Pozo cuadrado de potencial

a) Tenemos el siguiente potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ V_0 & |x| \geqslant a \end{cases} \tag{1}$$

El potencial es una función par y, si situamos el origen de la coordenada x en el eje de simetría del pozo tendremos que $[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0$, es decir, el operador Hamiltoniano (y en consecuencia el operador $\hat{V}$ y $\hat{p}$) conmuta con el operador paridad. Sabemos entonces que las autofuncionnes deben tener paridad definida.

Planteamos el problema de autovalores para el Hamiltoniano $\hat{H}|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$. Como sabemos, podemos dividir el problema en dos regiones para $|x| < a$ (región II) y para $|x| \geqslant a$ (regiones I y III).

Región II

Aquí la partícula se comporta como una partícula libre donde no hay potencial, entonces tendremos,

$$\psi_{II}(x) = A_{II}e^{-i\kappa_{II}x} + B_{II}e^{i\kappa_{II}x}, \forall x \in [-a, a]$$

donde $\kappa_{II} = \sqrt{\dfrac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$

Región I y III

Aquí tendremos que la ecuación de autovalores viene dada por,

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_0\right)|\psi_I\rangle = \epsilon|\psi_I\rangle \Rightarrow \nabla^2|\psi_I\rangle = (\kappa_I)^2|\psi_I\rangle$$

donde $\kappa_I = \kappa_{III} = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - \epsilon)}{\hbar^2}}$ (donde se deberá cumplir que $\epsilon < V_0$) y la solución en la región I será:

$$\psi_I(x) = \cancel{A_I e^{-\kappa_I x}} + B_I e^{\kappa_I x} \Rightarrow \psi_I(x) = B_I e^{\kappa_I x}, \forall x \in (-\infty, a]$$

donde se usó el hecho de que si $x < 0$, el primer término $\left(A_I e^{-\kappa_I x}\right)$ diverge para $x \to -\infty$ (y no es una función L^2) y al no tener significado físico la descartamos.

Y, de forma análoga para la región III, tendremos la siguiente solución:

$$\psi_{III}(x) = A_{III}e^{-\kappa_{III}x}, \forall x \in [a, \infty),\ \kappa_{III} = \kappa_I \tag{2}$$

Juntando las funciones de onda de las tres regiones tendremos la solución general dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} B_I e^{\kappa_I x} & \forall x \in (-\infty, -a] \\ A_{II}e^{-i\kappa_{II}x} + B_{II}e^{i\kappa_{II}x} & \forall x \in [-a,\ a\ ] \\ A_{III}e^{-\kappa_I x} & \forall x \in [a, \infty)) \end{cases} \tag{3}$$

Notemos que en las regiones I y III tenemos soluciones de la forma de exponenciales decrecientes, muy lejos del pozo de potencial (si $x \to \pm\infty$) estas soluciones se anulan. Y en la región II tenemos soluciones de la forma exponenciales complejas (o funciones oscilatorias). Esta solución general, podremos separarla en soluciones pares e impares, de la siguiente manera:

$$A_{II}e^{-i\kappa_{II}x} + B_{II}e^{i\kappa_{II}x} = (A_{II} + B_{II})\cos(\kappa_{II}x) + i(A_{II} - B_{II})\sin(\kappa_{II}x)$$
$$\Rightarrow \psi_{II}^{\text{pares}}(x) = C_{II}^{+}\cos(\kappa_{II}x); \psi_{II}^{\text{impares}}(x) = C_{II}^{-}\cos(\kappa_{II}x)$$

y para las regiones I y III se deberá cumplir que

$$\psi_I^{\text{pares}}(-a) = \psi_{III}^{\text{pares}}(a) \Rightarrow B_I = A_{III}; \psi_I^{\text{pares}}(-a) = -\psi_{III}^{\text{pares}}(a) \Rightarrow B_I = -A_{III}$$

Entonces, de (8), (9) y (10) tenemos,

$$\psi^{\text{pares}}(x) = \begin{cases} B_I e^{\kappa_I x} & \forall x \in (-\infty, -a] \\ C_{II}^{+} \cos(\kappa_{II} x) & \forall x \in [-a,\ a\ ] \\ B_I e^{-\kappa_I x} & \forall x \in [a, \infty)) \end{cases} ; \psi^{\text{impares}}(x) = \begin{cases} B_I e^{\kappa_I x} & \forall x \in (-\infty, -a] \\ C_{II}^{-} \sin(\kappa_{II} x) & \forall x \in [-a,\ a\ ] \\ -B_I e^{-\kappa_I x} & \forall x \in [a, \infty)) \end{cases}$$

