Aplicaciones de la Ec. Schrödinger 1D

Energía potencial constante

U constante $\Rightarrow$ $\Psi(x,t) = \Phi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$ (1)

con

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + U\,\Phi(x) = E\,\Phi(x) \qquad (2)$$

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\,\Phi(x) = 0 \qquad (3)$$

Como la energía cinética es $K = E - U$ (4), el momento lineal $p = \sqrt{2mK}$ (5) y el número de onda $k = \frac{p}{\hbar}$ (6), la ecuación (3) se escribe

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + k^2\,\Phi(x) = 0 \qquad (4).$$

Si $E > U$, la solución general de esta ecuación puede escribirse como

$$\Phi(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx} \qquad (5)$$

con $k = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}$ (6)

Si $E < U$

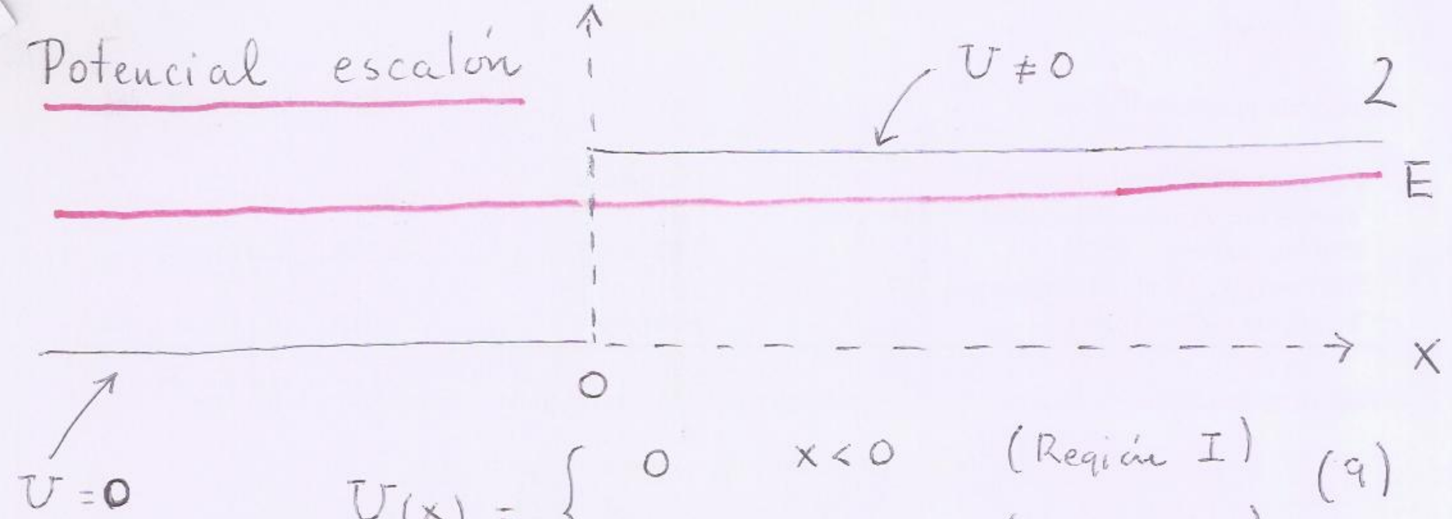
$$\Phi(x) = A\,e^{\kappa x} + B\,e^{-\kappa x} \qquad (7)$$

κ = letra griega kappa

con $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$ (8)

Potencial escalón

2



$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \quad \text{(Región I)} \\ U & x > 0 \quad \text{(Región II)} \end{cases} \qquad (9)$$

✓ De acuerdo al contenido de la página 1,

$$\Phi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (10)$$

$$\Phi_{II}(x) = C e^{+\chi x} + D e^{-\chi x} \quad ; \quad \chi = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \qquad (11)$$

✓ En $x \to -\infty$, $\Phi_1(x)$ es oscilatoria y por lo tanto no es infinita $\Rightarrow$ se comporta adecuadamente.

En $x \to \infty$, $\Phi_{II}(x) \to \infty$ a menos que $C = 0$.
Como $\Phi_{II}(x)$ debe ser finita, entonces $C = 0$ (12).

