GRADO: FÍSICA

FÍSICA CUÁNTICA I

EJERCICIO 1

EVA SÁNCHEZ PRIMO Y JOSE LUIS PÉREZ SÁNCHEZ

FECHA: 17/10/2024

PROFESOR: EZEQUIEL VALERO LAFUENTE

Índice

1. Enunciado del problema

Ejercicio 3: Calculad el coeficiente de reflexión y transmisión (en función de la energía y el potencial) en $x = 0$ para $E > 0$ y el siguiente pozo de potencial, donde V es una constante.

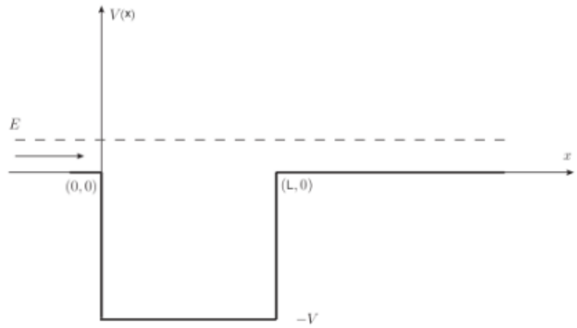

Figura 1: Pozo de potencial finito.

2. Definición de las zonas

En este problema tenemos un pozo de potencial finito que se extiende desde el origen hasta el punto (L, 0) $V = -V$, en el cual tenemos una onda que viaja con una energía $E > 0$ y por tanto $E > V$, en el problema tenemos 3 zonas importantes separadas por dos barreras de potencial en (0, 0) y en (L, 0), las zonas son las siguientes:

La primera zona viene descrita desde $(-\infty, 0)$ hasta $(0, 0)$ y la ecuación de ondas que la describe es la siguiente:

$$\psi_1(x) = Ae^{i\frac{p}{\hbar}x} + Be^{-i\frac{p}{\hbar}x} \tag{1}$$

La segunda zona viene descrita desde $(0, 0)$ hasta $(L, 0)$ y la ecuación de ondas que la describe es:

$$\psi_2(x) = C\sin(\frac{p'}{\hbar}x) + D\cos(\frac{p'}{\hbar}x) = \left(\frac{D}{2} + \frac{C}{2i}\right)e^{ix} + \left(\frac{D}{2} - \frac{C}{2i}\right)e^{-ix} \tag{2}$$

Finalmente, la zona 3 viene descrita desde $(L, 0)$ hasta $(+\infty, 0)$ y la ecuación de ondas que la rigue es la siguiente:

$$\psi_3(x) = Fe^{i\frac{p}{\hbar}x} \tag{3}$$

3. Cálculo de J_i, J_r y J_t

Para calcular el coeficiente de reflexión (R) y transmisión (T), tenemos las siguientes dos fórmulas:

$$R = \frac{J_r}{J_i}, \quad T = \frac{J_t}{J_i} \tag{4}$$

También sabemos que el flujo J, viene dado por la siguiente ecuación:

$$|\vec{J_{t,r,i}}| = \frac{\hbar}{2m}\left|\left(\vec{\nabla}\psi\right)\psi^* - \left(\vec{\nabla}\psi^*\right)\psi\right|, \tag{5}$$

Por tanto para calcular los dos coeficientes que se nos requieren, deberemos encontrar primero J_i, J_r y J_t realizando las debidas sustituciones de las ecuaciones 1, 2 y 3 en la ecuación 4 y con ello obtenemos:

Para J_i:

$$J_i = \frac{\hbar}{2m}\left((Ae^{\frac{-i}{\hbar}px})(\frac{ip}{\hbar}Ae^{\frac{i}{\hbar}px}) - (Ae^{\frac{i}{\hbar}px})(\frac{-ip}{\hbar}Ae^{\frac{-i}{\hbar}px})\right) \tag{6}$$

$$J_i = \frac{\hbar}{2m}\left|\frac{ip}{\hbar}\left(A^2e^{\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}px} + A^2e^{\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}px}\right)\right| \tag{7}$$

$$J_i = \frac{pi}{2m}\left|2A^2\right| \tag{8}$$

$$J_i = \frac{pi}{m}\left(|A|^2\right), \tag{9}$$

Para J_r:

$$J_r = \frac{\hbar}{2m}\left((Be^{\frac{i}{\hbar}px})(\frac{-ip}{\hbar}Be^{\frac{-i}{\hbar}px}) - (Be^{\frac{-i}{\hbar}px})(\frac{ip}{\hbar}Be^{\frac{i}{\hbar}px})\right) \tag{10}$$

$$J_r = \frac{\hbar}{2m}\left|\frac{ip}{\hbar}\left(-B^2e^{\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}px} - B^2e^{\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}px}\right)\right| \tag{11}$$

$$J_r = \frac{pi}{2m}\left|-2B^2\right| \tag{12}$$

$$J_r = \frac{pi}{m}\left(|-B|^2\right), \tag{13}$$

Para J_t:

$$J_t = \frac{\hbar}{2m}\left((Fe^{\frac{-i}{\hbar}px})(\frac{ip}{\hbar}Fe^{\frac{i}{\hbar}px}) - (Fe^{\frac{i}{\hbar}px})(\frac{-ip}{\hbar}Fe^{\frac{-i}{\hbar}px})\right) \tag{14}$$

$$J_t = \frac{\hbar}{2m}\left|\frac{ip}{\hbar}\left(F^2e^{\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}px} + F^2e^{\frac{i}{\hbar}px-\frac{i}{\hbar}px}\right)\right| \tag{15}$$

$$J_t = \frac{pi}{2m}\left|2F^2\right| \tag{16}$$

$$J_t = \frac{pi}{m}\left(|F|^2\right), \tag{17}$$

Para sacar los coeficientes R y T nos hacen falta conocer el valor las constantes A, B, C, D y F, para ello realizaremos el cambio de variable $p = k_1 \cdot \hbar$ y $p' = k_2 \cdot \hbar$ por tanto los flujos de corriente se nos quedan de la siguiente forma:

$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2, \quad J_r = \frac{\hbar k_1}{m}(|-B|^2), \quad J_t = \frac{\hbar k_1}{m}|F|^2 \tag{18}$$

4. Continuidad del sistema

Para hallar las constantes A, B, C, D y F debemos analizar la continuidad en las barreras de potencial, es decir en $x = 0$ y en $x = L$:

1. **Para hallar la continuidad en $x = 0$ igualamos ψ_1 a ψ_2:**

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + B = D \tag{19}$$

2. **A continuación hallamos la derivada en $x = 0$ de las ondas ψ_1 y ψ_2:**

$$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0} \Rightarrow ik_1A - ik_1B = k_2C \tag{20}$$

3. **Ahora calculamos la condiciones de continuidad en $x = L$:**

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \Rightarrow C\sin(k_2L) + D\cos(k_2L) = Fe^{ik_1L} \tag{21}$$

4. **Por último calculamos la derivada en ψ_2 y ψ_3:**

$$\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=L} = \left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=L} \Rightarrow k_2C\cos(k_2L) - k_2D\sin(k_2L) = ik_1Fe^{ik_1L} \tag{22}$$

Por tanto se nos queda un sistema de 4 ecuaciones con 5 incognitas:

$$A + B = D \tag{23}$$

$$ik_1A - ik_1B = k_2C \tag{24}$$

$$C\sin(k_2L) + D\cos(k_2L) = Fe^{ik_1L} \tag{25}$$

$$k_2C\cos(k_2L) - k_2D\sin(k_2L) = ik_1Fe^{ik_1L} \tag{26}$$

5. Cálculo de R y T

Resolvemos este sistema de ecuaciones con el software Mathematica y calculamos el coeficiente de reflexión en primer lugar, recordamos la forma que tiene este:

$$R = \frac{J_r}{J_i} \tag{27}$$

Por tanto vamos a necesitar el flujo inicial y el reflejado teniendo estos la siguiente forma:

$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2, \quad J_r = \frac{\hbar k_1}{m}(|-B|^2) \tag{28}$$

Por tanto si sustituímos las ultimas dos ecuaciones en la primera se los queda de la siguiente forma:

$$R = \left|\frac{B^2}{A^2}\right| \tag{29}$$

Para realizar este cálculo, sacaremos B en función de A quedando de esta manera:

$$B = -\left(\frac{-Ak_1^2\sin(k_2L) + Ak_2^2\sin(k_2L)}{2ik_1k_2\cos(k_2L) + k_1^2\sin(k_2L) + k_2^2\sin(k_2L)}\right) \tag{30}$$

Simplificando los calculos, R nos queda de la siguiente forma:

$$R = \left|\frac{\left(k_1^2 - k_2^2\right)^2\sin^2(k_2l)}{\left(2ik_1k_2\cos(k_2l) + (k_1^2 + k_2^2)\sin(k_2l)\right)^2}\right| \tag{31}$$

Por otra parte si nos vamos a calcular el coeficiente de transmisión T, necesitaremos el flujo inicial y el flujo transmitido siendo estas sus fórmulas:

$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2, \quad J_t = \frac{\hbar k_1}{m}|F|^2 \tag{32}$$

Y al sustituir en la fórmula del coeficiente T se nos queda de la siguiente forma:

$$T = \left|\frac{F^2}{A^2}\right| \tag{33}$$

Por tanto obtenemos la expresión de F en función de A:

$$F = \frac{2iAe^{-ik_1L}k_1k_2}{2ik_1k_2\cos(k_2L) + (k_1^2 + k_2^2)\sin(k_2L)}. \tag{34}$$

Simplificando la expresión obtenemos:

$$T = 4e^{2\,\mathrm{Im}(k_1 l)} \left| \frac{k_1^2 k_2^2}{\left(2ik_1k_2\cos(k_2 l) + (k_1^2 + k_2^2)\sin(k_2 l)\right)^2} \right| \tag{35}$$

Ahora realizaremos los cambios de variable de k_1 y k_2 para obtener R y T en función del potencial y de la energía:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \tag{36}$$

Por tanto si sustituímos k_1 y k_2 en las ecuaciones de los coeficientes R y T obtenemos:

$$R = \left| \frac{m^2V^2\sin^2\left(\frac{\sqrt{2}l\sqrt{m(E+V)}}{h}\right)}{\left(2i\sqrt{Em}\sqrt{m(E+V)}\cos\left(\frac{\sqrt{2}l\sqrt{m(E+V)}}{h}\right) + m(2E+V)\sin\left(\frac{\sqrt{2}l\sqrt{m(E+V)}}{h}\right)\right)^2} \right| \tag{37}$$

$$T = 4e^{2\sqrt{2}\,\mathrm{Im}\left(\frac{l\sqrt{Em}}{h}\right)} \left| \frac{Em^2(E+V)}{\left(2\sqrt{Em}\sqrt{m(E+V)}\cos\left(\frac{\sqrt{2}l\sqrt{m(E+V)}}{h}\right) - im(2E+V)\sin\left(\frac{\sqrt{2}l\sqrt{m(E+V)}}{h}\right)\right)^2} \right| \tag{38}$$

Para comprobar si R y T están correctamente calculadas sabemos por la teoría que $R + T = 1$ por tanto comprobamos en Mathematica la igualdad y vemos que efectivamente da 1.

Finalmente para comprobar si la onda queda atrapada en el pozo de potencial o consigue atravesarlo debemos fijarnos en el valor de E puesto que V es constante. En cualquier caso deberiamos dar valores a las constantes $m, V, \hbar$ y comprobar el valor de E con respecto a V:

a) Si $E \gg V \Rightarrow T \approx 1$ y $R \approx 0$.
b) Si $E > V \Rightarrow T$ y R tendrán valores aleatorios.
c) Si $E = V$ o $E < V \Rightarrow$ la onda quedará encerrada en el pozo de potencial.