

SOLUCIONES CUANTICAS EXACTAS PARA ALGUNOS POTENCIALES ASIMETRICOS CON DOS POZOS*

E. Ley-Koo†

Instituto de Física, U.N.A.M.

Apartado Postal 20-364, 01000 México, D.F.

V.C. Aguilera-Navarro

Instituto de Física Teórica

Rua Pamplona 145, 01405 Sao Paulo, Brasil

(recibido enero 3, 1985; aceptado abril 16, 1985)

RESUMEN

Se discuten varios puntos de interés en el estudio de potenciales con dos pozos en cursos de mecánica cuántica. En particular, se construyeron las soluciones de la ecuación de Schrödinger para potenciales de pozo rectangular, de oscilador armónico y de pozo triangular con un potencial de función- δ superpuesto en diferentes posiciones. Se presentan y analizan los espectros de energía y las eigenfunciones de tales sistemas para diferentes intensidades y posiciones del potencial de función- δ .

* Trabajo realizado dentro del programa de intercambio apoyado por CONACYT-CNPq

† Profesor de la Facultad de Ciencias, U.N.A.M. y Asesor del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares.

ABSTRACT

We discuss several points of interest in the study of two-well potentials in Quantum Mechanics courses. In particular, we construct the solutions of the Schrödinger equation for rectangular-well, harmonic-oscillator and triangular-well potentials with a δ -function potential superimposed in different positions. The energy spectra and eigenfunctions of such systems are presented and analyzed for different intensities and positions of the δ -function potential.

1. INTRODUCCION

El estudio de potenciales con dos pozos en cursos de mecánica cuántica es de interés, tanto desde el punto de vista de sus aplicaciones físicas como desde el punto de vista pedagógico. Entre las referencias que ilustran explícitamente el primer punto de vista podemos señalar el texto de Merzbacher⁽¹⁾, y los artículos de Lapidus^(2,3). Por otra parte, las referencias 4-8 discuten aspectos específicos del segundo punto de vista. La referencia 1 contiene una solución detallada del doble oscilador y una discusión de su aplicación para describir el espectro de inversión de la molécula de amoníaco. La referencia 2 analiza un modelo unidimensional de un ion molecular diatómico utilizando dos potenciales atómicos de función- δ . En la referencia 3 se estudia un modelo unidimensional de un átomo de hidrógeno en un pozo cuadrado infinito, usando también un potencial atómico de función- δ . El texto de Park⁽⁴⁾ analiza un potencial simétrico con dos pozos de forma arbitraria, pero se limita a hacer el tratamiento dentro de la aproximación WKB. Las referencias 5,6 y 7 estudian potenciales simétricos con dos pozos rectangulares separados por una barrera rectangular o de función- δ , y usan ampliamente gráficas generadas por computadora. En la referencia 8 se construyen las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger para tres potenciales simétricos de dos pozos, y los espectros de energía correspondientes se comparan con los de las referencias anteriores para destacar los aspectos físicos relevantes de cada caso. Una característica común a estos potenciales simétricos de dos pozos es la tendencia hacia la degeneración de pares consecutivos de niveles de energía de paridades par y non a medida que los dos pozos se vuelven más

independientes entre sí, debido a la penetrabilidad decreciente de la barrera entre ellos o a la intensidad creciente de uno de ellos.

Excepto la referencia 3, todos los otros trabajos mencionados es tán restringidos a potenciales simétricos. Como se señala al final de la referencia 8, existen situaciones de interés como átomos encajonados, moléculas simétricas, fisión nuclear, colisiones entre iones pesados, que pueden ser descritas a través de potenciales asimétricos con dos pozos. La referencia 9 titulada "Modelo de capas asimétrico con dos centros" ha servido de base para la investigación de las dos últimas situaciones señaladas en la física nuclear. Al nivel de las referencias 1-8 no existen prácticamente trabajos sobre potenciales asimétricos con dos pozos, lo cual nos ha motivado a realizar el presente.

En este trabajo se construyen las soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger para potenciales de pozo rectangular, de oscilador armónico y de pozo triangular con un potencial de función- δ superpuesto en diferentes posiciones:

$$V_r(x) = \begin{cases} U_0 \delta(x-x_0) & |x| \leq L/2 \\ \infty & |x| \geq L/2 \end{cases} , \quad (1)$$

$$V_0(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + U_0 \delta(x-x_0) \quad (2)$$

y

$$V_t(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ Fx + U_0 \delta(x-x_0) & x \geq 0 \end{cases} . \quad (3)$$

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 entre sí. Para valores negativos de la intensidad, $U_0 < 0$, el potencial de función- δ actúa como un pozo superpuesto al pozo original. Uno de nue stros objetivos es determinar las eigenfunciones y los espectros de energía

de estos potenciales para diferentes valores de la intensidad U_0 y de la posición x_0 del potencial de función- δ .

En la sección 2 primero demostramos que la presencia del potencial de función- δ en la posición x_0 introduce una discontinuidad en la derivada logarítmica de las funciones de onda en el punto x_0 , siendo esa discontinuidad proporcional a la intensidad U_0 del potencial de función- δ . Esta condición junto con la condición de integrabilidad cuadrática de las eigenfunciones permiten determinar ecuaciones trascendentales para los espectros de energía de los potenciales propuestos, Ecs. (1),(2) y (3).

En la sección 3 se presentan resultados numéricos bajo la forma de gráficas que ilustran las variaciones de los espectros de energía para cada potencial para diferentes intensidades y posiciones del potencial de función- δ . También se ilustran gráficamente las variaciones correspondientes de algunas eigenfunciones. Finalmente, se discuten estas variaciones destacando los puntos de analogía y de diferencia entre los potenciales de las Ecs. (1),(2) y (3), y se comparan además con las variaciones de la respectiva situación límite $x_0 = 0$ correspondiente a los potenciales simétricos estudiados en la referencia 8.

2. SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER

La ecuación de Schrödinger para potenciales del tipo de las Ecs. (1),(2) y (3) se puede escribir en la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) + U_0 \delta(x-x_0) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad , \quad (4)$$

la cual permite examinar explícitamente el efecto del potencial de función- δ sobre las funciones de onda y sus derivadas en la vecindad del punto x_0 . La función de onda misma tiene que ser continua en todos los puntos de su intervalo de definición, incluyendo el punto x_0 ,

$$\psi(x_0^-) = \psi(x_0^+) \quad (5)$$

debido a su significado de amplitud de probabilidad. Por otra parte, la integración de la Ec. (4) en la vecindad inmediata del punto x_0 conduce al resultado

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_0^+} - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_0^-} = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \psi(x_0) \quad (6)$$

de que la derivada de la función de onda tiene una discontinuidad proporcional a la intensidad del potencial de función- δ y al valor de la función de onda en ese punto. Esto equivale a la condición

$$\frac{1}{\psi} \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_0^+} - \frac{1}{\psi} \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_0^-} = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \quad (6')$$

de que la derivada logarítmica de la función de onda tiene una discontinuidad, en el punto en que actúa el potencial de función- δ , proporcional a la intensidad del último.

