Potencial escalón y penetración de barreras.

April 2024

Aron Kahrs - aron.kahrs@fcien.edu.uy
Franco Gardini - francogardini04@gmail.com

El presente documento fue realizado como tema de presentación para el curso de Física Moderna 2024 - IFFC - UdelaR.

1 Introduction

El potencial escalón es otro de los posibles casos con los que nos podemos encontrar cuando estudiamos potenciales. En esta situación el potencial "salta", una, o mas veces, de una cantidad constante a otra, y es de interés estudiar estos casos por su simplicidad matemática, y porque representa con bastante cercanía un pozo de potencial real. Esta situación también se aplica principalmente a problemas que presenta el análisis cuántico, como puede ser la situación de penetración de barrera, en donde una partícula se encuentra con un potencial escalón. Clásicamente tendríamos que ver que la partícula, al encontrarse con la pared del potencial, se vería reflejada, pero lo que en realidad vemos es que la partícula "penetra" a la pared y atraviesa el escalón, observándose del otro lado. Este fenómeno se explica bien con la mecánica cuántica ya que esta explica, como veremos a continuación que, a priori, no hay región inaccesible para una partícula independientemente de su energía.

Abordaremos entonces el estudio de estos fenómenos, deteniéndonos en el comportamiento de una partícula en cada una de las regiones según lo esperado clásicamente, así como las soluciones que la mecánica cuántica propone.

2 Potencial Escalón

Si consideramos un espacio unidimensional, donde existe un potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ,x < 0 \\ V_{cte} > 0 & ,x \geq 0 \end{cases} \tag{1}$$

Entonces para una partícula α definimos, clásicamente, su energía, de la forma:

$$E_\alpha = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{2}$$

Podemos visualizar esta situación:

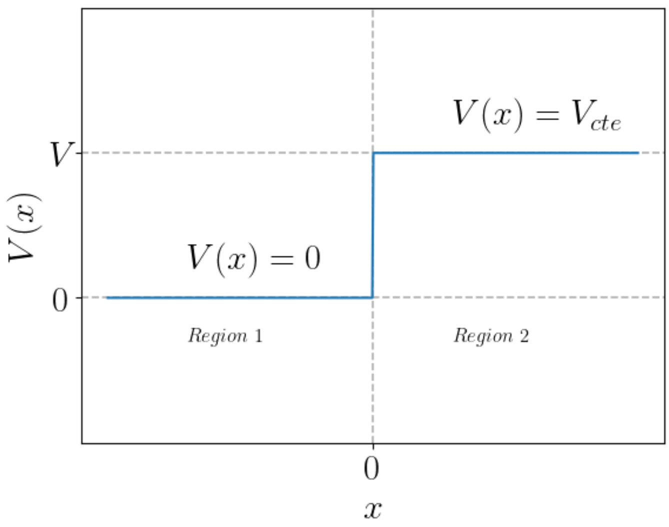

Figure 1: Bosquejo de $V(x)$ en función de x

En la figura podemos ver el escalón en $x = 0$, donde $V(x)$ pasa de 0 a V_0, un valor arbitrario constante. En el bosquejo podemos ver dos casos distintos, dependiendo del valor de E_α: uno se observa cuando $E \geq V(x)$, y otro cuando $E < V(x)$. La situación en donde $E_\alpha = V_0$ es un caso particular en la que la partícula puede estar tanto dentro del potencial como fuera, y para poder simplificar la forma de trabajar con un potencial escalón, obviaremos esta situación (si alguien esta interesado en leer más, refiérase al anexo 4.1).

