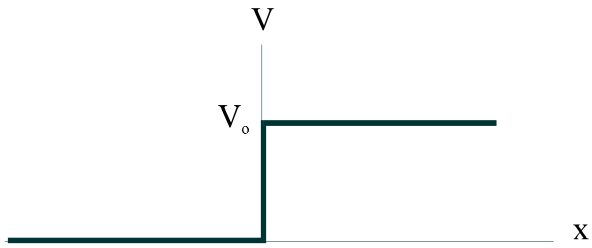
Introducción.

A lo largo de este tema vamos a analizar la solución de la ecuación de Schrödinger para potenciales unidimensionales sencillos. Esto nos va a permitir afianzar los conocimientos que se han adquirido en el tema anterior. La solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo nos va a permitir analizar la influencia de potenciales sencillos sobre un flujo de electrones con energía bien definida que incide sobre el potencial. Según vimos anteriormente, cuando la longitud de onda es pequeña comparada con la variación espacial del potencial los resultados que predice la mecánica cuántica deben ser similares a los que se obtienen de la mecánica clásica. En este tema analizaremos potenciales que varían muy bruscamente. De esta forma, aparecerán fenómenos de origen puramente cuántico y que no se pueden explicar mediante las teorías clásicas.

Potencial escalón.

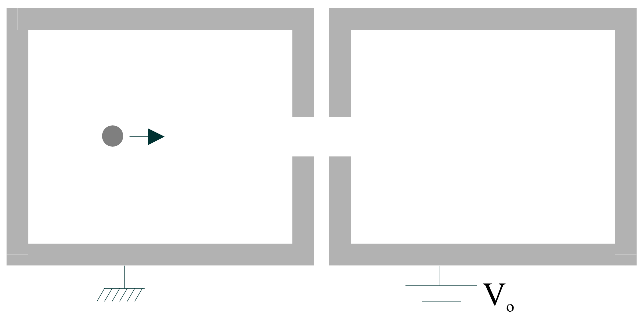
El primer ejemplo que vamos a analizar es el de un potencial escalón unidimensional, como por ejemplo el dado por la siguiente función:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } x > 0 \\ 0 & \text{para } x < 0 \end{cases}$$



Potencial escalón

Este potencial sufre una discontinuidad en el punto $x = 0$. Este potencial se puede obtener mediante el dispositivo que se muestra en la figura. Se trata de dos cajas conductoras huecas que se encuentran a potenciales distintos, de modo que una partícula cargada estará sometida más o menos a un potencial escalón. El campo eléctrico en la unión de las dos cajas será muy intenso.



Dispositivo para obtener un potencial escalón.

Podemos pensar qué ocurriría si un electrón se mueve dentro de este potencial desde el punto de vista clásico. Si el electrón tiene una energía inferior a V_0, no será capaz de pasar el escalón y rebotará con la misma velocidad que llevaba pero en dirección contraria. Por el contrario si su energía E es mayor que V_0, si será capaz de pasar el escalón. Su cantidad de movimiento una vez que ha atravesado el escalón será $p = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Vamos a ver ahora cual será la solución desde el punto de vista de la mecánica cuántica. Vamos a dividir el problema en dos partes. En primer lugar analizaremos el caso en que la energía del electrón es inferior a la de la barrera y en segundo lugar el caso en que sea mayor.

- Caso $E < V_0$.

Como hemos visto en el tema anterior, tenemos que resolver el problema de autovalores del Hamiltoniano, o lo que es lo mismo, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Para el caso de una dimensión esta ecuación es:

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

Esta ecuación nos dará las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger. Debido a que el potencial es discontinuo en $x = 0$ la derivada segunda de la función $\varphi(x)$ será discontinua, sin embargo, tanto la función como su primera derivada serán continuas. Podemos resolver la ecuación anterior en las dos regiones $x < 0$ y $x > 0$.

Para $x < 0$ la ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{\mathrm{I}}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_{\mathrm{I}}(x) = 0$$

donde hemos notado por $\varphi_I(x)$ a la solución en esta región.