Por supuesto, las funciones de onda deben satisfacer la condición de integrabilidad cuadrática, la cual en los casos de los potenciales de las Ecs. (1), (2) y (3) se reduce a la condición de que se anulen en los extremos de sus respectivos intervalos de definición. La imposición de estas condiciones de frontera junto con la de la Ec. (6) sobre las soluciones de la Ec. (4) a la izquierda y a la derecha del punto x_0 , conduce a las expresiones para los eigenvalores de la energía y las eigenfunciones del sistema.

A continuación aplicamos este procedimiento a los sistemas definidos por las Ecs. (1), (2) y (3) para determinar sus espectros de energía y eigenfunciones. En este proceso usamos libremente las funciones asociadas a cada potencial y sus propiedades sin deducirlas ni demostrarlas, pero damos las referencias necesarias.

A. Pozo rectangular.

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

$$\psi(-\frac{L}{2} \leq x \leq x_0) = N_- \text{sen} [k(\frac{L}{2} + x)] \quad (7-)$$

y

$$\psi(x_0 \leq x \leq \frac{L}{2}) = N_+ \text{sen} [k(\frac{L}{2} - x)] \quad , \quad (7+)$$

que obviamente satisfacen la condición de anularse en $|x| = L/2$. La condición de frontera en x_0 , Ec.(6'), toma entonces la forma

$$-k \cot [k(\frac{L}{2} - x_0)] - k \cot [k(\frac{L}{2} + x_0)] = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \quad , \quad (8)$$

que es la ecuación trascendental que determina los eigenvalores de la energía.

Para valores negativos de U_0 , el estado base del sistema también puede admitir soluciones con energía negativa $E = -\hbar^2 K^2/2m$,

$$\psi(-\frac{L}{2} \leq x \leq x_0) = N'_- \text{senh} [\kappa(\frac{L}{2} + x)] \quad (9-)$$

$$\psi(x_0 \leq x \leq \frac{L}{2}) = N'_+ \text{senh} [\kappa(\frac{L}{2} - x)] \quad (9+)$$

Al substituir éstas en la Ec. (6') se obtiene la expresión

$$-\kappa \coth [\kappa(\frac{L}{2} - x_0)] - \kappa \coth [\kappa(\frac{L}{2} + x_0)] = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \quad (10)$$

que determina los valores negativos de la energía del estado base.

Para algún valor negativo de U_0 , el estado base del sistema puede tomar el valor $E = 0$. Cuando esto ocurre la función de onda es

$$\psi(-\frac{L}{2} \leq x \leq x_0) = N''_- [\frac{L}{2} + x] \quad (11-)$$

y

$$\psi(x_0 \leq x \leq \frac{L}{2}) = N''_+ [\frac{L}{2} - x] \quad , \quad (11+)$$

y la Ec. (6') determina la intensidad

$$U_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\frac{L}{2} - x_0} + \frac{1}{\frac{L}{2} + x_0} \right] \quad (12)$$

dél pozo de potencial de función- δ correspondiente. Tanto la función de onda, Ec. (11), como la relación entre la intensidad y la posición del pozo, Ec. (12), se pueden obtener de las ecuaciones correspondientes en el límite de energía nula, es decir, de las Ecs. (7) y (8) para $k \rightarrow 0$ y de las Ecs. (9) y (10) para $\kappa \rightarrow 0$, respectivamente.

B. Oscilador armónico

Cuando se escribe la energía del oscilador como $E = \hbar\omega(v + \frac{1}{2})$ y se introduce la coordenada adimensional $z = x/b$, siendo $b = \sqrt{\hbar/2m\omega}$, entonces la solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial de la Ec. (2) que se anula para $x \rightarrow \pm\infty$ es^(1,10)

$$\psi(-\infty < x \leq x_0) = N_- e^{-z^2/4} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-v}{2}\right)} M\left(-\frac{v}{2}, \frac{1}{2}, \frac{z^2}{2}\right) - \frac{z}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{v}{2}\right)} M\left(\frac{1-v}{2}, \frac{3}{2}, \frac{z^2}{2}\right) \right], \quad (13-)$$

$$\psi(x_0 \leq x < \infty) = N_+ e^{-z^2/4} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-v}{2}\right)} M\left(-\frac{v}{2}, \frac{1}{2}, \frac{z^2}{2}\right) + \frac{z}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{v}{2}\right)} M\left(\frac{1-v}{2}, \frac{3}{2}, \frac{z^2}{2}\right) \right], \quad (13+)$$

donde $M(a, b, \xi)$ es la función hipergeométrica confluyente de Kummer. Las propiedades $M(a, b, \xi = 0) = 1$ y $M'(a, b, \xi) = (a/b)M(a+1, b+1, \xi)$ de esta función⁽¹⁰⁾ son útiles al aplicar la condición de la Ec. (6') para obtener

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} M\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) - \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} \nu Z_0 M\left(\frac{2-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} \frac{1-\nu}{3} Z_0^2 M\left(\frac{3-\nu}{2}, \frac{5}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} M\left(-\frac{\nu}{2}, \frac{1}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) + \frac{Z_0}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} M\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} M\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) + \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} \nu Z_0 M\left(\frac{2-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} \frac{1-\nu}{3} Z_0^2 M\left(\frac{3-\nu}{2}, \frac{5}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right)} M\left(-\frac{\nu}{2}, \frac{1}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) - \frac{Z_0}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} M\left(\frac{1-\nu}{2}, \frac{3}{2}, \frac{Z_0^2}{2}\right) \right] \\
 & = \frac{2mb}{\hbar^2} U_0 \tag{14}
 \end{aligned}$$

que es la relación que determina los eigenvalores de la energía del sistema.

C. Potencial lineal

El potencial lineal tiene asociada una distancia cuántica típica $d = (\hbar^2/2mF)^{1/3}$ que permite usar la coordenada y la energía adimensionales $y = x/d$ y $\varepsilon = E/Fd$, respectivamente. Entonces la solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial de la Ec. (3) que se anula en $x = 0$ y $x = \infty$ toma la forma (10, 11, 12)

$$\psi(0 \leq x \leq x_0) = N_- [\text{Bi}(-\varepsilon)\text{Ai}(y-\varepsilon) - \text{Ai}(-\varepsilon)\text{Bi}(y-\varepsilon)] \quad , \tag{15_-}$$

$$\psi(x_0 \leq x < \infty) = N_+ \text{Ai}(y-\varepsilon) \quad , \tag{15_+}$$

en términos de las funciones de Airy regular Ai e irregular Bi . La condición de frontera de la Ec. (6') se reduce a

$$\begin{aligned}
 & \frac{\text{Ai}'(y_0 - \varepsilon)}{\text{Ai}(y_0 - \varepsilon)} - \frac{\text{Bi}(-\varepsilon)\text{Ai}'(y_0 - \varepsilon) - \text{Ai}(-\varepsilon)\text{Bi}'(y_0 - \varepsilon)}{\text{Bi}(-\varepsilon)\text{Ai}(y_0 - \varepsilon) - \text{Ai}(-\varepsilon)\text{Bi}(y_0 - \varepsilon)} \\
 & = \frac{\text{Ai}(-\varepsilon) [-\text{Ai}'(y_0 - \varepsilon)\text{Bi}(y_0 - \varepsilon) + \text{Ai}(y_0 - \varepsilon)\text{Bi}'(y_0 - \varepsilon)]}{\text{Ai}(y_0 - \varepsilon) [\text{Bi}(-\varepsilon)\text{Ai}(y_0 - \varepsilon) - \text{Ai}(-\varepsilon)\text{Bi}(y_0 - \varepsilon)]}
 \end{aligned}$$

$$= \frac{\text{Ai}(-\epsilon)}{\pi \text{Ai}(y_0 - \epsilon) [\text{Bi}(-\epsilon) \text{Ai}(y_0 - \epsilon) - \text{Ai}(-\epsilon) \text{Bi}(y_0 - \epsilon)]} = \frac{2md}{\hbar^2} U_0 \quad (16)$$

En el último renglón se substituye explícitamente el valor del wronskiano de las funciones de Airy⁽¹⁰⁾, $W\{\text{Ai}(z), \text{Bi}(z)\} = 1/\pi$.

