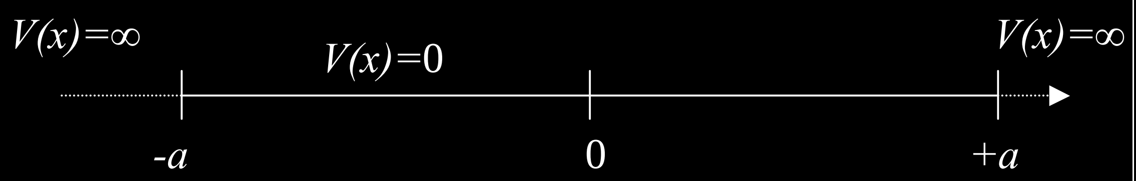
SOLUCIONES EN UN CASO TÍPICO UNIDIMENSIONAL: EL POZO CUADRADO INFINITO

Sea una partícula de masa *m* constreñida a una sola dimensión en el espacio y dentro de un segmento finito en esa dimensión. Aplicamos también el constreñimiento de que el potencial es constante y nulo dentro de ese segmento y que fuera de sus límites el potencial es infinito:



$$V(x) = \begin{cases} 0 \Rightarrow |x| < a \\ \infty \Rightarrow a < x < -a \end{cases}$$

Como el potencial es infinito fuera de los límites, la partícula no podrá existir en esa zona y $\psi(x) = 0$ cuando $|x| > a$ y como la función de onda debe ser continua, también debe ocurrir que en los extremos:

$$\psi(\pm a) = 0$$

Probaremos que esta es una **condición de contorno** y que ella es la responsable de la aparición de valores propios discontinuos o **cuantizados**.

Tal y como se explicó anteriormente, el hamiltoniano, y sobre todo su componente de energía potencial siempre se adaptan al sistema que se calcula. En este caso el potencial es nulo en el espacio considerado, por lo que a la ecuación de Schrödinger solo le queda la componente cinética y en una sola dimensión:

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

La función de onda que soluciona esta ecuación diferencial y que por lo tanto caracterizará al sistema en términos de la mecánica cuántica es:

$$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$$

donde k es una constante de periodicidad para las funciones trigonométricas. Sólo nos queda averiguar los valores de los parámetros A y B.

En las fronteras del segmento o "caja" unidimensional se cumplen las condiciones de contorno anteriores, y por lo tanto, en esos puntos:

$$A\sin ka=0 \qquad\qquad B\cos ka=0$$

Es preciso analizar estas relaciones para lograr una comprensión adecuada del comportamiento de la función de onda.

Caso 1 de satisfacción de las condiciones de contorno:

$$\left.\begin{cases} A = 0 \\ \cos ka = 0 \end{cases}\right\} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{2a}$$

Debe observarse que la característica de que la función trigonométrica *coseno* toma valores nulos solo para ciertos valores de los ángulos, *crea una periodicidad que conduce a valores discontinuos dados por n* = 1,3,5,...

En este caso la función propia quedaría:

$$\psi_n(x) = B\cos k_n x$$

que como debe de estar normalizada cumpliendo que:

$$\int_{-a}^{a} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1$$

$$B\int_{-a}^{a} \cos^2 \frac{n\pi}{2a} x dx = 1$$

$$B = a^{-1/2}$$

De esta forma se llega a la expresión de la función de onda que solo puede evaluarse con valores enteros impares de n = 1,3,5,...:

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{n\pi}{2a} x}$$

Caso 2 de satisfacción de las condiciones de contorno:

$$\left.\begin{cases} B = 0 \\ \sin ka = 0 \end{cases}\right\} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{2a}$$

donde, contrariamente al caso 1 con el *coseno*, los valores de *n* que hacen nulo al *seno* son pares, *n* = 2,4,6,...

