Revista Mexicana de Física 32 No. 1 (1985) 119-137

SOLUCION CUANTICA EXACTA PARA ALGUNOS POTENCIALES SIMETRICOS CON DOS POZOS*

E. Ley-Koo*

Instituto de Física, U.N.A.M. Apartado Postal 20-364, Ol000 México, D.F.

V.C. Aguilera-Navarro Instituto de Física Teórica Rua Pamplona 145, Sao Paulo, Brasil

(recibido enero 3, 1985; aceptado junio 25, 1985)

RESUMEN

Se construyen las soluciones de la ecuación de Schrödinger para los potenciales de pozo rectangular, oscilador armónico y lineal simétri co con un potencial de función- δ superpuesto en sus puntos centrales. Los estados de paridad non no son afectados por la presencia del potencial de función- δ . Los estados de paridad par están determinados por la condición de que sus funciones de onda tienen en el punto central una derivada logarítmica fija y proporcional a la intensidad del potencial de funcion- δ .

 Trabajo realizado dentro de la colaboración patrocinada por CONACYT y CNPq. Asesor del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares.

ABSTRACT

We construct the solutions of the Schrödinger equation for the rectangular-well, harmonic-oscillator and symmetric-linear potentials with a δ -function potential superimposed in their central positions. The odd-parity states are not affected by the presence of the δ -function potential. The even-parity states are determined by the condition that their wave functions have in the central position a fixed logarithmic derivative, which is proportional to the intensity the δ -function potential.

1. INTRODUCCION

Las aplicaciones físicas y el interés didáctico de los pozos de potencial dobles en mecánica cuántica han sido discutidos en libros de texto^(1,2) y artículos⁽³⁻⁷⁾. La referencia l contiene un estudio detalla do de la solución exacta para el oscilador doble, así como su aplicación en la descripción del espectro de inversión de la molécula de amoníaco. La referencia 2 considera un pozo de potencial simétrico doble y de forma arbitraria, pero el tratamiento es dentro de la aproximación WKB. La referencia 3 analiza un modelo unidimensional de un ion diatómico que involucra dos potenciales atómicos de función-8. Las referencias 4,·5 y 6 analizan dos pozos rectangulares separados por una barrera rectangular o de función-6, usando ampliamente gráficas de computadora. Desde el punto de vista físico es interesante analizar los cambios en los eigenvalores de la energía y en las eigenfunciones a medida que el potencial cambia en tre los dos extremos de un potencial con un solo pozo y un potencial con dos pozos independientes. En particular, para potenciales simétricos como son los de las referencias anteriores, es especialmente interesante re conocer la tendencia que presentan los pares consecutivos de niveles de energía de paridades par y non de hacerse degenerados a medida que los dos pozos se vuelven más y más independientes el uno del otro debido a la penetrabilidad decreciente de la barrera entre ellos. En el caso del osci lador doble, a medida que los dos pozos se separan uno del otro, la barre ra entre ellos crece tanto en espesor como en altura. En el caso de pozos rectangulares separados por una barrera rectangular, esta última puede ha cerse crecer en espesor o en altura. En estos dos casos el potencial correspondiente cambia su forma geométrica. El uso de un potencial de fun ción- δ mantiene la forma geométrica y sus efectos físicos se manifiestan directamente a través de su intensidad. Por otra parte, la referencia 7 presenta un modelo unidimensional de un átomo de hidrógeno en un pozo rectangular infinito usando también un potencial atómico de función- δ .

En el presente trabajo construimos las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger para tres potenciales simétricos con dos pozos que incluyen un potencial de función- δ , el cual puede servir como una barrera y como un pozo. Específicamente, estudiamos los potenciales de pozo rectangular, oscilador armónico y lineal simétrico con un potencial de función- δ superpuesto en sus puntos centrales:

$$V_{o}(x) = \frac{1}{2} m\omega^{2} x^{2} + U_{o}\delta(x) , \qquad (2)$$

$$V_1(x) = F|x| + U_0 \delta(x)$$
 (3)

Para valores positivos de la intensidad, $U_0>0$, el potencial de función- δ actúa como una barrera que separa el pozo original en dos pozos contiguos. Para valores negativos de la intensidad, $U_0<0$, el potencial de función- δ actúa como un pozo agregado al fondo del pozo original. Uno de nuestros objetivos es determinar las eigenfunciones y los espectros de energía de estos potenciales para diferentes valores de la intensidad U_0 del potencial de función- δ .

