

Aproximación a las energías de resonancia en un sistema de dos paredes permeables

Daniel Zamarrón-Frías, J. Avendaño

Instituto Politécnico Nacional

Departamento de Física, ESFM-IPN, México D.F., México

E-mail: dzamarronf1700@alumno.ipn.mx, javendanol@ipn.mx

Resumen — Se analiza el problema de un electrón en una dimensión incidiendo sobre un sistema de dos barreras deltas, obteniendo las energías de resonancia para las cuales el flujo de probabilidad es continuo en todo el espacio, posteriormente se considera que la función de onda en las regiones no acotadas es pequeña con lo que se obtienen estados cuasi-ligados que aproximan a las energías de resonancia.

Palabras Clave – Doble barrera delta, energías de resonancia, estados cuasi-ligados.

Abstract — One dimension electron crossing on two delta barrier system is analyzed, obtaining the resonance energies for which the probability flow is continuous throughout the space, later it is considered that the wave function in the not bounded regions is small, so quasi-bound states are obtained that approximate the resonance energies.

Keywords — Double delta barrier, resonance energies, quasi-bound states.

I. INTRODUCCIÓN

En mecánica cuántica, el potencial Delta es un potencial singular bien descrito matemáticamente por la función generalizada delta de Dirac. Este potencial se puede usar para simular situaciones en las que una partícula puede moverse libremente en dos regiones del espacio con una barrera porosa entre las dos regiones.

El problema que se analiza en este trabajo es el de un electrón en una dimensión en presencia de dos paredes permeables representadas por el potencial de dos barreras- δ . Se estudia primeramente el problema de dispersión, esto es, cuando el electrón incide desde una de las regiones no acotadas sobre una de las paredes, se determina el coeficiente de transmisión para caracterizar las propiedades dispersoras del sistema. A continuación, se determinan el espectro estacionario y se correlaciona con los resultados obtenidos de la dispersión.

II. DISPERSIÓN

En este apartado se analiza el problema de dispersión de un electrón cuando incide sobre un sistema constituido de dos paredes porosas, usando el método de la matriz de transferencia.

El potencial de la doble barrera delta simétrica en una dimensión [1-3] está dado por

$$V(x) = g\delta(x + a) + g\delta(x - a), \quad (1)$$

donde g es una constante positiva que recibe el nombre de intensidad de la delta. Con este potencial se tiene el hamiltoniano

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + g\delta(x + a) + g\delta(x - a), \quad (2)$$

la ecuación de Schrödinger es entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + g\delta(x + a)\psi(x) + g\delta(x - a)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

$\psi(x)$ es la función de onda y E es la energía del electrón, esta energía es positiva y continua ya que en este sistema no se presentan estados ligados.

Para analizar el problema se ha dividido el eje- x en tres regiones; la región *I* corresponde a $x < -a$, la región *II* cuando $x \in [-a, a]$ y la región *III* cuando $x > a$. Puesto que el potencial en cada una de estas regiones es nulo y la energía positiva, las soluciones en cada región son [1,3]

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \\ \psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \end{cases}, \quad (4)$$

donde A, B, C, D, F, G son constantes y se ha definido

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \quad (5)$$

el subíndice en cada función de onda representa la región a la que pertenece. El conjunto de soluciones (4) representa en cada región la superposición dos ondas planas, una viajando hacia la derecha y otra viajando hacia la izquierda, esto se representa de forma gráfica en la Fig. 1.

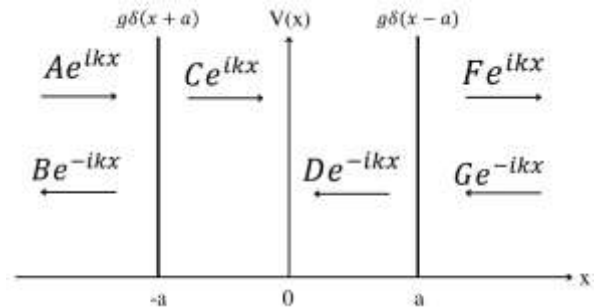


Fig. 1. Esquema de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para una doble barrera delta

