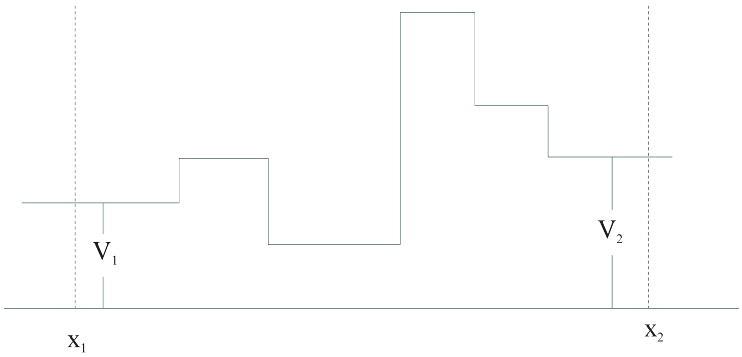
Resolución matricial de un potencial escalonado. Matriz de scattering y matriz de propagación.

Aunque pueda parecer que los potenciales escalonados (constantes a trozos) sólo tienen interés puramente teórico, porque se pueden resolver más o menos fácilmente, no es del todo cierto, ya que en el estudio de semiconductores aparecen potenciales escalonados cuando unimos semiconductores de distintos tipos. Lo que vamos a hacer es desarrollar una nueva técnica para estudiar este tipo de potenciales.

Supongamos que tenemos un potencial como el que se muestra la figura.



Para energías mayores que V_1 y V_2, en los puntos x_1 y x_2 la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es una combinación lineal de exponenciales imaginarias, que podemos escribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\psi_I &= \frac{A}{\sqrt{k_1}} e^{ik_1(x-x_1)} + \frac{B}{\sqrt{k_1}} e^{-ik_1(x-x_1)} \\
\psi_{II} &= \frac{C}{\sqrt{k_2}} e^{ik_2(x-x_2)} + \frac{D}{\sqrt{k_2}} e^{-ik_2(x-x_2)}
\end{aligned}$$

donde $k_1 = \sqrt{\dfrac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$ y $k_2 = \sqrt{\dfrac{2m(E-V_2)}{\hbar^2}}$ (los factores $1/\sqrt{k_i}$ en las amplitudes así como los factores de fase ik_ix_i se han introducido por conveniencia para simplificar los cálculos posteriores).

Como hemos visto ya en varias ocasiones una onda plana no puede describir a una sóla partícula ya que no es normalizable. Si embargo, siempre podemos formar un paquete de ondas superponiendo ondas planas. Por otro lado, el estudio de las ondas planas nos permite analizar lo que ocurre con un flujo de partículas que se mueven con velocidad más o menos definida. Si estamos interesados en ver lo que ocurre con un flujo de partículas las ondas planas nos permiten obtener fácilmente dichos flujos. Las cuatro ondas planas anteriores dan lugar a los siguientes flujos:

$$\begin{aligned}
j_I^+ &= \frac{\hbar}{m}|A|^2 = \text{ flujo de partículas que entra en el potencial desde la izquierda.}\\
j_I^- &= \frac{\hbar}{m}|B|^2 = \text{ flujo de partículas que sale del potencial hacia la izquierda.}\\
j_{II}^+ &= \frac{\hbar}{m}|C|^2 = \text{ flujo de partículas que sale del potencial hacia la derecha.}\\
j_{II}^- &= \frac{\hbar}{m}|D|^2 = \text{ flujo de partículas que entra en el potencial desde la derecha.}
\end{aligned}$$

La razón por la que introducimos los factores $1/\sqrt{k_i}$ es que todos los flujos quedan en función de las amplitudes.

De las cuatro amplitudes que aparecen en las expresiones anteriores sólo existen dos independientes (recordamos que en los casos que estudiamos anteriormente había que imponer dos condiciones, que eran continuidad tanto de la función de onda como de la primera derivada), y las otras dos dependerán linealmente de las que tomemos como independientes.

