

### 3.12 Pozos cuadrados (Clase 5)

Los potenciales físicos no son cuadrados sino que cambian suavemente, sin embargo si la longitud de onda de las partículas de acuerdo a su energía son mucho mayores que las regiones donde tenemos un cambio abrupto, podemos reemplazar el potencial real por escalones. Ya sabemos que en cada escalón, si es finito, tanto la función de onda como su derivada deben ser continuas.

Clasicamente cuando uno fija la energía  $E$  de la partícula las regiones de  $U > E$  son prohibidas porque tendríamos energía cinética negativa. Para analizar los efectos cuánticos uno podría hacer una analogía óptica, que ya la hemos usado bastante.

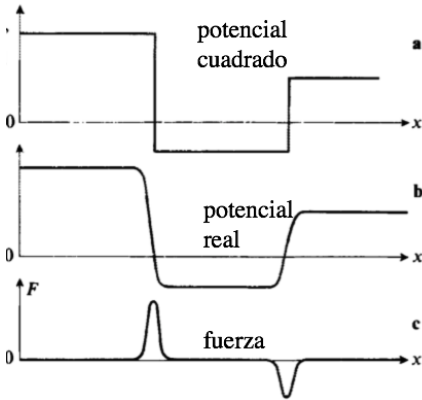


Figura 5: potencial cuadrado

Supongamos tener un medio transparente donde  $n = cte$  sin depender del tiempo o coordenadas y supongamos que incide una onda de campo eléctrico  $\mathbf{E}(x, t) = \mathbf{e}E(x)e^{-i\omega t}$ , si metemos esto en la ecuación de onda (supongamos una dimensión con  $\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ )

$$[\partial_x^2 - (n/c)^2 \partial_t^2] \mathbf{E}(x, t) = 0 \Rightarrow [\partial_x^2 + (\omega n/c)^2] E(x) = 0$$

que es *idéntica a la ecuación de Schrödinger si  $\frac{2m}{\hbar^2}(E - U) = (\omega n/c)^2$* , ver (56), así los puntos de discontinuidad del potencial corresponden a un *cambio de índice de refracción*. Más aún, podemos relacionar el índice con la energía y el potencial como  $n(\omega) = \frac{1}{\omega \hbar} \sqrt{2mc^2(E - U)}$  que va a ser cte cuando  $U$  lo es. Tenemos los siguientes casos

- $E > U$  Estas regiones corresponden a un medio transparente con un *índice de refracción real y la solución serán ondas oscilatorias  $E(x) = e^{\pm ikx}$*  viajando en un sentido u otro.
- $E < U$  En las regiones donde se cumple ésto tendríamos un *índice de refracción puramente imaginario y las soluciones que convergen serían  $E(x) = e^{-\kappa x}$  que se atenúa*, esta situación se asemeja a la situación de un medio metálico.

*Ejemplo: Escalón de potencial*

Tenemos dos regiones  $(-\infty, L] \equiv I, (L, +\infty) \equiv II$  donde en la primera el potencial se mantiene cte  $U(x) = 0$  y luego salta abruptamente a  $U(x) = U_0$ .

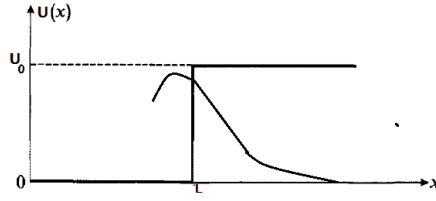


Figura 6: Escalón de potencial

En cada región tenemos un índice  $n_I = \frac{c}{\omega\hbar}\sqrt{2mE}$ ,  $n_{II} = \frac{c}{\omega\hbar}\sqrt{2m(E-U)}$ , respectivamente que cuando  $E > U_0$  son ambos reales. Clásicamente la partícula cambiaría abruptamente de una velocidad mayor a otra menor y continuaría hacia la derecha. En óptica (y cuántica) tendríamos una onda transmitida y otra reflejada, y en cuántica tenemos que tener en cuenta que si hay una probabilidad  $P$  de que la partícula sea reflejada habrá  $1 - P$  de que continúe hacia la derecha, esto contradice la mecánica clásica. Cuando  $E < U_0$  tenemos un índice imaginario si  $x > L$  y clásicamente la onda sería totalmente reflejada, sin embargo habría probabilidad de que la partícula atravesara el escalon pues allí tendríamos una solución para la función de onda  $\psi(x) = e^{-\kappa x}$ ,  $\kappa = \sqrt{2m(-E + U_0)/\hbar^2}$ .

