Mecánica Cuántica: Tarea 4

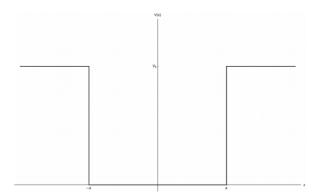
Tomás Ricardo Basile Álvarez 316617194

7 de julio de 2021

Problema 1

Calcula los coeficientes de transmisión y de reflexión para los estados con energía mayor a V_0 sobre el pozo de potencial finito que vimos en clase

$$V(x) = \begin{cases} V_0 , |x| \ge a \\ 0 , |x| < a \end{cases}$$



Puedes concentrarte en el caso de un haz de energía definida que incide desde x < -a

Dividimos el problema en 3 regiones y resolvemos la ecuación de Schrodinger para cada uno:

■ Región 1 ($x \le -a$): En esta región el potencial es V_0 , por lo que la ecuación de Schrodinger es: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0)\psi \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi$ Definimos $k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} > 0$ (es positivo porque $E > V_0$).

Entonces, la ecuación es $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$ y la solución general es:

$$\psi(x) = Be^{-ikx} + Ae^{ikx}$$

Con A, B constantes.

■ Región 2 ($-a \le x \le a$): En esta región el potencial es 0, por lo que la ecuación de Schrodinger es $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$ Definimos $l^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$ (positivo porque $E > V_0 > 0$)

Entonces, la ecuación es $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi$ y la solución general es:

$$\psi(x) = Ce^{-ilx} + De^{ilx}$$

Con C, D constantes.

■ Región 3 ($x \ge a$): En esta región el potencial es el mismo que en la región I, por lo que la solución es la misma $\psi(x) = Fe^{-ikx} + Ge^{ikx}$ Sin embargo, como Fe^{-ikx} representa una onda que va a la izquierda (hacia el pozo), hacemos F = 0. Pues el problema sólo consiste de un haz que llega desde x < -a al pozo y una parte de él rebota y la otra se transmite hacia el lado derecho. Por lo que la solución aquí es:

$$\psi(x) = Ge^{ikx}$$

En resumen:

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{-ikx} + Ae^{ikx} &, x \le -a \\ Ce^{-ilx} + De^{ilx} &, -a \le x \le a \\ Ge^{ikx} &, x \ge a \end{cases}$$

Ahora aplicamos las condiciones de frontera, que son 4:

■ Continuidad de ψ en -a:

La función ψ debe de valer lo mismo en a sin importar si la evaluamos desde la Región I o la II. Entonces, evaluamos en a para estas dos regiones y las igualamos:

$$Be^{ika} + Ae^{-ika} = Ce^{ila} + De^{-ila} \quad (1)$$

■ Continuidad de ψ' en -a:

La derivada de la función debe de valer lo mismo en -a ya sea si la evaluamos con la expresión de la región I o de la II. Entonces derivamos estas dos expresiones y las evaluamos en -a:

$$\frac{d}{dx} \left(Be^{-ikx} + Ae^{ikx} \right)_{x=-a} = \frac{d}{dx} \left(Ce^{-ilx} + De^{ilx} \right)_{x=-a}$$

$$\Rightarrow ik \left(-Be^{ika} + Ae^{-ika} \right) = il \left(-Ce^{ila} + De^{-ila} \right)$$

$$\Rightarrow k \left(-Be^{ika} + Ae^{-ika} \right) = l \left(-Ce^{ila} + De^{-ila} \right) \quad (2)$$

• Continuidad de ψ en a:

Ahora igualamos las expresiones de ψ en a de la región II y de la región III:

$$Ce^{-ila} + De^{ila} = Ge^{ika} \quad (3)$$

• Continuidad de ψ' en a:

Ahora igualamos las derivadas de la región II y III en a para asegurar que la derivada sea continua en x = a:

$$\frac{d}{dx} \left(Ce^{-ilx} + De^{ilx} \right)_{x=a} = \frac{d}{dx} \left(Ge^{ikx} \right)_{x=a}$$

$$\Rightarrow il \left(-Ce^{-ila} + De^{ila} \right) = ik \left(Ge^{ika} \right)$$

$$\Rightarrow l \left(-Ce^{-ila} + De^{ila} \right) = kGe^{ika} \quad (4)$$

Entonces, las 4 ecuaciones que hemos obtenido son:

1)
$$Be^{ika} + Ae^{-ika} - Ce^{ila} - De^{-ila} = 0$$

2)
$$-Bke^{ika} + Ake^{-ika} + Cle^{ila} - Dle^{-ila} = 0$$

3)
$$Ce^{-ila} + De^{ila} - Ge^{ika} = 0$$

$$4) -Cle^{-ila} + Dle^{ila} - Gke^{ika} = 0$$

Tenemos 5 variables (A, B, C, D, G) y 4 ecuaciones. Entonces podemos despejar estas ecuaciones para expresar cada una de las variables en términos de A.

 \blacksquare Primero encontraremos C, D en términos de G usando las ecuaciones 3 y 4:

Multiplicamos la ecuación 3) por -l para darnos $-Cle^{-ila} - Dle^{ila} + Gle^{ika} = 0$ y ahora la sumamos con la ecuación 4): $-Cle^{-ila} - Cle^{-ila} - Dle^{ila} + Dle^{ila} + Gle^{ika} - Gke^{ika} = 0$ $\Rightarrow -2Cle^{-ila} + G(l-k)e^{ika} = 0$ $\Rightarrow C = \frac{G(l-k)}{2l}e^{ia(k+l)}$

Nuevamente multiplicamos la ecuación 3) por -l: $-Cle^{-ila} - Dle^{ila} + Gle^{ika} = 0$ Ahora le restamos la ec. 4): $-Cle^{-ila} + Cle^{-ila} - Dle^{ila} - Dle^{ila} + Gle^{ika} + Gke^{ika} = 0$ $\Rightarrow -2Dle^{ila} + G(l+k)e^{ika} = 0$ $\Rightarrow D = \frac{G(l+k)}{2l}e^{ia(k-l)}$

■ Ahora Sustituimos estas expresiones de C y D en las ecuaciones 1 y 2:

1)
$$Be^{ika} + Ae^{-ika} - \left(\frac{G(l-k)}{2l}e^{ia(k+l)}\right)e^{ila} - \left(\frac{G(l+k)}{2l}e^{ia(k-l)}\right)e^{-ila} = 0$$

2) $-Bke^{ika} + Ake^{-ika} + \left(\frac{G(l-k)}{2l}e^{ia(k+l)}\right)le^{ila} - \left(\frac{G(l+k)}{2l}e^{ia(k-l)}\right)le^{-ila} = 0$

Simplificando:

1)
$$Be^{ika} + Ae^{-ika} - \frac{G}{2l}e^{ika}\left[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila}\right] = 0$$

2) $-Bke^{ika} + Ake^{-ika} + \frac{G}{2}e^{iak}\left[(l-k)e^{2ila} - (l+k)e^{-2ila}\right] = 0$

• Usamos estas dos ecuaciones para expresar G y B en términos de A.

A es la amplitud del haz que llega desde x < -a y se mueve hacia el pozo (pues A aparece en la solución de la región I como $\psi(x) = Be^{-ikx} + Ae^{ikx}$, entonces A es el coeficiente de la onda que se mueve hacia la derecha).

Por otro lado, B es la amplitud de la onda reflejada en esta misma región.

Y G es la onda transmitida en la región III que se mueve hacia la derecha.

