

Complemento N_{III}

ESTADOS NO LIGADOS DE UNA PARTICULA EN PRESENCIA DE UNA BARRERA O POZO DE POTENCIAL DE FORMA ARBITRARIA

1. Matriz de transmisión $M(k)$

- a. Definición
- b. Propiedades de $M(k)$

2. Coeficientes de reflexión y transmisión

3. Ejemplo

En el complemento M_{III}, mostramos que los estados ligados de una partícula colocada en un potencial $V(x)$ tienen energías negativas* y que ellos existen solamente si $V(x)$ es un potencial atractivo (un pozo de potencial que permite el movimiento confinado clásico). Tuvimos que desechar valores de energía positivos desde que ellos condujeron a funciones propias $\varphi_k(x)$ del Hamiltoniano H los cuales, en el infinito, se portaron como exponenciales $e^{+/-ikx}$ no integrables cuadráticamente. Sin embargo, vimos muy temprano en el capítulo I, que, superponiendo tales funciones linealmente, se pueden construir funciones de onda $\psi(x)$ cuadráticamente integrables (paquetes de onda) que por lo tanto representan el estado físico de una partícula. Es claro que, desde que los estados así obtenidos envuelven diversos valores de k (es decir, de energía) ellos ya no son estados estacionarios; por lo tanto la función de onda $\psi(x)$ evoluciona a través del tiempo, propagándose y llegando a deformarse. Sin embargo, el hecho de que $\psi(x)$ esta ya expandida en términos de las funciones propias $\varphi_k(x)$ nos habilita para calcular esta evolución muy simplemente [como hicimos, por ejemplo, en el complemento J_I, donde usamos las propiedades de la $\varphi_k(x)$ para calcular los coeficientes de reflexión y transmisión de una barrera de potencial, el retraso en la reflexión, etc]. Esto es porque, a pesar del hecho de que cada una de las $\varphi_k(x)$ solas no pueden representar un estado físico, es útil estudiar las funciones propias de energía positivas** de H , como hemos hecho ya, en el complemento H_I, para ciertos potenciales cuadrados.

En este complemento, estudiaremos de un modo general [confinándonos, no obstante, a problemas unidimensionales] el efecto de un potencial $V(x)$ en funciones propias de energía positivas $\varphi_k(x)$. No asumiremos nada acerca de la forma de $V(x)$, que puede presentar una o varias barreras, pozos, etc. excepto que $V(x)$ va a cero fuera de un intervalo finito $[x_1, x_2]$ del eje x . Mostraremos que, en todos los casos, el efecto de $V(x)$ sobre las funciones $\varphi_k(x)$ puede ser descrito por una matriz de 2×2 , $M(k)$, la cual posee un cierto número de propiedades generales. Obtendremos así varios resultados que son independientes de la forma del potencial $V(x)$ escogido. Por ejemplo, veremos que los coeficientes de reflexión y transmisión de una barrera (sea o no simétrica) son los mismos para una partícula viniendo desde la izquierda y para una partícula de la misma energía viniendo desde la derecha. Un objeto adicional de este complemento N_{III} es

* Recordar que escogimos el origen de energía para hacer $V(x)$ cero en el infinito.

** Podría también considerarse estudiar las funciones propias de energía negativas de H no integrables cuadráticamente (aquellas cuyas energías no pertenecen al espectro discreto obtenido en el complemento M_{III}). Sin embargo, estas funciones divergen muy rápidamente (exponencialmente) en el infinito, y no se pueden obtener funciones de onda cuadráticamente integrables superponiendo linealmente ellas.

servir como el punto de partida para los cálculos del complemento O_{III}, en el cual estudiamos las propiedades de una partícula en un potencial periódico $V(x)$.

