Ecuación de Shrödinger

U T N F R C

- **Autores:**
  - Valentino Rao - Leg. 402308
  - Ignacio Ismael Perea - Leg. 406265
  - Manuel Leon Parfait - Leg. 406599
  - Gonzalo Filsinger - Leg. 400460
  - Agustín Coronel - Leg. 402010
  - Marcos Raúl Gatica - Leg. 402006

- **Curso:** 2R1.
- **Asignatura:** Física electrónica.
- **Institución:** Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional de Córdoba

Índice

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Función de onda

En la mecánica cuántica, la función de onda Ψ describe el estado de una partícula en un sistema. Por si misma, Ψ no tiene un significado físico directo, sin embargo, sirve para representar la densidad de probabilidad de encontrar una partícula en un lugar y momento dado (magnitud instantánea):

$$|\Psi|^2$$

Para una función de onda compleja, la densidad de probabilidad se calcula como:

$$|\Psi|^2 = (\Psi^*)(\Psi)$$

Siendo Ψ^* el complejo conjugado de Ψ. Lo que esta operación asegura que la densidad de probabilidad sea positivo y real (para que físicamente tenga significado).

La función de onda, Ψ, es una función compleja y se expresa:

$$\Psi = A + Bi$$
$$\Psi^* = A - Bi \qquad \textit{(El complejo conjugado)}$$

Siendo A y B números reales.

Por lo tanto, una vez presentadas las funciones, es posible describir la densidad de onda compleja como:

$$|\Psi|^2 = (\Psi^*)(\Psi) = A^2 + B^2$$

1.2. La normalización

Existen ciertas condiciones para que una función de onda represente de manera adecuada el estado de una partícula, siendo una de ellas que la densidad de probabilidad debe ser normalizable.

Normalizar $|\Psi|^2$ significa que debe ser integrable en todo el espacio y converger en un valor finito. Físicamente se puede interpretar que ese valor representa un lugar determinado en el espacio donde existe la partícula. La normalización es igual a:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1$$

La ecuación hace referencia a la probabilidad total de encontrar la partícula en algún lugar del espacio equivale a 1. Si la función de onda compleja cumple la integral, cumple la normalización. También es posible multiplicar una constante a la función para cumplir a normalización en caso de no poder.

1.3. Funciones de onda ”bien comportadas”

Para que una función de onda Ψ sea válida en un sistema cuántico, debe:

- Ser continua y de valor único en cada punto del espacio, ya que la probabilidad de encontrar una partícula en algún lugar específico debe ser un solo valor.
- Sus derivadas parciales, llámese:

  $$\frac{\partial\Psi}{\partial x}, \frac{\partial\Psi}{\partial y}, \frac{\partial\Psi}{\partial z}$$

  deben ser continuas y converger en un solo valor para cada punto en el espacio. Esto permite asegurar que no existan discontinuidades abruptas en la función de onda.
- Ψ debe ser normalizable; tiende a 0 cuando $(x; y; z) \to \infty$.

1.4. La interpretación probabilística

Una vez aclarado las condiciones de normalización y de ”bien comportada”, la probabilidad de encontrar la partícula en una región específica del espacio puede calcularse integrando $|\Psi|^2$ en dicha región.

Supongamos que una partícula restringida a moverse en la dirección x, la probabilidad de encontrarla entre las posiciones x_1 y x_2 puede ser expresada por:

$$P(x_1 < x < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi|^2 dx$$

2. LA ECUACIÓN DE ONDA CLÁSICA

Una de las bases fundamentales de la mecánica cuántica es la ecuación de Schrödinger, que es análogo a lo que es la segunda ley de Newton en la mecánica clásica.

Newton describe la evolución de un cuerpo en el espacio y el tiempo, mientras que Schrödinger describe la evolución de una función de onda Ψ, la cual contiene información sobre el estado de una partícula.

$$\textit{Ec. Onda clásica:} \qquad \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

La ecuación de onda clásica deriva de principios como la segunda ley de Newton para ondas mecánicas y las ecuaciones de Maxwell para las ondas electromagnéticas. Su propósito es describir la propagación de una onda y en dirección x a una velocidad $\vec{u}$.

