REVISTA COLOMBIANA DE FÍSICA, VOL. 34, No. 1, 2002

CONDICIONES DE FRONTERA PARA LA FUNCIÓN DE ONDA EN POTENCIALES DISCONTINUOS

Virgilio Niño y William Herrera
Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.

RESUMEN

La mayoría de libros de mecánica cuántica incluyen potenciales rectangulares para ilustrar ideas físicas sin necesidad de usar una matemática complicada. Varios argumentos son desarrollados en la literatura para mostrar que la función de onda y su primera derivada son continuas en el punto donde el potencial es discontinuo. En este trabajo mostramos que los argumentos usuales que se utilizan para demostrar lo anterior no son satisfactorios. Planteamos un método que permite demostrar la continuidad de la función de onda y de su primera derivada, que puede ser utilizado en cursos introductorios de mecánica cuántica.

INTRODUCCIÓN

La mayoría de libros introductorios de mecánica cuántica o física moderna [1-5] incluyen la solución de problemas unidimensionales para explicar propiedades generales de la función de onda. Usualmente en estos capítulos se incluyen potenciales rectangulares con discontinuidades finitas para ilustrar la física evitando complicaciones matemáticas. Algunos autores advierten que potenciales con discontinuidades bruscas no existen pero que pueden representar modelos adecuados en algunos casos.

Se exige que la función de onda y su primera derivada sean continuas en el punto de discontinuidad del potencial. En este trabajo examinamos algunos argumentos usuales que conllevan a las condiciones de frontera señaladas y explicamos por qué éstos no son adecuados, mostramos que el problema no es trivial y finalmente presentamos un argumento diferente, que es más aceptable.

ARGUMENTOS USUALES

Consideremos la ecuación de Schrödinger unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

en donde $V(x)$ es un potencial escalar que tiene una discontinuidad finita en $x = a$, es decir $V(x) = V_1(\mathrm{x})$ para $x < a$ y $V(x) = V_2(\mathrm{x})$ para $x > a$. Aclaramos que no se trata de que el potencial $V(x)$ que estamos utilizando esté describiendo aproximadamente un potencial continuo con una gran pendiente, para el cual obviamente $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ son continuas, sino que la ecuación (1) incluyendo la discontinuidad de $V(x)$ plantea un problema matemático que debe resolverse formalmente. Algunos autores [2] plantean incluso cualitativamente, que en $x = a$, $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ son continuas y $d^2\psi(x)/dx^2$ es discontinua. El problema no es tan trivial, nótese que si $d\psi(x)/dx$ y $d^2\psi(x)/dx^2$ existen en todo el espacio, entonces sería necesario que tanto $\psi(x)$ como $d\psi(x)/dx$ fuesen continuas, en consecuencia el término $V(x)\psi(x)$ sería discontinuo en $x = a$, lo que debería ser compensado con una discontinuidad similar en $d^2\psi(x)/dx^2$. Sin embargo, una derivada que existe en todo punto de un intervalo no puede tener una discontinuidad en algún punto del mismo intervalo, por lo tanto estrictamente $d^2\psi(x)/dx^2$ no existe en $x = a$ y por lo tanto la ecuación (1) no está definida en $x = a$. En consecuencia no existe una conexión entre las regiones $x < a$ y $x > a$ y por lo tanto no hay razón para exigir a priori la continuidad de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en $x = a$. Esto muestra que el problema no es trivial y que debe resolverse formalmente desde un punto de vista matemático.