1. Matriz de Transmisión $M(k)$

a. DEFINICION DE $M(k)$:

En un problema unidimensional, considerar un potencial $V(x)$ que es cero fuera del intervalo $[x_1, x_2]$ de longitud l , pero que varía de un modo arbitrario dentro de este intervalo (fig. 1). Escogemos el origen de x para estar en el medio del intervalo $[x_1, x_2]$, de modo de tener que $V(x)$ varíe solamente para $|x| < l/2$. La ecuación satisfecha por todas las funciones de onda $\varphi(x)$ asociadas con un estado estacionario de energía E es:

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \right\} \varphi(x) = 0 \quad (1)$$

En el resto de este complemento, escogeremos, para caracterizar la energía, el parámetro k dado por:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2)$$

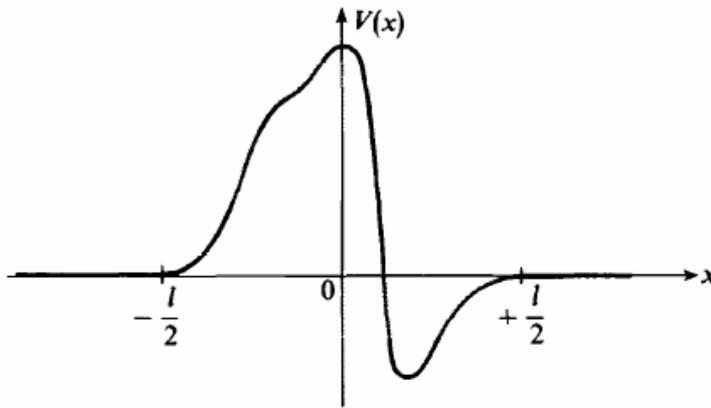


FIGURA 1

El potencial $V(x)$ bajo consideraciones diversas en un modo arbitrario dentro del intervalo $-l/2 \leq x \leq l/2$

En la región $x < -\frac{l}{2}$, la función e^{ikx} satisface la ecuación (1); llamemos $v_k(x)$ a la solución de esta ecuación que es idéntica a e^{ikx} para $x < -\frac{l}{2}$.

Cuando $x > +\frac{l}{2}$, $v_k(x)$ es necesariamente una combinación lineal de dos soluciones de (1) independientes, e^{ikx} y e^{-ikx} . Esto nos da:

$$\text{Si } x < -\frac{l}{2}: \quad v_k(x) = e^{ikx} \quad (3-a)$$

$$\text{Si } x > +\frac{l}{2}: \quad v_k(x) = F(k)e^{ikx} + G(k)e^{-ikx} \quad (3-b)$$

donde $F(x)$ y $G(x)$ son coeficientes que dependen de k , también como de la forma del potencial bajo estudio. Similarmente podemos introducir la solución $v'_k(x)$, que para $x = -l/2$, es igual a:

$$\text{Si } x < -\frac{l}{2}: \quad v'_k(x) = e^{-ikx} \quad (4-a)$$

$$\text{Si } x > +\frac{l}{2}: \quad v'_k(x) = F'(k)e^{ikx} + G'(k)e^{-ikx} \quad (4-b)$$

La solución $\varphi(x)$ más general de la ecuación (1) (de segundo orden en x), para un valor dado de E (es decir, k), es una combinación lineal de v_k y v'_k :

$$\varphi_k(x) = Av_k(x) + A'v'_k(x) \quad (5)$$

Las relaciones (3-a) y (4-a) implican que:

$$\text{Si } x < -\frac{l}{2}: \quad \varphi_k(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad (6-a)$$

mientras que las relaciones (3-b) y (4-b) producen:

$$\text{Si } x > +\frac{l}{2}: \quad \varphi_k(x) = \tilde{A}e^{ikx} + \tilde{A}'e^{-ikx} \quad (6-b)$$

con:

$$\tilde{A} = F(k)A + F'(k)A' \quad (7)$$

$$\tilde{A}' = G(k)A + G'(k)A'$$

Por definición, la matriz $M(k)$ es la matriz de 2x2:

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & F'(k) \\ G(k) & G'(k) \end{pmatrix} \quad (8)$$

lo cual nos lleva a escribir la relación (7) en la forma de matriz:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{A}' \end{pmatrix} = M(k) \begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} \quad (9)$$

$M(k)$ por lo tanto nos habilita para poder determinar, dado el comportamiento (6-a) de la función de onda a la izquierda del potencial, su comportamiento (6-b) a la derecha. Llamamos a $M(k)$ la “matriz de transmisión” del potencial.