Se puede comprobar que no existe ninguna solución satisfactoria para valores negativos de E, por tanto se verifica que $E > 0$. En este caso, la ecuación es como la de un oscilador armónico simple, de modo que sabemos directamente la solución, que será de la forma:

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$.

Por otro lado, en la región $x > 0$, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se reduce a:

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{\mathrm{II}}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_0\right)\varphi_{\mathrm{II}}(x) = 0$$

donde $\varphi_{II}(x)$ es la solución en esta región. Debido a que $E < V_0$, la solución a la ecuación anterior es una suma de exponenciales crecientes y decrecientes, es decir:

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = Be^{-\rho x} + B'e^{\rho x}$$

donde $\rho^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Está claro que la exponencial creciente no es aceptable ya que nos daría una probabilidad infinita de encontrar al electrón en el infinito, por tanto $B' = 0$. La solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es por tanto de la forma:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} & \text{para } x < 0 \\ \varphi_{\mathrm{II}}(x) = Be^{-\rho x} & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

Ahora tenemos que imponer la continuidad de la función $\varphi(x)$ y su derivada en el punto $x = 0$ que une las dos regiones:

$$\begin{aligned} A + A' &= B \\ ikA - ikA' &= -\rho B \end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones nos permiten escribir A' y B en función de A:

$$\begin{aligned} A' &= \frac{k - i\rho}{k + i\rho} A \\ B &= \frac{2k}{k + i\rho} A \end{aligned}$$

Las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger son por tanto de la forma:

$$\psi_E(x,t) = \begin{cases} Ae^{i(kx-\omega t)} + \frac{k-i\rho}{k+i\rho} Ae^{i(-kx-\omega t)} & \text{para } x < 0 \\ \frac{2k}{k+i\rho} Ae^{-\rho x - i\omega t} & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

donde lógicamente $\omega = E/\hbar$.

Debido a que no hay ninguna restricción sobre el valor de la energía, E puede cualquier valor positivo menor que V_o y por tanto el espectro de energías es continuo. La constante A nos permite imponer la condición de normalización para el caso de un espectro continuo. Las soluciones que hemos encontrado tienen una interpretación sencilla. En la región $x < 0$, la solución es una superposición de dos ondas: la primera viaja hacia la derecha y representa el movimiento de la partícula hacia el escalón de potencial, mientras que la segunda viaja a la izquierda y representa la reflexión del electrón en la barrera. Por otro lado, en la región $x > 0$, la onda está atenuada, de modo que al cabo de una cierta distancia la probabilidad de encontrar al electrón es nula. Nos encontramos con un resultado muy distinto al que predice la mecánica clásica y es que hay cierta probabilidad de encontrar al electrón en la región $x > 0$ que es una región clásicamente inaccesible.

Vamos a suponer que queremos analizar la influencia del potencial sobre un flujo de electrones de energía bien definida que incide sobre la barrera. Pues bien, las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger lo que nos permiten precisamente es resolver este problema (todavía no está claro que podamos extrapolar el resultado que hemos obtenido para la función de onda de una sola partícula a un flujo de partículas, aunque según veremos más adelante se puede extrapolar el resultado sin problema si todas las partículas vienen descritas por la misma función de onda).

En primer lugar, la onda incidente es $\psi_i(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$. Esta onda puede representar un flujo de electrones todos con energía y cantidad de movimiento bien definida, que viajan hacia el escalón de potencial. El flujo de electrones incidente vendrá dado por:

$$j_i = \Re\left(\psi_i^* \left(-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_i\right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = |A|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}} = |A|^2 v_{\mathrm{cl}}$$

y la densidad de electrones incidentes sería $|A|^2$. Por tanto, los electrones incidentes viajan con la velocidad clásica.

