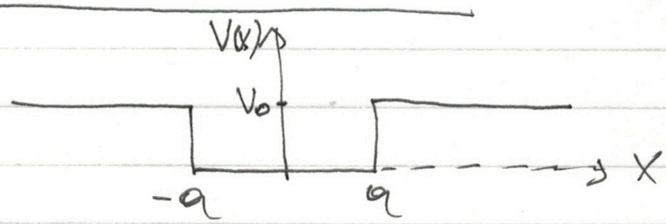
El pozo cuadrado unidimensional

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



Consideremos el caso $E < V_0$: $u'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)u$ (4)

$|x| > a$: $u'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)u \equiv \alpha^2 u \Rightarrow u \propto e^{\pm \alpha x}$

$|x| < a$: $u'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} u \equiv -k^2 u \Rightarrow u \propto \{\cos kx, \sin kx\}$

usando que $\psi \to 0$ cuando $|x| \to \infty$

$$\Rightarrow \left.\begin{array}{ll} u(x) = A e^{\alpha x} & x < -a \\ u(x) = B e^{-\alpha x} & x > a \\ u(x) = C\cos(kx) + D\sin(kx) & |x| < a \end{array}\right\} \quad (5)$$

Cont. de u en $x = \pm a$:

$$x=-a: \quad A e^{-\alpha a} = C\cos(ka) - D\sin(ka) \qquad (6)$$
$$x=+a: \quad B e^{-\alpha a} = C\cos(ka) + D\sin(ka) \qquad (7)$$

sumando: $(A+B)\, e^{-\alpha a} = 2C\cos(ka)$ (6')

restando: $(B-A)\, e^{-\alpha a} = 2D\sin(ka)$ (7')

Continuidad de u' en $x = \pm a$:

$$x=-a: \quad \alpha A e^{-\alpha a} = Ck\sin(ka) + Dk\cos(ka) \qquad (8)$$
$$x=+a: \quad -\alpha B e^{-\alpha a} = -Ck\sin(ka) + Dk\cos(ka) \qquad (9)$$

sumando: $\alpha(A-B)\, e^{-\alpha a} = 2Dk\cos(ka)$ (8')

restando: $\alpha(A+B)\, e^{-\alpha a} = 2Ck\sin(ka)$ (9')

$\frac{(8')}{(7')}$: $-\alpha = k\cot(ka)$ [si $A \neq B$ y $D \neq 0$] (10)

$\frac{(9')}{(6')}$: $\alpha = k\tan(ka)$ [si $A \neq -B$ y $C \neq 0$] (11)

(10) y (11) no pueden ser válidos el mismo tiempo.

Caso I: Ec. (10) no vale porque $A=B$ y $D=0$

$\Rightarrow \boxed{\alpha = k\tan(ka)}$

$u(x)$ es par

$$u(x) = \begin{cases} A e^{\alpha x} & x < -a \\ C\cos(kx) & -a < x < a \\ A e^{-\alpha x} & x > a \end{cases}$$

Caso II: (II) no es valido porque $A=-B$ y $C=0$

$$\Rightarrow \boxed{-\alpha = k\cot(ka)}$$

$$u(x) = \begin{cases} A e^{\alpha x} & x < -a \\ D\sin(kx) & -a < x < a \\ -A e^{-\alpha x} & x > a \end{cases}$$

$u(x)$ es impar

Recordemos que:

$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ y $\alpha = \sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$

$$\Rightarrow \boxed{k^2 + \alpha^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv \beta^2}$$

$ka \in [0, \frac{\pi}{2}] \cup [\pi, \frac{3\pi}{2}] \cup [2\pi, \frac{5\pi}{2}] \cup \ldots$