Por ejemplo podemos tomar como independientes las amplitudes de las ondas que entran en la región del potencial, es decir las amplitudes A y D. En este caso las amplitudes de las ondas que salen del potencial dependerán linealmente de las otras dos:

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

La matriz $\hat{S}$ se denomina matriz de scattering. Esta matriz tiene una gran relevancia en problemas de dispersión tridimensionales, ya que permite calcular secciones eficaces de dispersión. Sin embargo nosotros estamos más bien interesados en calcular coeficientes de transmisión y reflexión por lo que utilizaremos otra matriz. Si tomamos las amplitudes C y D como independientes, las amplitudes A y B dependerán linealmente de C y D de la forma:

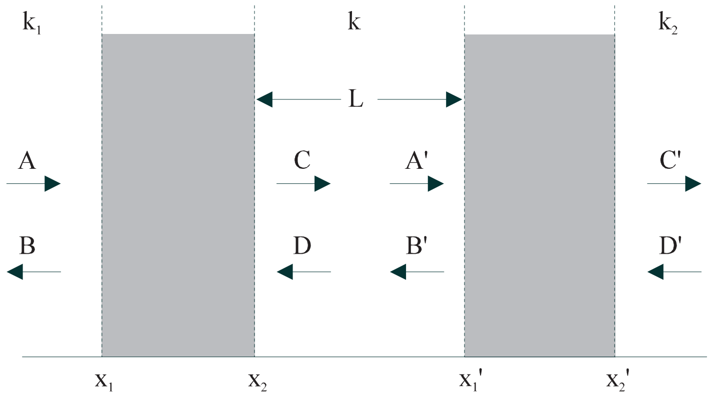
$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \hat{P} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

La matriz $\hat{P}$ se denomina matriz de propagación. Como veremos esta matriz nos permitirá obtener gran cantidad de información.

Propiedades de la matriz de propagación.

En este apartado vamos a ver algunas propiedades generales de la matriz de propagación.

Lo primero que vamos a ver es cómo se combinan las matrices de propagación de dos zonas que se encuentran conectadas mediante una región en la cual el potencial es constante. Vamos a suponer que tenemos dos regiones (x_1, x_2) y (x_1', x_2') en las cuales el potencial varía y de modo que en la región intermedia (x_2, x_1') el potencial es constante.



Tal como se muestra en la figura denotaremos por k_1 y k_2 a los números de onda a la izquierda y a la derecha de las dos regiones respectivamente y por k al número de ondas en la región intermedia. Las amplitudes A y B están relacionadas mediante una matriz de propagación $\hat{P}_1$ con las amplitudes C y D, de modo que:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{P}_1 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Lo mismo ocurrirá con las amplitudes A', B' y C', D' pero mediante otra matriz $\hat{P}_2$:

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \hat{P}_2 \begin{pmatrix} C' \\ D' \end{pmatrix}$$

Lo que vamos a obtener es la relación que existe entre las amplitudes A, B y C', D'. Vamos a escribir la función ψ en cada una de las regiones:

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{izq}} &= \frac{1}{\sqrt{k_1}}\left(Ae^{ik_1(x-x_1)} + Be^{-ik_1(x-x_1)}\right) \\
\psi_{\text{int}} &= \frac{1}{\sqrt{k}}\left(Ce^{ik(x-x_2)} + De^{-ik(x-x_2)}\right) \\
\psi_{\text{int}} &= \frac{1}{\sqrt{k}}\left(A'e^{ik(x-x_1')} + B'e^{-ik(x-x_1')}\right) \\
\psi_{\text{dch}} &= \frac{1}{\sqrt{k_2}}\left(C'e^{ik_2(x-x_2')} + D'e^{-ik_2(x-x_2')}\right)
\end{aligned}$$

Lógicamente en la región intermedia las dos formas deben coincidir, de modo que se deben verificar las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned}
Ce^{ik(x-x_2)} &= A'e^{ik(x-x_1')} \\
De^{-ik(x-x_2)} &= B'e^{-ik(x-x_1')}
\end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned}
C &= A'e^{-ik(x_1'-x_2)} = A'e^{-ikL} \\
D &= B'e^{ik(x_1'-x_2)} = B'e^{ikL}
\end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones se pueden escribir de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix}$$

Por último, ya podemos relacionar las amplitudes A, B y C', D':

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{P}_1 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \hat{P}_1 \begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \hat{P}_1 \begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix} \hat{P}_2 \begin{pmatrix} C' \\ D' \end{pmatrix}$$

Por tanto la matriz de propagación total del sitema será $\hat{P} = \hat{P}_1 \begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix} \hat{P}_2$.
La matriz $\begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix}$ la vamos a denominar matriz de propagación libre.