La función de onda normalizada correspondiente, después de un proceso similar al del caso 1, es ahora para *n* = 2,4,6,...:

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi}{2a} x}$$

Sustituyendo ambas en la ecuación de Schrödinger planteada al principio:

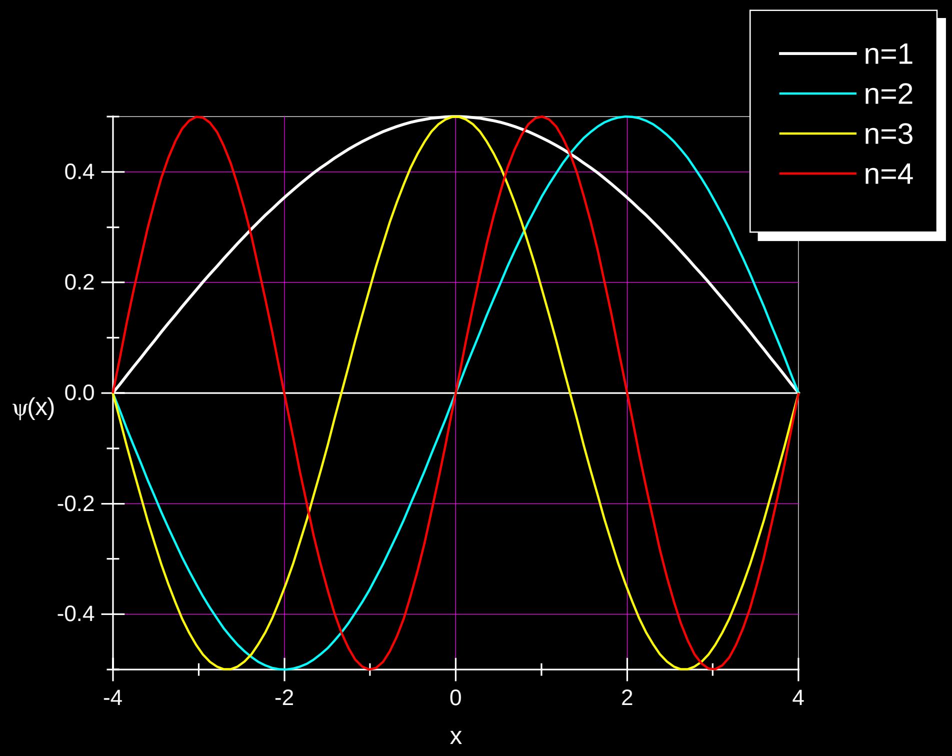
$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2 \cos \frac{n\pi}{2a}x}{dx^2} = E\cos\frac{n\pi}{2a}x$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2 \sin \frac{n\pi}{2a}x}{dx^2} = E\sin\frac{n\pi}{2a}x$$

se puede llegar a que la energía también depende de *n* y tiene la expresión:

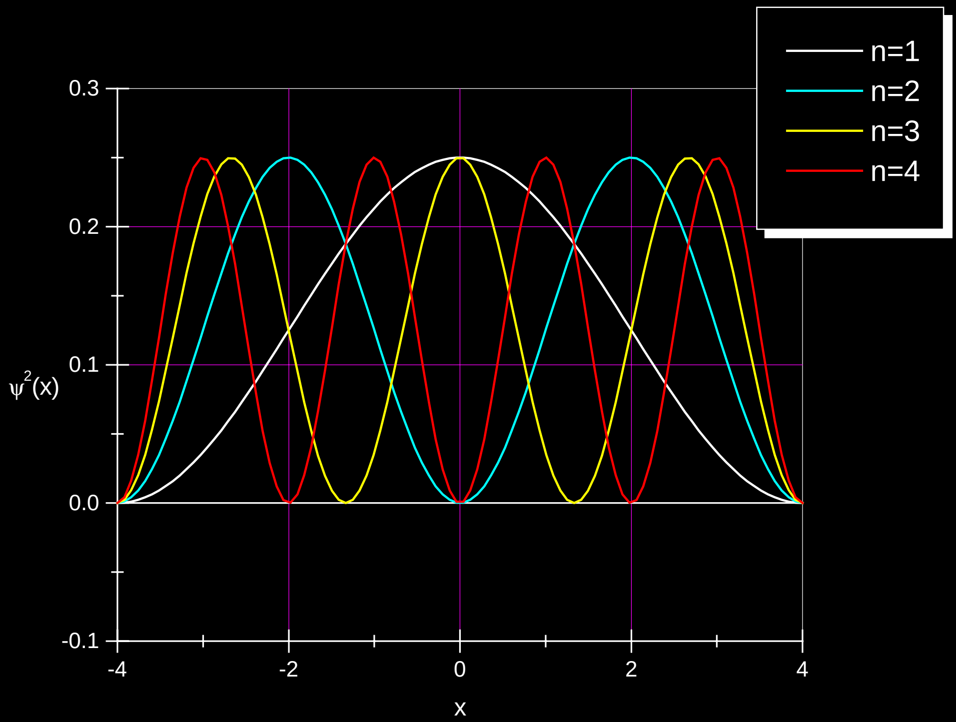
$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2}$$ para todos los valores enteros de *n* = 1,2,3,...