El argumento más usado [1]-[4] en los textos para mostrar la continuidad de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ es el de integrar la ecuación (1) en un intervalo que contenga la discontinuidad, del potencial, es decir entre $a - \varepsilon$ y $a + \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$), obteniéndose

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx\big(V(x) - E\big)\psi(x) \tag{2}$$

Nótese que estrictamente $d^2\psi(x)/dx^2$ no existe en $x = a$ como señalamos en el párrafo anterior. A pesar de esto, muchos autores plantean que de (2) se obtiene:

$$\left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{x=a+\varepsilon} - \left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{x=a-\varepsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx\big(V(x) - E\big)\psi(x) \tag{3}$$

Finalmente, tomando $\varepsilon \to 0$ y del hecho de que la integral es finita se obtiene que $d\psi(x)/dx$ es continua en $x = a$. Sin embargo, es importante tener en cuenta que en el paso de la ecuación (2) a la ecuación (3) se usa el teorema fundamental del cálculo, el cual plantea[9] que el lado izquierdo de (2) es igual al lado izquierdo de (3) si y sólo si $d\psi(x)/dx$ es continua en el intervalo $[a - \varepsilon,\ a + \varepsilon]$; en otras palabras la demostración hace uso de lo que se quiere demostrar y por lo tanto no demuestra nada. Algunos autores [1] hacen variaciones de este método pero utilizan esencialmente la misma argumentación.

Otros textos [5] argumentan que para obtener una densidad de probabilidad finita se requiere que la función de onda sea finita en todo el espacio en que se esté considerando el problema y que por lo tanto de la ecuación (1) se obtiene que $d^2\psi(x)/dx^2$ es finita, de tal manera que $d\psi(x)/dx$ y $\psi(x)$ sean continuas, garantizándose además de esta manera la continuidad de la densidad de probabilidad y de corriente de probabilidad [6]-[8]. Respecto a esto señalamos que no existe un principio básico de la mecánica cuántica que plantee que la densidad de probabilidad sea finita, lo que se exige es que su integral sea finita, es decir que la función de onda sea cuadráticamente integrable.

Otras exigencias se refieren a que el valor esperado del momentum o de la energía cinética

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}dx \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx$$

Sean reales para todo $\psi(x)$, con lo que se obtiene

$$\psi^*(a+\varepsilon)\psi(a+\varepsilon) = \psi^*(a-\varepsilon)\psi(a-\varepsilon) \tag{4}$$

$$\psi^*(a+\varepsilon)\psi'(a+\varepsilon) - \psi^{*\prime}(a+\varepsilon)\psi(a+\varepsilon) = \psi^*(a-\varepsilon)\psi'(a-\varepsilon) - \psi^{*\prime}(a-\varepsilon)\psi(a-\varepsilon) \tag{5}$$

En donde las integrales se han efectuado por partes y evaluado entre $(-\infty, a-\varepsilon]$ y $[a+\varepsilon, \infty)$ y se ha exigido que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean cero en $\pm\infty$.

Las ecuaciones (4) y (5) plantean directamente la continuidad de la densidad de probabilidad y de la densidad de la corriente de probabilidad en $x = a$ cuando se toma $\varepsilon \to 0$. Las relaciones expresadas en (4) y (5) son equivalentes a

$$\psi(a+\varepsilon) = e^{ib}\psi(a-\varepsilon)\,; \quad \psi'(a+\varepsilon) = e^{ib}[\psi'(a-\varepsilon) - c\,\psi(a-\varepsilon)] \tag{6}$$

con b y c constantes reales. De tal manera que de la continuidad de las densidades de probabilidad y de corriente de probabilidad no se obtiene la continuidad de la función de onda y de su primera derivada.

Recordemos que para potenciales tipo delta de Dirac [1]-[3] se obtienen funciones de onda cuyas derivadas no son continuas, pero sin embargo la densidad de corriente de probabilidad si es continua. En forma similar [10] pueden existir situaciones con campos magnéticos involucrados en las que la función de onda es continua y su primera derivada es discontinua requiriéndose que $(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r})/c)\psi(\mathbf{r})$ sea continua.

UN ARGUMENTO DIFERENTE

Si bien es posible usar teoría de distribuciones interpretando la ecuación (1) como una distribución y exigiendo su existencia incluso en $x = a$, este tipo de argumento no es adecuado para estudiantes de un primer curso de mecánica cuántica. En lo que sigue hacemos una demostración relativamente simple.