Concluimos esta sección señalando que hemos resuelto la ecuación de Schrödinger, Ec. (4), para los potenciales de las Ecs. (1), (2) y (3). Los eigenvalores de la energía están determinados por las ecuaciones trascendentales Ecs. (8), (14) y (16), respectivamente. Al sustituir los valores apropiados de los parámetros de energía en las Ecs. (7), (15) y (15), respectivamente, se obtienen las eigenfunciones correspondientes. En el caso del potencial de la Ec. (1) se tienen adicionalmente las Ecs. (11) y (9) para la función de onda del estado base para valores nulo y negativos de la energía, los cuales ocurren para intensidades del potencial de función- δ dadas por las Ecs. (12) y (10), respectivamente.

3. RESULTADOS NUMERICOS Y DISCUSION

En esta sección presentamos resultados numéricos ilustrativos de los espectros de energía de los potenciales de las Ecs. (1), (2) y (3) a través de las Figs. 1, 2 y 3, respectivamente. Estas figuras son gráficas de la intensidad del potencial de función- δ , U_0 , en abscisas y los eigenvalores de la energía, E , en ordenadas, para una posición dada, x_0 , del potencial de función- δ . En las abscisas se incluyen todos los valores de U_0 en una sola gráfica finita poniendo sus valores directamente en el intervalo $[-1, 1]$ y los valores de $1/U_0$ cuando $|U_0| > 1$.

Para comprender las variaciones de los espectros de energía a medida que varía la intensidad del potencial de función- δ , es natural y conveniente tomar como punto de partida el caso familiar en que el potencial de función- δ está ausente, $U_0 = 0$, y tomarlo como punto de comparación para otros valores de U_0 . En el caso del potencial de pozo rectangular la Ec. (8) para $U_0 = 0$ conduce a la condición $kl = n\pi$ de que en la longitud L se acomode un número entero de medias longitudes de onda, $n = 1, 2, 3, \dots$, y los niveles de energía varían entonces como los cuadrados de los números enteros⁽¹⁾; esto se aprecia en el eje de ordenadas ($U_0 = 0$) de la Fig. 1. En el caso del potencial de oscilador armónico los niveles de energía están igualmente espaciados⁽¹⁾ como se aprecia en el eje de ordenadas ($U_0 = 0$)

de la Fig. 2 y correspondiendo a valores enteros $\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$ del parámetro de energía; los valores pares (nones) corresponden a los estados de paridad positiva (negativa) cuyas funciones de onda se reducen al primer (segundo) término del segundo miembro de las Ecs.(13). Para el potencial lineal los niveles de energía están dados por el negativo de las raíces de la función de Airy regular^(11, 12), $\epsilon = -a_j$, $j=1, 2, 3, \dots$ como sigue de la Ec. (16) para $U_0 = 0$; esas raíces son las que aparecen explícitamente en el eje de ordenadas de la Fig. 3, y las funciones de onda son directamente la función de Airy regular en todo el intervalo $0 \leq x < \infty$, Ec. (15-) o Ec. (15+).

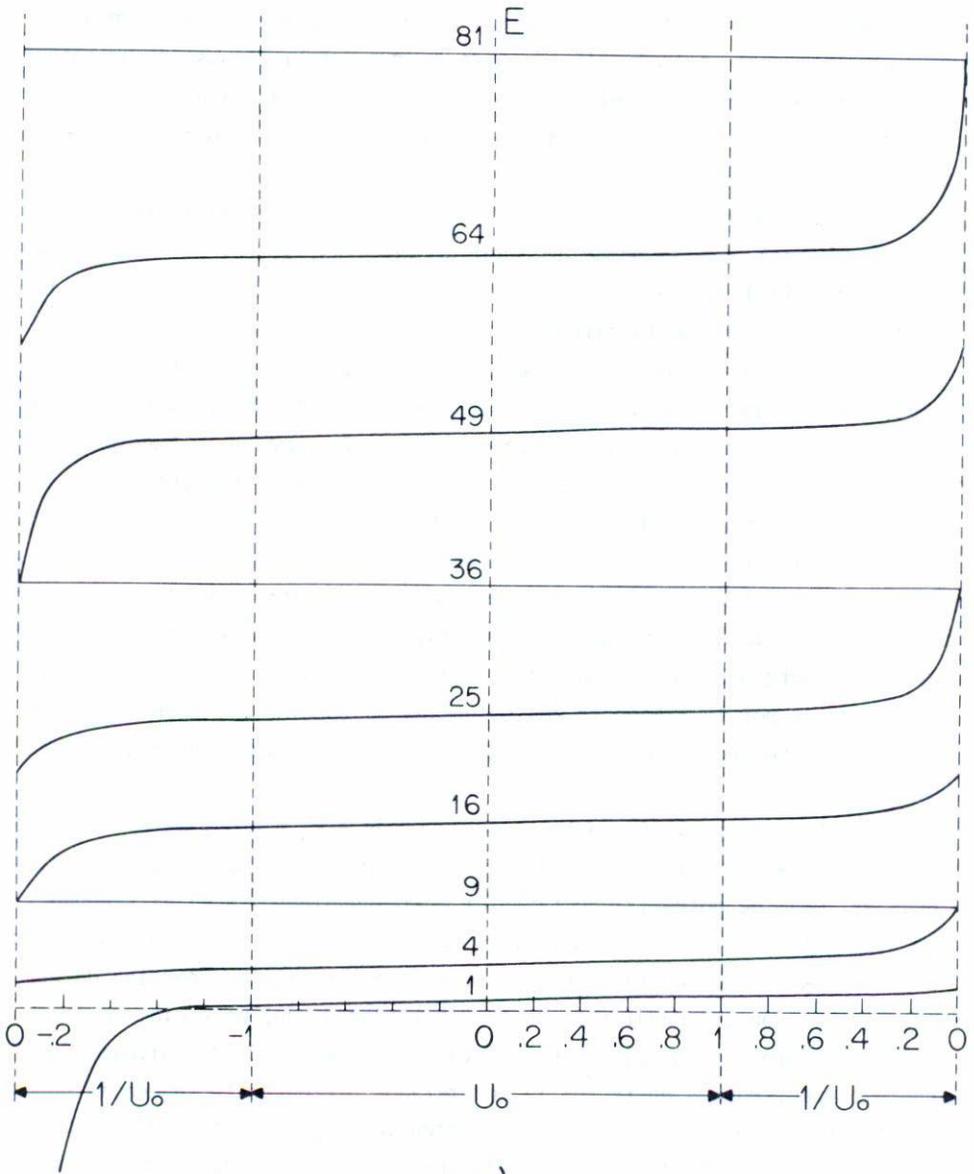
Para una posición dada x_0 y un valor dado de la intensidad U_0 del potencial de función- δ , se podrían resolver numéricamente las Ecs.(8), (14) y (16) para determinar los eigenvalores de la energía de los respectivos sistemas. Sin embargo, es más fácil escoger valores de la energía a nuestra conveniencia y usarlos en esas ecuaciones, con ayuda de tablas de la referencia 10 o de una computadora para tener los valores de las funciones respectivas, y determinar la intensidad correspondiente U_0 del potencial de función- δ para una posición dada x_0 . Las Figs. 1, 2 y 3 se han construido de esta manera y ahora procedemos a analizarlas.

