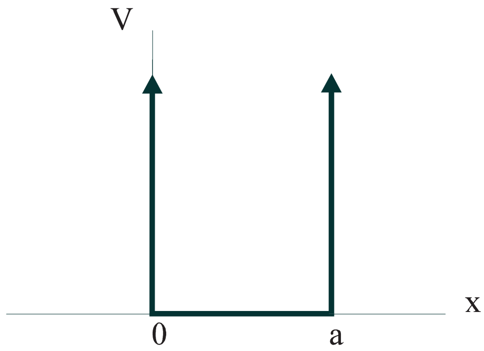
Pozo infinito de potencial. Estados ligados.

En este apartado vamos a estudiar un caso particular de potencial en el cual una partícula "clásica" realizaría un movimiento limitado. Según veremos, en este caso el movimiento de la partícula será similar al que predice la mecánica clásica. Sin embargo, en la descripción cuántica, la partícula no puede tener una energía arbitraria sino que sólo puede tomar una serie de valores discretos. El potencial que vamos a estudar se denomina pozo infinito de potencial y viene dado por la siguiente función:

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

Un esquema de este potencial se puede ver en la siguiente figura.



Pozo infinito de potencial.

Según la descripción clásica una partícula de energía E se moverá de un lado para otro dentro del pozo con una velocidad $v = \sqrt{2E/m}$. Lógicamente la energía puede tomar cualquier valor positivo. La descripción cuántica es muy distinta. Podemos ver que la energía de la partícula no puede ser tan pequeña como queramos ya que se contradice el principio de indeterminación. La indeterminación en la posición de la partícula la podemos estimar como máximo en $\Delta x \sim a$. Si la energía fuera nula, también lo sería la cantidad de movimiento, de modo que no tendríamos indeterminación en la cantidad de movimiento. En este caso la indeterminación en la posición debería ser infinita, pero según hemos visto, ésta nunca será mayor que a. Podemos concluir que la energía de la partícula dentro del pozo debe superar un cierto valor mínimo que esté de acuerdo con el principio de indeterminación. Si la indeterminación en la posición es del orden de la anchura del pozo, la indeterminación en la cantidad de movimiento será $\Delta p \sim h/a$. Esto nos indica que la partícula no puede estar quieta y tendrá por tanto una cierta energía cinética. Podemos estimar la energía mínima de la partícula dentro del pozo como $E_{\min} \sim \Delta p^2/2m \sim h^2/2ma^2$. Como veremos, el valor correcto de la energía mínima es del mismo orden que el que hemos encontrado; además la dependencia con los parámetros m y a es correcta. Vamos a obtener a continuación las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

De acuerdo con lo que vimos en un apartado anterior, cuando el potencial se hace infinito en una región la función de onda debe ser nula en dicha región. Por tanto, la función de onda será nula para $x < 0$ y $x > a$, y únicamente será distinta de cero dentro del pozo. La parte espacial de las soluciones estacionarias debe satisfacer la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que dentro del pozo se reduce a:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Las soluciones de esta ecuación son sencillamente:

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$

Vamos a imponer las condiciones de contorno, que en este caso también son secillas. La función de onda se debe anular en los puntos $x = 0$ y $x = a$. Si imponemos la condición de que se anule en en punto $x = 0$ se tiene que verificar que $A + A' = 0$ y $A' = -A$. De modo que la función $\varphi(x)$ será de la forma:

$$\varphi(x) = 2iA\sin(kx)$$

Por otro lado, si queremos que la función $\varphi(x)$ se haga cero en $x = a$ tenemos dos posibilidades: o bien $A = 0$ y por tanto la función de onda sería nula en todos lados, o bien $\sin(ka) = 0$. Lógicamente, la segunda propuesta es la única que tiene sentido y por tanto se debe verificar que $ka = n\pi$, donde n es un número entero. Esta relación impone una condición sobre el valor de la energía, de modo que la energía sólo puede tomar los siguientes valores:

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \qquad \text{donde } n = 1, 2, \ldots$$

Por tanto, en este caso el espectro de energías es discreto. El mínimo valor de la energía es $E_{\min} = h^2/8ma^2$, que como podemos ver está de acuerdo con la estimación que hicimos al principio. Las autofunciones del Hamiltoniano normalizadas (salvo un factor de fase que se puede escoger arbitrariamente) son de la forma:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi\frac{x}{a})$$

