Consideraciones generales sobre la función de onda en potenciales unidimensionales.

Como hemos visto en temas anteriores lo primero que conviene hacer para calcular la evolución temporal de la función de onda es resolver el problema de autovalores del Hamiltoniano, o lo que es equivalente, resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Para el caso de un potencial unidimensional esta ecuación es:

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

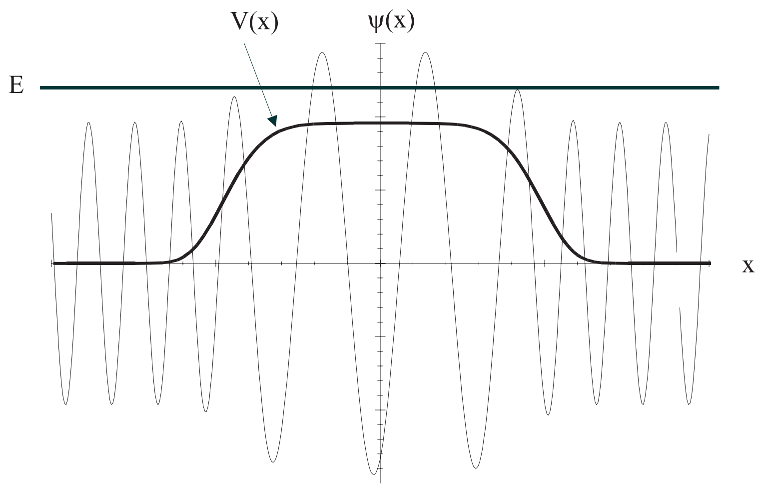
Esta ecuación la podemos escribir también de la siguiente forma:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2(x)}\psi(x) = 0$$

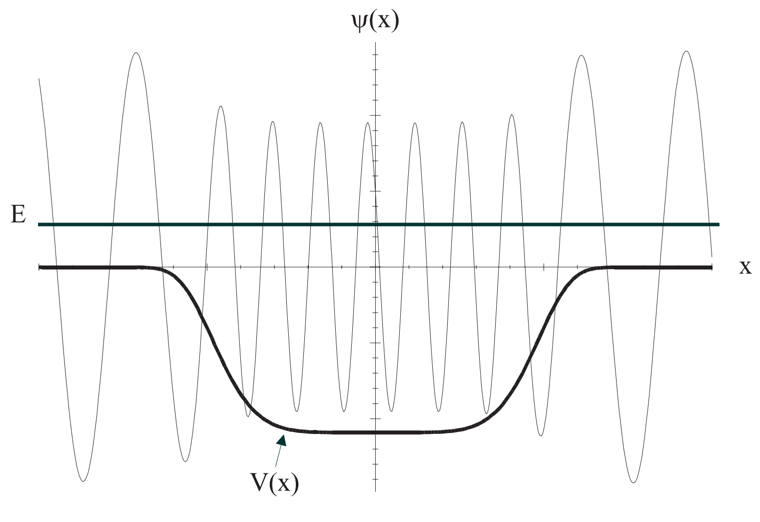
donde $\lambda(x) = \dfrac{h}{\sqrt{2m\,(E - V(x))}}$.

Vamos a hacer algunas consideraciones sobre como debe ser la función $\psi(x)$ que satisface la ecuación anterior en distintos casos. En primer lugar si $E > V(x)\ \forall x$ la función $\lambda^2(x)$ es positiva de modo que $\psi(x)$ es una función oscilatoria (como podemos ver la ecuación anterior se parece mucho a la de un oscilador armónico en el que la frecuencia varía con el tiempo). En los puntos en los que el potencial sea mayor $\lambda(x)$ se hace también mayor, de modo que las oscilaciones serán más lentas (espacialmente). Este hecho es compatible con que la derivada segunda de $\psi(x)$ sea menor ya que la curvatura de dicha función será también menor (la curvatura de una función es proporcional a su derivada segunda).

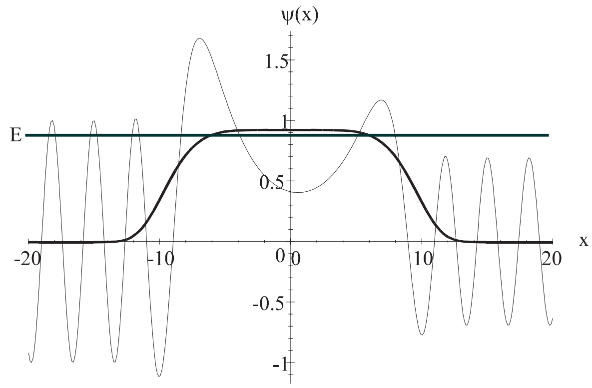
En la siguiente figura se muestra un ejemplo de la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un caso en el que la energía es mayor que el potencial. Se puede apreciar el fenómeno que acabamos de ver, de modo que en la zona en la que el potencial aumenta la función $\psi(x)$ disminuye su curvatura al aumentar la longitud de onda. También podemos apreciar que en dicha zona la función de onda aumenta de amplitud. Esto se debe a que la velocidad de una partícula al atravesar el potencial disminuye y por tanto será más probable encontrar a la partícula en dicha zona. Por último podemos ver que cada vez que la función $\psi(x)$ pasa por cero pasa de ser cóncava a convexa o viceversa ya que cambia el signo de su derivada segunda de acuerdo con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