La tendencia general de los eigenvalores de la energía es de crecer monotónicamente con la intensidad U_0 del potencial de función- δ . Específicamente, partiendo de los valores correspondientes a $U_0 = 0$, el cambio en la energía de un estado determinado es positivo (negativo) cuando U_0 toma valores positivos (negativos). Este cambio se puede entender como un resultado del efecto repulsivo (ligante) de la barrera (el pozo) de potencial de función- δ . A medida que $U_0 \rightarrow +\infty$ la energía de cada estado tiende a un valor límite que está por debajo de la energía que tenía el estado superior inmediato para $U_0 = 0$; por otra parte, a medida que $U_0 \rightarrow -\infty$, la energía de este último estado tiende al mismo valor límite mencionado, que está por encima de la energía que tenía el estado anterior para $U_0 = 0$. De acuerdo con la Ec. (6'), estos valores de U_0 y de la energía se presentan cuando la función de onda tiene un nodo en x_0 ; el primer caso corresponde al límite anterior a la aparición del nodo y el segundo caso ocurre inmediatamente después de la aparición del nodo a me-

dida que se va aumentando la energía. Desde luego, es la aparición de este nodo adicional en la función de onda lo que señala el paso de un estado al estado inmediato superior. La energía del estado base va a $-\infty$ a medida que $U_0 \rightarrow -\infty$, correspondiendo al límite en que el pozo de potencial de función- δ predomina.

La tendencia general descrita en el párrafo anterior tiene algunas excepciones como se puede apreciar de las Figs. 1, 2 y 3. Efectivamente, la energía de algunos niveles no cambia al cambiar U_0 . La Ec. (6) nos permite entender que esta situación se presenta siempre que la función de onda se anule en la posición x_0 de la función- δ , ya que en ese caso la derivada de la función de onda es continua en ese punto y por lo tanto el estado correspondiente coincide tanto en su energía como en su función de onda con el mismo estado del potencial original independientemente de la intensidad del potencial de función- δ . Esta situación se presenta en los potenciales simétricos de dos pozos estudiados en la referencia 8, ya que al estar situado el potencial de función- δ en la posición central, donde los estados de paridad no tienen un nodo, tales estados no se ven modificados ni en su energía ni en su función de onda; los estados de paridad par sí se modifican por la presencia del potencial de función- δ y tienden a degenerarse con su vecino de paridad no inmediato superior (inferior) a medida que $U_0 \rightarrow +\infty (-\infty)$.

En la Fig. 1, la parte a) corresponde a $x_0 = L/6$ y la parte b) a $x_0 = L/4$. Estos valores de x_0 se reconocen como nodos de las funciones de onda del pozo de potencial rectangular correspondientes a a) al segundo, quinto, octavo, ... $(3n-1)$ avo, y b) al tercero, séptimo, ..., $(4n-1)$ avo estados excitados. De acuerdo con la discusión anterior, las energías de estos niveles son independientes de la intensidad U_0 del potencial de función- δ y aparecen como líneas horizontales. El resto de los niveles de energía comprendidos entre los ya enumerados presentan la tendencia general de crecimiento monótonico con la intensidad U_0 del potencial de función- δ . En la parte a) nótese la tendencia a la degeneración de los pares de niveles excitados primero y segundo, cuarto y quinto, séptimo y octavo, etc. cuando $U_0 \rightarrow +\infty$ y de los pares de niveles excitados tercero y segundo, sexto y quinto, noveno y octavo, etc. cuando $U_0 \rightarrow -\infty$. En la parte b) también se presenta esa tendencia para los pares de niveles excitados segundo



a)