3. ECUACIÓN SCHRÖDINGER: DEPENDIENTE DEL TIEMPO

La función de onda Ψ sirve como equivalente cuántico de una variable de onda como y en el caso de las ondas clásicas. La diferencia significativa es que Ψ puede ser una cantidad que $\in \mathbb{C}$ y no representa directamente una magnitud observable. Como se ha mencionado en la introducción, permite conocer la probabilidad de encontrar una partícula en un punto con $|\Psi|^2$.

3.1. Expresión de la función de onda para una partícula libre

Partiendo de un caso ideal de una partícula libre moviéndose en la dirección $+x$, la función de onda se expresa como:

$$\Psi = Ae^{-i\omega(t-x/v)}$$

Esto describe una onda que se propaga libremente. Al reemplazar ω y v por sus respectivas relaciones con la energía E y el momento p de la partícula, se obtiene:

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(vt - x\lambda)}$$

La fórmula funciona cuando la partícula no tiene restricciones, pero si la misma está sujeta a un potencial (como un electrón unido a un átomo por el campo eléctrico de su núcleo), hace falta obtener una ecuación diferencial que describa Ψ para esas circunstancias.

Si se diferencia la expresión Ψ con respecto a x y a t, y se introduce la relación entre la energía total, energía cinética y potencial, se deriva la forma dependiente del tiempo de la ecuación de Schrödinger para una dimensión:

Función de onda de una partícula que se mueve libremente:

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(vt - x/\lambda)}$$

Se reemplaza ω por $2\pi v$ y la velocidad v en términos de la longitud de onda λ, se obtiene:

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(\frac{vt - x}{\lambda})}$$

Se sabe que:

- La energía total (por Planck) $E = hv = 2\pi\hbar v$
- $\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$

Usando esas relaciones, se puede expresar Ψ como:

$$\Psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et - px)}$$

El resultado es la expresión que describe una partícula que se mueve libremente en la dirección x con energía E y un momento p.

3.2. Derivada segunda de Ψ con respecto a x

Se procede a diferenciar Ψ dos veces con respecto a x para obtener una relación entre el momento p y la función de onda:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -\frac{ip}{\hbar}\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi$$

Se despeja $p^2\Psi$:

$$p^2\Psi = -\hbar\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

3.3. Derivada de Ψ con respecto a t

Se hace la diferenciación de la función onda Ψ con respecto a t:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

Se multiplica ambos lados por $\hbar$ e introduciendo el operador $i\hbar$ en el primer miembro, se obtiene:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi$$

3.4. Relación entre la energía total E , cinética y potencial U

Para una partícula a velocidad menores que c, la energía total E se expresa como la suma de la energía potencial cinética y potencial:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U_{(x;t)}$$

Si se multiplica por ambos miembros la función de onda Ψ se obtiene:

$$E\Psi = \Psi(\frac{p^2}{2m} + U_{(x;t)})$$

$$E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + U_{(x;t)}\Psi$$

Ahora se sustituye los valores obtenidos en los pasos anteriores para $E\Psi$ y $p^2\Psi$ usando las derivadas de Ψ con respecto a x y t:

I. De la relación de E con la derivada temporal de Ψ, se sustituye $E\Psi$ por $i\hbar\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$

II. De la relación de p^2 con la derivada espacial de Ψ, se sustituye $p^2\Psi$ por $-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$

En resumen, se obtiene:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi$$

3.5. Resultado final: Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión

Esta ecuación describe cómo evoluciona la función de onda Ψ de una partícula en función del tiempo bajo la influencia de un potencial $U_{(x;t)}$. Se puede llevar a tres dimensiones $(x; y; z)$ adicionando las energías cinéticas de cada coordenada:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}) + U\Psi$$

3.6. Ejemplo: electrón confinado en una caja

I. **Planteamiento:** Un electrón se encuentra confinado en una ”caja” de tamaño $L = 0,1nm$. Se asume que esta caja tiene ”paredes” impenetrables, lo que significa que fuera de la caja ($x < 0$ y $x > L$), la función de onda Ψ_x es 0, debido a la probabilidad nula de que el electrón exista fuera de este rango.

