UNIVERSIDAD DE
MURCIA

FÍSICA COMPUTACIONAL

Alejandro Pujante Pérez
49248019 M

Ejercicio 1-71-app

Breve descripción:

En este ejercicio obtendremos el valor de la energía del estado ligado par de un electrón en un pozo de potencial doble delta.

$$V(x) = -\alpha[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$$

En función del parámetro a (semidistancia entre pozos) así como su función de onda en el espacio.

Índice

1. Ecuacion transcendente y soluciones.

La energía del único estado ligado con paridad par viene dada por la ecuación transcendente

$$tanh(\kappa a) = \frac{2m\alpha}{\kappa\hbar^2} - 1$$

Donde $\kappa^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$, en lo que sigue tomaremos unidades atómicas: $\hbar = 1$, $m = 1$, $\alpha = 1$ para simplificar los cálculos.

Cabe destacar ahora que el valor de κ cumple la relación $1 < \kappa < 2$.

Dicho esto ahora obtendremos las soluciones de κ en relación a la ecuación transcendente y con ello el valor de la energía, sin olvidar que lo estamos estudiando en función del parámetro a $(a.u)$.

A continuación se presentan algunas de estas soluciones para algunos valores de a.

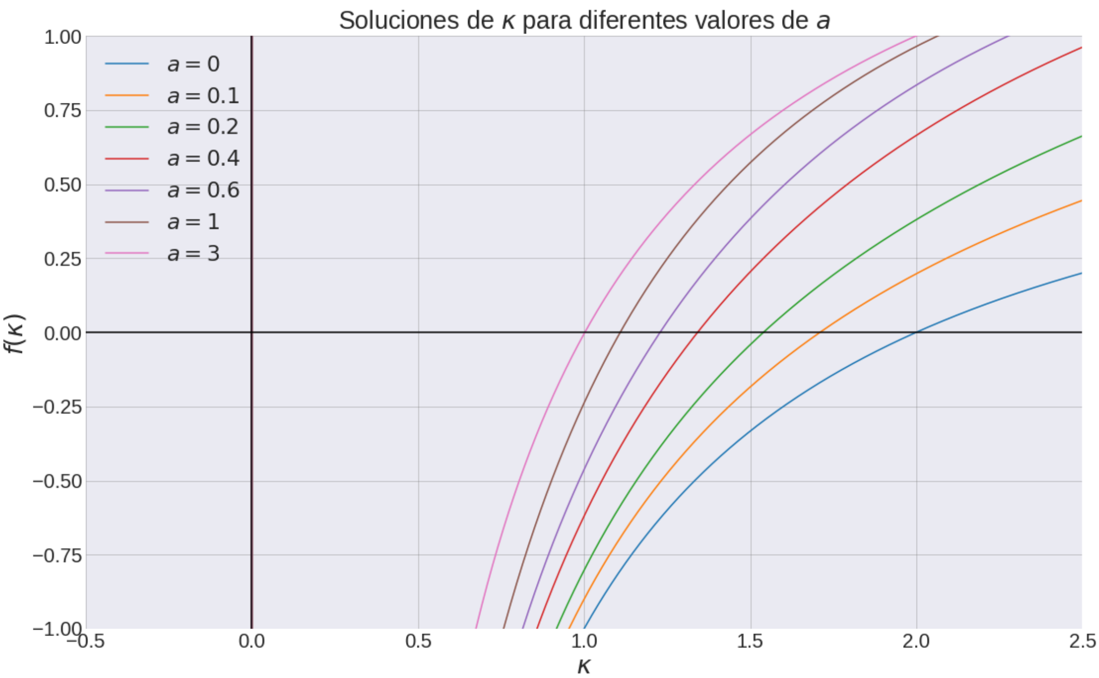

Figura 1: Soluciones a la ecuación $tanh(\kappa a) = \frac{2m\alpha}{\kappa\hbar^2} - 1$ para distintos valores del parámetro a $(a.u)$, podemos ver que las soluciones están bien acotadas entre 0 y 1.

2. Energía.

Nos interesa el valor de la energía en función de a , por tanto el problema se centra en resolver iteradamente la ecuación y obtener un valor de κ para cada valor de a, y con la relación anterior sabemos que $E = \kappa^2$.

La solución la obtenemos realizando un bucle desde $a = 0$ $a.u$ hasta $a = 5$ $a.u$ por ejemplo, y por el método de bisección encontrar las distintas soluciones de κ. Los valores de x_L y x_R son sencillos ya que basta con tomarlos por la izquierda de 1 y por la derecha de 2 puesto que no existen soluciones fuera de ese intervalo.

Tras recoger los datos del bucle hemos obtenido la siguiente realción entre la energía E y la semidistancia entre pozos a.