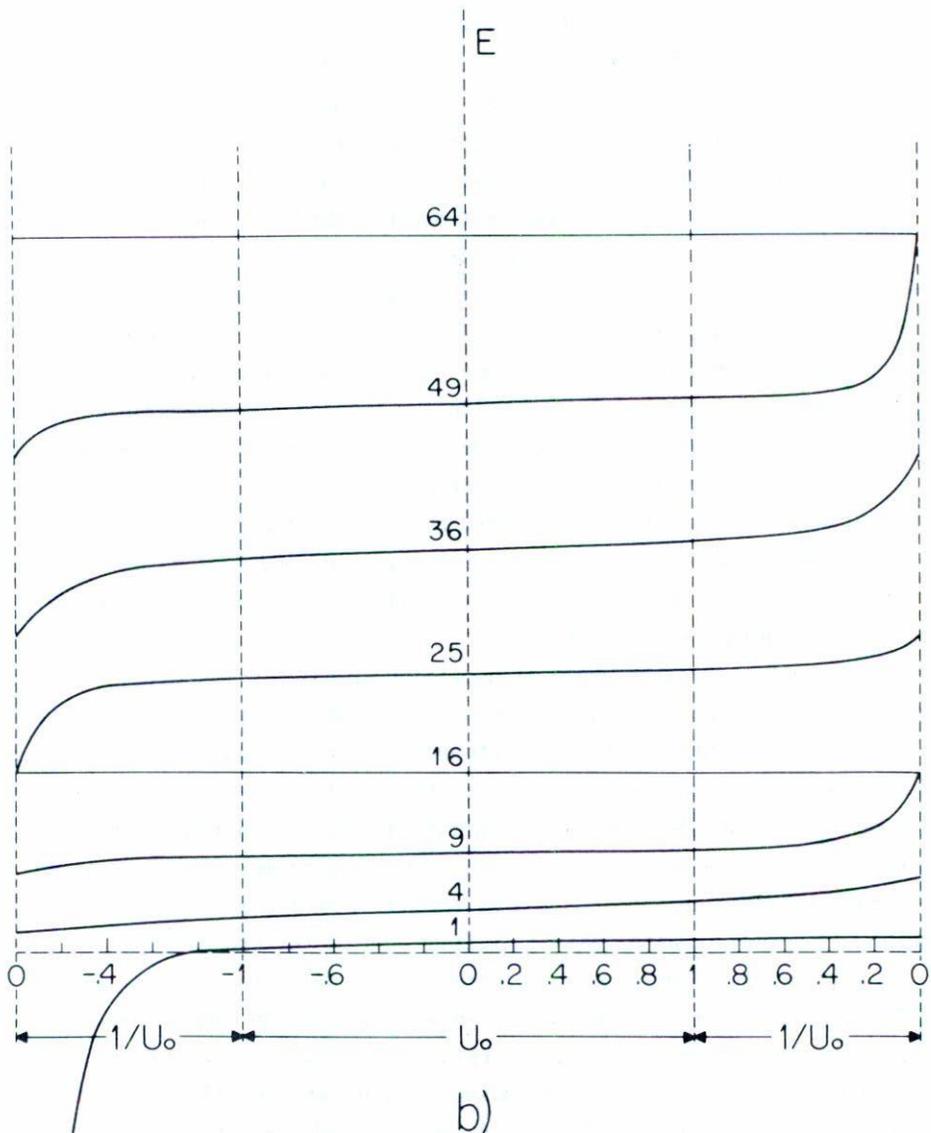


Fig. 1. Variación de los eigenvalores de la energía E , en unidades $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$, para diferentes intensidades U_0 , en unidades a) $3\frac{\hbar^2}{2mL}$ para $x_0 = L/6$ y b) $2\frac{\hbar^2}{mL}$ para $x_0 = L/4$, del potencial de función- δ superpuesto sobre el potencial de pozo rectangular. En las abscisas se grafican los valores de U_0 en el intervalo $[-1, 1]$ y los valores de $1/U_0$ para $|U_0| > 1$ con objeto de incluir todos los valores en una sola gráfica finita.

y tercero, sexto y séptimo etc. cuando $U_0 \rightarrow +\infty$ y de los pares de niveles excitados cuarto y tercero, octavo y séptimo, etc. cuando $U_0 \rightarrow \infty$. Estas tendencias podrían considerarse como una generalización de la degeneración de pares consecutivos de niveles de energía que se presenta en los potenciales simétricos de dos pozos⁽⁸⁾. Tal generalización es posible en el presente caso del pozo de potencial rectangular debido al espaciamiento uniforme de los nodos en las funciones de onda, pero no se presenta para otros potenciales. Efectivamente, si escogemos $x_0 = (L/2 - L/p)$, $p=2,3,4,\dots$, entonces los estados excitados $p-1, 2p-1, 3p-1, \dots, np-1$ tienen nodos en esa posición, sus energías y funciones de onda son independientes de la intensidad U_0 del potencial de función- δ y tienden a degenerarse con el nivel vecino inferior (superior) a medida que $U_0 \rightarrow +\infty (-\infty)$. Si x_0 se escoge como una fracción racional de L entonces coincidirá con nodos de algunos estados del pozo, los cuales servirán como niveles de referencia para las tendencias bajo consideración. Sólo si se escoge x_0 como una fracción irracional de L el potencial de función- δ afectará a todos los estados del pozo de potencial rectangular.

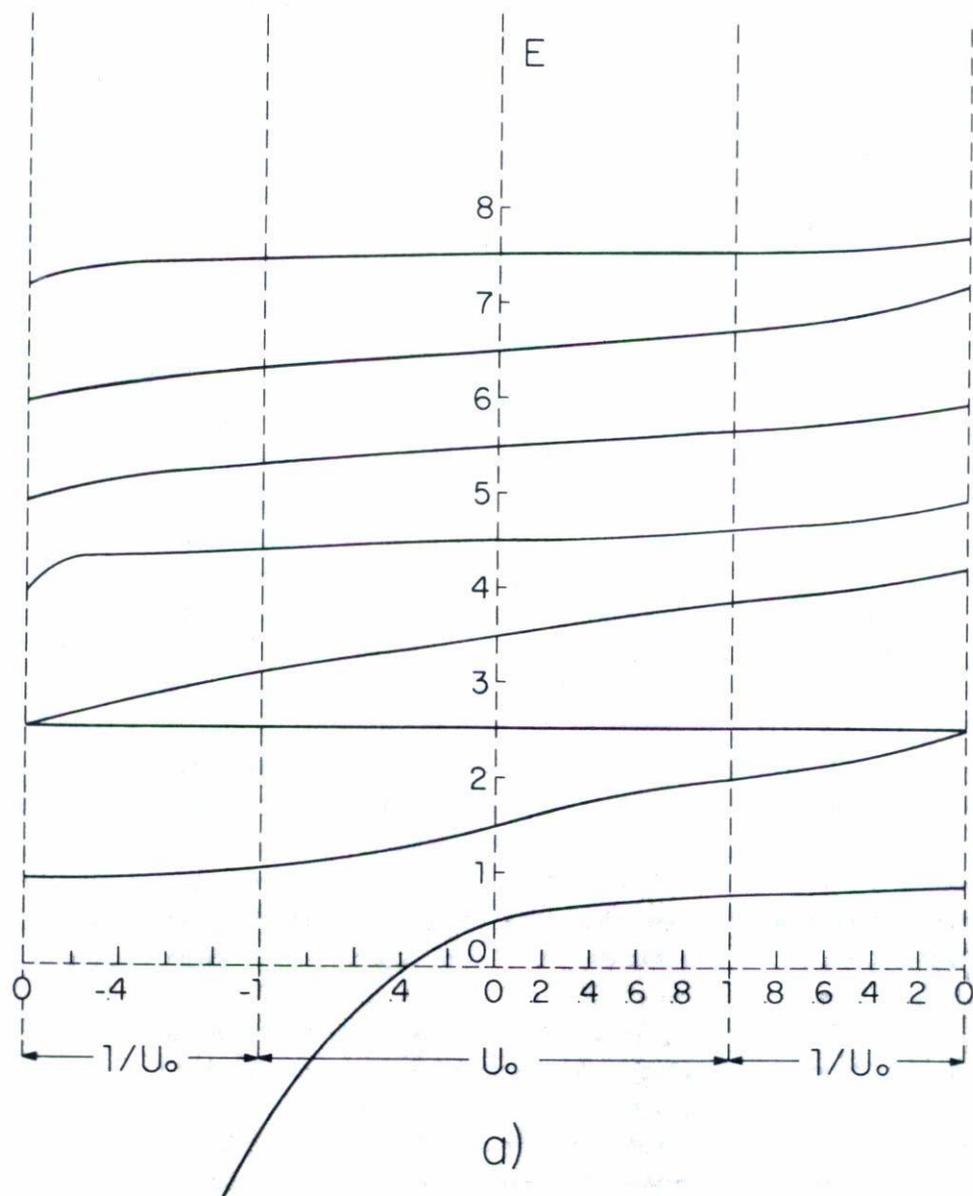
La Fig. 2 corresponde al oscilador armónico y los valores a) $x_0 = b$ y b) $x_0 = \sqrt{3}b$ coinciden con los nodos del segundo y tercer estados excitados, respectivamente. Correspondientemente, en cada figura las energías de los mismos aparecen como líneas horizontales, mientras que las energías de los demás estados muestran un crecimiento monotónico en función de la intensidad U_0 del potencial de función- δ . En a) el primer (tercer) estado excitado tiende a degenerarse con el segundo a medida que $U_0 \rightarrow +\infty (-\infty)$; y en b) el segundo (cuarto) estado excitado con el tercero para $U_0 \rightarrow +\infty (-\infty)$.