### 3.13 El pozo de potencial $\infty$

Consideremos el caso de un pozo de potencial unidimensional

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < L \\ U_0, & x < 0, \geq L \end{cases} \quad (58)$$

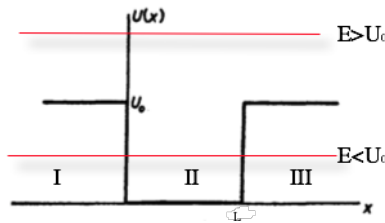


Figura 7: pozo de potencial

Ya sabemos que por lo visto cuando  $E < U_0$  tendremos un espectro discreto y para  $E > U_0$  espectro continuo doblemente degenerado. La ecuación de Schrödinger a resolver será

En II:

$$\psi''(x) + (2m/\hbar^2)E\psi(x) = 0$$

En I,III:

$$\psi''(x) + (2m/\hbar^2)[E - U_0]\psi(x) = 0$$

para  $E < U_0$  en la región I,III la solución debe tender a cero en  $\pm\infty$  con lo cual tendremos las funciones que decaen exponencialmente

$$\psi_{I,III}(x) = Be^{\pm\kappa x}, \kappa = \sqrt{(2m/\hbar^2)(U_0 - E)} \quad (59)$$

donde los signos  $\pm$  corresponden a I y III respectivamente, y donde la probabilidad de encontrar a la partícula entre  $x, x + dx$  es  $|\psi(x)|^2 = B^2 e^{\pm 2\kappa x}$  que decae exponencialmente. Cuando  $U_0 \rightarrow \infty \Rightarrow \kappa \rightarrow \infty$ , en las regiones mencionadas (potencial infinito)  $\psi(x) = 0$  y como la función de onda siempre es continua, se debe conectar con continuidad con la solución en II en  $x = 0, L$ . Para dicha región y está energía tendremos como solución

$$\psi_{II}(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}, A_i \in \mathbb{C}, k = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$$

donde  $\psi_{II}(0) = \psi_I(0) \Rightarrow A_1 + A_2 = 0 \Rightarrow A_1 = -A_2 \Rightarrow \psi_{II}(x) = A \text{sen}(kx + \phi)$ ,  $A \in \mathbb{R}$ . Pero como  $\psi_{II}(0) = A \text{sen}(\phi) = 0 \Rightarrow \phi = 0$ . La otra condición que debemos cumplir es

$$\psi_{II}(L) = A \text{sen}(kL) = 0 \Rightarrow kl = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots \Rightarrow k = n\pi/L \quad (60)$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (61)$$

notemos que la energía queda cuantificada. Los estados autoestados de energía deben normalizarse de acuerdo a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)| dx = 1$$

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \text{sen}^2(kx) dx = A^2 \int_0^L \frac{1 + \cos 2(n\pi/L)x}{2} dx = A^2 L/2 = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

finalmente entonces la función de onda solución para el potencial infinito nos queda

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}(n\pi/L)x, & x \in [0, L] \\ 0, & x > L \end{cases} \quad (62)$$

el estado fundamental corresponde a  $n = 1, E_{GS} = E_1 = \hbar^2 L^2 / 2m$ , y notemos que se satisface el principio de incerteza pues tenemos una incerteza  $\Delta x = L$  (sabemos con seguridad que está entre 0 y L) en la ubicación de la partícula mientras que una incerteza en el impulso  $\Delta p = \Delta k \hbar = (k_{n+1} - k_n) \hbar = \hbar \pi / L$  y de esta manera se satisface  $\Delta x \Delta p = L \times \pi \hbar / L = \pi \hbar > \hbar > \hbar / 2$ . Notemos que también se satisface el teorema de los nodos pues por ejemplo la función de onda del estado fundamental en  $[0, L]$  es  $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}(\pi x / L)$  que no tiene nodos, la del primer excitado  $\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}(2\pi x / L)$  que se anula, además de los extremos, en  $x = L/2$  y tiene un nodo. Y así siguiendo, el estado n-ésimo tendrá  $n - 1$  nodos. Obviamente en el caso del pozo infinito no hay un continuo de energías, son todas discretas y su valor  $E_n = n^2 \hbar^2 / 2mL^2$  se cuentan desde el fondo del pozo.

