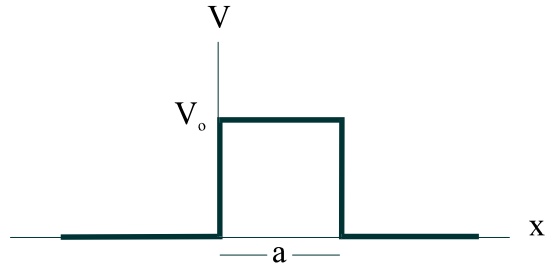


Barrera de potencial. Efecto túnel.

Vamos a estudiar otro tipo de potencial conocido como la barrera de potencial y que está representado en la siguiente figura.



Barrera de potencial.

El potencial vendrá dado en este caso por la siguiente función:

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

Al igual que en la sección anterior podemos analizar en primer lugar qué ocurriría desde el punto de vista clásico. Si una partícula tiene una energía menor que V_0 no será capaz de atravesar la barrera y rebotará con la misma velocidad que llevaba pero en sentido contrario. Por el contrario, si la energía de la partícula es mayor que V_0 será capaz de atravesar la barrera. Mientras se encuentra en la zona de la barrera su cantidad de movimiento será $p = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Por tanto, el coeficiente de transmisión que predice la teoría clásica será $T = 0$ si $E < V_0$ y $T = 1$ si $E > V_0$.

Como en el caso anterior vamos a estudiar por separado el caso en que la energía de la partícula incidente sea menor o mayor que la energía de la barrera y al igual que en el caso anterior, vamos a analizar las soluciones estacionarias.

- Caso $E < V_0$.

Al igual que para el potencial escalón, la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se puede encontrar fácilmente si dividimos la solución en tres regiones.

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_I(x) & \text{para } x \leq 0 \\ \varphi_{II}(x) & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{III}(x) & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Las ecuaciones que satisfacen cada una de estas funciones son las siguientes:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} + k^2 \varphi_I(x) = 0 \\ \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - \rho^2 \varphi_{II}(x) = 0 \\ \frac{d^2 \varphi_{III}(x)}{dx^2} + k^2 \varphi_{III}(x) = 0 \end{cases} \quad \text{donde:} \quad \begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \rho^2 &= \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \end{aligned}$$

Las soluciones de estas ecuaciones diferenciales son iguales a las del problema anterior. Vamos a suponer de nuevo que las partículas inciden desde la izquierda, de modo que en la región $x > a$ no pueden existir partículas que viajen hacia la izquierda, ya que no existe ninguna variación del potencial que pueda producir una reflexión (rebote) de partículas. En este caso, la solución será de la forma:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\text{I}}(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} & \text{para } x \leq 0 \\ \varphi_{\text{II}}(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x} & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{\text{III}}(x) = Ce^{ikx} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

En la zona de la barrera hay que mantener las dos exponenciales ya que no hay ningún motivo para eliminar ninguna de las dos. Imponemos a continuación la continuidad de la función $\varphi(x)$ en los puntos $x = 0$ y $x = a$. Esto supone que las constantes que aparecen en la solución deben satisfacer las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \text{Continuidad de la función } \varphi(x) & : \begin{cases} A + A' = B + B' \\ Be^{\rho a} + B'e^{-\rho a} = Ce^{ika} \end{cases} \\ \text{Continuidad de la primera derivada} & : \begin{cases} ikA - ikA' = \rho B - \rho B' \\ \rho Be^{\rho a} - \rho B'e^{-\rho a} = ikCe^{ika} \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} A + A' = B + B' \\ Be^{\rho a} + B'e^{-\rho a} = Ce^{ika} \\ ikA - ikA' = \rho B - \rho B' \\ \rho Be^{\rho a} - \rho B'e^{-\rho a} = ikCe^{ika} \end{cases}$$

Vamos a resolver este sistema de ecuaciones. En primer lugar, vamos a escribir B y B' en función de C . Las ecuaciones segunda y cuarta se pueden escribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} Be^{\rho a} + B'e^{-\rho a} &= Ce^{ika} \\ Be^{\rho a} - B'e^{-\rho a} &= i\frac{k}{\rho}Ce^{ika} \end{aligned}$$

Sumando estas dos ecuaciones queda: $2Be^{\rho a} = (1 + i\frac{k}{\rho})e^{ika}C$, de modo que $B = \frac{\rho + ik}{2\rho}e^{-\rho a}e^{ika}C$.

Si restamos las ecuaciones queda: $2B'e^{-\rho a} = (1 - i\frac{k}{\rho})e^{ika}C$, de modo que $B' = \frac{\rho - ik}{2\rho}e^{\rho a}e^{ika}C$.