Por ello, para calcular los coeficientes, necesitamos encontrar G, B en términos de la amplitud del haz original A.

$$\begin{aligned} & \text{Multiplicar la ec. 1) por } k: & Bke^{ika} + Ake^{-ika} - \frac{Gk}{2l}e^{ika}\left[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila}\right] = 0 \\ & \text{Y ahora le sumamos la ec. 2)} : & Bke^{ika} - Bke^{ika} + Ake^{-ika} + Ake^{-ika} - \frac{Gk}{2l}e^{ika}\left[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila}\right] + \frac{G}{2}e^{iak}\left[(l-k)e^{2ila} - (l+k)e^{-2ila}\right] = 0 \\ & \Rightarrow & 2Ake^{-ika} + \frac{G}{2}e^{ika}\left[\frac{-k(l-k)}{l}e^{2ila} + \frac{-k(l+k)}{l}e^{-2ila} + (l-k)e^{2ila} - (l+k)e^{-2ila}\right] = 0 \\ & \Rightarrow & 2Ak + \frac{G}{2}e^{2ika}\left[\frac{(k-l)^2}{l}e^{2ila} - \frac{(k+l)^2}{l}e^{-2ila}\right] = 0 \\ & \Rightarrow & G = -\frac{4kA}{e^{2ika}\left[\frac{(k-l)^2}{l}e^{2ila} - \frac{(k+l)^2}{l}e^{-2ila}\right]} \\ & \Rightarrow & G = -\frac{4klA}{e^{2ika}\left[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}\right]} \end{aligned}$$

Ahora que ya tenemos G en términos de A, encontremos B en términos de A. Para ello, consideramos la ec. (1) $Be^{ika} + Ae^{-ika} - \frac{G}{2l}e^{ika}\left[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila}\right] = 0$

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} + \frac{G}{2l} \left[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila} \right]$$
 usamos el valor encontrado de G:

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} - \frac{2ila}{2le^{2ika}\left[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila}\right]} \frac{2le^{2ika}\left[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}\right]}{2le^{2ila}\left[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}\right]}$$

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} \left(1 + \frac{2k[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila})}{(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}} \right)$$

$$2le^{2ika} \left[(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila} \right]$$

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} \left(1 + \frac{2k[(l-k)e^{2ila} + (l+k)e^{-2ila})}{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila}} \right)$$

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} \left(\frac{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila} + 2k(l-k)e^{2ila} + 2k(l+k)e^{-2ila}}{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila}} \right)$$

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} \left(\frac{(l^2 - k^2)e^{2ila} - (l^2 - k^2)e^{-2ila}}{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila}} \right)$$

$$\Rightarrow B = A(k^2 - l^2)e^{-2ika} \frac{e^{2ila} - e^{-2ila}}{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila}}$$

$$\Rightarrow B = A(k^2 - l^2)e^{-2ika} \frac{2i\sin(2la)}{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila}}$$

$$\Rightarrow B = -Ae^{-2ika} \left(\frac{(l^2 - k^2)e^{2ila} - (l^2 - k^2)e^{-2ila}}{(k - l)^2 e^{2ila} - (k + l)^2 e^{-2ila}} \right)$$

$$\Rightarrow B = A(k^2 - l^2)e^{-2ika} \frac{e^{2ila} - e^{-2ila}}{(k-l)^2 e^{2ila} - (k+l)^2 e^{-2ila}}$$

$$\Rightarrow B = A(k^2 - l^2)e^{-2ika} \frac{2i\sin(2la)}{(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}}$$

Dejaremos a B expresado así.

Con esto ya podemos calcular el coeficiente de transmisión. Que se define como el cuadrado del cociente de la amplitud de la onda que sale por la derecha entre la amplitud de la onda entrante. Es decir, $T = \frac{|G|^2}{|A|^2}$. Lo calculamos:

$$T = \frac{|G|^2}{|A|^2} = \left| \frac{4kl}{e^{2ika}[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}]} \right|^2$$

