Pozo finito de potencial.

El último ejemplo que vamos a ver en este tema es el de una partícula en un pozo finito de potencial. El pozo finito de potencial viene dado por la siguiente función:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ -V_0 & \text{para } 0 < x < a \\ 0 & \text{para } x > a \end{cases}$$

Los estados con energía positiva ya los hemos estudiado, ya que serán los mismos que en la barrera de potencial cambiando V_0 por $-V_0$. En esta sección vamos a analizar si es posible algún estado estacionario con energía negativa. Dividimos como siempre la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en tres regiones:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\mathrm{I}}(x) & \text{para } x \leq 0 \\ \varphi_{\mathrm{II}}(x) & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{\mathrm{III}}(x) & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Las ecuaciones que satisfacen cada una de estas funciones son las siguientes:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\varphi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} - \rho^2\varphi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \\ \dfrac{d^2\varphi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} + k^2\varphi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \\ \dfrac{d^2\varphi_{\mathrm{III}}(x)}{dx^2} - \rho^2\varphi_{\mathrm{III}}(x) = 0 \end{cases} \qquad \text{donde:} \qquad \begin{array}{l} \rho^2 = \dfrac{2m\,|E|}{\hbar^2} \\ k^2 = \dfrac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \end{array}$$

y las soluciones de estas tres ecuaciones diferenciales son las siguientes:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\rho x} + A'e^{-\rho x} & \text{para } x \leq 0 \\ \varphi_{\mathrm{II}}(x) = Be^{ikx} + B'e^{-ikx} & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{-\rho x} + C'e^{\rho x} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Si queremos que la función de onda no tienda a infinito en $x \to \pm\infty$ las constantes A' y C' tienen que ser nulas, por tanto, sólo quedan cuatro constantes y la solución queda reducida a:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\rho x} & \text{para } x \leq 0 \\ \varphi_{\mathrm{II}}(x) = Be^{ikx} + B'e^{-ikx} & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{-\rho x} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Imponemos ahora las condiciones de contorno, que como siempre vienen de imponer la continuidad de la función de onda y su primera derivada en los puntos de unión entre las distintas regiones. Estas condiciones se traducen en las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} A = B + B' \\ \rho A = ikB - ikB' \\ Be^{ika} + B'e^{-ika} = Ce^{-\rho a} \\ ikBe^{ika} - ikB'e^{-ika} = -\rho Ce^{-\rho a} \end{cases}$$

o bien:

$$\left\{\begin{array}{l} A - B - B' = 0 \\ \rho A - ikB + ikB' = 0 \\ e^{ika}B + e^{-ika}B' - e^{-\rho a}C = 0 \\ ike^{ika}B - ike^{-ika}B' + \rho e^{-\rho a}C = 0 \end{array}\right.$$

Este sistema de ecuaciones es homogéneo y sólo puede tener solución, distinta de la trivial, si el siguiente determinante es nulo.

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \rho & -ik & ik & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -e^{-\rho a} \\ 0 & ike^{ika} & -ike^{-ika} & \rho e^{-\rho a} \end{vmatrix} = 0$$

En ese caso existen infinitas soluciones que se obtienen dejando indeterminada una de las constantes. Esta constante nos sirve para poder normalizar las funciones de onda. Vamos a calcular el determinante:

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \rho & -ik & ik & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -e^{-\rho a} \\ 0 & ike^{ika} & -ike^{-ika} & \rho e^{-\rho a} \end{vmatrix} = e^{-\rho a} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \rho & \rho - ik & \rho + ik & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -1 \\ 0 & ike^{ika} & -ike^{-ika} & \rho \end{vmatrix} =$$

$$= e^{-\rho a}\left[\rho(\rho - ik)e^{-ika} - ik(\rho + ik)e^{ika} - ik(\rho - ik)e^{-ika} - \rho(\rho + ik)e^{ika}\right] =$$

$$= e^{-\rho a}\left[(\rho - ik)^2 e^{-ika} - (\rho + ik)^2 e^{ika}\right] = e^{-a(\rho + ik)}(\rho + ik)^2 \left[\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2 - e^{2ika}\right] = 0$$

Si queremos que el determinante se anule se tiene que verificar la siguiente condición:

$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2 = e^{2ika}$$

Como vamos a ver a continuación, esta ecuación impone una restricción sobre los valores permitidos de la energía. La ecuación anterior es una trascendente, de modo que vamos a buscar un método gráfico de analizar sus soluciones. La ecuación anterior es equivalente a la siguiente:

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = \pm e^{ika}$$

Vamos a analizar por separado las soluciones que se obtienen tomando cada uno de los dos signos.

Signo $-$.