En la sección 2, primero demostramos que la presencia del poten cial de función- δ introduce una discontinuidad en la derivada de la fun ciones de onda en el origen, siendo la discontinuidad proporcional a la intensidad de dicho potencial y al valor de la función de onda en el ori gen. En el caso de potenciales simétricos, como los de las Ecs. (1), (2) y (3), las funciones de onda tienen una paridad bien definida. Los estados de paridad non tienen funciones de onda que se anulan en el origen x = 0, y en consecuencia no son afectados por la presencia del poten cial de función- δ . Los estados de paridad par tienen funciones de onda cuyas derivadas en x = 0 y $x = 0^+$ tienen la misma magnitud pero signos opuestos; consecuentemente, los eigenvalores de la energía de estos esta dos quedan determinados por la condición de que la derivada logarítmica de las funciones de onda en el origen x = 0 es fija, y su valor es proporcional a la intensidad del potencial de función- δ . Estos resultados se aplican a los potenciales de las Ecs. (1), (2) y (3) obteniéndose las ecuaciones trascendentales para sus respectivos espectros de energía.

La sección 3 contiene ejemplos numéricos y gráficos de la varia ción de los espectros de energía para cada potencial a medida que la intensidad del potencial de función- δ cambia. También discutimos la física detrás de estas variaciones, y la comparamos con la física detrás de algunos de los pozos de potencial dobles de las referencias 1-7.

2. SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER

Primero examinamos el efecto de la presencia de un potencial de función- δ en las soluciones de la ecuación de Schrödinger,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) + U_0\delta(x)\right] \quad \psi(x) = E\psi(x) \quad . \tag{4}$$

Suponemos que la parte V(x) del potencial es finita en x = 0, lo cual per mite integrar la ecuación en la vecindad inmediata de este punto, obtenien do

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{0}^+} - \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{0}^-} = \frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2} \ \mathrm{U}_{\mathbf{0}}\psi(\mathbf{0}) \qquad . \tag{5}$$

Por lo tanto, la presencia del potencial de función- δ en x = 0 introduce una discontinuidad en la derivada de la función de onda en ese punto, tal discontinuidad es proporcional a la intensidad de ese potencial y al valor de la función de onda en ese punto. que es la condición de que la derivada logarítmica de las funciones de on da de los estados de paridad par en el origen es fija y proporcional a la intensidad del potencial de función- δ .

A continuación aplicamos los resultados anteriores a los casos específicos de los potenciales de las Ecs. (1), (2) y (3) para determinar las eigenfunciones y los eigenvalores de la energía de las ecuaciones de Schrödinger correspondientes. Además de las condiciones de paridad, Ecs. (6) y (7), y la condición de la Ec. (8) para los estados de paridad par, las eigenfunciones deben satisfacer también la condición de integrabilidad cuadrática. De hecho, las condiciones de paridad nos permiten trabajar primero en el intervalo $[0,\infty)$ solamente, y hacer la extensión al intervalo restante (- ∞ ,0] mediante la reflexión apropiada al final. Una vez que se ha determinado la función de onda con el comportamiento asint<u>ó</u> tico correcto, la condición que la misma debe satisfacer en el origen determina los eigenvalores de la energía. En lo que sigue hacemos uso libre de las funciones correspondientes a cada potencial y de sus propiedades sin deducirlas, pero haciendo los comentarios necesarios y dando las referencias apropiadas.

A. Pozo rectangular

La ecuación de Schrödinger para el potencial de la Ec.(1) y para valores positivos de la energía, E = $\hbar^2 k^2/2m$, tiene soluciones de la forma

$$\psi(x \ge 0) = A \cos kx + B \sin kx = N \sin \left[k\left(\frac{L}{2} - x\right)\right] \quad . \tag{9}$$

La anulación de esta función de onda en la posición x = L/2 de la pared del potencial rectangular se garantiza escogiendo los coeficientes en la proporción A/B = -tan(kL/2).