$$= \frac{16k^2l^2}{[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}][(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}]^*}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}][(k-l)^2e^{-2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}]}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{(k-l)^4 + (k+l)^4 - (k+l)^2(k-l)^2e^{-4ila} - (k+l)^2(k-l)^2e^{4ila}}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - (k^2 - l^2)^2[e^{4ila} + e^{-4ila}]}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - 2(k^4 - 2k^2l^2 + l^4)\cos(4la)}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - 2(k^4 - 2k^2l^2 + l^4)(1 - 2\sin^2(2la))}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - 2(k^4 - 2k^2l^2 + l^4) + 4(k^4 - 2k^2l^2 + l^4)\sin^2(2la)}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - 2(k^4 - 2k^2l^2 + l^4) + 4(k^4 - 2k^2l^2 + l^4)\sin^2(2la)}$$

$$= \frac{16k^2l^2}{16k^2l^2 + 4(k^4 - 2k^2l^2 + l^4)\sin^2(2la)} = \frac{16k^2l^2}{16k^2l^2 + 4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}$$

Ahora usamos las expresiones definidas para k y l para sustituirlas aquí. Recordamos que $k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \text{ y que } l^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$

Entonces nos queda que:

$$T = \frac{16\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \frac{2mE}{\hbar^2}}{16\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \frac{2mE}{\hbar^2} + 4\left(\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2(2la)}$$

$$= \frac{64(E - V_0)E}{64(E - V_0)E + 4(4V_0^2)\sin^2(2la)}$$

$$T = \frac{4(E - V_0)E}{4(E - V_0)E + V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)}$$

Y ahora calculamos el coeficiente de reflexión. Que se define como el cuadrado de la amplitud de la onda reflejada (que tiene amplitud B) entre el cuadrado de la amplitud de la onda entrante (que es la A).

Entonces:

$$\begin{split} R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| (k^2 - l^2)e^{-2ika} \frac{2i\sin(2la)}{(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}} \right|^2 \\ &= \frac{(k^2 - l^2)^2(4)\sin^2(2la)}{|(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}|^2} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}][(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}]^*} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{[(k-l)^2e^{2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}][(k-l)^2e^{-2ila} - (k+l)^2e^{-2ila}]} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{[(k-l)^4 + (k+l)^4 - (k-l)^2(k+l)^2e^{4ila} - (k+l)^2(k-l)^2e^{-4ila}} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - (k^2 - l^2)^2[e^{4ila} + e^{-4ila}]} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^4 - (k^2 - l^2)^2[2\cos(4la)]} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^2 - 2(k^2 - l^2)^2[1 - 2\sin^2(2la)]} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{2k^4 + 12k^2l^2 + 2l^2 - 2k^4 + 4k^2l^2 - 2l^4 + 4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)} \\ &= \frac{4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)}{16k^2l^2 + 4(k^2 - l^2)^2\sin^2(2la)} \end{split}$$

Ahora usamos las expresiones definidas para k y l para sustituirlas aquí. Recordamos que $k^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ y que $l^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$.

Entonces nos queda que:

$$R = \frac{4\left(\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2(2la)}{16\left(\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \frac{2mE}{\hbar^2}\right) + 4\left(\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2(2la)}$$

$$= \frac{4\frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4} \sin^2(2la)}{16\left(\frac{4m^2E(E - V_0)}{\hbar^4}\right) + 4\frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4} \sin^2(2la)}$$

$$= \frac{V_0^2 \sin^2(2la)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(2la)}$$

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

En resumen, tenemos que:

$$T = \frac{4(E - V_0)E}{4(E - V_0)E + V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)}$$
$$V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)$$

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

Podemos ver varias cosas interesantes sobre estos resultados:

- $0 \le T \le 1$: Esto está claro porque el numerador de T es menor que el denominador, ya que $4(E-V_0)E \le 4(E-V_0)E + V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)$ pues el seno cuadrado es siempre positivo (o cero).
- $0 \le R \le 1$: Esto está claro porque el numerador de R es menor que el denominador, ya que $V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right) \le 4(E-V_0)E + V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)$ pues $4(E-V_0)E$ es
- T + R = 1: Viendo los resultados de T y R, es fácil ver que se comprueba esta relación.
- \bullet Podemos ver que si la energía del haz entrante es muy alta $E >> V_0$ entonces po-

demos despreciar los
$$V_0$$
 frente a los E , por lo que el valor de T nos queda $T \simeq \frac{4(E)(E)}{4(E)(E) + V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)} = \frac{4E^2}{4E^2 + V_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right)} \simeq \frac{4E^2}{4E^2} = 1$

Y entonces, R=0. Es decir, para altas energía, todo el haz es transmitido y nada es reflejado, lo cual tiene sentido.