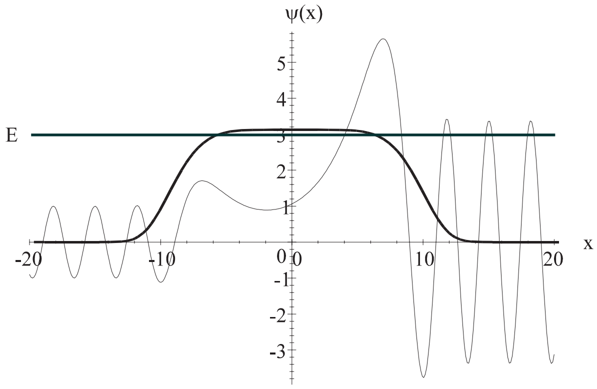


Por el contrario si en una región disminuye el potencial, en dicha región disminuirá la longitud de onda aumentando la curvatura de la función $\psi(x)$. Por otro lado, también disminuirá la amplitud de la función $\psi(x)$ ya que la partícula tiene en dicha región mayor velocidad y por tanto será menor la probabilidad de encontrar a la partícula en dicha zona. Este fenómeno es el que se puede apreciar en la siguiente figura.



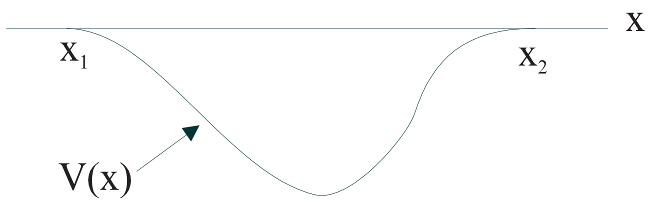
Por otro lado, si en alguna región la energía es menor que el potencial, en dicha región $\lambda(x)$ será imaginario puro y por tanto $\lambda^2(x)$ será negativo. En dicha región la función $\psi(x)$ se comportará como una combinación lineal de exponenciales crecientes y decrecientes y no habrá oscilaciones. En la siguiente figura se muestra la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para dos casos en los que la energía es menor que el potencial en la región central. Podemos ver que en este caso la función $\psi(x)$ cambia su carácter de concava o convexa por otro motivo distinto además del que se ha analizado anteriormente, y es que cuando la energía corta a la curva $V(x)$ cambia de signo la derivada segunda de la función $\psi(x)$.





En los casos que hemos analizado brevemente en los que $V(x) \to 0$ en $x \to \pm\infty$ y $E > 0$ las soluciones $\psi(x)$ son oscilatorias en dichos límites, de modo que no son funciones normalizables. En cualquier caso siempre podemos obtener una función de onda normalizada superponiendo las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger.

Vamos a analizar, por último, la aparición de estados ligados y por qué la energía toma valores discretos en ese caso. Supongamos que tenemos un pozo de potencial de una forma arbitraria pero con la condición de que en $x < x_1$ y en $x > x_2$ el potencial se anule, como en la figura. Vamos a analizar la aparición de estados ligados, en los que $E < 0$..

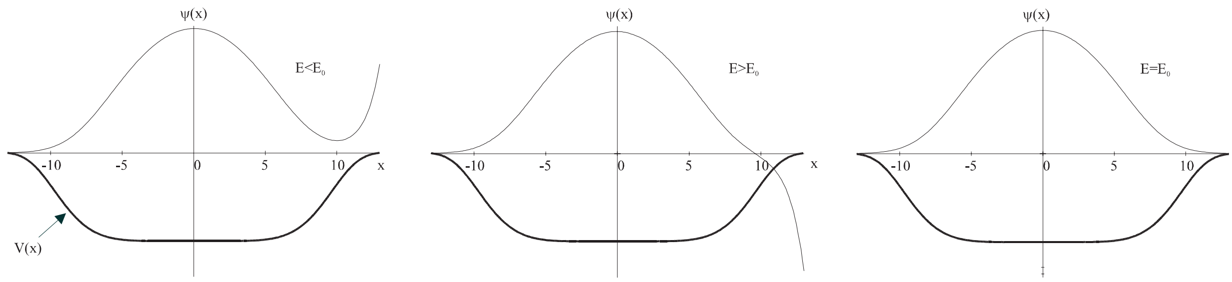


Los estados ligados son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo normalizables, de modo que deben verificar la condición $\psi(x) \to 0$ para $x \to \pm\infty$. Para valores negativos de la energía y en $x < x_1$ sabemos que las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que conducen a estados normalizables son de la forma