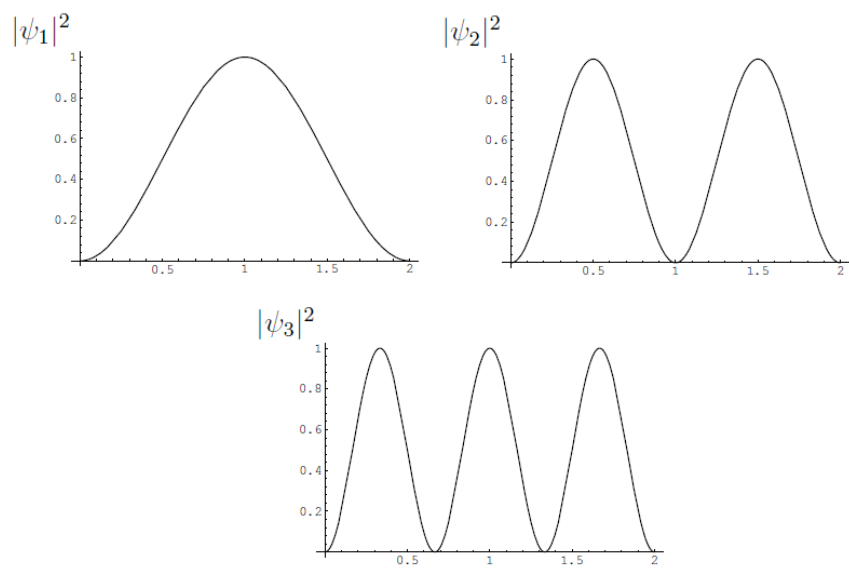
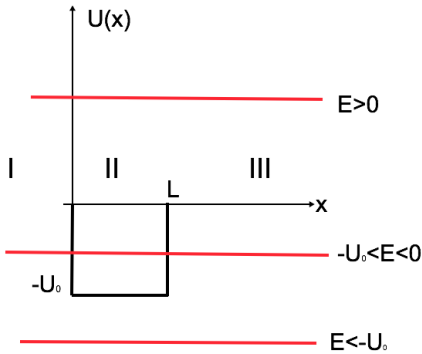


Figura 8: Funciones de onda para  $n=1,2,3$  con un  $L=2$  unidades de longitud

### 3.14 El pozo de potencial cuadrado finito de profundidad $-U_0$ (Clase 5)



Sería el caso descrito antes del pozo pero poniendo el cero de energía en  $U_0$  con lo que quedaría un pozo de profundidad  $-U_0$ .

Cuando  $E > 0$  tenemos que resolver:

$$\psi''(x) + (2m/\hbar^2)(E - U(x))\psi(x) = 0.$$

- En II:

$$\psi''(x) + (2m/\hbar^2)(E + U_0)\psi(x) = 0$$

- En I,III:

$$\psi''(x) + (2m/\hbar^2)E\psi(x) = 0$$

que tienen soluciones

$$\psi(x) = \begin{cases} A_I e^{ik_I x} + A'_I e^{-ik_I x}, & x < 0 \\ B_{II} e^{ik_{II} x} + B'_{II} e^{-ik_{II} x} & 0 < x < L \\ C_I e^{ik_I x} + C'_I e^{-ik_I x} & x > L \end{cases}$$

con  $k_I = \sqrt{(2mE/\hbar^2)}$ ,  $k_{II} = \sqrt{(2m(E + U_0)/\hbar^2)}$  donde vemos que en I y III tenemos los mismos  $\kappa$  pues la ecuación de Schrödinger es la misma.