Problema 2

Encuentra el espectro de energías negativas y las funciones de onda correspondientes en el potencial $V(x) = -\alpha \delta(x)$

Como $V(x) = -\alpha \delta(x)$, la ecuación de Schrodinger nos queda como:

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

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\delta(x)\psi = E\psi$$

Dividimos el espacio en dos regiones, x < 0 y x > 0:

• Región I x < 0:

En esta región $\delta(x) = 0$ por lo que la ecuación queda como $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$.

Definimos $k^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} > 0$ (es real y positiva porque E < 0 por el enunciado del problema)

Entonces la ecuación toma la forma $\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$

La solución general de esta ecuación diferencial se puede ver sencillamente que está dada por $\psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$

Sin embargo, el término Ae^{-kx} se hace infinitamente grande conforme $x \to -\infty$, lo cual haría la solución imposible de normalizar, por lo que debemos de escoger A=0. Entonces, la solución en esta región es:

$$\psi(x) = Be^{kx}$$

• Región II x > 0:

En esta región $\delta(x)=0$ por lo que la ecuación queda como $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi \ \Rightarrow \ \frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi.$

Usamos nuevamente $k^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} > 0$

Entonces la ecuación toma la forma $\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$

Nuevamente, la solución general de está ecuación diferencial está dada por $\psi(x)=Ce^{-kx}+De^{kx}$

Sin embargo, el término De^{kx} se hace infinitamente grande conforme $x\to\infty$, lo cual haría la solución imposible de normalizar, por lo que debemos de escoger D=0. Entonces, la solución en esta región es:

$$\psi(x) = Ce^{-kx}$$

En resumen, tenemos que:

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{kx} & , x < 0 \\ Ce^{-kx} & , x > 0 \end{cases}$$

Ahora aplicamos las condiciones de frontera al problema.

• Continuidad de ψ en x = 0:

Debemos de pegar ambos casos de la función de onda de tal forma que sea continua en 0. Para ello, ambos lados evaluados en 0 deben de tener el mismo resultado:

$$Be^{kx}\big|_{x=0} = Ce^{-kx}\big|_{x=0}$$

 $\Rightarrow Be^0 = Ce^0$
 $\Rightarrow B = C \quad (1)$

Con lo que conseguimos una primera ecuación.

• Continuidad de ψ' en x=0

En este caso, como vimos en clase, cuando el potencial se va a infinito en un punto, la derivada de la función de onda no va a ser continua en dicho punto.

Sin embargo, en clase encontramos que para este potencial $V(x) = -\alpha \delta(x)$ que diverge en 0, se debe de cumplir la siguiente condición:

$$\Delta \partial_x \psi(x) \bigg|_{x=0} = \frac{-2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$$

Tenemos que $\psi(0) = Be^{kx} \Big|_{x=0} = B$ (podemos evaluar $\psi(0)$ usando la expresión para

x < 0 o para x > 0 pues ya nos aseguramos de que valgan lo mismo en x = 0) Y tenemos que $\Delta \partial_x \psi(x)\big|_{x=0} = \partial_x (Ce^{-kx})\big|_{x=0} - \partial_x (Be^{kx})\big|_{x=0} = -Cke^{-kx}\big|_{x=0} - Bke^{kx}\big|_{x=0} = k(-C-B)$

Usando estas dos expresiones en la condición que mencionamos, tenemos que:

$$k(-C - B) = \frac{-2m\alpha}{\hbar^2} B$$

$$\Rightarrow -2kB = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} B \quad \text{por (1)}$$

$$\Rightarrow k = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad (2)$$

Con lo que hemos encontrado una condición en la variable k.

k debe de cumplir esta condición para que la solución $\psi(x)$ sea válida.