2.1 Caso $E < V(x)$

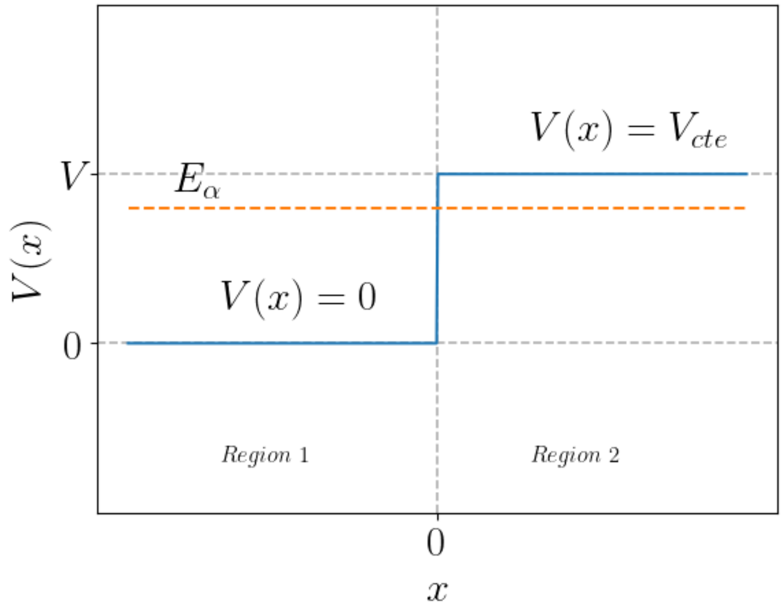

Figure 2: Bosquejo de $V(x)$ en función de x con $E < V(x)$

2.1.1 Mecánica Clásica

Veamos entonces que sucede en el caso en que $E < V(x)$. En el caso que la partícula α se mueve de izquierda a derecha, vemos que se choca con el escalón, y hagamos entonces el análisis de esta situación, viendo como lo que calculamos clásicamente, no se corresponde con la realidad y como esto se soluciona con la mecánica cuántica.
Podemos escribir E_α a partir de la ecuación 2 en las *regiones* 1 *y* 2, tenemos entonces:

$$E_\alpha = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} < 0 & , x < 0 \\ \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x) & , x \geq 0 \end{cases} \tag{3}$$

Interpretamos esto como que inicialmente E_α se mueve con energía $\frac{p^2}{2m} < 0$ en la *región* 1, pero al llegar a $x = 0$, observamos que la energía E_α en la *región* 2 es $V(0)$ más el término que contiene a p, y observamos que este termino debería ser negativo para que se pueda cumplir la desigualdad. Este resultado no es coherente con las hipótesis clásicas (que una partícula tenga momento con una componente imaginaria), y por lo tanto podemos concluir que clásicamente la *región* 2 es una región prohibida.

Sin embargo, experimentalmente observamos que la partícula α puede ser encontrada del otro lado de la barrera, así que buscamos una explicación en la física cuántica.

2.1.2 Mecánica Cuántica

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$E_\alpha \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \tag{4}$$

A partir de la cual podemos escribir E_α:

$$E_\alpha \psi(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} & , x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) & , x \geq 0 \end{cases} \tag{5}$$

Veamos que pasa en la *región* 1, definimos k^2:

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{6}$$

Entonces la solución mas general para está región es:

$$\psi(x) = (A)e^{jk_1x} + Re^{-jk_1x} \tag{7}$$

Esto corresponde a un flujo en la dirección positiva de magnitud

$$j = \frac{\hbar k_1}{m}(1 - |R|^2) \tag{8}$$

Podemos pensar e^{ikx} como una onda incidente con flujo $\frac{\hbar k}{m}$. Si no hubiera potencial $V(x)$ podríamos tomar e^{ikx} como solución para todo x, pero como esto no siempre es así, entonces atribuimos R a la presencia del potencial, esto da a lugar a una *onda reflejada*, Re^{-ikx} con un flujo reflejado $\frac{\hbar k|R|^2}{m}$.

Veamos ahora lo que pasa en la *región* 2, tenemos la solución mas general

$$\psi(x) = Te^{jk_2x} + (D)e^{-jk_2x} \tag{9}$$

pero para el análisis que estamos realizando, considerar De^{-jk_1x} daría a lugar una onda proveniente del infinito moviéndose de derecha a izquierda, entonces simplificamos la solución como:

$$\psi(x) = Te^{jk_2x} \tag{10}$$

Que, de nuevo, interpretamos como una onda moviéndose en dirección positiva con un flujo:

$$j = \frac{\hbar k_2}{m}|T|^2 \tag{11}$$

Como estamos trabajando con la ecuación independiente del tiempo, la ley de conservación implica que el flujo j es independiente de x, teniendo que ser este flujo igual para $x \leq 0$ y $x \geq 0$, es decir:

$$\frac{\hbar k_1}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar k_2}{m}|T|^2 \tag{12}$$

Y la continuidad de la función de onda implica que igualando las dos soluciones en $x = 0$ tenemos:

$$1 + R = T \tag{13}$$

Si bien el potencial es discontinuo, con un salto de 0 a un valor arbitrario de potencial, podemos ver que la onda si lo es e inclusive su derivada lo es, esta continuidad implica que:

$$jk_1(1 - R) = jk_2T \tag{14}$$

Podemos resolver para R y T, obteniendo:

$$\begin{aligned} R &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ T &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{aligned} \tag{15}$$

Y con esto podemos calcular el flujo transmitido y reflejado:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar k_1}{m}|R|^2 &= \frac{\hbar k_1}{m}\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \\ \frac{\hbar k_2}{m}|T|^2 &= \frac{\hbar k_1}{m}\frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned} \tag{16}$$