Por otro lado, las ecuaciones primera y tercera se pueden escribir de la siguiente forma:

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

Si sumamos las dos ecuaciones queda: $2A = \frac{k - i\rho}{k}B + \frac{k + i\rho}{k}B'$. Sustituimos ahora los valores que hemos encontrado antes para B y B' .

$$2A = \frac{(k - i\rho)(\rho + ik)}{2k\rho} e^{-\rho a} e^{ika} C + \frac{(k + i\rho)(\rho - ik)}{2k\rho} e^{\rho a} e^{ika} C$$

Esta expresión se puede reordenar y utilizando las funciones hiperbólicas se puede escribir de la siguiente forma:

$$2A = \frac{1}{k\rho} (2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)) e^{ika} C$$

de modo que ya tenemos el valor de C en función de A :

$$C = \frac{2k\rho e^{-ika}}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A$$

A partir del valor de C podemos obtener los valores de B y B' :

$$B = \frac{(\rho + ik)k e^{-\rho a}}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A$$

$$B' = \frac{(\rho - ik)k e^{\rho a}}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A$$

Por último, de las ecuaciones primera y tercera se obtiene que $2A' = \frac{k + i\rho}{k} B + \frac{k - i\rho}{k} B'$ y sustituyendo los valores de B y B' se obtiene el valor de A' en función de A .

$$A' = \frac{-i(k^2 + \rho^2) \sinh(\rho a)}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A$$

Las soluciones estacionarias son por tanto en este caso:

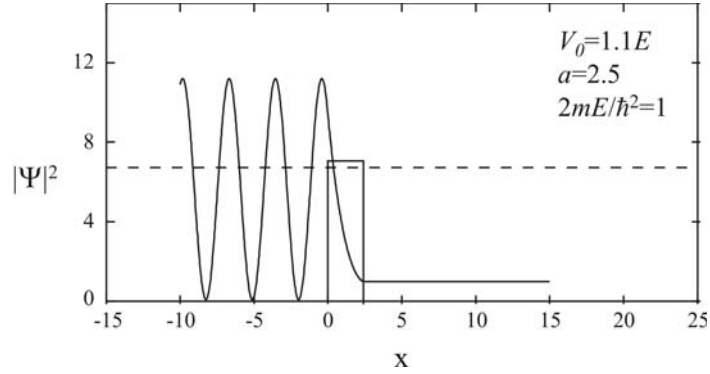
$$\psi_E(x, t) = \begin{cases} A e^{i(kx - \omega t)} + \frac{-i(k^2 + \rho^2) \sinh(\rho a)}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A e^{i(-kx - \omega t)} & \text{para } x \leq 0 \\ \frac{2k\rho \cosh(\rho(x - a)) + 2ik^2 \sinh(\rho(x - a))}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A e^{-i\omega t} & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \frac{2k\rho e^{-ika}}{2k\rho \cosh(\rho a) - i(k^2 - \rho^2) \sinh(\rho a)} A e^{i(kx - \omega t)} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Estas soluciones nos permiten analizar de nuevo en este caso la influencia del potencial sobre un flujo de partículas de energía bien definida que incide sobre la barrera. En la región $x \leq 0$ podemos ver que se propagan dos ondas: incidente y reflejada, que nos servirán para calcular el flujo de partículas incidentes y reflejadas (que han rebotado en el escalón). El flujo de partículas incidentes vale $j_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$. El flujo de partículas reflejadas (que rebotan) viene dado por la siguiente expresión.

$$j_r = -\frac{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)}{4k^2 \rho^2 \cosh^2(\rho a) + (k^2 - \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)} |A|^2 \frac{\hbar k}{m} =$$

$$= -\frac{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)}{4k^2 \rho^2 + (k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)} |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

En este caso, el flujo de partículas reflejadas no coincide con el flujo de partículas incidentes, por tanto parte de las partículas incidentes son capaces de atravesar la barrera de potencial. Este fenómeno no se puede explicar desde el punto de vista clásico y se denomina efecto túnel. Es como si las partículas pudieran excavar un túnel en la región clásicamente prohibida y atravesar así la barrera de potencial. En la siguiente figura se muestra el módulo al cuadrado de la función de onda en un instante determinado y para valores concretos de los parámetros. Se puede apreciar que la probabilidad de encontrar partículas más allá de la barrera es distinta de cero.



Densidad de probabilidad para un caso en que $E < V_0$.