CASOS DE LA FUNCIÓN DE ONDA DEL POZO CUADRADO PERFECTO CON *a* = 4



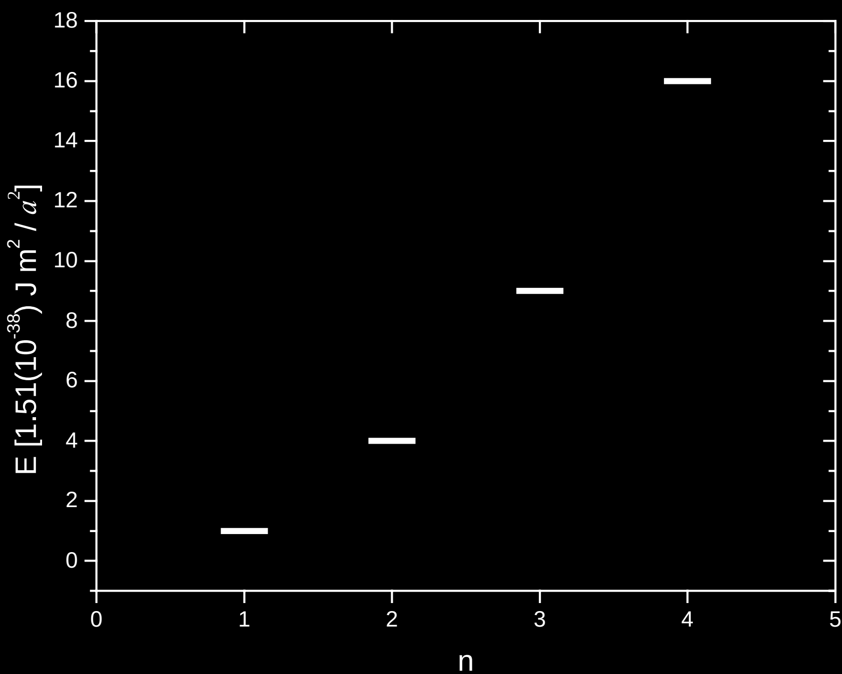
Debe notarse que el número de nodos (puntos en los que la función se hace nula) aumenta con el valor de *n*.

CASOS DEL CUADRADO DE LA FUNCIÓN DE ONDA (PROBABILIDAD) EN EL POZO CUADRADO PERFECTO CON *a* = 4



Debe notarse que el cuadrado de la función de onda siempre es positivo.

En cuanto a las energías, el gráfico ilustra la relación de los niveles y la discontinuidad de los mismos:



Observar que:

– la menor energía *no es cero* y tiene un valor de

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} = \frac{1.51(10^{-38})}{a^2}\, Jm^2$$

– la diferencia energética entre cada estado aumenta con el valor de *n*.