con $\tan(ka) > 0$

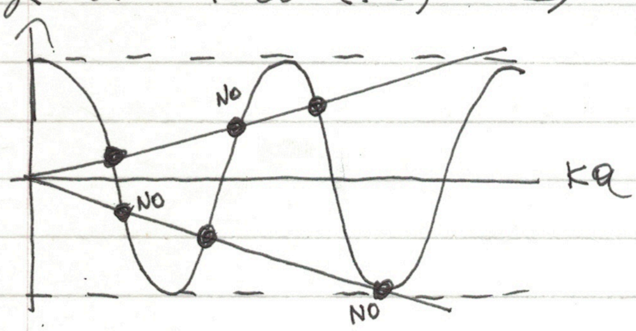
let $\alpha = k\tan(ka)$

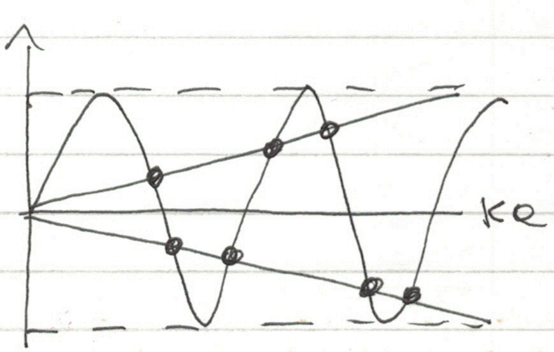
$\Rightarrow k^2 + k^2\tan^2(ka) = \beta^2$

$\Rightarrow k^2\sec^2(ka) = \beta^2 \Rightarrow \boxed{\cos(ka) = \pm\frac{ka}{\beta a}}$ soluc. PAR

si $\alpha = -k\cot(ka) \Rightarrow \boxed{\sin(ka) = \pm\frac{ka}{\beta a}}$ soluc. impar

con $\cot(ka) < 0$





$ka \in [\frac{\pi}{2}, \pi] \cup [\frac{3\pi}{2}, 2\pi] \cup [\frac{5\pi}{2}, 3\pi] \cup \ldots$

Ejemplo: $V_0 = 10\,(eV)$; $a = 10^{-7}\,(cm)$. Calc. todas las autoenergías ¿cuántas hay?

$$\beta a = \left[\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right]^{1/2} = 16.2$$

$m = 9.1\times10^{-28}\,(gr)$

$V_0 = 10\times1.602\times10^{-12}\,(erg)$

$\hbar = 1.054\times10^{-27}\,(erg\cdot s)$

Conocido ka, $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}(ka)^2 = E_0\,(ka)^2$

donde $E_0 = \hbar^2/2ma^2 = 0.038102\,[eV]$

$\cos(ka) = \pm\frac{ka}{16.2} \Rightarrow \cos(x) = \pm\frac{x}{16.2}$

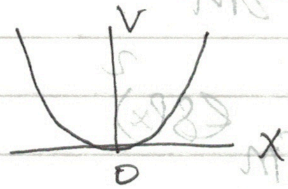
$\cos(x) = \pm\frac{x}{16.2}$	$\sin(x) = \pm\frac{x}{16.2}$
x	x
1.47935 ✓	2.95797 ✓
1.67434 ✗	3.34988 ✗
4.43508 ✓	5.90977 ✓
5.02797 ✗	6.71026 ✗
7.38092 ✓	8.84706 ✓
8.39903 ✗	10.09778 ✗
10.306 ✓	11.7545 ✓
13.1862 ✓	13.558 ✗
15.3905 ✗	14.5872 ✓
15.9008 ✓	

POZO ∞

Energías	$\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}n^2$
0.0834 (eV)	0.094
0.333 (eV)	0.376
0.7495 (eV)	0.846
1.3307 (eV)	1.504
2.0757 (eV)	2.350
2.9823 (eV)	3.384
4.047 (eV)	4.607
5.2649 (eV)	6.02
6.6250 (eV)	7.615
8.1076 (eV)	9.401
9.6332 (eV)	11.376

El oscilador armónico

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2$$

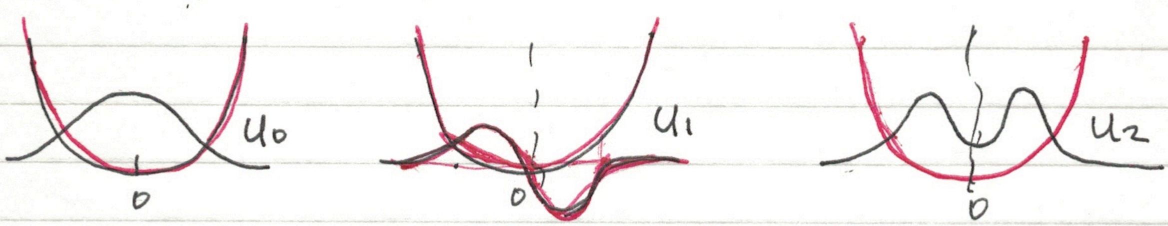


$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2\right) u = E u \qquad (1)$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{mk}{\hbar^2} x^2\right) u = -\frac{2mE}{\hbar^2} u \qquad (2)$$

o $$\left(\frac{d^2}{dx^2} - a^2 x^2\right) u = -b u \qquad (3)$$

Situación es parecida a un pozo cuadrado profundo. Además $V(x)$ es par $\Rightarrow$ autofns. poseen paridad definida.