Los estados de paridad non están determinados por la anulación de la función de onda en el origen como lo requiere la Ec. (6a), lo cual ocurre para

$$\frac{KL}{2} = n\pi$$
, n = 1, 2, 3,... (10)

ecuaciones de Schrödinger, Ec. (4), tienen una paridad bien definida. Los estados de paridad non están caracterizados por su cambio de signo bajo reflexión,

$$\psi_{non}(-x) = -\psi_{non}(x)$$
, (6a)

y los estados de paridad par no cambian de signo bajo reflexión,

$$\psi_{\text{par}}(-\mathbf{x}) = +\psi_{\text{par}}(\mathbf{x}) \quad . \tag{6b}$$

También se sigue que sus primeras derivadas satisfacen respectivamente

$$\frac{d\Psi_{\text{non}}}{dx}\Big|_{-x} = + \frac{d\Psi_{\text{non}}}{dx}\Big|_{x}$$
(7a)

у

$$\frac{d\psi_{\text{par}}}{dx}\Big|_{-x} = -\frac{d\psi_{\text{par}}}{dx}\Big|_{x}$$
(7b)

En particular, la Ec. (6a) implica que la función de onda de los estados de paridad non se anula en el origen x = 0. Cuando la Ec. (5) se aplica a los estados de paridad non, su contenido coincide con el de la Ec.(7a), a saber que la derivada de la función de onda en el origen x = 0 es continua. En consecuencia, la presencia del potencial de función- δ en el origen no afecta a los estados de paridad non.

En contraste, la Ec. (6b) no impone condición alguna sobre la función de onda de los estados de paridad par en el origen x = 0. Enton ces la combinación de las Ecs. (7b) y (5) en ese punto conduce a

$$\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x=0^+} = \frac{mU_o}{\hbar^2} , \qquad (8)$$

y corresponde a la situación de los estados de paridad non del pozo rectangular independientemente de la presencia del potencial de función- δ .

Los estados de paridad par quedan determinados al imponer la con dición de la Ec.(8) sobre la función de la Ec.(9), obteniéndose

$$-k \cot(kL/2) = mU_0/\hbar^2 \qquad (11)$$

De hecho este caso fue estudiado en las referencias 5 y 7 para las situaciones de una barrera de función- δ (U_o>0) y un pozo de función- δ (U_o<0), respectivamente. El estado base para el último también admite energías negativas E = - $\hbar^2 \kappa^2/2m$ con soluciones de la forma

$$\psi(\mathbf{x} \ge 0) = \mathbf{A}' \ \mathbf{e}^{-\kappa \mathbf{X}} + \mathbf{B}' \ \mathbf{e}^{\kappa \mathbf{X}} = \mathbf{N}' \ \operatorname{senh} \left[\kappa \left(\frac{\mathbf{L}}{2} - \mathbf{x}\right)\right]$$
(12)

La anulación de la función de onda en x = L/2 requiere que A'/B' = $-e^{\kappa L}$ y entonces la Ec.(8) da

$$-\kappa \coth(KL/2) = mU_0/\hbar^2 \qquad (13)$$

La transición de valores positivos a negativos de la energía ocu rre únicamente para el estado base en el caso del pozo de función- δ . La energía del estado base es cero solamente para un valor particular del pa rámetro de intensidad U₀. Efectivamente, para E = 0, la función de onda toma la forma

$$\psi(x \ge 0) = A'' + B''x = N \left(\frac{L}{2} - x\right)$$
 (14)

La anulación de la función de onda en x = L/2 se satisface si A''/B'' =-L/2, y entonces la Ec.(8) conduce a

$$U_{o} = 2\hbar^{2}/mL \qquad (15)$$

Esta intensidad del pozo de función- δ para la cual la energía del estado base es cero también se puede obtener de las Ecs.(11) o (13) en los lími tes en que k \rightarrow 0 δ K \rightarrow 0, respectivamente.