Como el potencial en (1) tiene una discontinuidad-infinita- δ en una cantidad finita de puntos, entonces la función de onda es continua en todo el espacio y el flujo de probabilidad presenta discontinuidades finitas en los puntos frontera que depende de la constante g [1-3], esta constante puede

interpretarse como la permeabilidad de las barreras, las ecuaciones que resultan de estas condiciones de frontera son [1,3]

$$\begin{cases} \psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \Delta\psi'(-a) = \frac{2mg}{\hbar^2} \psi(-a) \\ \Delta\psi'(a) = \frac{2mg}{\hbar^2} \psi(a) \end{cases} \quad (6)$$

El conjunto de ecuaciones (6) se reduce a un sistema de dos ecuaciones que representado de forma matricial se tiene

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (7)$$

donde los elementos de matriz están dados por

$$\begin{cases} M_{11} = M_{22}^* = \left[1 - \frac{i\alpha}{2k}\right]^2 + \frac{\alpha^2}{4k^2} e^{-i4ka} \\ M_{21} = M_{12}^* = \frac{i\alpha}{2k} \left[1 - \frac{i\alpha}{2k}\right] e^{i4ka} + \frac{i\alpha}{2k} \left[1 + \frac{i\alpha}{2k}\right] \end{cases}, \quad (8)$$

se ha definido por comodidad el parámetro

$$\alpha \equiv \frac{2mg}{\hbar^2}. \quad (9)$$

La matriz M que conecta las funciones de onda de las regiones I y III recibe el nombre de matriz de transferencia [3-6]. Considerando el caso en que el electrón incide por la izquierda, es decir, la onda plana en la región III que viaja a la izquierda es nula, esto significa que $G = 0$; esto se representa de forma gráfica en la Fig. 2.

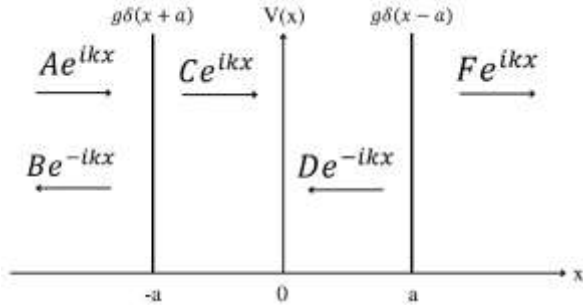


Fig. 2. Esquema de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para una doble barrera delta con la partícula incidiendo por la izquierda

El coeficiente de transmisión está dado por [3-5]

$$T = \frac{1}{|M_{22}|^2}, \quad (10)$$

por lo que desarrollando el módulo al cuadrado de M_{22} y sustituyendo en (10) se obtiene el coeficiente de transmisión

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2}{4k^2} [2 \cos(2ka) + \frac{\alpha}{k} \sin(2ka)]^2}, \quad (11)$$

este coeficiente de transmisión caracteriza las propiedades dispersoras del sistema y depende tanto de la energía del electrón como de la separación de las paredes porosas ($2a$).

De la ecuación (11) podemos observar que el coeficiente de transmisión toma el valor de 1, $T(E) = 1$, cuando

$$2 \cos(ka) + \frac{\beta}{k} \sin(ka) = 0, \quad (12)$$

reescribiendo la ecuación anterior se tiene

$$-\frac{2k}{\beta} = \tan(ka). \quad (13)$$

Esto es, la ecuación (13) determina las energías para las cuales el coeficiente de transmisión es la unidad (y por lo tanto el coeficiente de reflexión es nulo); estas energías reciben el nombre de *resonancias*. Sin embargo, esta ecuación es trascendente, por lo cual no podemos resolverla de manera analítica, por consiguiente, debe ser resuelta de manera numérica. En palabras un poco coloquiales podemos decir que cuando el electrón posee una de estas energías de resonancia las barreras delta se vuelven “invisibles” y el electrón puede moverse libremente sobre todo el espacio libremente.