Esto nos explica el hecho de encontrar partículas en la *región 2*, como vimos, clásicamente esto está prohibido, pero la mecánica cuántica nos dice que esto es, en efecto, posible. Una partícula pasando a la *región 2* tendría que disminuir su velocidad, para conservar la energía, pero no necesariamente se reflejaría totalmente, si bien como consecuencia de las propiedades onda-partícula vemos una pequeña fracción de partículas incidentes reflejadas.
Algo interesante para para el caso donde $E < V_0$, podemos ver que k_2 se hace imaginario y entonces tenemos la solución:

$$\psi(x) = Te^{-|k_2|x} \tag{17}$$

y obtenemos una expresión para $|R|^2$:

$$|R|^2 = \left(\frac{k_1 - j|k_2|}{k_1 + j|k_2|}\right)\overline{\left(\frac{k_1 - j|k_2|}{k_1 + j|k_2|}\right)} = 1 \tag{18}$$

Esto da a lugar, como en la mecánica clásica, a una reflexión total de la onda, igualmente notemos que:

$$T = \frac{2k_1}{k_1 + j|k_2|} \tag{19}$$

No desaparece, esto implica que una pequeña parte de la onda penetra a la *región 2*. Este fenómeno de penetración es bien característico de las ondas y como veremos a continuación, permite el "tunelamiento" o penetración de barreras que clásicamente bloquearían completamente la partícula.

2.2 Caso $E > V(x)$

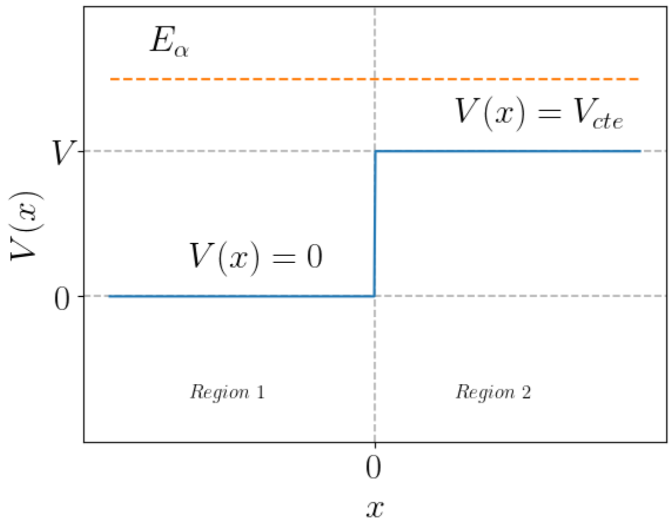

Figure 3: Bosquejo de $V(x)$ en función de x con $E > V(x)$

Podemos ver el caso para el que $E > V_0$ y llevarlo al extremo en que $E >> V_0$, veremos que en este caso $|R|^2$ tiende a cero, esto tiene sentido ya que para altas energías, en relación al potencial, la presencia de un escalón afecta mínimamente a la propagación de la onda.

2.2.1 Mecánica Clásica

Clásicamente sabemos que una partícula en la *región 1* sufrirá una fuerza repulsiva en el entorno de $x = 0$ por el potencial V

$$F = -\frac{dV(x}{dx} \tag{20}$$

Esto disminuye la velocidad de la partícula entrando a la *región 2*.
Por conservación de la energía sabemos que:

$$E_1 = \frac{p_1^2}{2m}, E_2 - V_0 = \frac{p_2^2}{2m} \tag{21}$$

Entonces en este caso nuestra partícula no tiene ninguna región prohibida, simplemente al pasar a la *región 2* su velocidad disminuye por conservación de la energía.

2.2.2 Mecánica Cuántica

El análisis cuántico, a priori, no difiere tanto del caso $E < V_0$. Resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para ambas regiones tenemos:

$$\Psi(x) = (A)e^{jk_1x} + Re^{-jk_1x}, \text{ con } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{22}$$

Para la *región 1* y

$$\Psi(x) = Te^{jk_2x} + (D)e^{-jk_2x}, \text{ con } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \tag{23}$$

Para la *región 2*, otra vez podemos simplificar el término D, puesto que implica una onda reflejada en un punto $x > 0$ y no tiene sentido físico, reescribiendo 23

$$\Psi(x) = Te^{jk_2x} \tag{24}$$

Obtenemos entonces la función de onda:

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{jk_1} + A\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}e^{-jk_1x} & ,x \leq 0 \\ A\frac{2k_1}{k_1+k_2}e^{jk_2x} & ,x \geq 0 \end{cases} \tag{25}$$

Entonces escribimos R:

$$R = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2 \tag{26}$$

y escribimos T:

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{(2k_1)^2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \tag{27}$$

Se cumple entonces la condición $R + T = 1$ y podemos evaluar según k_1 y k_2

$$R = 1 - T = \frac{1-\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}}{1-\sqrt{1+\frac{V_0}{E}}} \tag{28}$$

Veamos que este resultado es coherente con todo lo que venimos diciendo, cuando $\frac{E}{V_0} < 1$ es decir $V_0 > E$ tenemos $R = 1$ y cuando $\frac{E}{V_0} > 1$ es decir $V_0 < E$, tenemos que R cae proporcional a $\sqrt{\frac{E}{V_0}}$ y entonces T crece proporcionalmente también, es importante notar como R va asintoticamente a 0, es decir que por mas grande que sea $\frac{E}{V_0}$, o lo que es lo mismo, por mas que $E >> V_0$ siempre hay una fracción de la onda que es reflejada, afectando mínimamente la propagación de la onda.