B. Oscilador armónico

Si escribimos la energía del oscilador como E = $\hbar\omega(v+\frac{1}{2})$ y la coordenada adimensional z = x/b, donde b = $\sqrt{\hbar/2m\omega}$, entonces la ecuación de Schrödinger para el potencial de la Ec.(2) tiene soluciones de la for ma^(1,8) $\psi(x \ge 0) = e^{-z^2/4}$ [A M ($-\frac{v}{2}, \frac{1}{2}, \frac{z^2}{2}$) + B z M ($\frac{1-v}{2}, \frac{3}{2}, \frac{z^2}{2}$)]

$$= \operatorname{Ne}^{-Z^{2}/4} \left[\frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}\right]}{\Gamma\left[\frac{1-\nu}{2}\right]} - \operatorname{M}\left[-\frac{\nu}{2}, \frac{1}{2}, \frac{Z^{2}}{2}\right] + \frac{Z}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left[-\frac{1}{2}\right]}{\Gamma\left[-\frac{\nu}{2}\right]} \operatorname{M}\left[\frac{1-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z^{2}}{2}\right] \right], \quad (16)$$

en términos de la función hipergeométrica confluente de Kummer M(a,b, ξ). El comportamiento asintótico de esta última, M(a,b, $\xi \rightarrow \infty$) $\rightarrow \Gamma$ (b)e $\xi \xi^{a-b}/\Gamma(a)$, y la condición de integrabilidad cuadrática de la función de onda determinan la razón entre los coeficientes A y B indicada explícitamente. Otras propiedades de la función de Kummer que usaremos a continuación son M(a,b, $\xi=0$)=1 y M'(a,b, ξ)=(a/b)M(a+1, b+1, ξ).

Los estados de paridad non están determinados por la anulación de la función de onda en el origen z = 0, como se sigue de la Ec.(6a). Es to implica la anulación del coeficiente del primer término de la Ec.(16), lo cual ocurre para valores enteros impares del parámetro de energía,

$$v = 1, 3, 5, \dots$$
 (17)

ya que la función gama se hace infinita cuando su argumento es cero o un número entero negativo. Correspondientemente, el segundo término de la Ec.(16) se puede identificar como un polinomio de Hermite en z de grado v. Como habíamos anticipado, los eigenvalores de la energía y las eigenfunciones coinciden con los del oscilador armónico independientemente de la presencia del potencial de función- δ .

Los estados de paridad par están determinados al imponer la con dición de la Ec.(8) sobre la función de la Ec.(16). En este caso obtene mos

$$-\frac{\sqrt{2}}{b} - \frac{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} = \frac{mU_{o}}{\hbar^{2}} .$$
(18)

C. Potencial Lineal Simétrico

La distancia cuántica típica para el potencial lineal es d = $(\hbar^2/2mF)^{1/3}$, en términos de la cual podemos escribir la coordenada adimensional y = x/d y la energía adimensional ϵ = E/Fd. Entonces las so luciones de la ecuación de Schrödinger para el potencial de la Ec.(3) tie nen la forma^(8,9,10)

$$\psi(\mathbf{x} \ge 0) = \mathrm{NAi}(\mathbf{y} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \tag{19}$$

en términos de la función de Airy regular Ai (ξ) . La otra función de Airy Bi $(y-\epsilon)$ se excluye porque diverge para y→∞.

Los estados de paridad non están determinados por la anulación de la función de onda en el origen, de acuerdo con la Ec.(6a). Esto ocu rre cuando la energía se hace igual al negativo de las raíces de la función de Airy regular

$$\epsilon = -a_{j}, \quad j = 1, 2, 3, \dots$$
 (20)

Los estados de paridad par están determinados cuando imponemos la condición de la Ec.(8) sobre la Ec.(19) y obtenemos

$$\frac{1}{d} \frac{A_{i}(-\epsilon)}{A_{i}(-\epsilon)} = \frac{mU_{o}}{\hbar^{2}} .$$
(21)

Completamos esta sección señalando que hemos resulto la ecuación de Schrödinger, Ec(4), para los potenciales de las Ecs(1), (2) y (3). Las

energías de los estados de paridad non están dadas directamente por las Ecs.(10), (17) y (20), respectivamente; mientras que para obtener las energías de los estados de paridad par se necesita la solución numérica de las respectivas ecuaciones trascendentales, Ecs.(11), (18) y (21), para valores dados de U_o. Las eigenfunciones respectivas están dadas por las Ecs.(9), (16) y (19) en el intervalo $[0,\infty)$, y se pueden extender inmedia tamente al intervalo $(-\infty,0]$ haciendo uso de las Ecs.(6a) o (6b).