Por otro lado, la onda reflejada es $\psi_r(x,t) = \frac{k-i\rho}{k+i\rho} A e^{i(-kx-\omega t)}$ y representará por tanto el flujo de electrones reflejados en el escalón. El coeficiente que multiplica a la amplitud A es complejo y por tanto, existe un desfase entre la onda incidente y la reflejada. Este desfase se debe a que la partícula pasa algún tiempo en el interior del escalón. Podemos calcular el flujo de electrones reflejados de la misma forma

$$j_r = \Re\left(\psi_r^* \left(-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_r\right) = -|A|^2 \frac{\hbar k}{m} = -|A|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}} = -|A|^2 v_{\rm cl}$$

Por tanto, el flujo de electrones reflejado coincide con el flujo de electrones incidentes y todos los electrones son reflejados por el escalón, tal como ocurre con la teoría clásica. La velocidad de los electrones reflejados coincide con la velocidad de electrones incidentes.

Por último, para la región $x > 0$ la función de onda es $\psi_t(x,t) = \frac{2k}{k+i\rho} A e^{-\rho x - i\omega t}$. Se puede conprobar que el flujo de electrones en esta región es nulo y por tanto, aunque hay cierta probabilidad de encontrar electrones en esta región es distinta de cero, todos los electrones que entran salen dando un valor neto del flujo nulo (en la región $x < 0$ el flujo neto también es cero). La probabilidad de encontrar un electrón en esta región entre x y $x + dx$ viene dada por:

$$\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = \frac{4k^2}{k^2+\rho^2} |A|^2 e^{-2\rho x} dx$$

La distancia característica de penetración viene dada por

$$l = \frac{1}{2\rho} = \frac{\hbar}{\sqrt{4m(E-V_o)}}$$

Cuando $\hbar \to 0$ o bien cuando la masa es grande (por ejemplo para una partícula macroscópica) la distancia de penetración tiende a cero. Asímismo, en este caso, la probabilidad de encontrar electrones en la región clásicamente prohibida tiende a cero en el caso límite $\hbar \to 0$ (o bien cuando la masa se hace grande). Por tanto, en este límite se recuperan los resultados de la teoría clásica.

Finalmente vamos a presentar un resultado que utilizaremos más adelante. En el límite en que $V_o \to \infty$, la solución tiende a

$$\psi_E(x,t) = \begin{cases} Ae^{i(kx-\omega t)} - Ae^{i(-kx-\omega t)} & \text{para } x < 0 \\ 0 & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

Lógicamente la probabilidad de encontrar a la partícula en la región $x > 0$ es nula en este caso y la función de onda se anula en esta región. Este resultado lo utilizaremos más adelante al estudiar el pozo infinito de potencial.

- Caso $E > V_0$.

Vamos a estudiar ahora el caso en que la energía del electrón incidente es mayor que la energía del escalón. En la región $x < 0$ la solución es igual al caso anterior:

$$\varphi_{\rm I}(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

donde de nuevo $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Por otro lado en la región $x > 0$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se reduce a:

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{\rm II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_0\right)\varphi_{\rm II}(x) = 0$$

En este caso, las soluciones en esta región son también oscilatorias, es decir:

$$\varphi_{\rm II}(x) = Be^{ik'x} + B'e^{-ik'x}$$

donde $k'^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Si pretendemos analizar qué ocurre con un flujo de electrones que incide sobre el escalón de potencial desde la izquierda el coeficiente B' debe ser nulo, ya que en la región $x > 0$ no existe ninguna variación del potencial que pueda producir una reflexión de electrones. Por tanto, nos vamos a limitar a estudiar el caso en que $B' = 0$. Tenemos que imponer a continuación la continuidad de la función $\varphi(x)$ y su derivada en el punto $x = 0$. Estas dos condiciones se reducen a las siguientes dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} A + A' &= B \\ ikA - ikA' &= ik'B \end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones nos permiten obtener A' y B en función de A. Resolviendo las ecuaciones anteriores obtenemos que:

$$\begin{aligned} A' &= \frac{k-k'}{k+k'}A \\ B &= \frac{2k}{k+k'}A \end{aligned}$$

Por tanto, las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger son de la forma:

$$\psi_E(x,t) = \begin{cases} Ae^{i(kx-\omega t)} + \frac{k-k'}{k+k'}Ae^{i(-kx-\omega t)} & \text{para } x < 0 \\ \frac{2k}{k+k'}Ae^{i(k'x-\omega t)} & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