II. **Aplicación de la ecuación de Schrödinger:** Para una partícula de masa m en una dimensión con energía total E, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

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

Dentro de la "caja" (entre x = 0 y x = L), la energía potencial U es cero, por lo que la ecuación se reduce a:

$$\frac{d^2\Psi_{(x)}}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_{(x)}$$

Se define $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, lo que convierte la ecuación diferencial en:

$$\frac{d^2\Psi_{(x)}}{dx^2} + k^2\Psi_{(x)} = 0$$

III. **Solución general de la función de onda:**

$$\Psi_{(x)} = Asen(kx) + Bcos(kx)$$

Donde A y B son constantes de integración determinadas por las condiciones de frontera.

IV. **Condiciones de frontera:**
Dado que la probabilidad de que el electrón esté fuera de la caja es cero, tenemos que:

- En x = 0: $\Psi_{(0)}$ = 0, lo que implica que B = 0
- En x = L: $\Psi_{(L)}$ = 0, lo que implica que $Asen(kL)$ = 0

Para satisfacer esta última condición, kL debe ser un múltiplo entero de π:

$$kL = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{L} \qquad \text{para } n = 1, 2, 3...$$

V. **Energía cuantizada:**
Sustituyendo $k = \frac{n\pi}{L}$ en la definición de k, obtenemos los valores de energía permitidos:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{L})^2 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Siendo:

- $m = 9,1{,}10^{-31}kg$
- $\hbar = \frac{6{,}63{,}10^{-34}Js}{2\pi}$
- $L = 10^{-10}m$

La expresión final para la energía queda como:

$$E_n = \frac{(n^2)(6{,}63{,}10^{-34}Js)^2}{(8)(9{,}1{,}10^{-31kg})(10^{-10}m)} \approx 6{,}10^{-18}n^2J$$

VI. **Interpretación de los niveles energéticos:**
Para $n = 1$, la energía mínima del electrón es $E_1 \approx 6{,}10^{-18}J$, que son aproximadamente $38eV$. Los niveles de energía son:

- $E_1 = 38eV$
- $E_2 = 4x38eV = 152eV$
- $E_3 = 9x38eV = 342eV$
- $E_4 = 16x38eV = 608eV$

Estos niveles energéticos cuantizados implican que el electrón en la "caja" solo puede existir para ciertos estados energéticos discretos, en lugar de tener una energía continua. Esta cuantización es característico en sistemas confinados.

4. FORMA DE ESTADO ESTACIONARIO

4.1. Desarrollo

En muchas situaciones, la energía potencial de una partícula no depende explícitamente del tiempo; las fuerzas que actúan sobre ella, y por lo tanto U, varían solo con la posición de la partícula. Cuando esto es cierto, la ecuación de Schrödinger puede simplificarse eliminando toda referencia a t. Comenzamos observando que la función de onda unidimensional de una partícula no restringida puede escribirse como:

$$\Psi = Ae^{-j\cdot(\hbar^{-1})\cdot(Et-px)}$$
$$\Psi = Ae^{-jEt\cdot\hbar^{-1}} \cdot e^{jpx\cdot\hbar^{-1}}$$
$$\Psi = \psi(x)e^{-jEt/\hbar}$$

Donde Ψ es el producto de una función dependiente del tiempo $e^{-jEt\cdot\hbar^{-1}}$ y de una función dependiente de la posición ψ. Si sustituimos Ψ en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, obtenemos:

$$E\cdot\psi e^{-tjE\cdot\hbar^{-1}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot e^{-tjE\cdot\hbar^{-1}}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\cdot\psi e^{-tjE\cdot\hbar^{-1}} \quad (1)$$

Si despejamos $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$, obtenemos:

$$E\cdot\psi - U\cdot\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$
$$(E-U)\psi\cdot\frac{2m}{\hbar^2} = -\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$
$$(E-U)\psi\cdot\frac{2m}{\hbar^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula no restringida en una sola dimención. La solución de esta ecuación es una función de onda ψ que depende solo de la posición y que satisface la condición de que la energía total de la partícula es igual a la suma de su energía cinética y su energía potencial. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es una ecuación diferencial de segundo orden que puede resolverse para obtener la función de onda ψ.