3. RESULTADOS NUMERICOS Y DISCUSION

Como estamos interesados en los espectros de energía de los potenciales de las Ecs.(1), (2) y (3) para diferentes valores de la intensi dad U_o del potencial de función- δ , es natural y conveniente empezar con los casos familiares cuando el potencial de función- δ está ausente, U_o=0, y usarlos entonces como puntos de comparación para otros valores de U_o. Si U_o = 0, la Ec.(8) o sus equivalentes Ecs.(11), (18) y (21) se reducen a la condición usual de que la derivada de la función de onda en el origen se debe anular para los estados de paridad par. Esta condición se sa tisface siempre y cuando se ajuste un número impar de medias longitudes de onda en el pozo rectangular

$$\frac{kL}{2} = \frac{(2n+1)\pi}{2} , \qquad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(22)

el número cuántico del oscilador sea un entero par

$$v = 0, 2, 4, \dots,$$
 (23)

y la energía del potencial lineal simétrico sea el negativo de un máximo o un mínimo de la función de Airy regular

$$\epsilon = -a_j^1$$
, $j = 1, 2, 3, ...,$ (24)

respectivamente.

En las Figs. 1, 2 y 3 graficamos los eigenvalores de la energía para diferentes valores de U_0 . Para $U_0 = 0$, se pueden reconocer inmediatamente los respectivos espectros de energía. En la Fig. 1 las energías, en unidades $\hbar^2 \pi^2/2mL^2$, varían como los cuadrados de los números enteros; enteros impares para los estados de paridad par, Ec(22), y enteros pares para los estados de paridad non, Ec.(10). En la Fig.2, los niveles de energía están igualmente espaciados, Ec.(23) y (17). Y en la Fig. 3 las posiciones de los niveles de energía corresponden a las posiciones de los valores extremos y de las raíces de la función de Airy regular, Ecs.(24) y (20).

Los estados de paridad non tienen las mismas energías, Ecs.(10), (17) y (20), para todos los valores de U_o. Esto se muestra en las Figs.l, 2 y 3 mediante las correspondientes líneas de energía horizontales.

Para un valor dado de U_o podríamos resolver numéricamente las ecuaciones trascendentales (11), (18) y (21) para determinar los eigenvalores de la energía de los estados de paridad par. Sin embargo, es más fácil escoger valores de la energía a nuestra conveniencia y usarlos en esas ecuaciones, con la ayuda de las tablas de la referencia 8, para determinar la intensidad correspondiente U_o del potencial de función- δ . En las Figs. 1, 2 y 3 hemos graficado los valores de U_o directamente en el intervalo [-1,1] y los valores de 1/U_o para $|U_o| > 1$, para incluir en la misma gráfica todos los valores de U_o.

Podemos observar que la energía de los estados de paridad par aumenta monotónicamente con la intensidad U_0 del potencial de función- δ . Es pecíficamente, partiendo del caso con $U_0 = 0$, el cambio de la energía es positivo (negativo) cuando U_0 toma valores positivos (negativos). Este cambio se puede entender como resultado del efecto repulsivo (ligante) de la barrera (el pozo) de función- δ . A medida que $U_0 \rightarrow +\infty$ (- ∞), la energía de un estado de paridad par tiende por abajo (arriba) a la energía del estado vecino superior (inferior) de paridad negativa. La energía del estado base tiende a - ∞ cuando $U_0 \rightarrow = \infty$. La degeneración de pares consecutivos de pares consecutivos de niveles de energía de paridades par y non cuando $U_0 \rightarrow +\infty$ se puede entender como debida a la penetrabilidad decreciente de la barrera de función- δ , la cual tiende a hacer los dos pozos independientes entre sí y conduce al aumento máximo posible en la energía del estado de paridad



Fig. 1. Variación de los eigenvalores de la energía $E/(\hbar_{\pi}^{2/2}/2mL^{2})$ para diferentes intensidades U/2 \hbar^{2}/mL) del potencial de función- δ superim puesto sobre un potencial de pozo rectangular. Los valores de U en el intervalo [-1,1] y los valores de 1/U para |U| > 1 se grafican directamente en lasa^uscisas, incluyendo todos los valores en una gráfica finita.



Fig. 2. Variación de los eigenvalores de la energía E/(ħω) para diferentes intensidades U /($\sqrt{2}\hbar^2$ /mb) del potencial de función- δ superimpuesto sobre un potencial de oscilador armónico.

