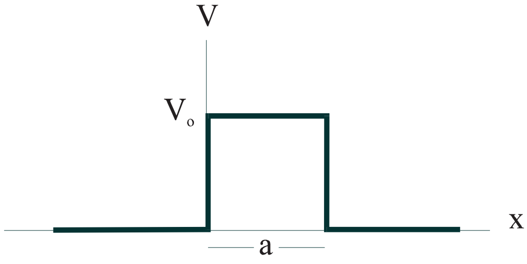
Cálculo de la matriz de propagación. Coeficientes de transmisión. Estados ligados.

En este apartado vamos a ver algunos ejemplos de cómo se puede calcular la matriz de propagación y de cómo se puede utilizar la matriz de propagación, tanto para calcular coeficientes de transmisión como los niveles de energía de estados ligados.

Barrera de potencial.

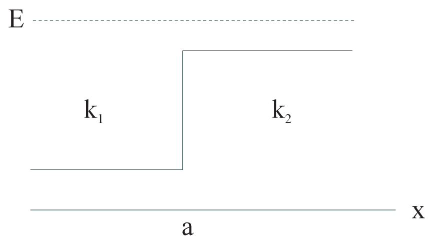
El primer caso que vamos a analizar es el de la barrera de potencial, por ser un potencial que ya hemos estudiado en un tema anterior



Barrera de potencial.

Vamos a suponer en primer lugar que la energía de las partículas incidentes es mayor que el potencial de la barrera, es decir que $E > V_o$. Vamos a ver cual es la matriz de propagación que corresponde a una discontinuidad del potencial en un punto determinado $x = a$, de modo que a la izquierda el número de ondas valga k_1 y a la derecha k_2. Las soluciones a cada lado serán:

$$\begin{aligned} \psi_I &= \frac{1}{\sqrt{k_1}}\left(Ae^{ik_1(x-a)} + Be^{-ik_1(x-a)}\right) \\ \psi_I &= \frac{1}{\sqrt{k_2}}\left(Ce^{ik_2(x-a)} + De^{-ik_2(x-a)}\right) \end{aligned}$$



Tenemos que imponer la condición de continuidad tanto para la función de onda como para su primera derivada en el punto $x = a$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{k_1}}(A+B) &= \frac{1}{\sqrt{k_2}}(C+D) \\ \sqrt{k_1}(A-B) &= \sqrt{k_2}(C-D) \end{aligned}$$

Podemos resolver este sistema y encontrar las amplitudes A y B en función de las amplitudes C y D:

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2\sqrt{k_1 k_2}}\left[(k_1+k_2)\,C + (k_1-k_2)\,D\right] \\ B &= \frac{1}{2\sqrt{k_1 k_2}}\left[(k_1-k_2)\,C + (k_1+k_2)\,D\right] \end{aligned}$$

De modo que la matriz de propagación para la discontinuidad vale:

$$\frac{1}{2\sqrt{k_1 k_2}}\begin{pmatrix} k_1+k_2 & k_1-k_2 \\ k_1-k_2 & k_1+k_2 \end{pmatrix}$$

Vamos ahora a combinar las matrices correspondientes a las dos discontinuidades que aparecen en la barrera de potencial con la propagación libre que existe entre las dos discontinuidades. Si notamos los números de onda de la siguiente forma:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad y \qquad k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_o)}{\hbar^2}}$$

la matriz de propagación total será:

$$\hat{P} = \frac{1}{2\sqrt{kk'}}\begin{pmatrix} k+k' & k-k' \\ k-k' & k+k' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-ik'a} & 0 \\ 0 & e^{ik'a} \end{pmatrix}\frac{1}{2\sqrt{kk'}} \begin{matrix} k+k' & -(k-k') \\ -(k-k') & k+k' \end{matrix}$$

Vamos a multiplicar las matrices:

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \frac{1}{4kk'}\begin{pmatrix} k+k' & k-k' \\ k-k' & k+k' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} (k+k')e^{-ik'a} & -(k-k')e^{-ik'a} \\ -(k-k')e^{ik'a} & (k+k')e^{ik'a} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{4kk'}\begin{pmatrix} (k+k')^2\, e^{-ik'a} - (k-k')^2 e^{ik'a} & -(k^2-k'^2)e^{-ik'a} + (k^2-k'^2)e^{ik'a} \\ (k^2-k'^2)e^{-ik'a} - (k^2-k'^2)e^{ik'a} & -(k-k')^2\, e^{-ik'a} + (k+k')^2 e^{ik'a} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