Si tomamos el signo negativo se llega a la siguiente expresión:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\rho}{k}$$

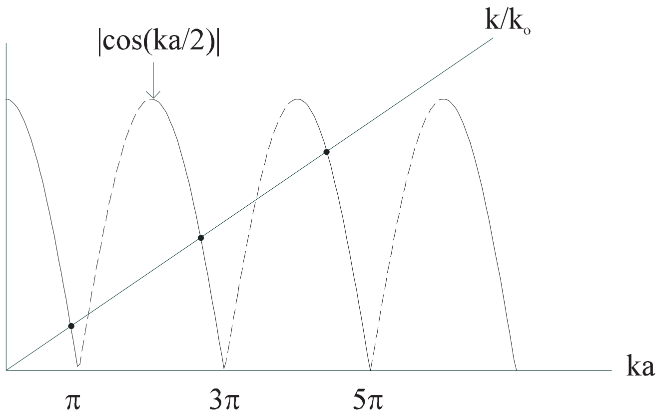
Como ρ y k son cantidades positivas las soluciones de esta ecuación tienen que verificar la condición $\tan(ka/2) \geq 0$. Por otro lado, utilizando la relación trigonométrica $\tan^2\alpha + 1 = 1/\cos^2\alpha$, y tomando el cuadrado de la ecuación anterior llegamos a la siguiente ecuación:

$$\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{k^2}{\rho^2 + k^2} = \frac{k^2}{k_0^2} \qquad \text{donde } k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

Por último, las soluciones verifican las siguientes dos condiciones:

$$\begin{cases} \left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \geq 0 \end{cases}$$

En la siguiente figura se han representado la soluciones de la ecuación anterior (para un caso particular). Como puede observarse cuanto mayor sea V_0 (es decir, más profundo sea el pozo) existirán más soluciones.



Soluciones de la ecuación $\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = -e^{ika}$.

Signo +.

Vamos a analizar ahora el resto de la soluciones que se obtienen tomando el signo positivo. En este caso, la ecuación que queremos resolver se puede transformar en la siguiente:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = -\frac{k}{\rho}$$

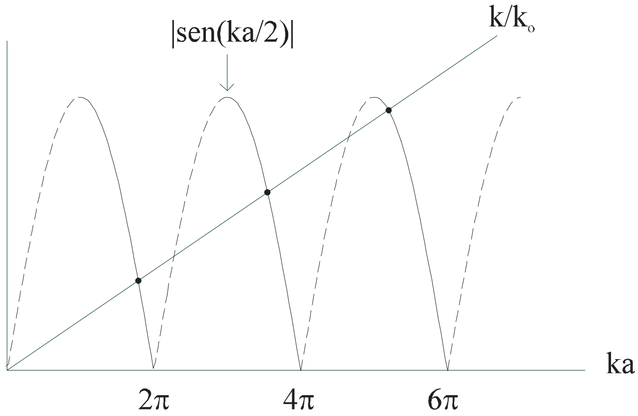
Por tanto, en este caso se verifica la condición $\tan(ka/2) \leq 0$. Haciendo uso de la igualdad trigonométrica $1 + 1/\tan^2\alpha = 1/\sin^2\alpha$, y tomando el cuadrado de la ecuación anterior, llegamos a la siguiente ecuación:

$$\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{k^2}{\rho^2 + k^2} = \frac{k^2}{k_0^2}$$

Por tanto en este caso las soluciones verifican las siguiente condiciones:

$$\begin{cases} \left|\sin\left(\dfrac{ka}{2}\right)\right| = \dfrac{k}{k_0} \\ \tan\left(\dfrac{ka}{2}\right) \leq 0 \end{cases}$$

En la siguiente figura están representadas gráficamente las soluciones para este caso (para un caso particular).



Soluciones de la ecuación $\frac{\rho-ik}{\rho+ik} = e^{ika}$.

Si $k_0 a \leq \pi$ ($V_0 \leq \pi^2\hbar^2/2ma^2$), sólo existirá una solución del primer caso. Para valores mayores que V_0 iran apareciendo soluciones del segundo y primer caso alternativamente.

Podemos ver que en el límite $V_0 \to \infty$ (o bien $k_0 \to \infty$) las soluciones de la ecuación trascendente tienden a $k = n\pi/a$. Por tanto, las posibles energías en este límite son:

$$|E| = V_0 - \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad \text{ o bien } \quad E = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} - V_0$$

que como era de esperar coinciden con las energías del pozo infinito de potencial.