La Fig. 3 corresponde al potencial lineal y los valores a) $x_0 = 1.74984203 d$ y b) $x_0 = 3.18245242 d$ se han escogido de manera que coinciden con nodos del primer y segundo estados excitados, respectivamente. En cada figura las energías correspondientes aparecen como líneas horizontales, mientras que las energías de los demás estados son funciones crecientes de la intensidad U_0 del potencial de función- δ . En a) el estado base (segundo estado excitado) tiende a degenerarse con el primer estado excitado a medida que $U_0 \rightarrow +\infty (-\infty)$; y en b) el primer (tercer) estado excitado tiende a degenerarse con el segundo para $U_0 \rightarrow +\infty (-\infty)$.

Tanto en el caso del oscilador armónico como en el del potencial lineal no se presenta una coincidencia de nodos para diferentes estados, aparte de la del nodo en $x = 0$, y en consecuencia no se observa la multiplicidad de niveles de energía no afectados por la presencia del potencial de función- δ , Figs. 2 y 3, en contraste con el caso del pozo de potencial rectangular, Fig. 1, y con los potenciales simétricos de dos pozos⁽³⁾. Correspondientemente, tampoco se observa la multiplicidad de pares de niveles degenerados en los límites $U_0 \rightarrow \pm \infty$.

También es de interés analizar el efecto del potencial de función- δ sobre las funciones de onda del potencial original a medida que varía U_0 . La Fig. 4 ilustra la función del estado base del pozo de potencial rectangular para los valores a) $x_0 = L/6$ y b) $x_0 = L/4$, y diferentes valores de U_0 . La línea continua corresponde a $U_0 = 0$ y representa la función de onda cosenoidal del pozo de potencial rectangular por sí mismo. La línea de rayas y puntos corresponde a $U_0 > 0$ y está formada por las dos senoides de las Ecs. (7-) y (7+); la presencia de la barrera de potencial de función- δ tiene el efecto de aumentar la amplitud de probabilidad en la región izquierda con la consecuente reducción a la derecha. La línea de rayas corresponde a $E = 0$ y los valores a) $U_0 = -9\hbar^2/4mL$ y b) $U_0 = -8\hbar^2/3mL$ dados por la Ec. (12), y está formada por los segmentos rectilíneos de las Ecs. (11-) y (11+); la presencia del pozo de potencial de función- δ tiene el efecto de aumentar la amplitud de probabilidad en la vecindad del punto donde actúa. Por claridad, no incluimos las líneas correspondientes a energías negativas y $U_0 < 0$ que están formadas por las senoides hiperbólicas de las Ecs. (9-) y (9+). En todos los casos se puede verificar que las funciones de onda y sus derivadas a uno y otro lado de x_0 son consistentes con la Ec. (6) o sus equivalentes de acuerdo con el signo y valor de U_0 .

Para finalizar, se hace una descripción de la variación de la energía de un estado determinado cuando el potencial de función- δ de una intensidad dada se coloca en diferentes posiciones. Si partimos de la posición $x_0 = 0$, entonces los potenciales de las Ecs. (1) y (2) se reducen a los potenciales simétricos de dos pozos de la referencia 8. Los estados de paridad non no se ven afectados y los de paridad par aumentan (disminuyen) su energía si U_0 es positiva (negativa). Para el potencial de