131



Fig. 3. Variación de los eigenvalores de la energía E/(Fd) para diferentes intensidades U /(\hbar^2 /md) del potencial de función- δ superimpuesto sobre un potencial lineal simétrico. Los eigenvalores de la energia para U = 0 corresponden a los valores extremos y raíces de la función de Airy regular, Ecs. (24) y (20).

par. Correspondientemente, la degeneración de pares consecutivos deniveles de energía de paridades non y par cuando $U_0 \rightarrow -\infty$ es la consecuencia de la ligadura adicional máxima posible para los estados de paridad par debida al pozo de función- δ . La Ec.(8) indica que en ambos limites, $U_0 \rightarrow \pm \infty$, las funciones de onda de paridad par tienden a anularse en el origen, jus tamente como ocurre con las funciones de onda de paridad non; por lo tanto, los estados correspondientes tienen la misma energía y las funciones de onda tienen la misma forma, pero difieren en sus paridades de acuerdo con las Ecs. (6a) y (6b). También justamente antes del límite $U_0 \rightarrow +\infty$, la función de onda de paridad par no tiene el cero en el origen que la función de onda de paridad non siempre tiene; y justamente antes del límit te $U_0 \rightarrow -\infty$, la función de onda de paridad par tiene dos ceros próximos al origen que tienden a juntarse en el cero en el origen cuando se alcanza el límite.

También es interesante seguir el comportamiento de la energía y la función de onda del estado base para valores negativos de la intensidad U_o. En el caso del pozo rectangular tuvimos que distinguir explícita mente los intervalos de energía $E(U_0 = 0) > E > 0$, E = 0, $y \in < 0$, dentro de los cuales las Ecs. (11), (15) y (13) dan los valores respectivos de U_o. Las funciones de onda correspondientes, Ecs. (9), (14) y (12), pueden ser caracterizadas como cóncava hacia el eje, lineal, y convexa hacia el eje, respectivamente. Similarmente las funciones de onda del oscilador armónico y del potencial lineal simétrico de las Ecs. (16) y (19) tie nen un punto de inflexión, es decir, una derivada segunda nula, en $x = 0^+$ para E = 0 (v = - 0.5 y ϵ = 0, respectivamente). Correspondientemente, las funciones de onda son cóncavas hacia el eje en la vecindad de x = 0para E > 0, y convexas hacia el eje en todo el intervalo 0 < x <∞ para E ≤ 0. Las formas respectivas reflejan la predominancia de la energía ci nética positiva sobre la energía potencial negativa, el equilibrio entre ambos tipos de energía, y la predominancia de la energía potencial sobre la energía cinética. Las Figs. 4a, 4b y 4c ilustran las formas de las funciones de onda de los potenciales de las Ecs.(1), (2) y (3), respecti vamente, para valores de U positivos, nulo y negativos. Nótese la discontinuidad de la derivada en el origen de acuerdo con la Ec. (5).

Por otra parte, resulta instructivo utilizar los espectros de



Fig. 4. Funciones de onda del estado base para a) pozo rectangular b) osci lador armónico y c) potencial lineal simétrico con potenciales de función-δ de intensidad U > 0 -----, U = 0 ----, y U (E=0) < 0 -----, superimpuestos en el punto central.

nuestras Figs. 1, 2 y 3 como puntos de comparación para las figuras correspondientes de otros potenciales con dos pozos, identificando las diferencias y similaridades cualitativas entre ellos. Nuestros resultados pueden servir como un paso intermedio para entender la física involucrada en los otros potenciales. Primero, consideremos potenciales del tipo de las Ecs. (1), (2) y (3) con el potencial de función-o reemplazado por una barrera rectangular muy delgada y de altura variable. En este caso podemos reconocer que se puede lograr una conexión suave de las funciones de onda y de sus derivadas a través de la barrera rectangular para los estados de ambas paridades; debido a la anchura finita de la barrera rectangular, los estados de paridad non tendrán pequeños corrimientos de energía positivos; para una barrera infinitamente alta, los estados consecutivos de paridad par y non se hacen degenerados a los eigenvalores de la energía de cada uno de los pozos independientes. El método de grá ficas de computadora de la referencia 6 se puede usar para verificar lo anterior cuantitativamente.