Ahora bien, tanto la función de onda como su derivada deben ser continuas en los puntos $x = \pm a$. Imponiendo estas condiciones de matching y notando que, debido a la paridad de las soluciones, solo es necesaria plantearla en uno de los puntos extremos tendremos:

Soluciones pares: para las regiones II y III tendremos,

$$\lim_{x \to a^-} \psi_{II}^{\text{pares}} = \lim_{x \to a^+} \psi_{III}^{\text{pares}}(x) \Rightarrow C_{II}^{+} \cos(\kappa_{II} a) = B_I e^{-\kappa_I a}$$

Por otro lado,

$$\lim_{x \to a^-} \frac{d\left[\psi_{II}^{\text{pares}}\right]}{dx} = \lim_{x \to a^+} \frac{d\left[\psi_{III}^{\text{pares}}(x)\right]}{dx} \Rightarrow -C_{II}^{+} \kappa_{II} \sin(\kappa_{II} a) = -B_I \kappa_I e^{-\kappa_I a}$$

Entonces tenemos el siguiente sistema de ecuaciones,

$$\hat{A}\vec{x} = \vec{b} \equiv \begin{pmatrix} e^{-\kappa_I a} & -\cos(\kappa_{II} a) \\ -\kappa_I e^{-\kappa_I a} & \kappa_{II} \sin(\kappa_{II} a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_I \\ C_{II}^{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Pidiendo solución no trivial, tenemos que $\det(\hat{A}) = 0$,

$$e^{-\kappa_I a}[\kappa_{II} \sin(\kappa_{II} a) - \kappa_I \cos(\kappa_{II} a)] = 0 \Rightarrow \kappa_I^{\text{pares}} = \kappa_{II}^{\text{pares}} \tan\left(\kappa_{II}^{\text{pares}} a\right)$$

Soluciones impares para las regiones II y III tendremos,

$$\lim_{x \to a^-} \psi_{II}^{\text{impares}} = \lim_{x \to a^+} \psi_{III}^{\text{impares}}(x) \Rightarrow C_{II}^{-} \sin(\kappa_{II} a) = -B_I e^{-\kappa_I a}$$

Por otro lado,

$$\lim_{x \to a^-} \frac{d\left[\psi_{II}^{\text{impares}}\right]}{dx} = \lim_{x \to a^+} \frac{d\left[\psi_{III}^{\text{impares}}(x)\right]}{dx} \Rightarrow C_{II}^{-} \kappa_{II} \cos(\kappa_{II} a) = B_I \kappa_I e^{-\kappa_I a}$$

Entonces tenemos el siguiente sistema de ecuaciones,

$$\hat{A}\vec{x} = \vec{b} \equiv \begin{pmatrix} -e^{-\kappa_I a} & -\sin(\kappa_{II} a) \\ \kappa_I e^{-\kappa_I a} & -\kappa_{II} \cos(\kappa_{II} a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_I \\ C_{II}^{-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