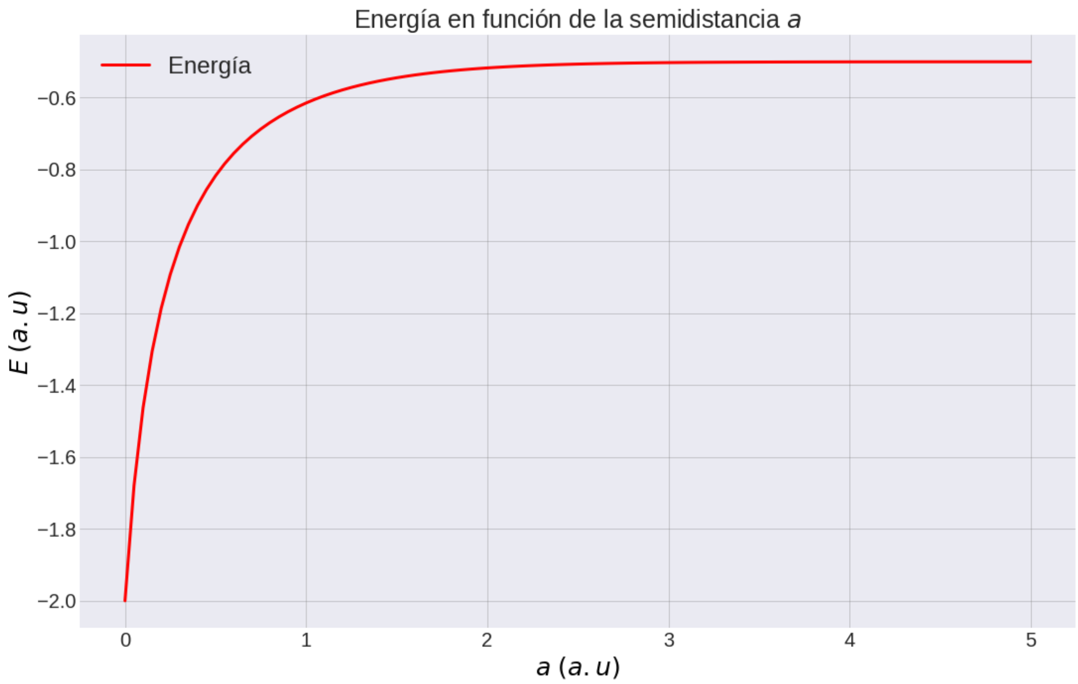

Figura 2: Energía en función de la semidistancia entre pozos a

Como vemos la energía converge rápidamente al valor de $E = -0{,}5$ a.u. Una observación es que cuando aumentamos la distancia, el crecimiento de la energía tiende a ser logarítmico.

3. Potencial y energía del estado ligado par.

Sabido esto, tomemos un valor arbitrario de la distancia, en mi caso $a = 1\ a.u$, para el cual la energía del estado ligado par es $E = -0{,}592$ a.u, hagamos una representación de la situación.

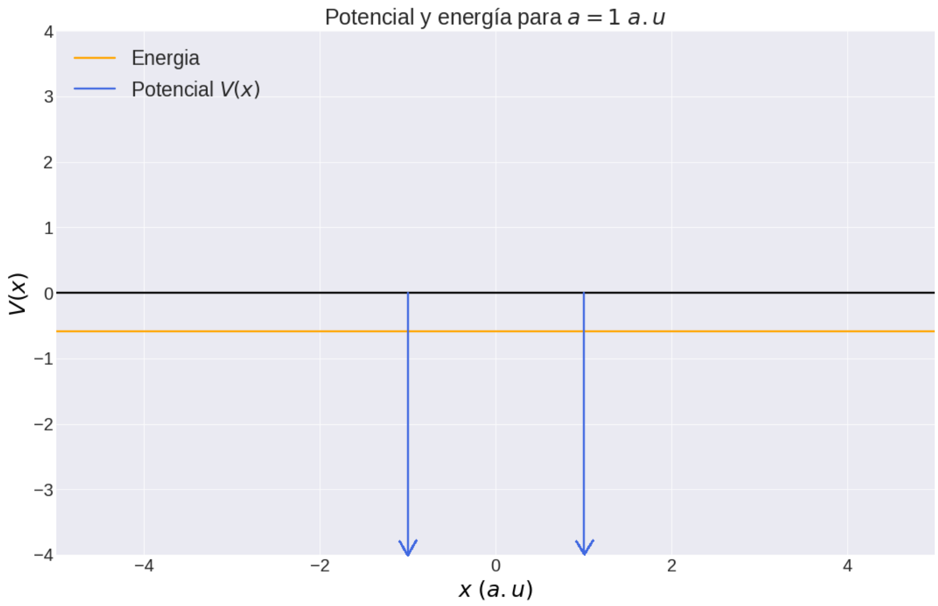

Figura 3: Potencial $V(x) = -\alpha[\delta(x-a) + \delta(x+a)]$ y energía asociada al estado ligado par cuando $a = 1\ a.u.$

4. Ecuación de Schrödinger y función de onda.

Siguiendo el caso anterior, podemos resolver la ecuación de Schrödinger para este potencial:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

Tomemos $E < 0$, ya que solo en este caso existirán estados ligados para este potencial.