Una propiedad importante de la ecuación de estado estacionario de Schrödinger es que, si tiene una o más soluciones para un sistema dado, cada una de estas funciones de onda corresponde a un valor específico de la energía E. Así, la cuantización de la energía aparece en la mecánica ondulatoria como un elemento natural de la teoría, y la cuantización de la energía en el mundo físico se revela como un fenómeno universal característico de todos los sistemas estables.

5. VALORES PROPIOS Y FUNCIONES PROPIAS

Los valores E_n para los cuales la ecuación de Schrödinger tiene soluciones no triviales se llaman valores propios de la ecuación. Las funciones de onda correspondientes a estos valores propios se llaman funciones propias. Por ejemplo los valores propios para los niveles de energía discreta del átomo de hidrógeno son:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2}$$

Donde n es un número entero positivo y m_e es la masa del electrón.

Una variable dinámica G puede no estar cuantizada. En este caso, las mediciones de G realizadas en varios sistemas idénticos no producirán un resultado único, sino una dispersión de valores cuyo promedio es el valor esperado.La condición para que una cierta variable dinámica G esté restringida a los valores discretos G_n,en otras palabras, que G esté cuantizada,es que las funciones de onda ψ_n del sistema sean tales que

Ecuaciones de valores propios

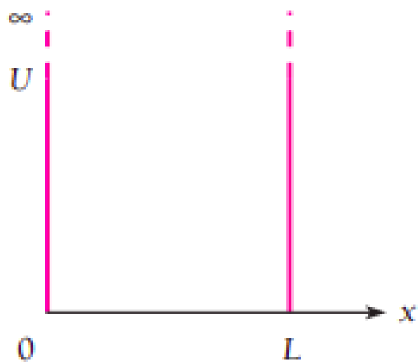
$$\hat{G}\psi_n = G_n\psi_n$$

6. PARTÍCULA EN UNA CAJA

6.1. Pozo de potencial infinito

Como las condiciones limites y la normalización determinan las funciones de onda.

Para resolver la ecuación de Schrödinger, incluso en su estado estacionario, es necesario conocer las condiciones de contorno. En el caso de una partícula en una caja, la condición de contorno es que la función de onda debe ser cero en los extremos de la caja.



$Figura1$

El movimiento de la partícula está restringido a la región $0 \le x \le L$ por paredes infinitamente altas (U infinita). Una partícula no pierde energía al chocar con una pared infinitamente alta, por lo que la energía potencial de la partícula es infinita en los extremos de la caja, mientras U es constante, diremos que $U = 0$ en el interior de la caja para conveniencia.Por que la partícula no puede tener una cantidad de energía potencial infinita, esta misma no puede existir fuera de la caja, por lo tanto $\psi = 0$ para $x \le 0$ y $x \ge L$, lo que tenemos que hacer es encontrar la función de onda ψ para $0 < x < L$.

La ecuación de Schrödinger para una partícula en una caja es:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$$

Donde $U = 0$ en el interior de la caja. La solución general de esta ecuación es:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot E \cdot \psi = 0$$

Para resolver esta ecuación, suponemos que $\psi = e^{r\cdot x}$, donde r es una constante, entonces la derivada segunda de ψ con respecto a x es $\psi = r^2 \cdot e^{r\cdot x}$. Sustituyendo esto en la ecuación anterior, obtenemos:

$$\begin{aligned}
&r^2 \cdot e^{r\cdot x} + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot E \cdot e^{r\cdot x} = 0\\
&e^{r\cdot x}\cdot(r^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot E) = 0\\
&r^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot E = 0\\
&r^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}\cdot E\\
&r = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}\cdot E}\\
&r = \pm j \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}
\end{aligned}$$