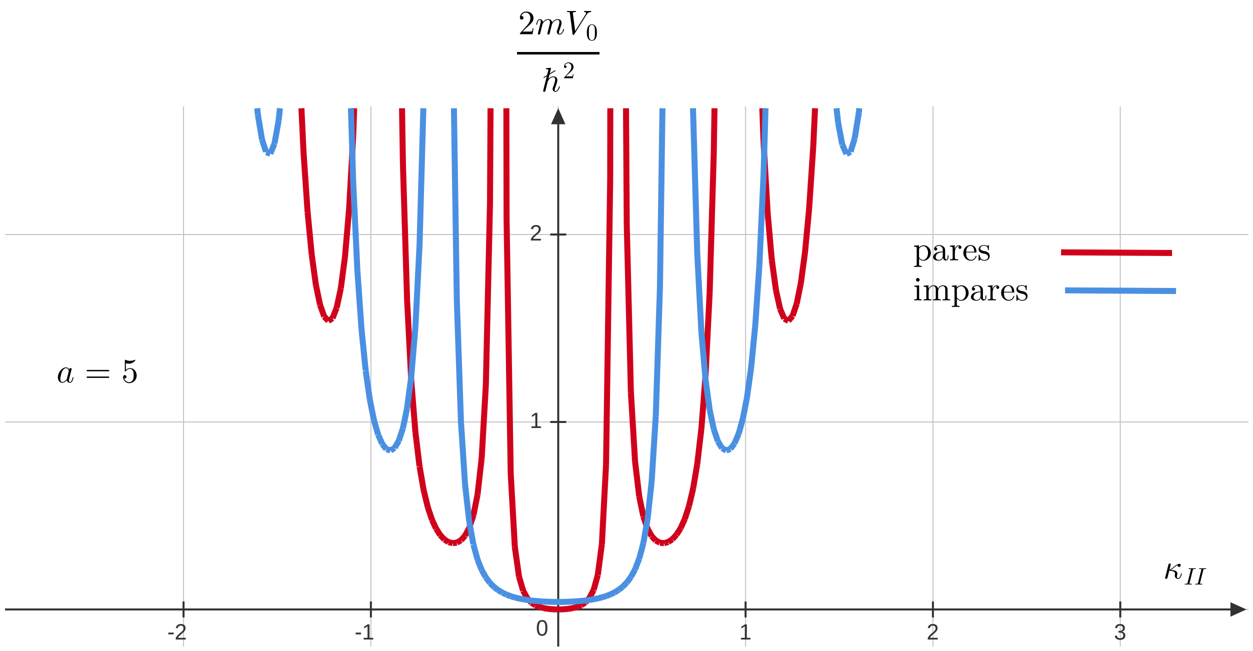
Pidiendo solución no trivial, tenemos que $\det(\hat{A}) = 0$,

$$e^{-\kappa_I a}[\kappa_{II} \cos(\kappa_{II} a) + \kappa_I \sin(\kappa_{II} a)] = 0 \Rightarrow \kappa_I^{\text{impares}} = -\kappa_{II}^{\text{impares}} \cot\left(\kappa_{II}^{\text{impares}} a\right)$$

Entonces, de los resultados anteriores y recordando que $(\kappa_I)^2 + (\kappa_{II})^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$ vemos que tenemos condiciones para los valores posibles de V_0, es decir,

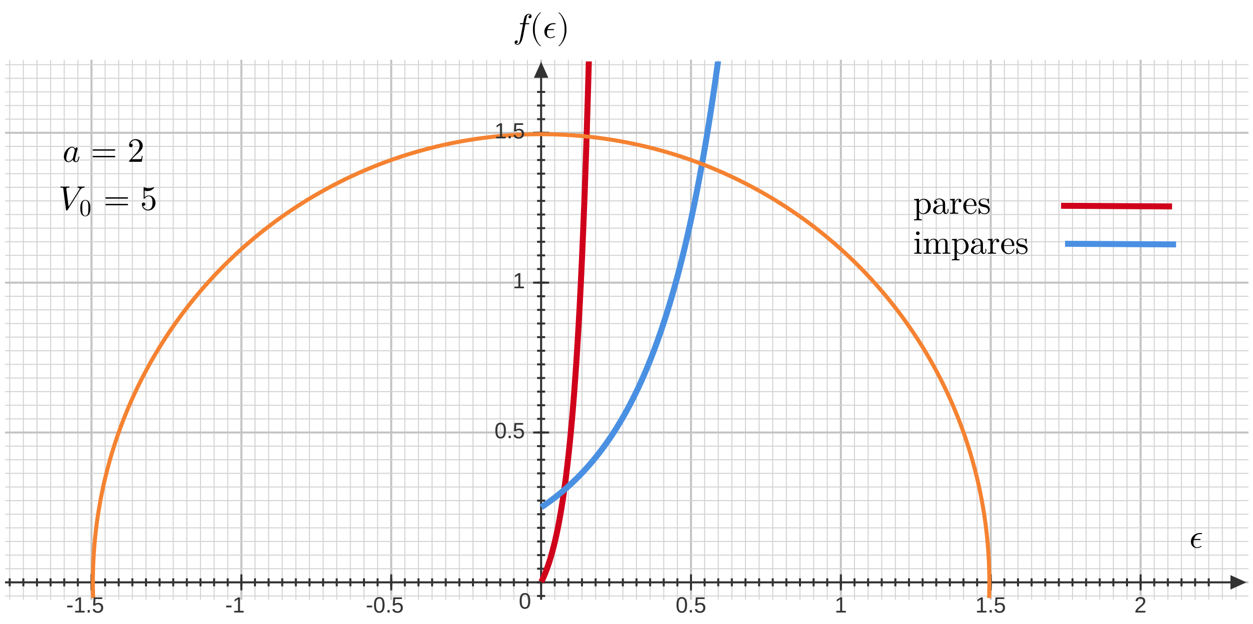
$$\left(\kappa_{II}^{\text{pares}}\right)^2\left[\tan^2\left(\kappa_{II}^{\text{pares}}a\right)+1\right]=\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