Una vez que se ha resuelto la ecuación trascendente se pueden obtener las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Necesitamos expresiones para las constantes B, B' y C, si dejamos la constante A como una constante de normalización. Las expresiones para las constantes se obtienen fácilmente y son:

$$\begin{aligned} B &= -\frac{i}{2k}(\rho + ik)A \\ B' &= \frac{i}{2k}(\rho - ik)A \\ C &= e^{\rho a}\left(\frac{\rho}{k}\sin(ka) + \cos(ka)\right)A \end{aligned}$$

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se pueden obtener ya y son las siguientes:

$$\varphi_E(x) = \begin{cases} Ae^{\rho a} & \text{para } x \leq 0 \\ -\dfrac{i}{2k}(\rho + ik)Ae^{ikx} + \dfrac{i}{2k}(\rho - ik)Ae^{-ikx} = A\left(\dfrac{\rho}{k}\sin(kx) + \cos(kx)\right) & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ A\left(\dfrac{\rho}{k}\sin(ka) + \cos(ka)\right) e^{\rho(a-x)} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

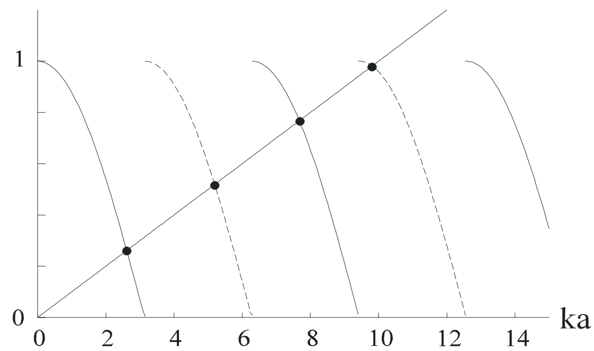
donde los valores de k y ρ se obtienen de la ecuación transcendente para un valor particular de k_0. La constante de normalización A debe verificar la siguiente condición:

$$|A|^2 \left[\frac{1 + e^{-2\rho a}}{2\rho} + \frac{(k^2 - \rho^2)\sin(2ka) - 2\rho k\cos(2ka) + 2ka(k^2 + \rho^2)}{4k^3}\right] = 1$$

Las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger son como siempre las funciones anteriores multiplicadas por el factor $e^{-i\omega t}$.

Para centrar las ideas, vamos a presentar las soluciones para un valor particular de k_0, que será $k_0 = 10/a$ ($V_0 = 50\hbar^2/ma^2$). En la siguiente figura se puede ver que existen cuatro soluciones y que son:

ka	ρa
2.61288	9.65261
5.19148	8.54684
7.67493	6.41957
9.81259	1.92693

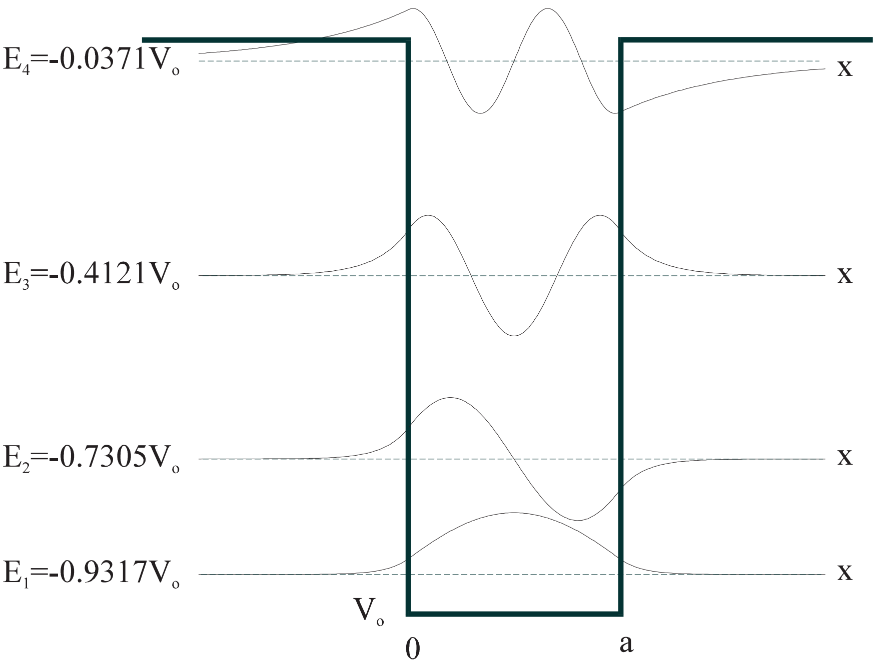


Soluciones para el caso particular $k_0 a = 10$.

Las posibles energías son por tanto:

$$E_1 = -\frac{46.58\hbar^2}{ma^2} = -0.9317V_0 \quad E_2 = -\frac{36.52\hbar^2}{ma^2} = -0.7305V_0$$
$$E_3 = -\frac{20.61\hbar^2}{ma^2} = -0.4121V_0 \quad E_4 = -\frac{1.856\hbar^2}{ma^2} = -0.0371V_0$$

En la siguiente figura se puede ver una representación de las funciones de onda para los cuatro estados posibles.



Funciones de onda para el caso particular $k_0 a = 10$.

Como se puede apreciar existe una cierta penetración de las funciones de onda en las regiones clásicamente prohibidas. En cuanto al número de ceros de las funciones de onda, podemos ver que siguen la misma pauta que en el caso del pozo infinito de potencial.