Guía 2 - Ejercicio 2

Un electrón se encuentra confinado en un pozo cuántico dado por un potencial de confinamiento V(z). Notar que solo hay confinamiento en la dirección z. Factorice los autoestados del Hamiltoniano y dé su expresión en general, y en particular para: (i) un pozo cuadrado infinito, y (ii) un pozo parabólico. Indique las autoenergías en ambos casos.

Solución

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{1}$$

con $\hat{H}$ el operador Hamiltoniano y E la energía. Para el caso unidimensional, la ec. (1) queda

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

donde $\psi(z)$ es la función de onda correspondiente al potencial $V(z)$.

(i) Pozo cuadrado infinito

Supongamos que el electrón está confinado en un pozo de potencial dado por

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 \leq z \leq a \\ \infty & fuera\ del\ pozo \end{cases} \tag{3}$$

La ecuación de Schrödinger será

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right)\psi(z) = E\psi(z) \tag{4}$$

dentro del pozo el potencial es 0 entonces podemos escribir la ecuación como sigue

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\right)\psi(z) = 0 \tag{5}$$

o

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k^2\right)\psi(z) = 0 \tag{6}$$

con $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

La solución general de la ec. (6) está dada por una combinación de ondas planas

$$\psi(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz}. \tag{7}$$

La función de onda se debe anular en los puntos $z = 0$ y $z = a$ ya que la partícula no puede escapar del pozo (se necesitaría una cantidad infinita de energía). Si imponemos la condición de que se anule en el punto $z = 0$ se tiene que verificar que $A = -B$. Por otro lado, si queremos que la función de onda se haga cero en el punto $z = a$ tenemos que

$$\psi(a) = 2iAsen(ka) = 0 \tag{8}$$

de donde sale que los valores de k están restringidos:

$$k = \frac{n\pi}{a} \tag{9}$$

con n un número entero. Esta relación impone una condición sobre el valor de la energía, de modo que la energía solo puede tomar los valores

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \tag{10}$$

por tanto, en este caso el espectro de energías es discreto.

La energía del estado fundamental se da estableciendo $n = 1$:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}. \tag{11}$$

Podemos escribir la expresión general para la energía en términos de la energía del estado fundamental

$$E_n = n^2 E_1 \tag{12}$$

notando que el cambio en la energía entre niveles consecutivos aumenta a medida que n aumenta.

Para completar la solución, necesitamos encontrar la constante en la función de onda. Para hacer esto, imponemos la condición de que la función de onda tiene que ser normalizada, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier lugar del espacio tiene que ser 1. Esto es

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 dz = 1 \tag{13}$$

de aquí enontramos que las autofunciones del Hamiltoniano normalizadas son de la forma

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} sen\left(\frac{n\pi}{a} z\right). \tag{14}$$

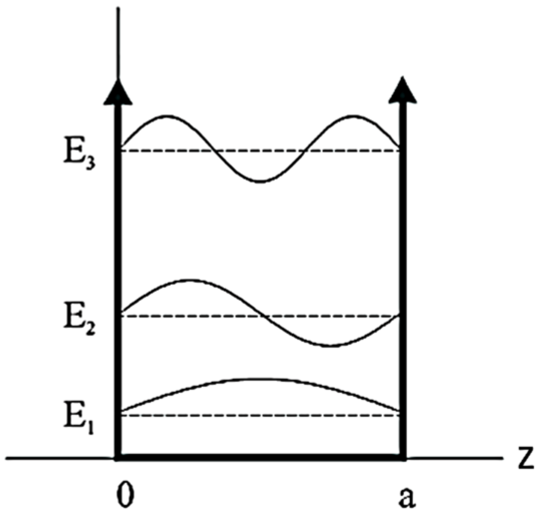

Figura 1: Primeras funciones de onda para una partícula en un pozo infinito de potencial.

Como podemos ver el estado fundamental no tiene ningún cero, el primer estado excitado tiene un cero, el segundo dos ceros, y así sucesivamente.

(ii) Pozo parabólico

La descripción cuántica del oscilador armónico está basada en la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, estas soluciones determinan los estados estacionarios de la partícula, en este caso, del electrón.

La energía pontencial está dada por $V(z) = \frac{k}{2} z^2$, entonces la ecuación de Schrödinger (en una dimensión) resulta

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{k}{2} z^2\right)\psi(z) = E\psi(z), \tag{15}$$

reacomodando la expresión y llamando $y^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} z^2$ y $\lambda = \frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}$, la ecuación (15) resulta

$$\frac{d^2}{dy^2}\psi(y) + \left(\lambda - y^2\right)\psi(y) = 0, \tag{16}$$

donde ψ ahora es función de la nueva variable y. Para encontrar las soluciones a esta ecuación diferencial, vemos que cuando $y \to \infty$, λse vuelve despreciable en comparación con y^2, y la ecuación se reduce a

$$\frac{d^2}{dy^2}\psi(y) = y^2\psi(y) \tag{17}$$

cuya solución es $\psi(y) = Ce^{-y^2/2}$ donde nos hemos quedado con la exponencial negativa ya que $\psi(y)$ debe anularse para valores infinitamente grandes. Por otra parte, la función de onda mantendrá la caída asintótica si es multiplicada por un polinomio finito $H(y)$. La solución tentativa será entonces

$$\psi(y) = H(y)\, e^{-y^2/2} \tag{18}$$

y reemplazando en la ec. (16) obtenemos una ecuación diferencial para $H(y)$

$$H'' - 2yH' + (\lambda - 1)H = 0 \tag{19}$$

para resolver esta ecuación proponemos una solución en forma polinómica:

$$H(y) = \sum_{k=0}^{n} a_k y^k \tag{20}$$

sustituyendo en la ec. (19) después de haber tomado las derivadas primera y segunda. La suma de los coeficientes de cada potencia de y debe anularse potencia por potencia, y encontramos la condición

$$\lambda = 2n + 1 \tag{21}$$

que es lo mismo que

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, ... \tag{22}$$

vemos que los autovalores para la energía del oscilador armónico cuántico son discretos y se encuentran espaciados la misma cantidad.

Luego, las funciones de onda normalizadas resultan

$$\psi_n(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y)\, e^{-y^2/2} \tag{23}$$

con $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}z$.

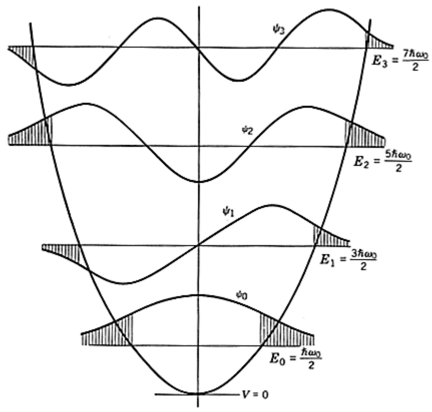

Figura 2: Niveles de energía y autofunciones para los primeros cuatro estados del oscilador armónico.