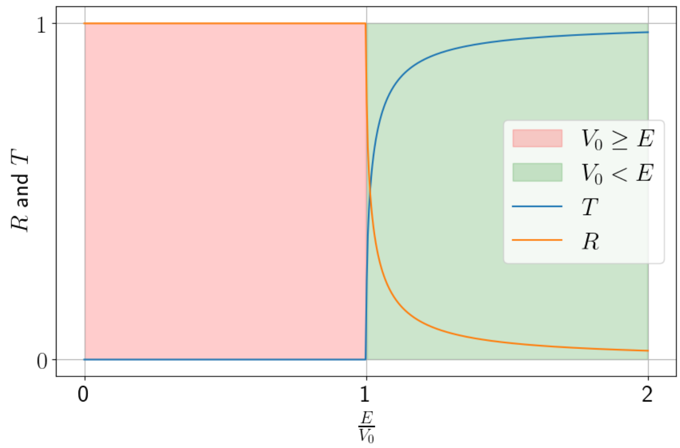

Figure 4: Bosquejo de R y T en función de $\frac{E}{V_0}$

3 Penetración de barrera

La penetración de barreras de potencial o tunelamiento es un fenómeno muy común en física atómica y nuclear. Como mencionamos en la sección anterior, este fenómeno se da cuando partículas ”reflejadas”, terminan atravesando el potencial. Nuestro análisis en este caso será mas bien cualitativo, puesto que hay compañeros que entrarán en detalles sobre este fenómeno.

Como ya vimos, este efecto es imposible para la mecánica clásica, es imposible que una partícula con $E < V_0$ atraviese la barrera de potencial y de hecho esta es totalmente reflejada al encontrarse con el potencial, pero esto no es así cuando hacemos el análisis con la mecánica cuántica. Como ya vimos, la cuántica si nos permite que está partícula atraviese el potencial, esto gracias al entendimiento onda-partícula que nos da la mecánica cuántica, pero de todas formas esto no necesariamente explica el fenómeno de tunelamiento y de hecho no nos da todas las condiciones bajo las cuales se presenta este efecto, no es hasta que introducimos otros conceptos como el principio de incertidumbre que podemos entenderlo. Como ya dijimos no vamos a entrar en aspectos cuantitativos de este fenómeno, pero si nos parece importante mencionar que efectos podemos encontrar aparte del tunelamiento.

Como ya mencionamos, la onda una vez atraviesa el potencial conserva su energía, principalmente disminuyendo su velocidad, pensemos entonces que pasa si la velocidad dentro del potencial es inferior a la velocidad de escape del potencial, entonces no veríamos el efecto de tunelamiento, tendríamos una reflexión interna de la onda y esta quedaría "atrapada" en el potencial. Entonces ya sabemos que para lograr tunelamiento necesitamos una velocidad suficiente como para "escapar" el potencial, podemos ver que esta capacidad de "escape" depende de la geometría de nuestro potencial, no es igual atravesar un potencial escalón que un potencial pozo. Estos son algunos de los factores de los que determina si tenemos una penetración de barrera o, en efecto, encontramos otro fenómeno para esta onda que viaja por una región con potencial. Todo esto quedará mucho mas claro una vez presentada la clase de tunelamiento.

4 Anexo

4.1

En cuántica, una situación en la que dos estados tienen la misma energía E^0 se conoce como estado degenerado. Esta situación, según lo entendido, se resuelve debido a un termino de la forma $R\hbar$, causado por una perturbación, que se suma o se resta a la energía de cada estado, siendo así que ahora la energía se "desdobla" en dos energías distintas $E_- = E_0 + R\hbar$ y $E_+ = E_0 - R\hbar$. Nuevamente invitamos a los interesados a indagar más en el link referido en la nota al pie[1]

5 Bibliografia

- The Structure of Matter A Survey of Modern Physics, Gasiorowicz, S. ed. Addison-Wesley (1979).
- Modern physics by Raymond A. Serway - Clement J. Moses And Curt A. Moyer.
- Introducción a la Mecánica Cuántica. Gratton, J. Buenos Aires (2003).

[1] https://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2009/08/perturbacion-y-estados-degenerados-i.html