Donde diferenciaremos entre 3 zonas, en las cuales impondremos las condiciones de contorno de continuidad de la función y su derivada en cada una de las regiones.

- Zona 1: $\psi(x)$ si $x < -a$
- Zona 2: $\psi(x)$ si $-a < x < a$
- Zona 3: $\psi(x)$ si $x > a$

Tras imponer las condiciones, las soluciones para cada zona son combinación lineal de exponenciales con constantes que hallaremos.

Además, en este paso obtenemos la ecuación transcendete de la cual partíamos en el ejercicio:

$$tanh(\kappa a) = \frac{2m\alpha}{\kappa\hbar^2} - 1$$

Esta ecuación tiene una única solución para cada valor de a, por tanto solo existirá un estado ligado para cada valor de la semidistancia.

Destacar tambien que si hacemos tender $a \to 0$, $\kappa = 2$, resultado que se obtiene si tenemos una sola delta de Dirac.

Si operamos para obtener las constantes obtenemos las siguientes funciones de onda para cada zona:

$$\psi(x) \begin{cases} Acosh(ka)e^{k(x+a)} & \text{si} \quad x < -a \\ Acosh(kx) & \text{si} \quad -a < x < +a \\ Acosh(ka)e^{-k(x-a)} & \text{si} \quad x > +a \end{cases}$$

Donde la constante $A = \sqrt{(a + \frac{cosh^2(ka)}{k} + \frac{senh(2ka)}{2k})}$ se ha obtenido por normalización de la función de onda.

Esta función de onda $\psi(x)$ podemos representarla en una gráfica, para el caso donde $a = 1\ a.u$ hemos obtenido lo siguiente:

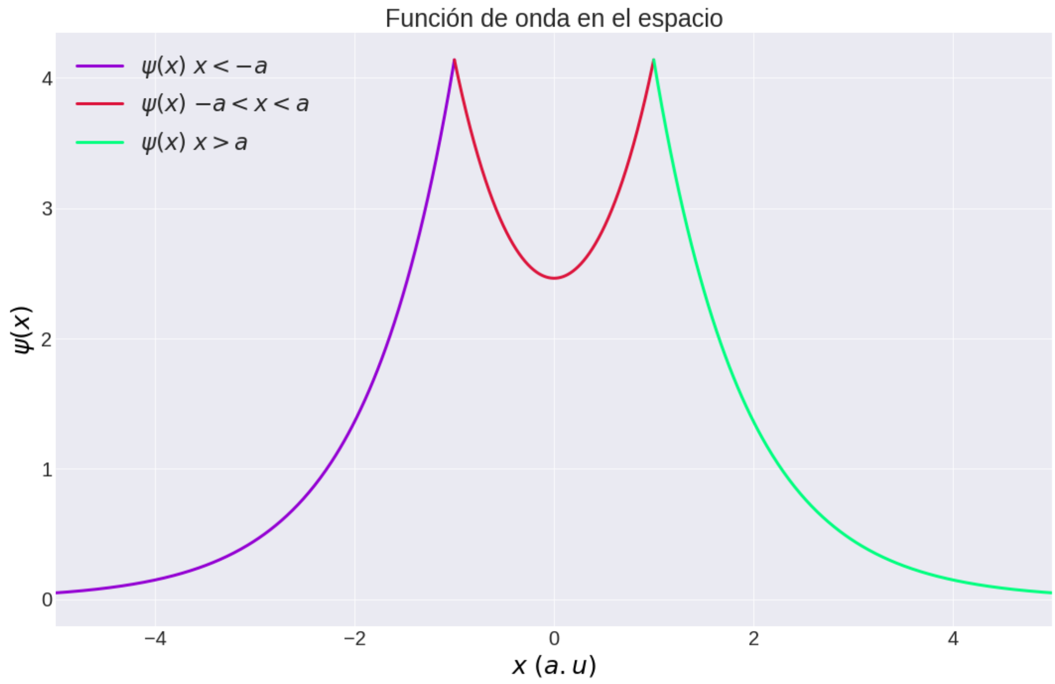

Figura 4: Función de onda $\psi(x)$ para las diferentes zonas.

5. Conclusiones.

El ejercicio ilustra muy bien la utilidad de los métodos numéricos para resolver ecuaciones que no tienen solución analítica y lo extrapola al campo de la fisica cuántica como podría ser cualquier otro.

En mi opinión me ha parecido un ejercicio interesante y diferente a lo que estamos acostumbrados resolviendolo con papel y boli.