Entonces, usamos la definición de $k = \frac{-2mE}{\hbar}$ en la condición (2):

$$\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow -2mE = \frac{m^2\alpha^2}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Solamente tenemos una energía posible.

Ésta es la única energía negativa posible para el problema.

Encontramos ahora la función de onda correspondiente.

Como vimos, B = C, así que la solución que habíamos encontrado queda como:

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{kx} & , x < 0 \\ Ce^{-kx} & , x > 0 \end{cases}$$

Podemos escribir esto de manera más sencilla usando el valor absoluto, $\psi(x) = Be^{-k|x|}$

Ahora, para obtener el valor de B, normalizamos la función de onda, pidiendo que se cumpla $\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 = 1$:

$$1 = \int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 dx$$

$$= \int_{\mathbb{R}} |Be^{-k|x|}|^2 dx$$

$$= B^2 \int_{\mathbb{R}} e^{-2k|x|} dx$$

$$= 2B^2 \int_0^{\infty} e^{-2k|x|} dx \quad \text{porque la función es par}$$

$$= 2B^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx$$

$$= 2B^2 \frac{e^{-2kx}}{-2k} \Big|_0^{\infty}$$

$$= 2B^2 \left(\lim_{x \to \infty} \frac{e^{-2k}}{-2k} - \frac{e^0}{-2k} \right)$$

$$= 2B^2 \left(\frac{1}{2k} \right)$$

$$= \frac{B^2}{k}$$

Por lo tanto,
$$\frac{B^2}{k} = 1 \implies B = \sqrt{k}$$

Entonces, la solución está dada por:

$$\psi(x) = Be^{-k|x|}$$
$$= \sqrt{k}e^{-k|x|}$$

usamos (2)
$$= \sqrt{\frac{\sqrt{m\alpha}}{h}} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}$$

Entonces, la solución al problema es que existe un solo estado, con función de onda y energía dadas por:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{h} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} \quad , \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Problema 3

Calcula los coeficientes de transmisión y de reflexi'on para un haz de energía definida mayor a V_0 que incide desde x < 0 sobre el potencial escalón

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , x < 0 \\ V_0 & , x \ge 0 \end{cases}$$

Nota que en este caso será de particular relevancia usar la corriente de probabilidad

Primero separamos el espacio en dos regiones y resolvemos la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo en cada uno:

• Región I (x < 0):

En esta región V=0, por lo que la ecuación de Schrodinger toma la forma $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}=$

$$E\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

Definimos $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ y nos queda la ecuación $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi$

Se puede ver fácilmente que la solución estará dada por:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

• Región II (x > 0)

En esta región $V = V_0$, por lo que la ecuación de Schrodinger toma la forma $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ +

$$V_0 \psi = E \psi \implies \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi$$

$$\begin{split} V_0 \psi &= E \psi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \psi \\ \text{Definimos } l &:= \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \text{ que es positivo porque } E > V_0 \end{split}$$

Entonces nos queda la ecuación $\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = -l^2 \psi$ que tiene por solución general:

$$\psi(x) = Ce^{ilx} + De^{-ilx}$$

Sin embargo, el término De^{-ilx} representa un haz que se mueve hacia la izquierda en esta región $x \geq 0$. Esto no nos interesa, pues solamente nos interesa un haz que llega desde x < 0, y una parte se refleja en esta misma región, mientras que la otra se transmite hacia la derecha en $x \geq 0$ (representada por el término Ce^{ilx}). Por tanto, haremos D=0. Entonces la solución es:

$$\psi(x) = Ce^{ilx}$$

La solución general nos queda:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + B^{-ikx} &, x \le 0\\ Ce^{ilx} &, x \ge 0 \end{cases}$$

Ahora aplicamos las condiciones de continuidad que debe de cumplir esta función de onda en el punto x=0:

• ψ debe de ser continua en x = 0: Para asegurarnos de esto, ambos casos de la solución ψ (para $x \leq 0$ y para $x \geq 0$) deben de valer lo mismo en x = 0.