Con el objeto de observar las resonancias, en las Figuras 3, 4 y 5 se muestran gráficas del coeficiente de transmisión (Ec.11) para un electrón en el intervalo de energías $[0 \text{ eV}, 200 \text{ eV}]$, y una separación entre las paredes porosas de $d = 2a = 2 \text{ \AA}$, se usó el software Wolfram Mathematica para graficar. La Fig.3 corresponde al valor $g = 10 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}$.

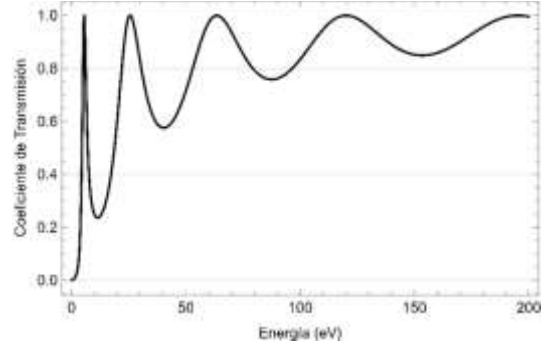


Fig. 3. Coeficiente de transmisión para un electrón atravesando una doble barrera delta con una separación entre barreras $d = 2 \text{ \AA}$ y una constante de la delta $g = 10 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}$

La Fig.4 corresponde al valor $g = 100 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}$

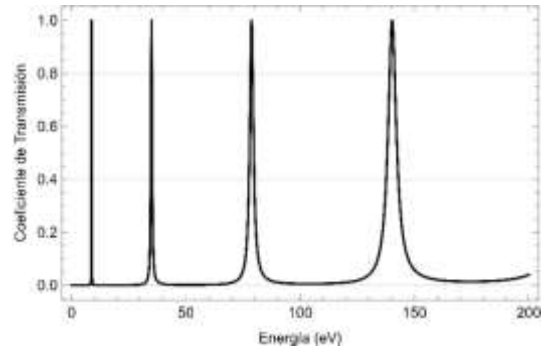


Fig. 4. Coeficiente de transmisión para un electrón atravesando una doble barrera delta con una separación entre barreras $d = 2 \text{ \AA}$ y una constante de las deltas $g = 100 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}$

Finalmente, para el valor de la constante $g = 1 \text{ keV} \cdot \text{ \AA}$ y la misma separación entre paredes permeables, se obtiene la Fig. 5.

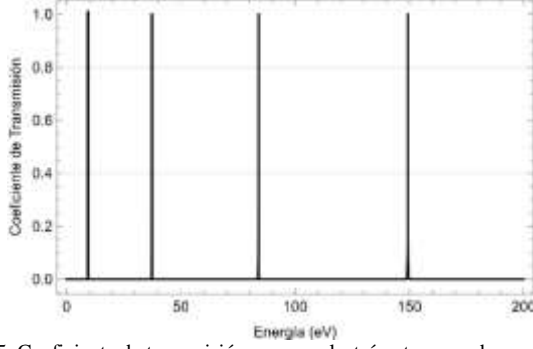


Fig. 5. Coeficiente de transmisión para un electrón atravesando una doble barrera delta con una separación entre barreras $d = 2\text{Å}$ y una constante de las deltas $g = 1\text{keV} \cdot \text{Å}$

Resolviendo la ecuación (13) numéricamente, en el software Wolfram Mathematica, para un electrón, con una separación de las barreras delta $d = 2\text{Å}$ y constantes de las deltas de $g = 10\text{eVÅ}$, $g = 100\text{eVÅ}$ y $g = 1\text{keVÅ}$, se obtienen los valores que se muestran en la Tabla I.

TABLA I.
ENERGÍAS DE RESONANCIA PARA DISTINTAS CONSTANTES DE PERMEABILIDAD

Energías para $g = 10\text{eVÅ}$ (eV)	Energías para $g = 100\text{eVÅ}$ (eV)	Energías para $g = 1\text{keVÅ}$ (eV)
5.48971	8.7261	9.32953
25.5704	34.9376	37.3182
63.5003	78.7259	83.9660
120.021	140.2247	149.2733
195.279		

III. ESTADOS CUASI-LIGADOS

En esta sección se analiza el espectro estacionario del sistema, y se obtienen estados cuasi-ligados al exigir que la función de onda en las regiones no-acotadas sea muy pequeña comparada con la función de onda en el interior de las paredes porosas.