Entonces, la solución general de la ecuación de Schrödinger para una partícula en una caja es:

$\psi(x) = C_1 \cdot e^{j\cdot\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot x} + C_2 \cdot e^{-j\cdot\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot x}$
$\psi(x) = C_1 \cdot \cos(...) + j\cdot\sin(...) + C_2\cdot\cos(...) - j\cdot\sin(...)$
$\psi(x) = (C_1 + C_2)\cdot\cos(...) + j\cdot(C_1 - C_2)\cdot\sin(...)$
donde $j\cdot(C_1 - C_2)$ es una constante real que llamaremos A,
y $(C_1 + C_2)$ es otra constante que llamaremos B

$$\psi(x) = B \cdot \cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) + A \cdot \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x)$$

Las condiciones limites nos dicen que $\psi = 0$ en $x = 0$ y $x = L$. Si $cos(0) = 1$ ese termino no puede describir la función de onda, por lo que $B = 0$. Entonces, la función de onda para una partícula en una caja es:

$$\psi(x) = A \cdot \sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) \tag{2}$$

En $x = L$ va a ser 0 para los valores de E_n:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot L = n \cdot \pi$$
$$E = \frac{n^2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2}{2m \cdot L^2}$$

Donde n es un número cuántico, por lo tanto la energía de la partícula en una caja está cuantizada y ademas E_n es un valor propio para cada n, si reemplazamos E en la ecuación (2) obtenemos:

$$\psi = A \cdot \sin(\sqrt{\frac{2mn^2\pi^{2\hbar^2}}{2mL^2}} : \hbar \cdot x)$$
$$\psi = A \cdot \sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x)$$

Entonces obtemos la función propia para los valores propios E_n, esta función propia reuna todos los requerimientos necesarios, es decir, tiene un valor finito para cada número cuántico n, es univaluada en x y ψ y $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ son continuas en $x = 0$ y $x = L$.

$$\psi_n = A \cdot sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x) \tag{3}$$

Si calculamos $|\psi_n|^2$ sobre un espacio finito ($0 \leq x \leq L$) obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \, dx$$
$$\int_0^L |\psi_n|^2 \, dx$$
$$\int_0^L A^2 \cdot sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x) dx$$
$$A^2 \cdot \int_0^L sin^2(\frac{n\pi}{L} \cdot x) dx$$
$$A^2 \cdot \int_0^L \frac{1 - cos(2 \cdot \frac{n\pi}{L} \cdot x)}{2} dx$$
$$A^2 \cdot \int_0^L \frac{1}{2} - \frac{cos(2 \cdot \frac{n\pi}{L} \cdot x)}{2} dx$$
$$\frac{A^2}{2} \cdot \int_0^L 1 - \frac{cos(2 \cdot \frac{n\pi}{L} \cdot x)}{2} dx$$

$$\frac{A^2}{2} \cdot \left[x - \frac{L}{2n\pi} \cdot \sin(\frac{2nx\pi}{L}) \right]_0^L$$
$$\frac{A^2}{2} \cdot L = \int_0^L |\psi_n|^2 \, dx$$

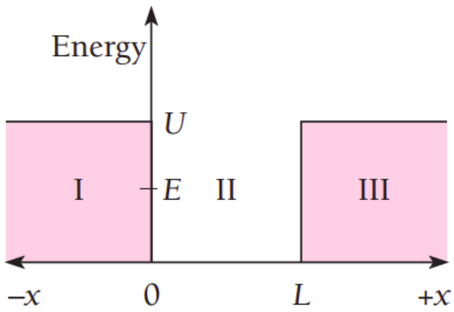
Para normalizar la función de onda, debemos hacer que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \, dx = 1$, por lo que $A^2 \cdot L = 1$, entonces $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Por lo tanto, la función de onda normalizada para una partícula en una caja/ pozo de potencial infinito es con condiciones limites $\psi(0) = \psi(L) = 0$:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot sin(\frac{n\pi}{L} \cdot x) \tag{4}$$

7. POZO DE POTENCIAL FINITO

7.1. Pozo de potencial finito simétrico

La función de onda transpasa la pared con niveles de energía menores a la energía del pozo.