Podemos ver la utilidad de utilizar la matriz de propagación ya que podemos ir resolviendo problemas parciales y al final combinarlos para obtener la matriz de propagación total.

Vamos a ver a continuación algunas de las propiedades de los coeficientes de la matriz de propagación.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

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

Si el potencial es una función real y si $\psi(x)$ es una solución de la ecuación anterior entonces la función $\psi^*(x)$ también será una solución, ya que al tomar el complejo conjugado de la ecuación anterior queda indéntica salvo que cambia ψ por ψ^* (se puede ver que esto es una consecuencia de la simetría de la ecuación de Schrödinger ante una inversión temporal). Si volvemos al primer ejemplo, la función $\psi(x)$ en cada región era:

$$\begin{aligned} \psi_I &= \frac{A}{\sqrt{k_1}} e^{ik_1(x-x_1)} + \frac{B}{\sqrt{k_1}} e^{-ik_1(x-x_1)} \\ \psi_{II} &= \frac{C}{\sqrt{k_2}} e^{ik_2(x-x_2)} + \frac{D}{\sqrt{k_2}} e^{-ik_2(x-x_2)} \end{aligned}$$

donde las amplitudes están relacionadas mediante la matriz de propagación:

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

Vamos a tomar el complejo conjugado de la función ψ:

$$\begin{aligned} \psi_I^* &= \frac{A^*}{\sqrt{k_1}} e^{-ik_1(x-x_1)} + \frac{B^*}{\sqrt{k_1}} e^{ik_1(x-x_1)} \\ \psi_{II}^* &= \frac{C^*}{\sqrt{k_2}} e^{-ik_2(x-x_2)} + \frac{D^*}{\sqrt{k_2}} e^{ik_2(x-x_2)} \end{aligned}$$

Lógicamente ahora las amplitudes estarán relacionadas de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix}$$

Si tomamos el complejo conjugado de esta ecuación y reagrupamos los términos:

$$\begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11}^* & P_{12}^* \\ P_{21}^* & P_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{22}^* & P_{21}^* \\ P_{12}^* & P_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Por tanto los coeficientes de la matriz de propagación deben verificar las siguientes condiciones:

$$P_{22} = P_{11}^* \qquad \text{y} \qquad P_{21} = P_{12}^*$$

Vamos a ver a continuación otra propiedad que deben verificar los coeficientes de la matriz de propagación. La conservación del número de partículas implica que la densidad de corriente debe ser igual a la izquierda y a la derecha de la región en la que varía el potencial. Esto se traduce en la siguiente condición:

$$j_I^+ - j_I^- = j_{II}^+ - j_{II}^-$$

o bien

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2$$

Esta condición se debe verificar para cualquier valor de las amplitudes. En particular si tomamos $D = 0$ la ecuación anterior se reduce a

$$AA^* - BB^* = (P_{11}P_{11}^* - P_{21}P_{21}^*)\,|C|^2 = |C|^2$$

De modo que se debe verificar la condición: $P_{11}P_{11}^* - P_{21}P_{21}^* = 1$. Si tenemos en cuenta las condiciones que hemos encontrado anteriormente esta última ecuación se puede escribir como:

$$P_{11}P_{22} - P_{21}P_{12} = 1$$

Por tanto, el determinante de la matriz de propagación debe ser igual a la unidad. Hasta ahora hemos considerado sólo el caso en el que la energía es mayor que el potencial tanto a la izquierda como a la derecha. Si no fuera así las condiciones que deben cumplir los coeficientes de la matriz de propagación varían.