COMENTARIO

La corriente con una función de onda $\varphi(x)$ es:

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\varphi^*(x) \frac{d\varphi}{dx} - \varphi(x) \frac{d\varphi^*}{dx} \right] \quad (10)$$

Diferenciando, encontramos:

$$\frac{d}{dx} J(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\varphi^*(x) \frac{d^2\varphi}{dx^2} - \varphi(x) \frac{d^2\varphi^*}{dx^2} \right] \quad (11)$$

Tomando (1) en cuenta, obtenemos:

$$\frac{d}{dx} J(x) = 0 \quad (12)$$

Por lo tanto, la corriente $J(x)$ asociada con un estado estacionario es la misma en todos los puntos del eje x . Note, además, que (12) es simplemente el análogo de la relación:

$$\text{div} \vec{J}(\vec{r}) = 0 \quad (13)$$

Lo cual es válido, según la relación (D-11) del capítulo III, para algún estado estacionario de una partícula moviéndose en el espacio tridimensional. De acuerdo con (12), la corriente $J_k(x)$ asociada con $\varphi_k(x)$ puede por lo tanto calcularse para alguna x , escogiendo entre la forma (6-a) o la forma (6-b) de $\varphi_k(x)$:

$$J_k(x) = \frac{\hbar k}{m} \left[|A|^2 - |A'|^2 \right] = \frac{\hbar k}{m} \left[|\tilde{A}|^2 - |\tilde{A}'|^2 \right] \quad (14)$$

b. PROPIEDADES DE M(k)

α Es fácil mostrar, usando el hecho de que la función $V(x)$ es real, que si $\varphi(x)$ es una solución de la ecuación (1), $\varphi^*(x)$ también. Ahora considerar la función $v_k^*(x)$, que es una solución de (1), la comparación de (3-a) y (4-a) muestra que es idéntica a $v_k'(x)$ cuando $x < -l/2$. Por lo tanto tenemos, para todo x :

$$v_k^*(x) = v_k'(x) \quad (15)$$

Substituyendo las relaciones (3-b) y (4-) en esta relación, obtenemos:

$$F^*(k) = G'(k) \quad (16)$$

$$G^*(k) = F'(k) \quad (17)$$

Se sigue que la matriz M(k) puede escribirse en la forma simplificada:

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & G^*(k) \\ G(k) & F^*(k) \end{pmatrix} \quad (18)$$

β Vimos arriba [cf. (12)] que la corriente de probabilidad $J(x)$ no depende de x para un estado estacionario. Debemos por lo tanto tener [cf. (14)]:

$$|A|^2 - |A'|^2 = |\tilde{A}|^2 - |\tilde{A}'|^2 \quad (19)$$

para algún A y A' . Ahora las relaciones (9) y (18) producen:

$$\begin{aligned} |\tilde{A}|^2 - |\tilde{A}'|^2 &= [F(k)A + G^*(k)A'] [F^*(k)A^* + G(k)A'^*] \\ &= [G(k)A + F^*(k)A'] [G^*(k)A^* + F(k)A'^*] \\ &= [|F(k)|^2 - |G(k)|^2] [|A|^2 - |A'|^2] \end{aligned} \quad (20)$$

La condición (19) es por lo tanto equivalente a:

$$|F(k)|^2 - |G(k)|^2 = \text{Det}M(k) = 1 \quad (21)$$

COMENTARIOS:

(i) No hemos hecho suposiciones particulares acerca de la forma del potencial. Si es par, es decir, si $V(x) = V(-x)$, la matriz $M(x)$ posee una propiedad adicional: puede mostrarse que $G(k)$ es un imaginario puro.

(ii) La relación (6) muestra que A y \tilde{A}' son los coeficientes de ondas planas “entrantes”, i.e. ondas asociadas con partículas llegando respectivamente desde $x = -\infty$ y $x = +\infty$ y moviéndose hacia la zona de influencia del potencial (partículas incidentes). Por otra parte, \tilde{A} y A' son los coeficientes correspondientes a ondas “salientes”, asociadas a partículas alejándose del potencial (partículas reflejadas o transmitidas). Es útil introducir la matriz S , la cual nos conduce a calcular la amplitud de las ondas salientes en términos de las ondas entrantes:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ A' \end{pmatrix} = S(k) \begin{pmatrix} A \\ \tilde{A}' \end{pmatrix} \quad (22)$$

$S(k)$ puede fácilmente expresarse en términos de los elementos de la matriz $M(k)$, como se muestra ahora. Las relaciones:

$$\tilde{A} = F(k)A + G^*(k)A' \quad (23-a)$$

$$\tilde{A}' = G(k)A + F^*(k)A' \quad (23-b)$$

implican que:

$$A' = \frac{1}{F^*(k)} [\tilde{A}' - G(k)A] \quad (24)$$

Sustituyendo esta relación en (23-a), obtenemos:

$$\tilde{A} = \frac{1}{F^*(k)} [(F(k)F^*(k) - G(k)G^*(k))A + G^*(k)\tilde{A}'] \quad (25)$$