$$E = \frac{\langle P_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle$$

Si $E = 0 \Rightarrow \langle x^2 \rangle = 0$ y $\langle P_x^2 \rangle = 0$

$$\Rightarrow \delta x = 0 \ \wedge \ \delta P_x = 0 \ \rightarrow\leftarrow$$

$\left(\delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \underbrace{\langle x \rangle^2}_{0}} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \ \wedge \ \delta P_x = \sqrt{\langle P_x^2 \rangle - \underbrace{\langle P_x \rangle^2}_{0}} = \sqrt{\langle P_x^2 \rangle}\right)$

$$E = \frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle + \frac{\langle P_x^2\rangle}{2m}$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2 + \frac{1}{2m}(\delta P_x)^2$$

cuando $\delta x \, \delta P_x \geq \hbar/2$

$$\Rightarrow \quad E \geq \frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{8m(\delta x)^2}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{E_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - a^2x^2\right)u = -bu \qquad (1)$$

reescribir como:

$$\left[\left(\frac{d}{dx} - ax\right)\left(\frac{d}{dx} + ax\right) - a\right]u = -bu \qquad (2)$$

Dem.: $\left(\frac{d}{dx} - ax\right)(u' + axu) - au$

$u'' + \cancel{au} + \cancel{axu'} - \cancel{axu'} - a^2x^2u - \cancel{au}$

$u'' - a^2x^2u$ ✓ //

o sea, $$\left(\frac{d}{dx} - ax\right)\left(\frac{d}{dx} + ax\right)u = (-b+a)u \qquad (3)$$

Aplicar $\left(\frac{d}{dx} + ax\right)$ a ambos lados de (3):

$$\left(\frac{d}{dx} + ax\right)\left(\frac{d}{dx} - ax\right)\underbrace{\left(\frac{d}{dx} + ax\right)u}_{u'} = -(b-a)\underbrace{\left(\frac{d}{dx} + ax\right)u}_{u'} \qquad (4)$$

$$\left(\frac{d}{dx} + ax\right)\left(\frac{d}{dx} - ax\right)u' = -(b-a)u' \qquad (4')$$

desarrollando ↗

$$\left(\frac{d}{dx} + ax\right)\left(\frac{du'}{dx} - axu'\right) = \frac{d^2u'}{dx^2} - au' - \cancel{ax\frac{du'}{dx}} + \cancel{ax\frac{du'}{dx}} - a^2x^2u'$$

$$= \frac{d^2u'}{dx^2} - a^2x^2u' - au'$$

$$\therefore \quad \frac{d^2u'}{dx^2} - a^2x^2u' = -(b-2a)u' \qquad (5)$$

<u>mismo</u> ec. que (1) con distinto b, y u'.

Luego si def: $b - 2a \equiv (2m/\hbar^2)E' \rightarrow E'$ es la energía de un Osc. Arm. cuya fn. de onda es u'.

$$\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2m}{\hbar^2}E'$$

$$\Rightarrow \boxed{E' = E - \hbar\omega} \qquad (6)$$

"operador de bajada"

$\therefore$ si u(x) es autofn. del op. de energía del osc. Arm.
$u'(x) \equiv (d/dx + ax)u(x)$ es también autofn. del <u>mismo</u> operador, con autovalor <u>menor</u> q' el autov. de u(x) en una cantidad $\hbar\omega$. $\Rightarrow$ se puede generar toda una serie de autovs. equiespaciados en $\hbar\omega$.

Como todas las energías permitidas son <u>positivas</u> $\rightarrow$ debe $\exists$ una energía mínima >0, E_0 con autofn. u_0

y $\left(\frac{d}{dx} + ax\right)u_0 = 0$

$$\Rightarrow \frac{du_0}{dx} = -axu_0 \Rightarrow \frac{du_0}{u_0} = -ax\,dx$$

$$d\ln u_0 = d\left(-\frac{ax^2}{2}\right) \Rightarrow \boxed{u_0 = A\,e^{-\frac{ax^2}{2}}} \qquad (7)$$

donde A se det. por normalización.