La matriz de propagación se puede simplificar si desarrollamos las exponenciales como funciones trigonométricas. El resultado final es el siguiente:

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \cos k'a - i\dfrac{k^2+k'^2}{2kk'}\sin k'a & i\dfrac{k^2-k'^2}{2kk'}\sin k'a \\ -i\dfrac{k^2-k'^2}{2kk'}\sin k'a & \cos k'a + i\dfrac{k^2+k'^2}{2kk'}\sin k'a \end{pmatrix}$$

Vamos a ver ahora cómo podemos obtener el coeficiente de transmisión a través de la barrera. El coeficiente de transmisión viene dado por la fracción entre la corriente incidente y transmitida en el caso en que $D = 0$:

$$T = \left(\frac{j_{II}^+}{j_I^+}\right)_{D=0} = \left(\frac{|C|^2}{|A|^2}\right)_{D=0} = \frac{1}{|P_{11}|^2}$$

Por tanto el coeficiente de transmisión sólo depende del coeficiente P_{11}. De la matriz de propagación que hemos calculado se obtiene directamente que:

$$\begin{aligned} |P_{11}| &= \cos^2 k'a + \left(\frac{k^2+k'^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2 k'a = 1 + \left(\frac{(k^2+k'^2)^2}{4k^2k'^2} - 1\right)\sin^2 k'a = \\ &= 1 + \frac{(k^2-k'^2)^2}{4k^2k'^2}\sin^2 k'a \end{aligned}$$

Por tanto:

$$T = \frac{4k^2k'^2}{4k^2k'^2 + (k^2-k'^2)^2\sin^2 k'a}$$

que es el resultado que obtuvimos en un tema anterior.

Para el caso en que $E < V_o$ hay que sustituir en la zona de la barrera k por $i\rho$, donde $\rho = \sqrt{\dfrac{2m(V_o-E)}{\hbar^2}}$.

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \cosh\rho a - i\dfrac{k^2-\rho^2}{2k\rho}\sinh\rho a & i\dfrac{k^2+\rho^2}{2k\rho}\sinh\rho a \\ -i\dfrac{k^2+\rho^2}{2k\rho}\sinh\rho a & \cosh\rho a + i\dfrac{k^2-\rho^2}{2k\rho}\sinh\rho a \end{pmatrix}$$

El coeficiente de transmisión se calcula de la misma forma dando como resultado:

$$T = \frac{1}{|P_{11}|^2} = \frac{4k^2\rho^2}{4k^2\rho^2 + (k^2+\rho^2)^2\sinh^2\rho a}$$

Potencial tipo delta de Dirac.

A partir de la matriz de propagación anterior podemos calcular un caso límite y es el de un potencial tipo delta de Dirac. Supongamos que el potencial vale $V(x) = \alpha\delta(x)$. Este potencial se puede obtener como un caso límite de la barrera de potencial. Este límite es:

$$V_o \to \infty, a \to 0 \quad \text{y} \quad V_o a \to \alpha$$

Realizando este límite los distintos términos que aparecen en la matriz de propagación se comportan de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \cosh\rho a &\to 1 \\ -i\frac{k^2-\rho^2}{2k\rho}\sinh\rho a &\simeq i\frac{\rho}{2k}\sinh\rho a \to i\frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \end{aligned}$$

Por tanto la matriz de propagación será:

$$\hat{P}_{\delta\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 + i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} & i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} \\ -i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} & 1 - i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} \end{pmatrix}$$

El coeficiente de transmisión para el potencial delta vale:

$$T_{\delta\uparrow} = \frac{1}{|P_{11}|^2} = \frac{1}{1+\dfrac{m^2\alpha^2}{\hbar^4 k^2}} = \frac{1}{1+\dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}$$

Por último, para un potencial de la forma $V(x) = -\alpha\delta(x)$ la matriz de propagación será:

$$\hat{P}_{\delta\downarrow} = \begin{pmatrix} 1-i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} & -i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} \\ i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} & 1+i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 k} \end{pmatrix}$$