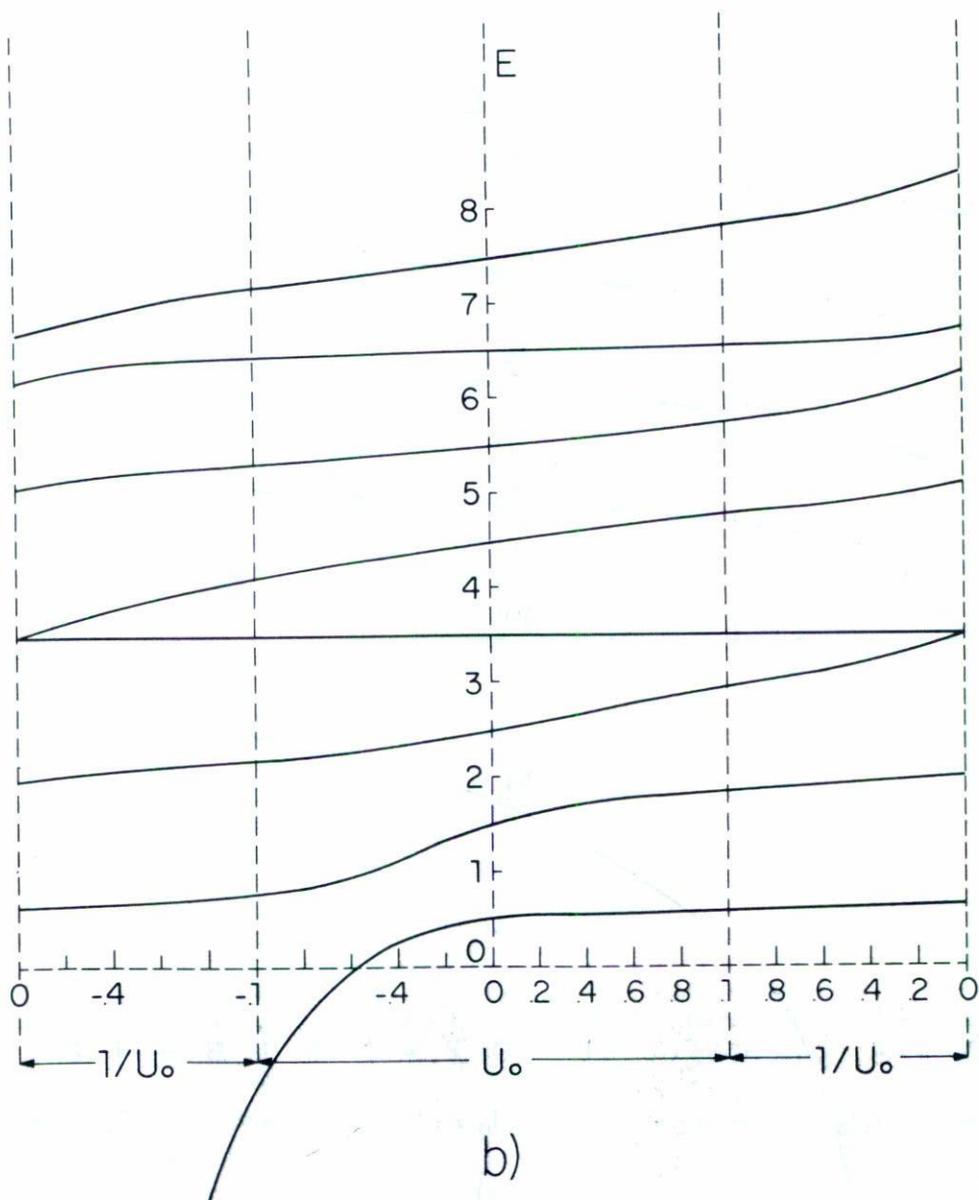
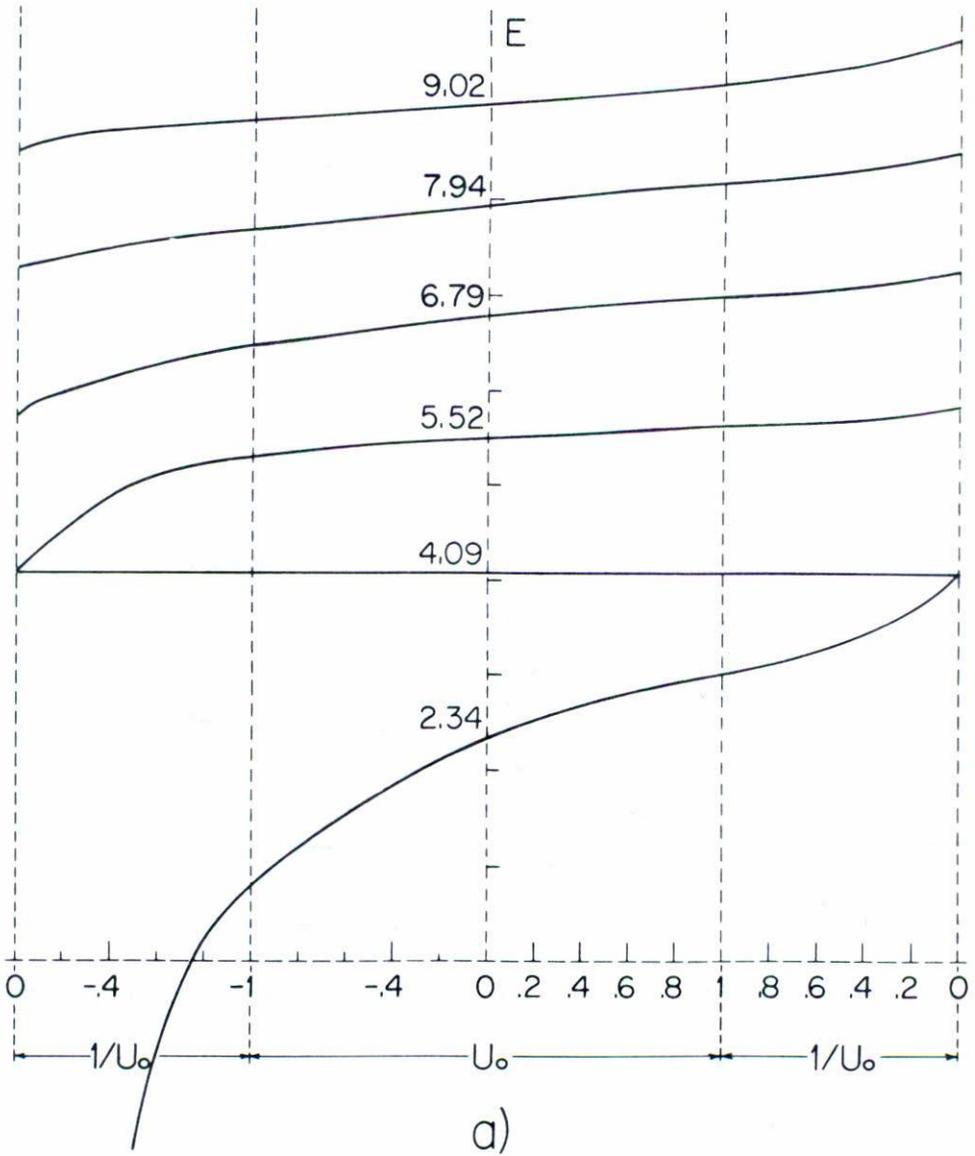


Fig. 2. Variación de los eigenvalores de la energía E , en unidades $\hbar\omega$, para diferentes intensidades U_0 , en unidades $\sqrt{2}\hbar^2/m\text{b}$, del potencial de función- δ superpuesto sobre el potencial de oscilador armónico en la posición a) $x_0 = b$ y b) $x_0 = \sqrt{3}b$.



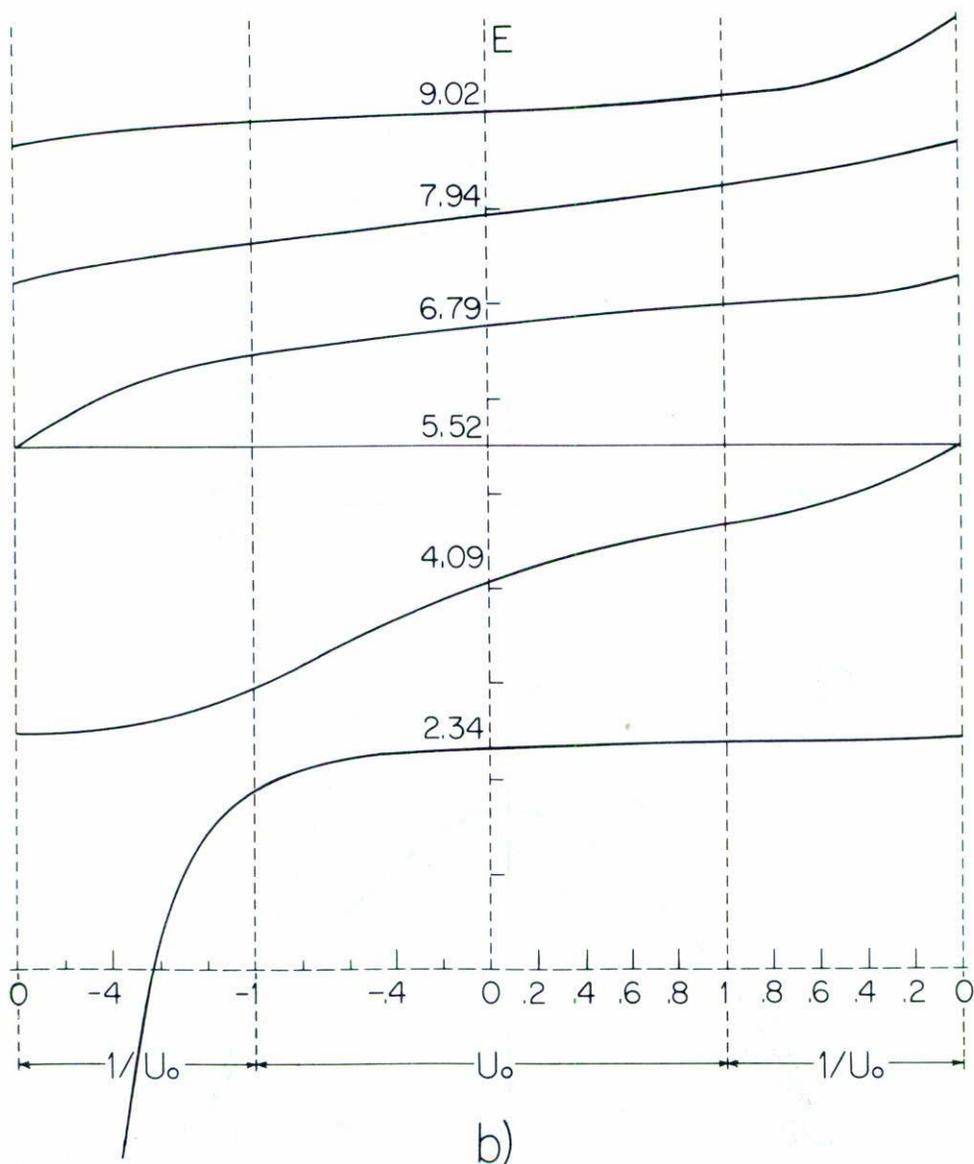


Fig. 3. Variación de los eigenvalores de la energía E , en unidades Fd , para diferentes intensidades U_0 , en unidades \hbar^2/md , del potencial de función- δ superpuesto sobre el potencial lineal en la posición a) $x_0 = 1.74984203$ d y b) $x_0 = 3.18245242$ d.