$Figura2$

Tenemos un pozo de potencial de altura U_0 y ancho L. Si $E < U$, entonces la ecuación de Schrödinger es:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U) \cdot \psi = 0$$
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - a^2 \cdot \psi = 0$$

Donde $a = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$, para resolver la ecuación diferencia tenemos que hacer la misma tecnica que en el pozo de potencial infinito, diciendo que:

$$\psi = e^{r \cdot x}$$

Su derivada segunda es

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = r^2 \cdot e^{r \cdot x}$$

Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger obtenemos:

$$r^2 \cdot e^{r \cdot x} - a^2 \cdot e^{r \cdot x} = 0$$
$$e^{r \cdot x} \cdot (r^2 - a^2) = 0$$
$$r^2 - a^2 = 0$$
$$r^2 = a^2$$
$$r = \pm a$$

Entonces, la solución general de la ecuación de Schrödinger para un pozo de potencial finito, en las regiones I y III es:

$$\psi_I = C \cdot e^{a \cdot x} + D \cdot e^{-a \cdot x}$$
$$\psi_{III} = F \cdot e^{a \cdot x} + G \cdot e^{-a \cdot x}$$

Pero las solucines a las ecuación de Schrödinger deben ser finitas para que tengan sentido físico.

ψ_I es la solucion para la región izquierda donde $x < 0$, si en esta region $x \to -\infty$ entonces $e^{-a \cdot x} \to \infty$, entonces D = 0.

Los mismo sucede para ψ_{III}, ya que esta es la solución para la región derecha donde $x > L$, si en esta region $x \to \infty$ entonces $e^{a \cdot x} \to \infty$, entonces F = 0, quedando como solución:

$$\psi_I = C \cdot e^{a \cdot x} \tag{5}$$

$$\psi_{III} = G \cdot e^{-a \cdot x} \tag{6}$$

Para la región II, donde $0 < x < L$, la función de onda es ψ_{II} la partícula se encuentra en el pozo de potencial de altura finita, entonces la solucion es la misma a la primera parte del pozo de potencial infinito;

$$\psi_{II} = A \cdot sin(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) + B \cdot cos(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot x) \tag{7}$$

Para un potencial de pozo finito las condiciones limites eran $\psi(0) = \psi(L) = 0$, lo cual eliminaba al termino coseno, pero en este caso las condiciones son distitan, como la función de onda debe ser continua en $x = 0$ y $x = L$, entonces $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ y $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$, por lo tanto, en $x = 0$: la función de onda $\psi_{II} = C$ y en $x = L$: la función de onda $\psi_{II} = G$

8. EFECTO TÚNEL

Una partícula sin la energía sufuciente para superar una barrera de potencial finita, puede atraversarla con el efecto túnel.

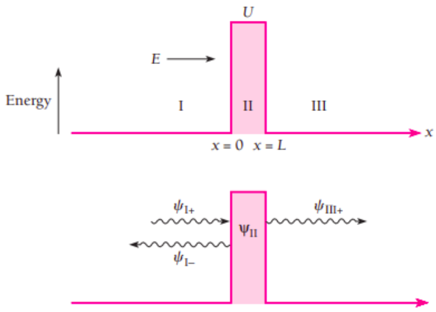


Figura3

En la figura 2, el pozo de potencial tenia una altura U y una anchura L, pero la anchura de las regiones I y III es infinita, en este caso del efecto túnel, la región II tiene una anchura finita, en el caso del pozo con potencial finito las particulas efectivamente pasaban hacia las regiones I y III pero se quedaban atrapadas ahí.

Ahora vamos a imaginar la situación donde una partícula con energía $E < U$ se encuentra en la región I, donde la barrera es de altura U, cuando la particula choca con esta barrera tiene una psoibiblidad, pequeña pero no nula, de atravesarla y llegar a la región III, mientras más alta y más ancha sea la barrera, menos probable es que la partícula la atraviese.