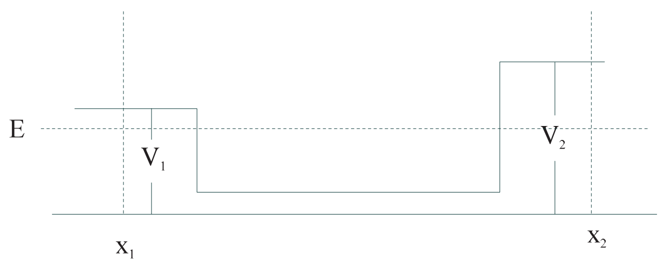
El coeficiente de transmisión vale exactamente igual que en el caso anterior.

Las matrices de propagación que hemos estudiado hasta el momento permiten obtener, combinándolas adecuadamente, la matriz de propagación de cualquier potencial escalonado. Lo único que hay que hacer es dividir el problema en tramos e ir multiplicando las matrices correspondientes a cada uno de los tramos.

Estamos viendo que el coeficiente P_{11} de la matriz de propagación es de gran utilidad ya que permite calcular fácilmente coeficientes de transmisión. Vamos a ver a continuación que también permite obtener los niveles de energía de los estados ligados de un potencial.

Estados ligados.

Vamos a considerar ahora el caso en el que la energía es menor que el potencial tanto para puntos a la izquierda de la región en la que varía el potencial como a la derecha. En este caso el número de ondas tanto a la izquierda como a la derecha será un número imaginario puro.



Vamos a escribir como será la solución en las regiones izquierda y derecha:

$$\begin{aligned} \psi_I &= \frac{1}{\sqrt{i\rho_1}}\left(Ae^{-\rho_1(x-x_1)} + Be^{\rho_1(x-x_1)}\right) \\ \psi_{II} &= \frac{1}{\sqrt{i\rho_2}}\left(Ce^{-\rho_2(x-x_2)} + De^{\rho_2(x-x_2)}\right) \end{aligned}$$

donde $\rho_1 = \sqrt{\dfrac{2m(V_1-E)}{\hbar^2}}$ y $\rho_2 = \sqrt{\dfrac{2m(V_2-E)}{\hbar^2}}$

Para que la función de onda tienda a cero en $x \to \pm\infty$, lógicamente se tiene que verificar que $A = D = 0$. Por tanto, la función de onda evanescente tanto a la izquierda como a la derecha estará representada mediante las siguientes matrices:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B \end{pmatrix}_{x_1} \qquad \begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix}_{x_2}$$

Si estas dos matrices están conectadas mediante la matriz de propagación se verificará que:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11}C \\ P_{21}C \end{pmatrix}$$

Por tanto se debe cumplir que $P_{11} = 0$. Como el coeficiente P_{11} depende de la energía E esta condición será la que nos indique las posibles energías de los estados estacionarios. Lógicamente los estados estacionarios en este caso corresponden a estados ligados y las energías posibles formarán un conjunto discreto de valores. A continuación veremos dos ejemplos sobre el cálculo de las energías posibles utilizando la matriz de propagación.

Vamos a comenzar analizando el caso del potencial tipo delta de Dirac. Supongamos una partícula sometida a un potencial de la forma $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Si la energía se hace negativa el número de ondas tanto a la izquierda como a la derecha se hace imaginario puro. En este caso, en lugar de utilizar el parámetro k conviene como siempre utilizar un parámetro real ρ de modo que $k = i\rho$ y $\rho = \sqrt{\dfrac{2m\,|E|}{\hbar^2}}$. En este caso la matriz de propagación en función de ρ será:

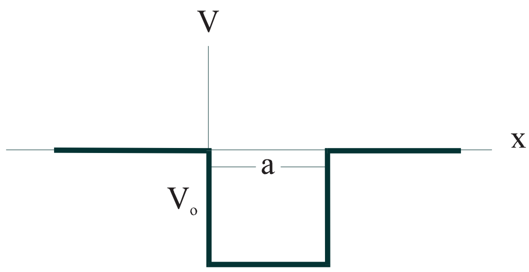
$$\hat{P}_{\delta\downarrow} = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{m\alpha}{\hbar^2\rho} & -\dfrac{m\alpha}{\hbar^2\rho} \\ \dfrac{m\alpha}{\hbar^2\rho} & 1 + \dfrac{m\alpha}{\hbar^2\rho} \end{pmatrix}$$