✓ La $\Phi(x)$ y $\frac{d\Phi(x)}{dx}$ deben ser contínuas en $x = 0$:

$$\Phi_I(x) \Big|_{x=0} = \Phi_{II}(x) \Big|_{x=0} \qquad (13)$$

$$\frac{d\Phi_1(x)}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{d\Phi_{II}(x)}{dx} \Big|_{x=0} \qquad (14)$$

$$(13) \Rightarrow \quad A + B = D \qquad (15)$$

$$ikA - ikB = -\kappa D \qquad (16)$$

Multiplicamos (15) por κ y sumamos la ecuación resultante miembro a miembro con la ecuación (16):

$$\kappa A + \kappa B + ikA - ikB = \kappa D - \kappa D = 0$$

$$\Rightarrow (\kappa + ik)A + (\kappa - ik)B = 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{B}{A} = -\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \qquad (17)$$

con $\quad k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad$ y $\quad \kappa = \dfrac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \qquad (18)$

Autofunción $\Phi_I(x)$:

$$\Phi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} = A e^{ikx} - A\left(\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}\right) e^{-ikx} \qquad (19)$$

Función de onda $\Psi_I(x,t)$

$$\Psi_I(x,t) = \Phi_I(x)\, e^{-iEt/\hbar} = A e^{i\left(kx - \frac{Et}{\hbar}\right)} - A\left(\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}\right) e^{-i\left(kx + \frac{Et}{\hbar}\right)} \qquad (20)$$

$$= \underline{\underline{A e^{i(kx - \omega t)}}} - \underline{\underline{A\left(\frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}\right) e^{-i(kx + \omega t)}}} \qquad (21)$$

Onda viajera en el sentido positivo del eje X con amplitud A

Onda incidente sobre la discontinuidad de U en $X = 0$

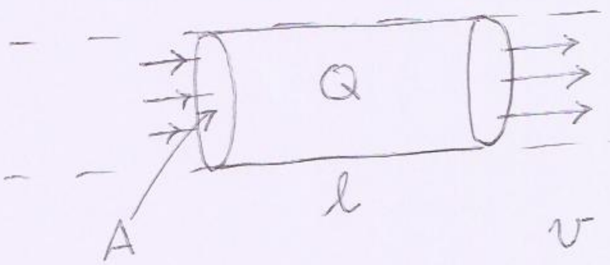
Onda viajera en el sentido negativo del eje X con amplitud $B = -A\left(\dfrac{\kappa + ik}{\kappa - ik}\right)$

Onda reflejada por la discontinuidad de U en $X = 0$

Coeficientes de reflexión y trasmisión

Recordatorio de Física III

Si por un conductor cilíndrico pasa una corriente eléctrica



Si la carga eléctrica Q atraviesar el área A en un tiempo $t = \frac{\ell}{v}$, siendo v la velocidad de los portadores de carga, entonces la densidad superficial de corriente $J = \frac{I}{A}$, donde I es la intensidad de corriente eléctrica, puede escribirse como

$$J = \frac{I}{A} = \frac{Q/t}{A}$$; y como $Q = \rho \,\mathrm{Vol} = \rho A \ell$, donde ρ es la densidad volumétrica de carga (C/m^3),

entonces

$$J = \frac{Q/t}{A} = \frac{\rho \,\mathrm{Vol}/t}{A} = \frac{\rho A \ell / t}{A} = \rho \frac{\ell}{t} = \rho v \qquad (22)$$

Nótese que ρ representa la cantidad de carga por unidad de volumen (C/m^3) y v es la velocidad de cada portador de carga.

En el problema mecánico-cuántico que estamos resolviendo, un haz o rayo de partículas que proviene de $x = -\infty$ (horror matemático pero tolerado por los físicos) se mueve a lo largo del eje x (hacia la derecha).

Si no existiese la discontinuidad de U en $x=0$, el haz se movería a lo largo del eje x sin ser perturbado. Debido a la discontinuidad de U en $x=0$, el haz de partículas experimenta reflexión en $x=0$. ¿Qué fracción o porcentaje del haz incidente se refleja?

Si tuviésemos que de N partículas que inciden en la discontinuidad $(x=0)$, N_R se reflejan y N_T se trasmiten, entonces podemos definir al coeficiente de reflexión R como la fracción de partículas que son reflejadas en $x=0$, esto es,

$$R = \frac{N_R}{N} \qquad (23).$$

Analogamente, el coeficiente de trasmisión puede escribirse como

$$T = \frac{N_T}{N} \qquad (24).$$

Es obvio que

$$R + T = 1 \qquad (25).$$

Por razones prácticas, es más conveniente definir los coeficientes R y T en función de flujos y no de número de partículas, esto es:

$$R = \frac{|J_R|}{|J_i|} \qquad (26)$$

$$T = \frac{|J_T|}{|J_i|} \qquad (27)$$

donde

$$J_R = \rho_R v_R \qquad (28)$$

$$J_T = \rho_T v_T \qquad (29)$$

$$J_i = \rho_i v_i \qquad (30)$$

En las ecuaciones anteriores, ρ_R representa el número de partículas reflejadas por unidad de volumen y v_R es la velocidad de las partículas reflejadas;
ρ_T representa el número de partículas trasmitidas por unidad de volumen y v_T es la velocidad de las partículas trasmitidas;
ρ_i es el número de partículas incidentes por unidad de volumen y v_i es la velocidad de las partículas incidentes.