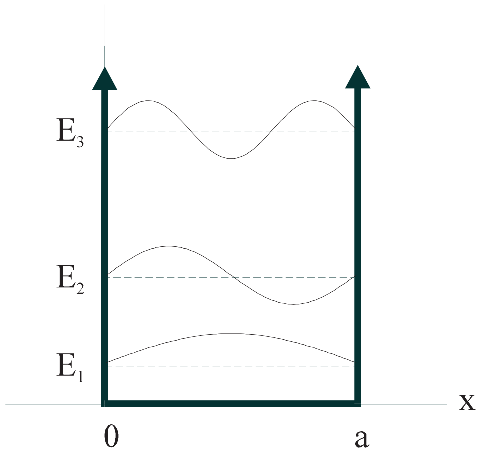
Se puede comprobar fácilmente que se verifica la condición: $\displaystyle\int \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx = \delta_{n,m}$. Cualquier función físicamente aceptable (que en este caso consiste en que se anule fuera del pozo) se puede desarrollar en serie de las funciones que hemos encontrado, es decir, que una función $f(x)$ que se anule en las regiones $x < 0$ y $x > a$ se puede desarrollar de la siguiente forma:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n\varphi_n(x)$$

Los coeficientes del desarrollo son, como vimos en el tema anterior:

$$f_n = \int \varphi^*(x)f(x)dx$$

La función $\varphi_1(x)$ se denomina el estado fundamental; la siguiente función, $\varphi_2(x)$, el primer estado excitado, y así sucesivamente. En la siguiente figura podemos ver una representación de la dependencia espacial de las primeras soluciones estacionarias.



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

Como podemos ver el estado fundamental no tiene ningún cero. Veremos en otros casos que esto no es exclusivo del potencial que estamos analizando. Del mismo modo, el primer estado excitado tiene un cero, el segundo dos ceros y así sucesivamente. Para una energía E, la longitud de onda asociada a la partícula es $\lambda = h/\sqrt{2mE}$. Podemos ver que las sucesivas funciones de onda contienen un número semientero de veces el valor de esta longitud de onda. Las funciones que hemos encontrado se asemejan mucho a las ondas estacionarias en un cuerda tensa. De hecho, en la primitiva teoría cuántica se consideraba que los valores discretos de la energía provenían de que las ondas de materia, para una partícula en un estado ligado, tenían que ser ondas estacionarias.

Vamos a analizar a continuación cómo el haber encontrado las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo nos permite analizar la evolución temporal de un estado no estacionario. Como vimos en el tema anterior, el encontrar las autofunciones del hamiltoniano nos permite calcular la evolución temporal de la función de onda si conocemos dicha función en el instante inicial. Vamos a analizar un ejemplo de evolución temporal.

Supongamos que en el instante inicial la función de onda dentro del pozo vale:

$$\psi(x,0) = f(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]$$

Esta función se puede escribir como una combinación lineal de las autofunciones del hamiltoniano, $\varphi_n(x)$, de la forma:

$$\psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \varphi_n(x)$$

Está claro que los coeficientes son $f_1 = 1/\sqrt{2}$, $f_2 = 1/\sqrt{2}$ y el resto de los coeficientes f_n son nulos. Por tanto, la función de onda en el instante inicial se puede escribir de la forma:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_2(x)$$

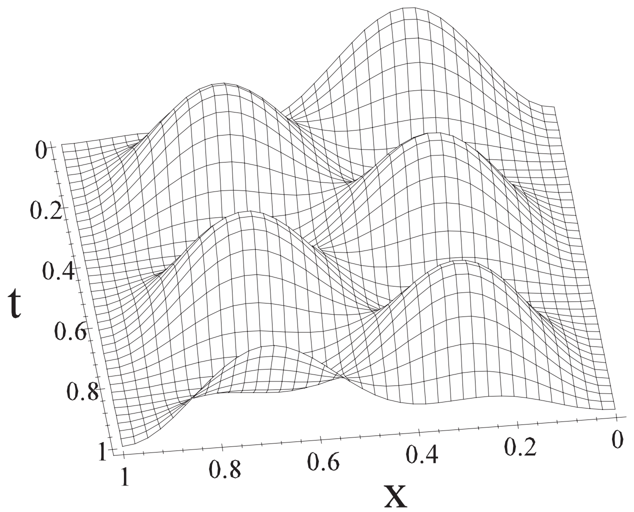
Pues bien, como las soluciones estacionarias evolucionan en el tiempo mediante un término armónico de frecuencia bien definida (relacionada con la energía de acuerdo con las relaciones de de Broglie-Einstein), la función de onda en el instante t será:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} \varphi_1(x) + e^{-iE_2 t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \right]$$

Podemos calcular la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula, que será:

$$\psi^*(x,t)\psi(x,t) = \frac{1}{a} \left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + 2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right) \right]$$

En la siguiente figura se muestra la evolución temporal de la densidad de probabilidad. Según se puede apreciar el máximo de la función de onda oscila entre las dos paredes del pozo, tal como ocurre en la descripción clásica.



Como hemos visto, la superposición de estados estacionarios ya no es un estado estacionario, de modo que la densidad de probabilidad evoluciona en el tiempo.