Podemos ver que los coeficientes de esta matriz ya no verifican las condiciones que analizamos previamente. Imponemos ahora la condición $P_{11} = 0$, que nos dará las posibles energías de los estados estacionarios. Para el caso del potencial que estamos considerando se obtiene que los estados ligados deben verificar la siguiente condición:

$$P_{11} = 1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2\rho} = 1 - \frac{m\alpha}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\,|E|}} = 0$$

Por tanto $|E| = \dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$. Para este potencial sólo existe un estado ligado.

Vamos a considerar ahora otro problema como es el pozo finito de potencial.



Podemos obtener la matriz de propagación de este potencial si sustituimos V_o por $-V_o$ en la matriz de propagación de la barrera de potencial. La matriz de propagación será por tanto:

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \cos k'a - i\dfrac{k^2+k'^2}{2kk'}\sin k'a & i\dfrac{k^2-k'^2}{2kk'}\sin k'a \\ -i\dfrac{k^2-k'^2}{2kk'}\sin k'a & \cos k'a + i\dfrac{k^2+k'^2}{2kk'}\sin k'a \end{pmatrix}$$

donde $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ y $k' = \sqrt{\dfrac{2m(E+V_o)}{\hbar^2}}$. Vamos a considerar ahora el caso de energías negativas. Sustituimos k por $i\rho$ donde $\rho = \sqrt{\dfrac{2m\,|E|}{\hbar^2}}$ y $k' = \sqrt{\dfrac{2m(V_o - |E|)}{\hbar^2}}$. La matriz de propagación queda de la forma:

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \cos k'a - \dfrac{k'^2-\rho^2}{2\rho k'}\sin k'a & -\dfrac{k'^2+\rho^2}{2\rho k'}\sin k'a \\ \dfrac{k'^2+\rho^2}{2\rho k'}\sin k'a & \cos k'a + \dfrac{k'^2-\rho^2}{2\rho k'}\sin k'a \end{pmatrix}$$

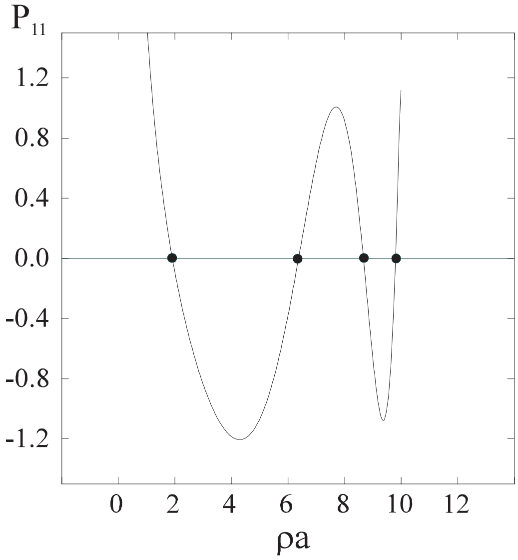
Los estados ligados deben verificar la siguiente condición:

$$P_{11} = \cos k'a - \frac{k'^2-\rho^2}{2\rho k'}\sin k'a = 0$$

Si definimos un nuevo parámetro $k_o = \sqrt{\dfrac{2mV_o}{\hbar^2}}$ el coeficiente P_{11} se puede escribir de la siguiente forma:

$$P_{11} = \cos\sqrt{k_o^2a^2-\rho^2a^2} - \frac{k_o^2a^2-2\rho^2a^2}{2k_oa\rho a}\sin\sqrt{k_o^2a^2-\rho^2a^2}$$

Vamos a ver los ceros de este coeficiente para el caso particular $k_oa = 10$ (que es el mismo caso que analizamos cuando estudiamos el pozo finito de potencial). En la siguiente figura está representado el coeficiente P_{11} para $k_oa = 10$ en función de ρa. Como se puede apreciar aparecen cuatro ceros y por tanto existen cuatro energías posibles.


P11
1.2
0.8
0.4
0.0
-0.4
-0.8
-1.2
0
2
4
6
8
10
12
ρa