Entonces, evaluamos ambos casos en x = 0 e igualamos:

$$Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \Big|_{x=0} = Ce^{ilx} \Big|_{x=0}$$

$$\Rightarrow Ae^{0} + Be^{0} = Ce^{0}$$

$$\Rightarrow A + B = C$$

• ψ' debe de ser continua en x=0. Para asegurarnos de esto, la derivada de ψ en $x \leq 0$ y la de ψ en $x \geq 0$ deben de valer lo mismo al evaluarlas en x=0. Por tanto, derivamos ambas expresiones, evaluamos en 0 e igualamos:

$$\begin{split} \frac{d}{dx} \left[A e^{ikx} + B e^{-ikx} \right]_{x=0} &= \frac{d}{dx} \left[C e^{ilx} \right]_{x=0} \\ \Rightarrow & \left[ikA e^{ikx} - ikB e^{-ikx} \right]_{x=0} = \left[ilC e^{ilx} \right]_{x=0} \\ & \Rightarrow & ikA e^0 - ikB e^0 = ilC e^0 \\ & \Rightarrow & k(A-B) = Cl \end{split}$$

Por lo que nos queda un sistema de ecuaciones:

1)
$$A + B = C$$

2)
$$kA - kB = Cl$$

Como el término Ae^{ikx} en la solución representa al haz que llega desde la izquierda hacia el escalón de potencial, el coeficiente A es en cierto sentido la amplitud de este haz de llegada. Por otro lado, el coeficiente B representa la amplitud del haz que es reflejado y C la de la parte del haz que es transmitido. Buscamos escribir la amplitud reflejada y transmitida en términos de la de la incidente, por lo que usaremos estas ecuaciones para escribir B y C en términos de A.

Primero multiplicamos la ecuación 1) por k: kA + kB = kCY le sumamos la ecuación 2) kA + kA + kB - kB = kC + lC $\Rightarrow 2kA = (k+l)C$ $\Rightarrow C = \frac{2k}{k+l}A$

Ahora sustituimos esta expresión de C en la ecuación 1): $A + B = \frac{2k}{k+l}A$ $\Rightarrow B = \frac{2k}{k+l}A - A$

$$\Rightarrow B = \frac{2k - k - l}{k + l} A = \frac{k - l}{k + l} A$$

Por tanto, tenemos que $B = \frac{k-l}{k+l}A$ y $C = \frac{2k}{k+l}A$

Por lo que hemos logrado expresar B, C en términos de A

Como vimos en clase, cuando a diferencia de los otros problemas de la tarea, el potencial no tiene el mismo valor de ambos lados, no podemos usar la definición sencilla de que el coeficiente de transmisión está dado por $T = |C|^2/|A|^2$.

En este caso, la cantidad propiamente asociada a la intensidad de un haz es la corriente de probabilidad $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} \left[(\nabla \psi) \psi^* - \psi(\nabla \psi^*) \right]$

Y entonces los coeficientes de transmisión y reflexión están dados por $R = J_R/J_I$, $T = J_T/J_I$ Donde J_R es la norma del vector de corriente de probabilidad evaluado para la parte de la función de onda que representa el haz reflejado. Y similarmente con J_T para la transmitida y J_I para la incidente.

En nuestro caso uno dimensional, reemplazamos ∇ por ∂_x y en vez de calcular la norma de \vec{J} , calculamos su valor absoluto.