Debemos imponer continuidad de  $\psi(x)$ ,  $\psi'(x)$ ,  $x = 0, L$  por ser un potencial finito o en forma equivalente de  $\psi'(x)/\psi(x)$  que es la derivada logarítmica (de  $\ln(\psi)$ ).

*Esto nos dará  $A_I = f(E)C_I$ ,  $A'_I = g(E)C_I$  para  $U_0$  dado, quedando  $C_I$  fijado por la condición de normalización y  $C'_I$  debería hacerse cero ya que no viene una onda desde la derecha, por las condiciones iniciales.*

Lo que sabemos hasta ahora de normalización para estados del continuo es que  $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(i/\hbar)(p'-p)x} = \delta(p'-p)$ . Si hacemos por ejemplo la integral de la solución en III  $(0, \infty)$  (mantengamos por el momento  $C'_I$ , y agreguemos por conveniencia al intervalo el pedazo  $(0, L)$  que contribuye con algo finito frente a la contribución en  $(L, \infty)$  que será infinita ) y tendremos

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \psi_{k'_I}^*(x)\psi_{k_I}(x)dx &\doteq C_I C_{I'} \left[ \int_0^{\infty} e^{i(k_I - k'_I)x} dx + \int_0^{\infty} e^{-i(k_I - k'_I)x} dx \right] = C_I C_{I'} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k_I - k'_I)x} dx \right] \\ &= C_I C_{I'} (2\pi\hbar)^{1/2} \delta(k_I - k_{I'}), \end{aligned}$$

donde hemos prescindido ( $\doteq$ ) de terminos oscilatorios (que van con  $e^{\pm i(k_I + k_{I'})}$ ) que se iran compensando ya que se efectuan muchas oscilaciones, de esta manera *conviene definir  $C_I = 1/(2\pi\hbar)^{1/2}$* . Si quisieramos normalizar pero *en términos de la energía y no del impulso*, como los  $k_I = f(E)$  dependen de la energía deberiamos usar

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{f(E')}^* \psi_{f(E)} dx = \delta(f(E') - f(E)) = \frac{\delta(E - E')}{|df/dE|}$$

con lo que debería ser  $\psi_{f(E)} = \frac{1}{\sqrt{|df/dE|}} \psi_E$ , donde en este caso es  $k = f(E)$ ,  $dE/dk = v(E)$ , que da  $k\hbar/m$  cuando la partícula es libre, o sea lo que en general llamamos la velocidad y por lo tanto  $\psi_E = (2\pi\hbar v)^{-1/2} e^{ik(E)x}$ .

La corriente de probabilidad de

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = i\hbar/2m [\Psi(\mathbf{r}, t)\nabla\Psi(\mathbf{r}, t)^* - \Psi^*(\mathbf{r}, t)\nabla\Psi(\mathbf{r}, t)],$$

de  $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$  es

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (-i) \frac{2p}{2\pi\hbar^2} = \frac{p}{2m\hbar\pi} = \frac{k}{2\pi m} = \frac{v}{\hbar},$$

o sea lo que buscaríamos como criterio alternativo de normalización que *la corriente de probabilidad sea finita y normalizada a un valor*.

Si ahora queremos analizar el caso  $-U_0 < E < 0$  obtendremos estados ligados con soluciones (donde usamos  $i = \sqrt{-1}$  en el exponente de  $\psi_I$ )

$$\psi(x) = \begin{cases} A_I e^{\kappa_I x}, & x < 0, \kappa_I = \sqrt{(-2mE)/\hbar^2} \\ B_{II} e^{ik_{II}x} + B'_{II} e^{-ik_{II}x}, & 0 < x < L, k_{II} = \sqrt{(2m(E + U_0))/\hbar^2} \\ C_I e^{\kappa_I x} + C'_I e^{-\kappa_I x}, & x > L \end{cases}$$