A partir del flujo de partículas reflejadas podemos calcular el coeficiente de reflexión:

$$R = \frac{(k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)}{4k^2 \rho^2 + (k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)} = \frac{V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar\right)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar\right)}$$

Por otro lado, el flujo de partículas transmitidas por la barrera vendrá dado por la siguiente expresión:

$$j_t = \frac{4k^2 \rho^2}{4k^2 \rho^2 \cosh^2(\rho a) + (k^2 - \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)} |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = \frac{4k^2 \rho^2}{4k^2 \rho^2 + (k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)} |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

que como se puede apreciar es distinto de cero. A partir de esta expresión es inmediato calcular el coeficiente de transmisión, que vale:

$$T = \frac{4k^2 \rho^2}{4k^2 \rho^2 + (k^2 + \rho^2)^2 \sinh^2(\rho a)} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2\left(\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar\right)}$$

Este coeficiente nos da la fracción de partículas que son capaces de atravesar la barrera. Se puede comprobar que se verifica la condición $R + T = 1$. En esta expresión se puede ver que en el límite en que $\hbar \rightarrow 0$ el coeficiente de transmisión tiende a cero, recuperando así el valor que predice la teoría clásica. El mismo resultado se obtiene si hacemos tender el valor de la masa a infinito, por tanto, una partícula macroscópica no será capaz de atravesar la barrera. Podemos analizar el comportamiento del coeficiente de transmisión con la

anchura de la barrera. Para valores de a grandes, el seno hiperbólico se hace grande e igual a $e^{\rho a}/2$. En este caso podemos obtener la siguiente expresión aproximada del coeficiente de transmisión:

$$T \sim 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho a} \quad a \rightarrow \infty$$

Por tanto, para valores grandes de a el coeficiente de transmisión disminuye exponencialmente con la distancia (esta es la base del microscopio de efecto túnel).

- Caso $E > V_0$.

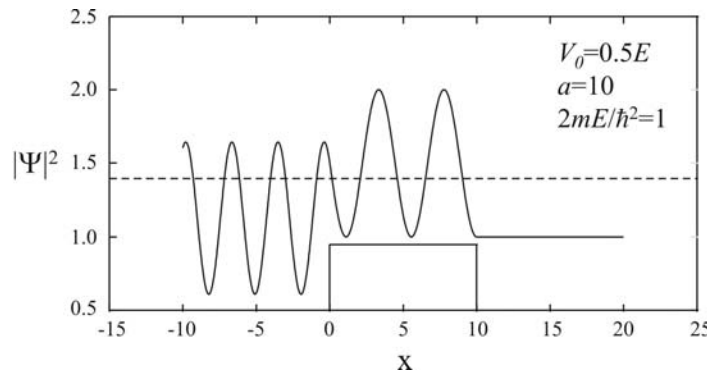
Vamos a analizar a continuación la solución para el caso en que la energía de las partículas es mayor que la energía de la barrera. En realidad no tenemos que resolver el problema otra vez, ya que las soluciones son válidas si sustituimos ρ por $-ik'$, donde $k'^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. En este caso la solución será de la forma:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_{\text{I}}(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} & \text{para } x \leq 0 \\ \varphi_{\text{II}}(x) = Be^{ik'x} + B'e^{-ik'x} & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \varphi_{\text{III}}(x) = Ce^{ikx} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Si realizamos la sustitución $\rho = ik'$ en todas las ecuaciones podemos obtener directamente la solución, que será ahora la siguiente:

$$\psi_E(x, t) = \begin{cases} Ae^{i(kx - \omega t)} + \frac{(k^2 - k'^2) \sin(k'a)}{2ikk' \cos(k'a) + (k^2 + k'^2) \sin(k'a)} Ae^{i(-kx - \omega t)} & \text{para } x \leq 0 \\ ik \frac{(k + k')e^{-ik'a} e^{i(kx - \omega t)} - (k - k')e^{ik'a} e^{i(-k'x - \omega t)}}{2ikk' \cos(k'a) + (k^2 + k'^2) \sin(k'a)} A & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ \frac{2ikk'e^{-ika}}{2ikk' \cos(k'a) + (k^2 + k'^2) \sin(k'a)} Ae^{i(kx - \omega t)} & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

En la siguiente figura se puede ver el módulo al cuadrado de la función de onda en un instante determinado para valores concretos de los parámetros. Se puede apreciar que la probabilidad de encontrar a la partícula es mayor en la zona de la barrera, ya que en esta zona la velocidad es menor (la partícula pasa más tiempo en esa zona).