Reemplazando (7) en (1), hallamos E_0.

$$\frac{du_0}{dx} = -ax\,A e^{-\frac{ax^2}{2}}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2u_0}{dx^2} = -aAe^{-\frac{ax^2}{2}} + a^2x^2Ae^{-\frac{ax^2}{2}}$$

$$\Rightarrow -aAe^{-\frac{ax^2}{2}} + \cancel{a^2x^2Ae^{-\frac{ax^2}{2}}} - \cancel{a^2x^2Ae^{-\frac{ax^2}{2}}} = -bAe^{-\frac{ax^2}{2}}$$

$$\Rightarrow a = b \Rightarrow \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{2mE_0}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega} \qquad (8)$$

Teniendo la energía más baja E_0, y su autofn. u_0, hallamos las otras autofn. usando un proc. similar que nos permite generar las autofn. de energías superiores.

Aplicamos el operador $\left(\frac{d}{dx} - ax\right)$ a ambos lados de (4').

$$\left(\frac{d}{dx}-ax\right)\left(\frac{d}{dx}+ax\right)\underbrace{\left(\frac{d}{dx}+ax\right)u'}_{u''} = (-b+a)\underbrace{\left(\frac{d}{dx}-ax\right)u'}_{u''}$$

o sea, $\left(\frac{d}{dx}-ax\right)\left(\frac{d}{dx}+ax\right)u'' = (-b+a)u''$

$$\frac{d^2}{dx^2}u'' + a u'' \quad \cancel{+ax\frac{du''}{dx}} - \cancel{ax\frac{du''}{dx}} - a^2x^2u'' = (-b+a)u''$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2u''}{dx^2} - a^2x^2u'' = -bu'' \qquad (9)$$

$\therefore$ u'' es autofn. de la <u>ec. original</u> con autov. $-b$ y por tanto su energía es $\hbar\omega$ mayor que la de u'.

$\Rightarrow$ dada una autofn. y su autovalor, podemos generar la autofn. con el sig. autovalor <u>superior</u> aplicando el operador $(d/dx - ax)$ "operador de subida"

Los autoenergías del oscilador armónico son

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

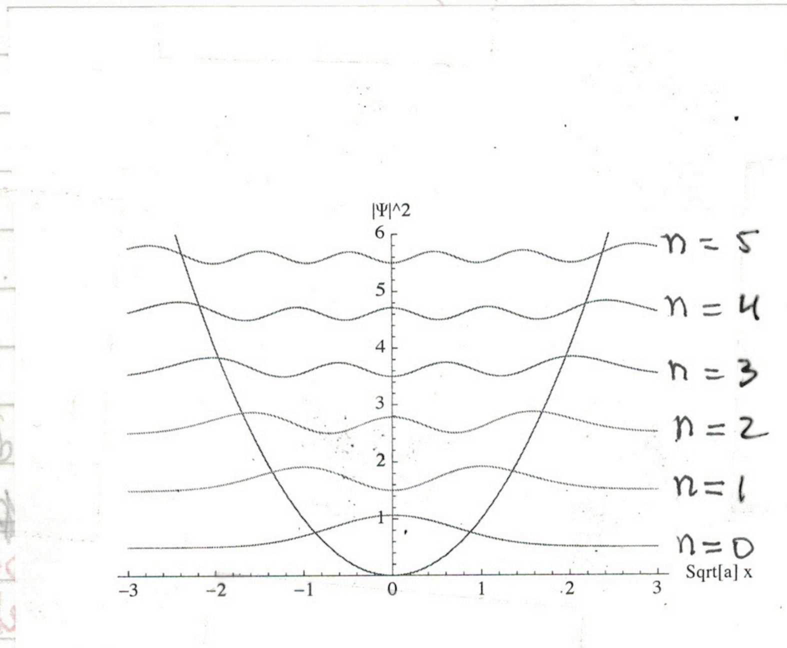
$$\psi_n(t) = \left(\frac{d}{dx} - ax\right)^n e^{-\frac{ax^2}{2}} e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} \qquad \text{(sin normalizar)}$$

$$\psi_0 = (a/\pi)^{1/4} e^{-\frac{ax^2}{2}} e^{-i\omega t/2}$$

$$\psi_1 = (4a^3/\pi)^{1/4} x e^{-\frac{ax^2}{2}} e^{-3i\omega t/2}$$

$$\psi_2 = (a/4\pi)^{1/4}(2ax^2-1) e^{-\frac{ax^2}{2}} e^{-5i\omega t/2}$$

normalizadas



|Ψ|^2
6
5
4
3
2
1
-3
-2
-1
0
1
2
3
Sqrt[a] x
n = 5
n = 4
n = 3
n = 2
n = 1
n = 0