n = 1,3,5, \dots), \\ -k_n \cot(k_n a) & (n = 2,4,6, \dots), \end{cases} \qquad \begin{aligned} k_n &\equiv \sqrt{2mE_n}/\hbar \\ \kappa_n &\equiv \sqrt{2m(V_0 - E_n)}/\hbar. \end{aligned}$$

que son las ecuaciones trascendentes que determinan E_n

Soluciones gráficas

$$z \equiv k_n a = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mE_n}, \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}, \qquad \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} = \begin{cases} \tan(z) & (n = 1,3,5, \dots), \\ -\cot(z) & (n = 2,4,6, \dots). \end{cases}$$

$$g(z) = \begin{cases} \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} \\ \tan z \\ -\cot z \end{cases}$$

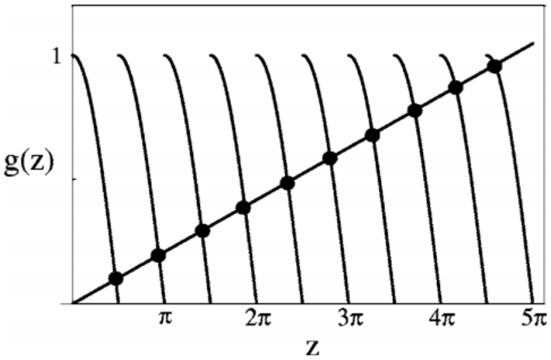


Soluciones numéricas

n	z	E_n/V_0
1	1.472 473	0.009 636
2	2.944 041	0.038 522
3	4.413 720	0.086 582
4	5.880 355	0.153 683
5	7.342 468	0.239 608
6	8.798 006	0.344 022
7	10.243 82	0.466 382
8	11.674 42	0.605 743
9	13.078 15	0.760 168
10	14.416 91	0.923 765

Reescribiendo las ecuaciones

$$g(z) \quad \frac{z}{z_0} = \begin{cases} |\cos z| & (n = 1,3,5, \dots), \\ |\sin z| & (n = 2,4,6, \dots), \end{cases} \qquad n\pi/2 - \pi/2 \leqslant z \leqslant n\pi/2$$



Estado fundamental

$$z = z_0 \cos z$$

Soluciones aproximadas

Vamos a aproximar el coseno por la expresión siguiente

$$\cos x \approx f_s(x) \equiv \frac{1-(2x/\pi)^2}{(1+cx^2)^s} \quad (0 \leqslant x \leqslant \pi/2)$$

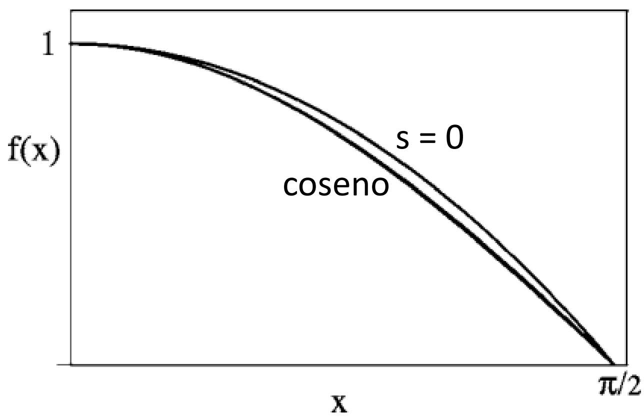
Donde s puede tomar los valores $s = 0,\ 1/2,\ 1$. s = 0 es la aproximación cuadrática, que coincide con el valor de cosx en x=0, x=π/2, y x=π.

Serie de Taylor

Una aproximación consiste en elegir los valores de c de modo que la expresión sea consistente con los 2 primero términos de la serie de Taylor (constante y cuadrático). Se puede ver fácilmente que coresponde a $c_{1/2} = 1 - 8/\pi^2$y $c_1 = (1 - 8/\pi^2)/2$.

Ajuste

La otra aproximación consiste en obtener c del ajuste de la expresión a la función cosx. En ese caso: $c'_{1/2} = 0.212 \ldots$, $c'_1 = 0.101 \ldots$



tomado de:

Exact and approximate energy spectrum for the finite square well and related potentials

Alcántara Bonfim y Griffiths, DOI: 10.1119/1.2140771, Am. J. Phys. **74** 1, January 2006