donde si se impone la continuidad de  $\psi'/\psi$  en  $0, L$

$$\begin{aligned} B_{II} &= \frac{\kappa_I + ik_{II}}{2ik_{II}} A_I, B'_{II} = B_{II}^*, C_I/A_I = \frac{e^{-2L\kappa_I}}{4i\kappa_I k_{II}} \left[ (\kappa_I + ik_{II})^2 e^{2ik_{II}L} - (\kappa_I - ik_{II})^2 e^{-2ik_{II}L} \right], \\ C'_I/A_I &= (k_{II}^2 + \kappa_I^2) \text{sen} 2k_{II}L / 2k_2 \kappa_I, \end{aligned}$$

pero para tener una onda finita si  $x > L$  debe ser

$$C_I = 0 \Rightarrow [(\kappa_I + ik_{II})^2 e^{2ik_{II}L} - (\kappa_I - ik_{II})^2 e^{-2ik_{II}L}] = 0 \Rightarrow e^{4ik_{II}L} = (2\kappa_I - i2k_{II})^2 / (2\kappa_I + i2k_{II})^2$$

$$e^{4ik_{II}L} = \left( \frac{2\kappa_I - i2k_{II}}{2\kappa_I + i2k_{II}} \right)^2 \Rightarrow e^{2ik_{II}L} = \mp \frac{2\kappa_I - i2k_{II}}{2\kappa_I + i2k_{II}} = \mp \frac{(2\kappa_I - i2k_{II})^2}{4\kappa_I^2 + 4k_{II}^2}$$

$$\Rightarrow e^{ik_{II}L} = i \frac{\kappa_I - ik_{II}}{\sqrt{\kappa_I^2 + k_{II}^2}} (-) \text{ or } \frac{\kappa_I - ik_{II}}{\sqrt{\kappa_I^2 + k_{II}^2}} (+)$$

- $e^{ik_{II}L} = i \frac{\kappa_I - ik_{II}}{\sqrt{\kappa_I^2 + k_{II}^2}} \Rightarrow \tan(k_{II}L) = \frac{\kappa_I}{k_{II}} > 0, \cos^2(k_{II}L) = \frac{1}{1 + \tan^2\left(\frac{\kappa_I}{k_{II}}\right)} = \frac{k_{II}^2}{\kappa_I^2 + k_{II}^2} = \frac{k_{II}^2}{2mU_0/\hbar^2} \equiv \frac{k_{II}^2}{k_0^2}$ 

$$\tan(k_{II}L) > 0, |\cos(k_{II}L)| = \frac{k_{II}}{k_0}$$
- $e^{ik_{II}L} = \frac{\kappa_I - ik_{II}}{\sqrt{\kappa_I^2 + k_{II}^2}} \Rightarrow \tan(k_{II}L) = -\frac{k_{II}}{\kappa_I} < 0, \sin^2(k_{II}L) = \frac{\tan^2 k_{II}L}{1 + \tan^2 k_{II}L} = \frac{k_{II}^2}{k_0^2},$ 

$$\tan(k_{II}L) < 0, |\sin(k_{II}L)| = \frac{k_{II}}{k_0}$$

Lo que se puede observar es que hay un número finito de estados pues si  $k_{II}/k_0 > 1$  no hay más solución. Si  $k_0 \leq \pi/2L$  sólo hay un sólo estado ligado.

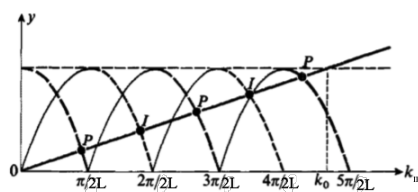


Figura 9: energías estados ligados

Notemos la solución en  $(0, L)$

$$\psi_{II}(x) = B_{II}e^{ik_{II}x} + B'_{II}e^{-ik_{II}x} = B_{II}2\cos(k_{II}x)$$

$$\psi(-x) = \psi(x),$$

sin embargo en  $(-L, 0)$  no tenemos oscilatorias, y por lo tanto la función no es par. Si el potencial fuera simétrico respecto al cero  $U(x) \rightarrow U(x + L/2)$

$$\psi_{II}(x) = B_{II}2\cos(k_{II}(x + L/2)),$$

$$\psi_{II}\left(-\frac{L}{2} + \xi\right) = \psi_{II}\left(\frac{L}{2} - \xi\right), 0 < \xi < L/2,$$

y las soluciones serían pares.



Figura 10: Espectro pozo finito