En mecánica cuántica, si las partículas del haz incidente tuviesen carga eléctrica, por ejemplo si fuesen electrones, entonces la densidades volumétricas de carga para la parte incidente, reflejada y trasmitida del haz de partícula se escriben como

$$d_i = e\,|\psi_{inc}|^2 \quad (31),$$

$$d_R = e\,|\psi_{ref}|^2 \quad (32),$$

$$d_T = e\,|\psi_{tras}|^2 \quad (33),$$

donde e es la carga eléctrica.

La relación entre las ρ's de las ecuaciones (28), (29) y (30) con las d's de las ecuaciones (31), (32) y (33) es:

$$\rho = \frac{d}{e} \quad (34).$$

$$\Rightarrow \quad \rho_R = |\psi_{ref}|^2 \quad (35)$$

$$\rho_I = |\psi_{inc}|^2 \quad (36)$$

$$\rho_T = |\psi_{tras}|^2 \quad (37)$$

donde ψ_{inc} es la parte incidente de la función de onda presente en la región I (Ver ecuación (21))

ψ_{ref} es la parte reflejada de la función de onda presente en la región I (Ver ecuación (21))

ψ_{tras} corresponde a la onda trasmitida (Ver ecuación (11)

Finalmente obtenemos para el coeficiente de reflexión R :

$$R = \frac{|J_R|}{|J_i|} = \frac{\rho_R |v_R|}{\rho_i |v_i|} = \frac{|\psi_{ref}|^2 |v_R|}{|\psi_{inc}|^2 |v_i|} \qquad (38)$$

De la ecuación (21) vemos que la onda incidente $\psi_{inc} = A\, e^{i(kx-\omega t)}$ y la reflejada $\psi_{ref} = B\, e^{-i(kx+\omega t)}$ tienen la misma magnitud de velocidad $\frac{\omega}{k}$.

$$\Rightarrow \quad v_i = v_R \qquad (39)$$

$$\Rightarrow \quad R = \frac{|\psi_{ref}|^2}{|\psi_{inc}|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \qquad (40)$$

Pero por la ecuación (17) sabemos que

$$\frac{B}{A} = -\frac{\chi + ik}{\chi - ik} \quad \Rightarrow \quad \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|-\frac{\chi + ik}{\chi - ik}\right|^2$$

$$= \frac{(\chi + ik)(\chi - ik)}{(\chi - ik)(\chi + ik)} = 1$$

$$\Rightarrow \quad R = 1 \qquad (41)$$

Como $\quad R + T = 1 \quad \Rightarrow \quad T = 0 \qquad (42)$

La onda se refleja totalmente

En general, se puede demostrar

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\{\Psi^* \nabla \Psi\} \qquad (43)$$

Ejemplo : a) $\Psi_{inc} = A\, e^{i(kx-\omega t)}$

$$\nabla \Psi_{inc} = \frac{\partial \Psi_{inc}}{\partial x}\hat{i} = ikA\, e^{i(kx-\omega t)}\,\hat{i}$$

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left\{A^* e^{-i(kx-\omega t)}\, ikA\, e^{i(kx-\omega t)}\right\}\hat{i}$$

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\{A^*\, ik\, A\}\hat{i} = \frac{\hbar}{m} A^* k A\,\hat{i} = \frac{\hbar k}{m} A^* A\,\hat{i}$$

$$\vec{J}_i = \frac{\vec{P}}{m} |A|^2\,\hat{i} = \vec{v}\,|A|^2 \qquad (44)$$

b) $\Psi_{ref} = B\, e^{-i(kx+\omega t)}$

$$\nabla \Psi_{ref} = \frac{\partial \Psi_{ref}}{\partial x}\hat{i} = -ikB\, e^{-i(kx+\omega t)}\,\hat{i}$$

$$\vec{J}_{ref} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left\{B^* e^{i(kx+\omega t)}\,(-ik)\,B\, e^{-i(kx+\omega t)}\right\}\hat{i}$$

$$= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\{B^*(-ik)B\}\hat{i} = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2\,\hat{i} \qquad (45)$$

$$= -\vec{v}\,|B|^2$$

$$\left.\begin{matrix} a) \text{ y } b) \\ (44) \text{ ó } (45) \end{matrix}\right\} \Rightarrow \quad R = \frac{|\vec{J}_{ref}|}{|\vec{J}_{inc}|} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

Mismo resultado que el de la ecuación (40

c) $\Psi_{tras} = \Phi_{II}(x) = D e^{-\chi x}$

$$\vec{J}_{tras} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left\{ \Psi^*_{tras} \nabla \Psi_{tras} \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left\{ \underbrace{D^* e^{-\chi x} \frac{\partial}{\partial x}\left(D e^{-\chi x}\right)}_{\text{Real}} \hat{i} \right\} = 0$$

However:

$$|\Psi_{tras}|^2 = D D^* e^{-2\chi x} \neq 0$$