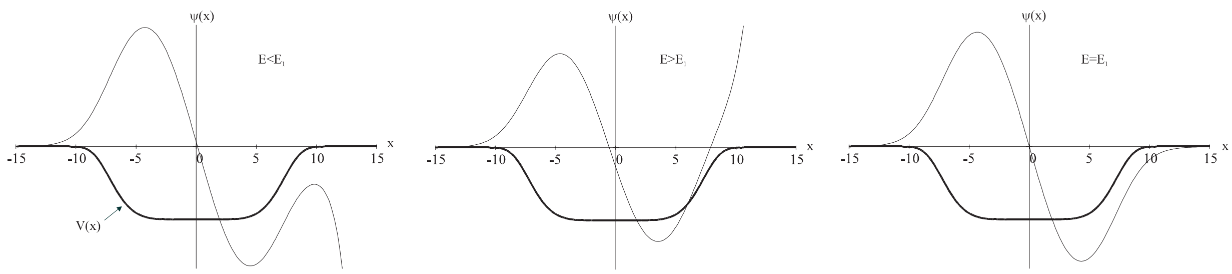
$$\psi(x) = Ae^{\rho x} \qquad \text{donde} \qquad \rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Como la ecuación de Shcrödinger independiente del tiempo es lineal en ψ, si encontramos una solución de la ecuación y la multiplicamos por una constante arbitraria obtendremos otra solución. Dicha constante arbitraria es la que se utiliza para normalizar la función de onda. Podemos aprovechar esta propiedad de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para escoger el valor $A = 1$ para la solución en $x < x_1$. Por tanto las distintas soluciones de la ecuación de Schrödinger se diferencian únicamente en el valor de ρ. Como puede comprobarse ρ depende de la energía. Lo que vamos a hacer es analizar la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tomando las condiciones iniciales de la función $e^{\rho x}$ para un punto muy a la izquierda, en el cual el potencial sea nulo (ya que sabemos que en dicho punto la solución de la ecuación de Schrödinger tiene que ser de la forma anterior).

La energía de la partícula tiene que ser superior al mínimo valor del potencial. Si escojemos para la energía un valor un poco por encima de dicho valor mínimo y resolvemos numéricamente la ecuación de Schrödinger, nos encontraremos con que la función $\psi(x)$ diverge tendiendo a ∞ en $x \to \infty$. Si vamos aumentando paso a paso la energía llegará un momento en que la función $\psi(x)$ diverge tendiendo a $-\infty$ en $x \to \infty$ (el aumentar la energía implica que esta tome cada vez valores menos negativos y por tanto estamos aumentando la constante ρ). En ese momento el valor de la energía habrá superado la energía del estado fundamental. Este fenómeno se muestra en la siguiente figura. Para la energía del estado fundamental la función $\psi(x)$ tenderá a cero en $x \to \infty$ de modo que será una función normalizable. En los puntos de retorno clásicos (en los que la energía se iguala al potencial) cambia el carácter de concavidad o convexidad de la función de onda.



Sin embargo el estado fundamental no tiene por qué ser la única energía permitida ya que sabemos que pueden existir estados excitados, es decir, otros valores de la energía para los que la función de onda es normalizable. Una vez que hemos superado la energía del estado fundamental la función de onda presenta un cero, como puede apreciarse en la figura anterior. Si seguimos aumentando la energía el cero de la función de onda se irá desplazando hacia la izquierda. Al igual que en la figura anterior la función de onda diverge tendiendo a $-\infty$ en $x \to \infty$. Llegará un momento en que la función de onda pasará a diverger tendiendo hacia ∞ en $x \to \infty$. En este momento habremos superado la energía del primer estado excitado. Este fenómeno es el que se muestra en la siguiente figura.



Por tanto la función de onda del primer estado excitado presenta un cero. Podemos ver que en este primer estado excitado la función de onda cambia su carácter de cóncava o convexa por los dos motivos analizados anteriormente, es decir, cuando atraviesa un punto de retorno clásico, o bien cuando pasa por cero. Al ser mayor la energía en este primer estado excitado que en el estado fundamental la cuervatura de la función de onda es mayor.

Si continuamos aumentando la energía nos encontraremos con el segundo estado excitado que presentará dos ceros, y así sucesivamente. La aparición de ceros en las funciones de ondas es un fenómeno que se puede ver en el pozo finito de potencial o en el pozo infinito.

Del análisis que acabamos de hacer de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo podemos concluir que en un estado ligado solamente obtenemos funciones de onda normalizables para determinados valores de la energía. Dichos valores constituyen por tanto un conjunto discreto, de modo que la energía de un estado ligado no puede tomar cualquier valor.