A continuación, consideremos un potencial que consiste de dos pozos separados por una barrera rectangular, y para el cual, de acuerdo a las referencias 3 y 4, los eigenvalores de la energía del estado base de paridad par y del primer estado excitado de paridad non aumentan y dis minuyen, respectivamente, partiendo de sus valores para una separación nu la entre los pozos y tendiendo al límite de degeneración común correspon diente a la energía del estado base de uno de los pozos para grandes sepa raciones. Aquí tenemos que reconocer que a medida que los dos pozos se se paran entre sí, hay dos tipos de cambios geométricos con sus efectos físi cos correspondientes: un crecimiento en el espesor de la barrera entre los pozos, el cual hace que aumenten los eigenvalores de la energía; y un crecimiento de la región del espacio donde hay mayor probabilidad de encontrar al sistema cuántico, el cual hace que disminuyan los eigenvalores de la energía. El primer efecto es grande y predomina para el estado de paridad par; mientras que es pequeño y dominado por el segundo efecto para el estado de paridad non.

Para el oscilador doble de la referencia 1 estos dos tipos de cambios y efectos también están presentes y en competencia el uno con el

135

otro; una diferencia es que la barrera crece tanto en espesor como en al tura a medida que los dos pozos se separan entre sí. Para separaciones pequeñas el segundo efecto es el que domina para estados de ambas parid<u>a</u> des, de modo que sus energías decrecen con la separación entre los pozos. Para separaciones más grandes, la misma situación persiste para los est<u>a</u> dos de paridad non; pero la situación se invierte para los estados de p<u>a</u> ridad par, de modo que sus energías alcanzan valores mínimos y de ahí a<u>u</u> mentan a medida que la separación entre los pozos continúa. El resultado es que pares consecutivos de niveles de energía de paridad par y non tienden asintóticamente a los niveles igualmente espaciados del oscilador armónico por abajo y por arriba, respectivamente.

Completamos nuestra discusión dando ejemplos adicionales de sis temas físicos que pueden ser descritos mediante potenciales con pozos múltiples o mediante la superposición de potenciales de función-6 sobre algunos potenciales simples. Siguiendo la referencia 7, podemos conside rar potenciales asimétricos con dos pozos colocando el potencial de función-6 superpuesto en posiciones diferentes de la central; éstos pueden ser útiles en el estudio de moléculas, fisión nuclear y átomos encajonados no simétricos. La extensión a moléculas diatómicas encajonadas y sistemas con muchos átomos, como un sólido, involucra potenciales con po zos rúltiples; en el último ejemplo podemos distinguir los casos de un arreglo regular para un cristal y un arreglo al azar para un sólido amor fo. La superposición de un potencial de función- δ sobre un potencial no ligante proporciona un modelo simple para estados resonantes, los cua les son de interés en diferentes áreas de física atómica y subatómica. En todos estos ejemplos la función de onda tiene una discontinuidad en su derivada logarítmica en las posiciones de los potenciales de funcion-6; dependiendo de tales posiciones el sistema puede tender o no tener degene racion de sus niveles de energía. También, algunos de estos ejemplos son bien conocidos y se encuentran en libros de texto, mientras que otros son aún objeto de investigación.

REFERENCIAS

1. E. Merzbacher, Quantum Mechanics, Wiley, New York (1961) pp. 64-77

136

- D. Park, Introduction to Quantum Theory, McGraw-Hill, New York (1964) pp. 116-123.
- 3. I.R. Lapidus, Am. J. Phys. 38 (1970) 905.
- 4. P.A. Deutchman, Am. J. Phys. 39 (1971) 952.
- 5. C.U. Segre and J.D. Sullivan, Am. J. Phys. 44 (1976) 729.
- 6. E.A. Johnson and H.T. Williams, Am. J. Phys. 50 (1982) 239.
- 7. I.R. Lapidus, Am. J. Phys. <u>50</u> (1982).
- M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York (1985).
- L. D. Landau and E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory Pergamon, London(1965) p. 73.
- V.C. Aguilera-Navarro, H. Iwamoto, E. Ley-Koo and A.H. Zimerman Am. J. Phys. <u>49</u> (1981) 648.