Entonces, calculemos J_T , J_I , J_R :

$\blacksquare J_I$:

El término que representa a la onda incidente es $\psi_I = Ae^{ikx}$, por lo que la corriente de probabilidad es:

$$J_{I} = \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_{x}\psi_{I})\psi_{I}^{*} - \psi_{I}(\partial_{x}\psi_{I}^{*})]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_{x}Ae^{ikx})A^{*}e^{-ikx} - Ae^{ikx}(\partial_{x}A^{*}e^{-ikx})]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [(ikAe^{ikx})A^{*}e^{-ikx} - Ae^{ikx}(-ikA^{*}e^{-ikx})]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [ik|A|^{2} + ik|A|^{2}]$$

$$= \frac{-k\hbar}{m} |A|^{2}$$

$\blacksquare J_R$:

El término que representa a la onda reflejada es $\psi_R = Be^{-ikx}$, por lo que la corriente

de probabilidad es:

$$J_R = \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_x \psi_R) \psi_R^* - \psi_R (\partial_x \psi_R^*)]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_x B e^{-ikx}) B^* e^{ikx} - B e^{-ikx} (\partial_x B^* e^{ikx})]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [(-ikB e^{-ikx}) B^* e^{ikx} - B e^{ikx} (ikB^* e^{ikx})]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [-ik|B|^2 - ik|B|^2]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} |B|^2$$

 $\blacksquare J_T$:

El término que representa a la onda reflejada es $\psi_T = Ce^{ilx}$, por lo que la corriente de probabilidad es:

$$J_T = \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_x \psi_T) \psi_T^* - \psi_T (\partial_x \psi_T^*)]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [(\partial_x C e^{ilx}) C^* e^{-ilx} - C e^{ilx} (\partial_x C^* e^{-ilx})]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [ilC e^{ilx} C^* e^{-ilx} + ilC e^{ilx} C^* e^{-ilx}]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [il|C|^2 + il|C|^2]$$

$$= -\frac{\hbar l}{m} |C|^2$$

Entonces, por lo dicho antes, el coeficiente de transmisión está dado por:

$$T = |J_T|/|J_I|$$

$$= \frac{\hbar l}{m}|C|^2/\frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

$$= \frac{l}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2}$$

usamos la expresión para C que encontramos antes, $C = \frac{2k}{k+l}A$

$$= \frac{l}{k} \frac{\frac{4k^2}{(k+l)^2} |A|^2}{|A|^2}$$
$$= \frac{4kl}{(k+l)^2}$$

Usamos ahora la definición de $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ y de $l=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

$$T = \frac{4kl}{k^2 + 2kl + l^2}$$

$$= \frac{4\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}}{\frac{2mE}{\hbar^2} + 2\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

$$= \frac{8m\sqrt{E(E - V_0)}}{2m(E + 2\sqrt{E(E - V_0)} + (E - V_0))}$$

$$= \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{2E + 2\sqrt{E(E - V_0)} - V_0}$$

Ahora hacemos lo mismo para calcular R:

$$R = |J_R|/|J_I|$$

$$= \frac{\hbar k}{m} |B|^2 / \frac{k\hbar}{m} |A|^2$$

$$= \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$= \frac{(k-l)^2}{(k+l)^2} |A|^2$$

$$= \frac{(k-l)^2}{(k+l)^2}$$

Y ahora usamos la definición de k y de l:

$$R = \frac{k^2 - 2kl + l^2}{k^2 + 2kl + l^2}$$

$$= \frac{\frac{2mE}{\hbar^2} - 2\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}{\frac{2mE}{\hbar^2} + 2\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

$$= \frac{E - 2\sqrt{E(E - V_0)} + (E - V_0)}{E + 2\sqrt{E(E - V_0)} + E - V_0}$$

$$= \frac{2E - V_0 - 2\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}$$

Entonces, los coeficientes son:

$$T = \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}$$

$$R = \frac{2E - V_0 - 2\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}$$

Podemos ver directamente que se cumple T+R=1, como debería.

A parte, vemos que si $E >> V_0$ y despreciamos V_0 , entonces T es convierte en $T=\frac{4E}{2E+2E}=1$ y $R=\frac{2E-2E}{2E+2E}=0$, es decir, todo el haz se transmite, justo como se esperaría.