Podemos interpretar de nuevo las soluciones como un flujo de electrones. En la región $x < 0$ tenemos una superposición de dos ondas una que representa los electrones incidentes y otra los electrones reflejados. Por otro lado, en la región $x > 0$ tenemos una onda que viaja hacia la derecha y que representa los electrones transmitidos, es decir, los electrones que son capaces de atravesar el escalón. Como no hay ninguna restrición sobre el valor de la energía el espectro de energías es continuo y la energía puede tomar cualquier valor mayor que V_0. Vamos a analizar cada una de las funciones de onda que aparecen en la solución para una valor particular de E.

En el flujo de electrones incidentes está representado por la función $\psi_i(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$. El flujo de electrones incidentes es por tanto: $j_i = |A|^2\,\frac{\hbar k}{m} = |A|^2\sqrt{\frac{2E}{m}} = |A|^2\,v_{\rm cl}$.

Por otro lado, el flujo de electrones reflejados por el escalón viene representado por la función $\psi_r(x,t) = \frac{k-k'}{k+k'} A e^{i(kx-\omega t)}$. Podemos calcular el flujo de electrones como siempre:

$$j_r = \Re\left(\psi_r^* \left(-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_r\right) = -\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = -\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 |A|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

En este caso, no todos los electrones son reflejados por el escalón. Vamos a definir el coeficiente de reflexión como la fracción entre el número de electrones reflejados y el número de electrones incidente, y viene dado por:

$$R = -\frac{j_r}{j_i} = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 = 1 - \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{\left(\sqrt{E}-\sqrt{E-V_0}\right)^2}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}\right)^2}$$

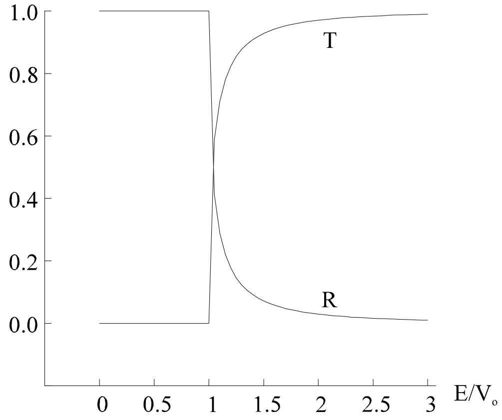
Por último, el flujo de electrones transmitidos, viene representado por la función $\psi_t(x,t) = \frac{2k}{k+k'} A e^{i(k'x-\omega t)}$. Podemos calcular el flujo de electrones transmitidos, obteniendo el siguiente resultado:

$$j_t = \frac{4k^2}{(k+k')^2} |A|^2 \frac{\hbar k'}{m} = \frac{4k^2}{(k+k')^2} |A|^2 \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$$

Los electrones en la región $x > 0$ viajan con una velocidad igual a $\sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$, resultado que coincide con la teoría clásica. Sin embargo, según podemos apreciar, no todos los electrones son capaces de atravesar el escalón de potencial, ya que parte de los electrones son reflejados. Este resultado, que se puede comprobar experimentalmente que es correcto, no lo puede predecir la teoría clásica. Vamos a definir el coeficiente de transmisión como la fracción entre el número de electrones transmitidos y el número de electrones incidentes, y que viene dado por la expresión:

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4\sqrt{E(E-V_0)}}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}\right)^2}$$

Es evidente que se verifica la condición $R + T = 1$, ya que los electrones incidentes o bien son reflejados o bien son transmitidos. Podemos ver que cuando la energía de los electrones incidentes es mucho mayor que la energía de la barrera, todos los electrones son transmitidos, tal como ocurre en la teoría clásica. En la siguiente figura se puede ver una representación de los coeficientes de transmisión y reflexión en función de la energía.



Coeficientes de transmisión y reflexión para un escalón de potencial.

Por último, decir que se puede estudiar la evolución de un paquete de ondas superponiendo las soluciones que hemos obtenido para distintos valores de E.