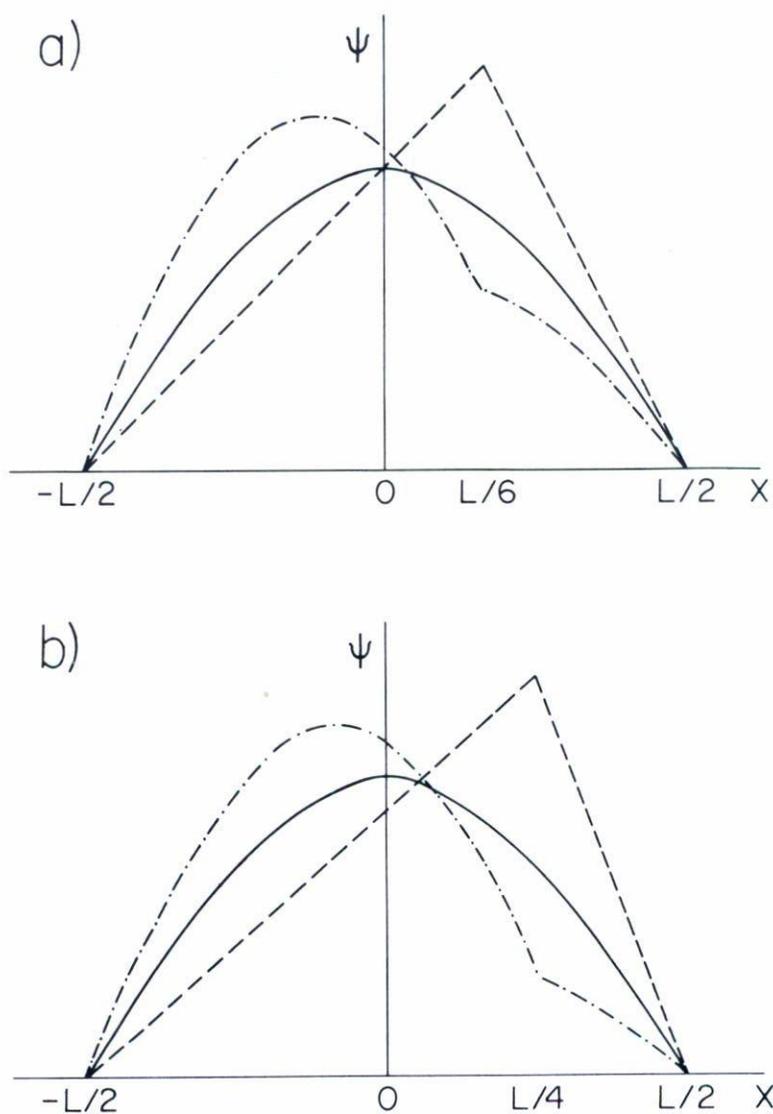


Fig. 4. Funciones de onda para el estado base del potencial de pozo rectangular con el potencial de función- δ superpuesto en la posición a) $x_0 = L/6$ y b) $x_0 = L/4$ con intensidades $U_0 > 0$ ----, $U_0 = 0$ ————— y $U_0 < 0$ - - - - .

la Ec. (3) los estados no se ven modificados puesto que sus funciones de onda se anulan en $x = 0$. A medida que x_0 toma valores pequeños distintos de cero, los estados que tenían un nodo en $x = 0$ se ven afectados por el potencial de función- δ , pero el efecto será pequeño porque la función de onda misma es pequeña en x_0 ; en comparación los estados que tenían un máximo o mínimo en $x = 0$ se ven afectados fuertemente aunque no tanto como cuando $x_0 = 0$. En general de acuerdo con la Ec. (6), para un valor dado de U_0 , un estado determinado se verá más o menos afectado según la magnitud de su función de onda en x_0 . En consecuencia, podemos afirmar que para los potenciales de las Ecs. (1) y (2) el estado base sufre su desplazamiento máximo de energía para $x_0 = 0$, y su desplazamiento decrece monótonicamente hacia cero a medida que x_0 tiende a $1) L/2$ y $2) \infty$, respectivamente. Para el potencial de la Ec. (3), la función de Airy correspondiente al estado base tiene el nodo en $x = 0$, alcanza su máximo en $x = 1.17d$ y tiende a cero asintóticamente; correspondientemente la energía del estado base se desplaza de manera creciente a medida que x_0 varía de 0 a $1.17d$ y el desplazamiento tiende a cero cuando x_0 sigue creciendo más allá de $1.17d$. Para los potenciales de las Ecs. (1) y (2) el primer estado excitado tiene un comportamiento cualitativo análogo al del estado base del potencial de la Ec.(3) que acabamos de describir. Para los potenciales de las Ecs. (1) y (2) conviene señalar que los niveles de energía ocupan las mismas posiciones para las posiciones $\pm x_0$ del potencial de función- δ , como se puede comprobar haciendo el cambio $x_0 \rightarrow -x_0$ en las Ecs. (8) y (14) respectivamente. En general, los desplazamientos de energía de un nivel determinado para diferentes posiciones del potencial de función- δ , x_0 , tienen magnitudes que siguen las variaciones de la función de onda a medida que varía x_0 .

REFERENCIAS

1. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York (1961) pp. 64-77.
2. I.R. Lapidus, *Am. J. Phys.* 38 (1970)905.
3. I.R. Lapidus, *Am. J. Phys.* 50 (1982) 563.
4. D. Park, *Introduction to Quantum Theory* McGraw-Hill, New York (1964) pp. 116-123.
5. P.A. Deutchman, *Am. J. Phys.* 39 (1971) 952.
6. C.U. Segre and J.D. Sullivan, *Am. J. Phys.* 44 (1976) 729.
7. E.A. Johnson and H.T. Williams, *Am. J. Phys.* 50 (1982) 239.
8. E. Ley-Koo and V.C. Aguilera-Navarro (por publicarse).

9. J. Maruhn and W. Greiner, *Z. Phys.* 251 (1972) 431.
10. M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, (1965).
11. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory*, Pergamon, London (1965) p. 73
12. V.C. Aguilera-Navarro, H. Iwamoto, E. Ley-Koo and A.H. Zimmerman, *Am. J. Phys.* 49 (1981) 648.