EL efecto túnel es real, este ocurre por ejemplo con las partículas alfa, donde una partícula cuya energía es de unos pocos MeV, mientras que el núcleo posee una barrera de potencial de unos 25 MeV, para que esto suceda la partícula tiene que chocar con la barrera aproximadamente 10^{38} veces o más,otr ejemplo son los diodos de tunel, donde la corriente eléctrica pasa a través de la barrera de potencial, en este caso la barrera es de unos pocos eV y la energía de los electrones es de unos pocos meV.

Vamos a considerar el caso de un conjunto idéntico, donde su energía es $E < U$, este conjunto incide desde la izquierda con una función de onda ψ_{+I} donde esta representa al conjunto antes de chocar contra la pared, la función ψ_{-I} a la parte del conjunto que se refleja, la función ψ_{+III} represneta a la parte del conjunto que realizó efecto túnel y logró atravesar la barrera, finalmente la función ψ_{-II} representa a la parte del conjunto que está atrapada dentro de la región II,dodne una parte hará el efecto túnel y la otra se reflejará.

La probabilidad de que una partícula atraviese la barrera de potencial es:

$$T = e^{-2 \cdot L \cdot K_2} \tag{8}$$

Donde K_2 es:

$$K_2 = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar} \tag{9}$$

Ahora consideramos la ecuación de Schrödinger para la región I y II, donde la energía potencial U es igual a 0, ya que la particula esta libre.

$$\frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E\psi_I = 0$$
$$\frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E\psi_{III} = 0$$

Las soluciónes generales de estas ecuaciones son:

$$\psi_I = A \cdot e^{jk_1 \cdot x} + B \cdot e^{-jk_1 \cdot x}$$
$$\psi_{III} = F \cdot e^{jk_1 \cdot x} + G \cdot e^{-jk_1 \cdot x}$$

Donde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Las soluciones son equivalentes a las obtenidas en el pozo de potencial infinito, pero los de las regiones cambian por la misma logica aplicada en el pozo de potencial infinito.

La función de onda entrante es:

$$\psi_{I+} = A \cdot e^{jk_1 \cdot x}$$

Y la función de onda reflejada es:

$$\psi_{I-} = B \cdot e^{-jk_1 \cdot x}$$

Por lo que la funcion de onda total en la región I es:

$$\psi_I = \psi_{I+} + \psi_{I-} = A \cdot e^{jk_1 \cdot x} + B \cdot e^{-jk_1 \cdot x}$$

La función de onda en la región III es solo la saliente de la región II, por lo que:

$$\psi_{III} = \psi_{III+} = F \cdot e^{jk_1 \cdot x}$$

La posibilidad de transmisión es la razón del flujo de particulas entrantes y salientes al producirse el efecto tunel.

$$T = \frac{S_{III}}{S_I} = \frac{|\psi_{III+}|^2 \upsilon_{III+}}{|\psi_{I+}|^2 \upsilon_{I+}} = \frac{FF^* \upsilon_{III+}}{AA^* \upsilon_{I+}}$$

$$S = |\psi|^2 \upsilon$$

Donde S es el flujo y υ es la velocidad del grupo.

Ahora planteamos la ecuación de Schrödinger para la región II, donde $U > E$.

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U)\psi_{II} = 0$$
$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (U - E)\psi_{II} = 0$$

Donde la función de onda en la región II es:

$$\psi_{II} = C \cdot e^{-k_2 \cdot x} + D \cdot e^{k_2 \cdot x}$$

Donde

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}$$

Dado que los exponentes son cantidades reales, ψ_{II} no oscila y, por lo tanto, no representa una partícula en movimiento. Sin embargo, la densidad de probabilidad $|\psi_{II}|^2$ no es cero, por lo que existe una probabilidad finita de encontrar una partícula dentro de la barrera. Dicha partícula puede emerger en la región III o regresar a la región I.