Consideremos la transformada de Fourier de una función de onda $\psi(x)$, que pertenece al espacio de funciones cuadráticamente integrables L^2. Cada una de estas funciones tiene una transformada de Fourier de la forma

$$T\psi(x) = \phi(p) = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar}\psi(x) \tag{7}$$

$\phi(p)$ también pertenece a L^2. Cualquier operador $\hat{A}$ en el espacio de configuración, define un operador $\hat{B}$ en el espacio de momentum, mediante

$$\hat{B}\phi(p) = T(\hat{A}\psi(x)) = \frac{1}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar}\hat{A}\psi(x) \tag{8}$$

Si $\psi(x)$ pertenece a L^2 y suponiendo que $V(x)$ se ''comporta bien'' excepto en $x = a$ tenemos de la ecuación (1) que $d^2\psi(x)/dx^2$ también pertenece a L^2. Un aspecto importante de la funciones de onda que resuelven la ecuación de Schrödinger es que si $\hat{A} = -\hbar^2 d^2/dx^2 \Rightarrow \hat{B} = \hat{p}^2$. Usando (7) y $\hat{A} = -\hbar^2 d^2/dx^2$ tenemos para la ecuación (8)

$$\hat{B}\phi(p) = T(\hat{A}\psi(x)) = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{h}}\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \tag{9}$$

Para admitir la posibilidad de tener discontinuidades en $x = a$, integramos entre $(-\infty, a - \varepsilon]$ y $[a + \varepsilon, \infty)$, con $\varepsilon \to 0$. Realizando la integral en (9) por partes y utilizando las propiedades de una función de L^2 se obtiene

$$\hat{B}\phi(p) = \frac{\hbar^2}{\sqrt{h}}e^{-ipa/\hbar}[\psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon)] + i\frac{\hbar p}{\sqrt{h}}e^{-ipa/\hbar}[\psi(a+\varepsilon) - \psi(a-\varepsilon)] + p^2\phi(p)$$

Como $\hat{B} = \hat{p}^2$ obtenemos las ecuaciones de continuidad

$$\psi'(a+\varepsilon)=\psi'(a-\varepsilon) \text{ y } \psi(a+\varepsilon)=\psi(a-\varepsilon) \tag{10}$$

Lo que demuestra la continuidad de la función de onda y de su primera derivada en $x = a$ sin necesidad de asumir o suponer condiciones como las anteriores mencionadas.

CONCLUSIONES

Los argumentos usuales que se usan en la mayoría de los libros de mecánica cuántica o física moderna para justificar la continuidad de la función de onda y de su primera derivada en las discontinuidades de un potencial no son satisfactorios. Usando una transformada de Fourier entre el espacio de configuración y el espacio de momentum se ha demostrado que para funciones de onda cuadráticamente integrables, la función de onda y su primera derivada son continuas en la discontinuidad de un potencial. Esta demostración puede ser usada en cursos introductorios de mecánica cuántica o física moderna.

REFERENCIAS

[1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë. Mécanique Quantique I, Hermann (1977).

[2] L. I. Schiff. Quantum Mechanics 3rd edition. McGraw-Hill (1968).

[3] E. Merzbacher. Quantum Mechanics 3rd edition. John Wiley & sons (1998).

[4] A. Messiah. Quantum Mechanics. Vol. I. North Holland (1964).

[5] R. M. Eisberg. Fundamentals of Modern Physics. Wiley (1961).

[6] R. Seki. Am. J. Physics , **39**, 929 (1971).

[7] J. E. Draper. Am. J. Physics , **47**, 525 (1979).

[8] J. E. Draper. Am. J. Physics , **48**, 749 (1980).

[9] T. M. Apostol. Calculus Vol I. 2nd ed. Blaisdell Publ. Co. (1967).

[10] W. Pauli. General Principles of Quantum Mechanics , Springer (1980).