Tomando (21) en cuenta; podemos entonces escribir la matriz $S(k)$:

$$S(k) = \frac{1}{F^*(k)} \begin{pmatrix} 1 & G^*(k) \\ -G(k) & 1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

Es fácil verificar, usando (21) otra vez, que:

$$S(k)S'(k) = S'(k)S(k) = 1 \quad (27)$$

$S(k)$ es por lo tanto unitaria. Esta matriz juega un papel importante en la teoría de la colisión; podríamos haber probado su propiedad unitaria desde que el operador de evolu

ción (cf. Complemento F_{III}), el cual simplemente expresa la conservación en el tiempo de la probabilidad total de encontrar a la partícula en alguna parte sobre el eje x (norma de la función de onda).

2. Coeficientes de transmisión y reflexión

Para calcular los coeficiente de reflexión y transmisión de una partícula que se encuentra en el potencial $V(x)$, uno debería construir (como en el complemento J_I) un paquete de ondas con las funciones propias de H que hemos justamente estudiado. Considerar, por ejemplo, una partícula incidente de energía E_i viniendo desde la izquierda. El paquete de ondas correspondiente es obtenido por superposición de funciones $\varphi_k(x)$, para lo cual establecemos $\tilde{A}'=0$, con coeficientes dados por una función $g(k)$ la cual tiene un pico marcado en la vecindad de $k = k_i = \sqrt{2mE_i / \hbar^2}$. No entraremos en estos cálculos en detalle aquí; ellos son análogos en toda forma a aquellos del complemento J_I. Ellos muestran que los coeficientes de transmisión y reflexión son iguales, respectivamente, a $|A'(k_i)/A(k_i)|^2$ y $|\tilde{A}(k_i)/A(k_i)|^2$.

Desde que $\tilde{A}'=0$, las relaciones (22) y (26) producen:

$$\tilde{A}(k) = \frac{1}{F^*(k)} A(k) \quad (28)$$

$$A'(k) = \frac{G(k)}{F^*(k)} A(k)$$

Los coeficientes de reflexión y transmisión son por lo tanto iguales a:

$$R_1(k_i) = \left| \frac{A'(k_i)}{A(k_i)} \right|^2 = \left| \frac{G(k_i)}{F(k_i)} \right|^2 \quad (29-a)$$

$$T_1(k_i) = \left| \frac{\tilde{A}(k_i)}{A(k_i)} \right|^2 = \left| \frac{1}{F(k_i)} \right|^2 \quad (29-b)$$

[es fácil verificar que la condición (21) asegura que $R_1(k_i) + T_1(k_i) = 1$].

Si ahora consideramos una partícula viniendo desde la derecha, debemos tomar $A=0$, lo cual da:

$$\tilde{A}(k) = \frac{G^*(k)}{F^*(k)} \tilde{A}'(k) \quad (30)$$

$$A'(k) = \frac{1}{F^*(k)} \tilde{A}'(k)$$

Los coeficientes de transmisión y reflexión ahora son iguales a:

$$T_2(k) = \left| \frac{A'(k)}{\tilde{A}'(k)} \right|^2 = \left| \frac{1}{F(k)} \right|^2 \quad (31-a)$$

$$R_2(k) = \left| \frac{\tilde{A}(k)}{\tilde{A}'(k)} \right|^2 = \left| \frac{G(k)}{F(k)} \right|^2 \quad (31-b)$$

La comparación de (29) y (31) muestra que $T_1(k) = T_2(k)$ y que $R_1(k) = R_2(k)$: para una energía dada, la transparencia de la barrera (ya sea simétrica o no) es por lo tanto siempre la misma para partículas viniendo desde la derecha y desde la izquierda. Además, de (21) tenemos:

$$|F(k)| \geq 1 \quad (32)$$

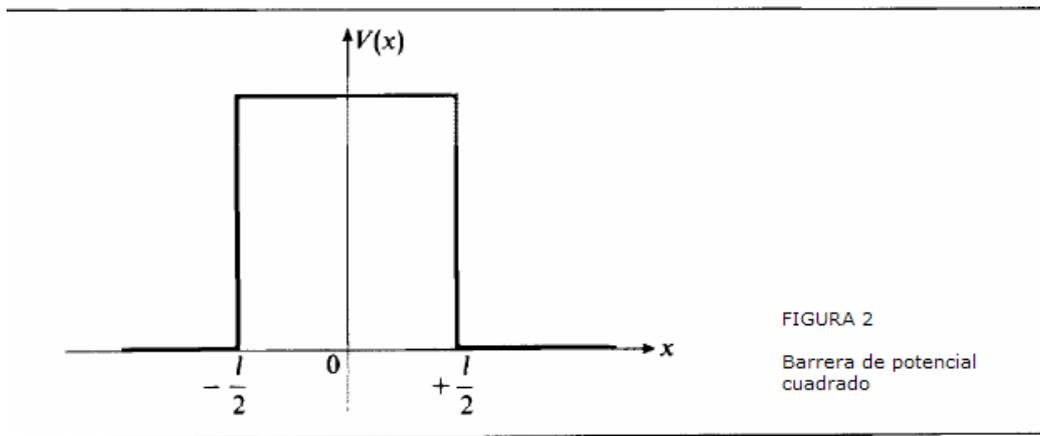
Cuando esta igualdad es realizada, el coeficiente de reflexión es cero y el coeficiente de transmisión es igual a 1 (resonancia). En cambio, la situación inversa no es posible: desde que (21) impone que $|F(k)| > |G(k)|$, uno nunca puede tener $T=0$ y $R=1$ [exceptúen el caso donde F y G tienden simultáneamente hacia infinito]. En realidad, tal semejante situación solamente ocurre para $k=0$. Para ver esto, dividir la función $v_k(x)$ definida en (3) por $F(k)$. Si $F(k)$ va al infinito, la función de onda será idénticamente cero sobre el lado derecho. Sin embargo, esto es imposible a menos que $k=0$ y $F=-G$.

3. Ejemplo

Retornemos a los potenciales cuadrados estudiados en §2-b del complemento H_I: en la región $-l/2 < x < +l/2$, $V(x)$ es igual a una constante V_0^* (ver figura 2, donde V_0 ha sido escogida para que sea positiva).

Primero, asumamos que E es más pequeña que V_0 , y establezcamos:

$$\rho = \sqrt{2m(V_0 - E) / \hbar^2} \quad (33)$$



Un cálculo elemental análogo a uno en el complemento H_I, da:

$$M(k) = \begin{pmatrix} \left[\cosh \rho l + i \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh \rho l \right] e^{-ikl} & -i \frac{k_0^2}{2k\rho} \sinh \rho l \\ i \frac{k_0^2}{2k\rho} \sinh \rho l & \left[\cosh \rho l - i \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh \rho l \right] e^{ikl} \end{pmatrix} \quad (34)$$

* De hecho, consideramos aquí una barrera la cual está desplazada relativo a la del complemento H_I, desde que estamos asumiéndola situada entre $x = -l/2$ y $x = +l/2$, en lugar de entre $x=0$ y $x=l$.

con:

$$k_o = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (35)$$

(V_0 es necesariamente positiva aquí, desde que hemos asumido $E < V_0$).

Si ahora asumimos que $E > V_0$, establecemos:

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \quad (36)$$

$$k_o = \sqrt{\varepsilon \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (37)$$

(donde $\varepsilon = +1$ si $V_0 > 0$ y -1 si $V_0 < 0$). Así obtenemos:

$$M(k) = \begin{pmatrix} \left[\cos k'l + i \frac{k^2 - k'^2}{2kk'} \operatorname{sen} k'l \right] e^{-ikl} & -i\varepsilon \frac{k_o^2}{2kk'} \operatorname{sen} k'l \\ i\varepsilon \frac{k_o^2}{2kk'} \operatorname{sen} k'l & \left[\cos k'l - i \frac{k^2 - k'^2}{2kk'} \operatorname{sen} k'l \right] e^{ikl} \end{pmatrix} \quad (38)$$

Es fácil verificar que las matrices $M(k)$ escritas en (34) y (38) satisfacen las relaciones (16), (17) y (21).

Referencias y sugerencias para lectura adicional:

Merzbacher (1.16) Capítulo 6, §§ 5, 6 y 8; ver también las referencias del complemento

M_{III}.