Para calcular la probabilidad de transmisión T, debemos aplicar las condiciones de frontera apropiadas a ψ_I, ψ_{II} y ψ_{III}. Tanto ψ como su derivada $\frac{d\psi}{dx}$ deben ser continuas en todas partes. Estas condiciones significan que las funciones de onda dentro y fuera deben tener el mismo valor y la misma pendiente.

En $X = 0$:

$$\psi_I = \psi_{II}$$
$$\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx}$$

En $X = L$:

$$\psi_{II} = \psi_{III}$$
$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx}$$

Si aplicamos estas condiciones a las funciones de onda en las regiones I, II y III, obtenemos:

$$Ae^{jk_1 \cdot 0} + Be^{-jk_1 \cdot 0} = Ce^{-k_2 \cdot 0} + De^{k_2 \cdot 0}$$
$$A + B = C + D \tag{10}$$
$$jk_1 \cdot (A - B) = k_2 \cdot (D - C) \tag{11}$$
$$Ce^{-k_2 \cdot L} + D \cdot e^{k_2 \cdot L} = Fe^{jk_1 \cdot L} \tag{12}$$
$$-k_2 \cdot Ce^{-k_2 \cdot L} + k_2 \cdot D \cdot e^{k_2 \cdot L} = jk_1 \cdot F \cdot e^{jk_1 \cdot L} \tag{13}$$

Ahora vamos a resolver el sistema queriando buscar La relación entre A y F, ya que es la relación entre las funciones de onda entrantes y salientes.

$$\left(\frac{A}{F}\right) = \left[\frac{1}{2} + \frac{i}{4}\left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)\right] e^{i(k_1+k_2)L} + ...$$
$$... + \left[\frac{1}{2} - \frac{i}{4}\left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2}\right)\right] e^{i(k_1-k_2)L}.$$

Supongamos que la barrera de potencial U es muy grande en relación con la energía E de las partículas incidentes. Si este es el caso, entonces se cumple que $k_2/k_1 > k_1/k_2$ y:

$$\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \approx \frac{k_2}{k_1}.$$

También que la barrera es lo suficientemente ancha como para que ψ_{II} se atenúe considerablemente entre $x = 0$ y $x = L$. Esto implica que $k_2 L \gg 1$, entonces:

$$e^{k_2 L} \gg e^{-k_2 L}.$$

Por lo tanto, la Ecuación puede aproximarse como:

$$\frac{A}{F} = \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_2}{4k_1}\right) e^{i(k_1+k_2)L}.$$

El conjugado complejo de $\frac{A}{F}$, que necesitamos para calcular la probabilidad de transmisión T:

$$\left(\frac{A}{F}\right)^* = \left(\frac{1}{2} - \frac{ik_2}{4k_1}\right) e^{-i(k_1+k_2)L}.$$

Al multiplicar $\frac{A}{F}$ y $\left(\frac{A}{F}\right)^*$, obtenemos:

$$\frac{AA^*}{FF^*} = \left(\frac{1}{4} + \frac{k_2^2}{16k_1^2}\right) e^{2k_2 L}.$$

Dado que $v_{III+} = v_{I+}$, $v_{III+}/v_{I+} = 1$, podemos escribir la probabilidad de transmisión como:

$$T = \frac{FF^* v_{II+}}{AA^* v_{I+}} = \left(\frac{AA^*}{FF^*}\right)^{-1} = \left[\frac{16}{4 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2}\right] e^{-2k_2 L} \tag{14}$$

Finalmente, a partir de las definiciones de k_1 y k_2 (Ecuación 5.86), se puede demostrar que:

$$\left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2 = \frac{2m(U-E)/\hbar^2}{2mE/\hbar^2} = \frac{U}{E} - 1.$$

Esta fórmula significa que la cantidad entre corchetes varía mucho menos con E y U que lo hace el término exponencial. Además, la cantidad entre corchetes siempre tiene un valor del orden de magnitud de 1. Entonces, una aproximación razonable de la probabilidad de transmisión es:

$$T = e^{-2k_2 L}. \tag{15}$$