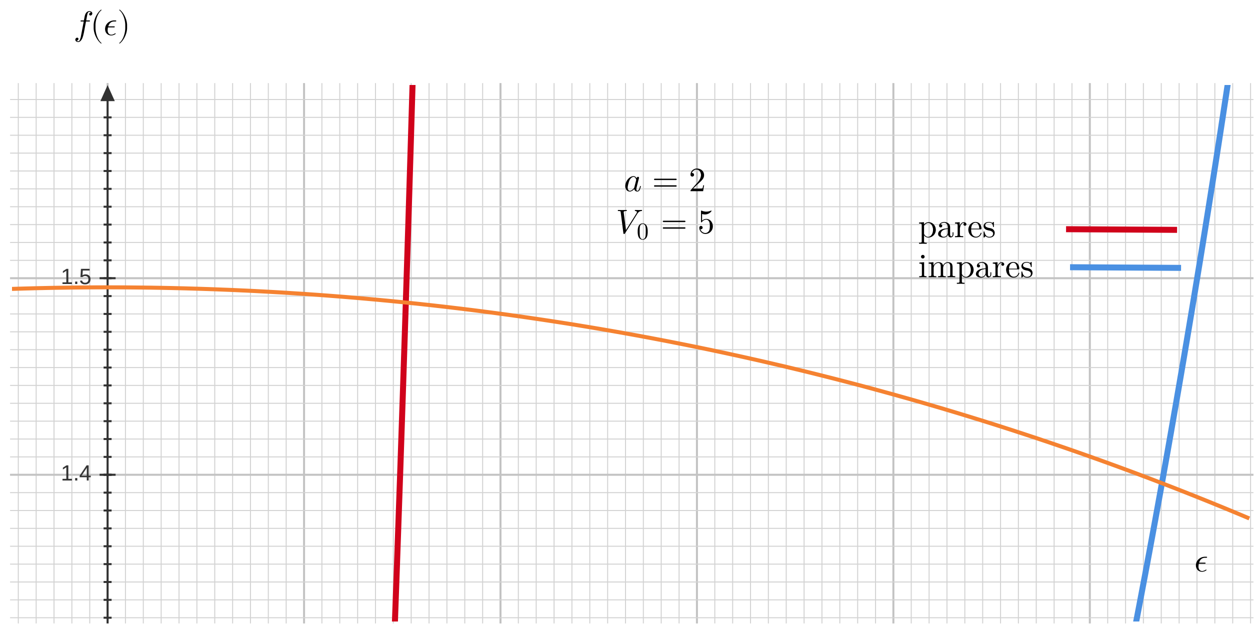
$$\left(\kappa_{II}^{\text{impares}}\right)^2\left[\cot^2\left(\kappa_{II}^{\text{impares}}a\right)+1\right]=\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$



y acá vemos que para cada valor de $(\kappa_{II})^2$ tendremos un valor de energía $\epsilon = \dfrac{(\hbar\kappa_{II})^2}{2m}$.

Y, en el sistema atómico de unidades $\hbar = m = 1$, si graficamos las funciones $f^{\text{par}}(\epsilon) = 2\epsilon\left[\tan^2\left(\sqrt{2\epsilon}\right)+1\right]$ y $f^{\text{impar}}(\epsilon) = 2\epsilon\left[\cot^2\left(\sqrt{2\epsilon}\right)+1\right]$ veremos que círculos centrados en el origen de radio $\sqrt{V_0}$ que cortan a la función $f(\epsilon)$ verificarán las condiciones impuestas del problema y serán una energía válida.




$f(\epsilon)$
$a = 2$
$V_0 = 5$
pares
impares
1.5
1.4
ϵ