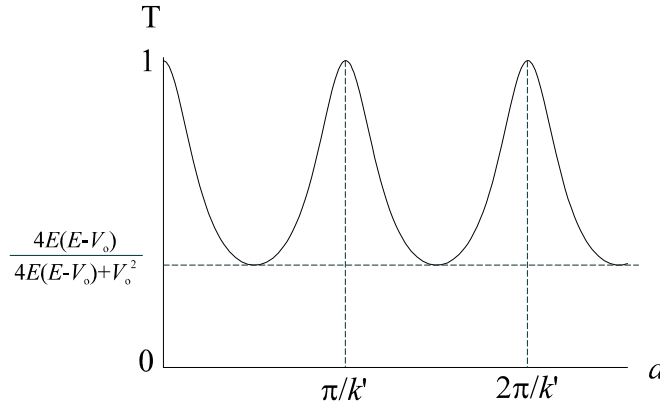
Densidad de probabilidad para un caso en que $E > V_0$.

Podemos, por último, calcular los coeficientes de reflexión y transmisión, que son en este caso:

$$R = \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)}{4k^2k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)} = \frac{V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar\right)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar\right)}$$

$$T = \frac{4k^2k'^2}{4k^2k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)} = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar\right)}$$

En esta expresión podemos ver que cuando $k'a = n\pi$ (siendo n un número entero) el coeficiente de reflexión vale $R = 0$ y el de transmisión $T = 1$ y por tanto todas las partículas atraviesan la barrera. Esto es similar a lo que ocurre en óptica al analizar la interferencia en un Frabri-Perot (este fenómeno, en óptica, es el que produce el arcoiris en una pompa de jabón o en un charco que tiene aceite). Para determinados espesores de la lámina se obtiene una transmisión máxima y para otros mínima. Para que se produzca una interferencia constructiva el camino recorrido dentro de la barrera debe ser múltiplo entero de la longitud de onda, es decir: $2a = n\lambda'$ y por tanto $k'a = n\pi$. En la siguiente figura se ha representado el coeficiente de transmisión en función de la anchura de la barrera.

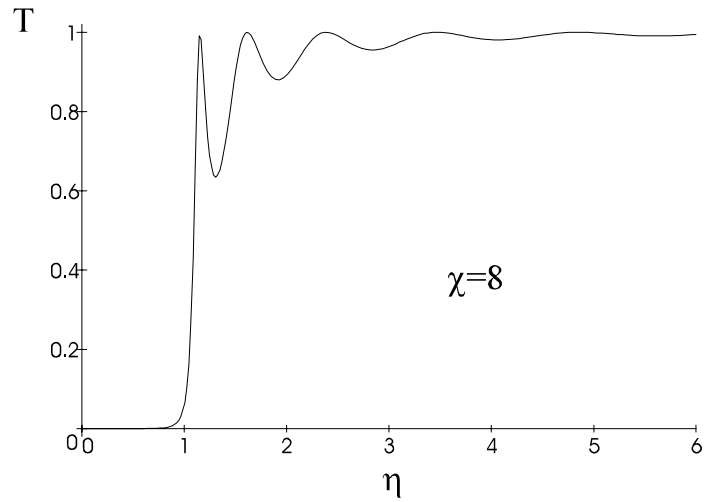


Variación del coeficiente de transmisión con la anchura de la barrera.

Vamos a analizar ahora la variación del coeficiente de transmisión con la energía. Vamos a definir dos parámetros adimensionales: $\eta = E/V_0$ y $\chi = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$. El coeficiente de transmisión en función de estos dos parámetros adimensionales vale:

$$T = \begin{cases} \frac{4\eta(1 - \eta)}{4\eta(1 - \eta) + \sin^2(\chi\sqrt{1 - \eta})} & \text{para } \eta < 1 \\ \frac{4\eta(\eta - 1)}{4\eta(\eta - 1) + \sin^2(\chi\sqrt{\eta - 1})} & \text{para } \eta > 1 \end{cases}$$

En la siguiente figura se puede ver la variación del coeficiente de transmisión para un valor particular de χ . En la figura se puede apreciar el decaimiento exponencial del coeficiente de transmisión para $\eta < 1$. Por otro lado, para $\eta > 1$ el coeficiente de transmisión presenta oscilaciones debido al fenómeno de interferencia que acabamos de ver.



Coefficiente de transmisión en función del parámetro η .

Hasta ahora, en todos los problemas que hemos estudiado, la energía de las partículas podía tomar cualquier valor y por tanto el espectro de energías es continuo. En el siguiente apartado vamos a estudiar un caso para el cual el espectro de energías es discreto.