Podemos observar de manera inmediata que el hamiltoniano del sistema (Ec.2) es invariante ante reflexiones del espacio, es decir

$$\hat{H}(x) = \hat{H}(-x), \quad (14)$$

por lo tanto, conmuta con el operador de paridad, lo cual implica que comparten un conjunto de eigenfunciones, es decir las eigenfunciones del hamiltoniano tienen paridad definida [1,3]. Como las soluciones en (4) son suma de exponenciales complejas, entonces por lo anterior las soluciones deben ser senos o cosenos. Por lo tanto, el conjunto de soluciones en (4) se pueden escribir como dos conjuntos de soluciones, las soluciones impares

$$\begin{cases} \varphi_I(x) = A_1 \sin(kx - \omega_1) \\ \varphi_{II}(x) = \sin(kx) \\ \varphi_{III}(x) = A_1 \sin(kx + \omega_1) \end{cases}, \quad (15)$$

y las soluciones pares

$$\begin{cases} \phi_I(x) = A_2 \cos(kx - \omega_2) \\ \phi_{II}(x) = \cos(kx) \\ \phi_{III}(x) = A_2 \cos(kx + \omega_2) \end{cases}, \quad (16)$$

donde A_1, A_2 constantes y ω_1, ω_2 corrimientos en la fase.

Debido a la simetría del problema, la constante de la función de onda en las regiones I y III son iguales, tanto para las soluciones pares como para las impares.

Sabemos que para el pozo infinito (con paredes impermeables) las funciones de onda están confinadas en el interior del pozo, esto es, la función de onda afuera del pozo es nula [1-3]. En cambio, en el caso que se está considerando de paredes permeables, la función de onda afuera de las paredes no es nula (como se observa en las Ecs. 15 y 16). Sin embargo, si exigimos que la función de onda afuera de las paredes permeables (regiones I y III) sea pequeña comparada con los valores que toma en el interior de estas paredes, tendríamos estados en los cuales la probabilidad de encontrar al electrón estaría concentrada fundamentalmente entre las paredes (región II). Podemos entonces llamar a estos estados, *cuasi-confinados* o *cuasi-ligados*.

Analizando primero el caso de las soluciones impares (15). Por la simetría del problema, es suficiente analizar las condiciones de frontera (6) solo en el punto $x = a$, la función de onda debe ser continua

$$\sin(ka) = A_1 \sin(ka + \omega_1), \quad (17)$$

y la discontinuidad del flujo de probabilidad en $x = a$ implica que

$$A_1 k \cos(ka + \omega_1) - k \cos(ka) = \frac{2mg}{\hbar^2} \sin(ka), \quad (18)$$

sustituyendo (9) en (18) y reescribiendo la ecuación se tiene

$$A_1^2 \cos^2(ka + \omega_1) = \left(\frac{\alpha}{k} \sin(ka) + \cos(ka) \right)^2, \quad (19)$$

desarrollando el lado derecho de (19) y aplicando identidades trigonométricas del lado izquierdo se tiene

$$A_1^2 - A_1^2 \sin^2(ka + \omega_1) \quad (20)$$

$$= \cos^2(ka) + \frac{2\alpha}{k} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{\alpha^2}{k^2} \sin^2(ka),$$

elevando al cuadrado (17) y sustituyendo en (20) se obtiene

$$A_1^2 = 1 + \frac{2\alpha}{k} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{\alpha^2}{k^2} \sin^2(ka). \quad (21)$$

Como requerimos que la función de onda sea pequeña en las regiones no acotadas, debemos exigir que $A_1 \ll 1$. De (21) se sigue que para que A_1 sea pequeña entonces se debe tener que

$$ka \approx n\pi + \varepsilon \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (22)$$

con $\varepsilon \ll 1$. Sustituyendo (22) en (21) se obtiene

$$A_1^2 \approx 1 + \frac{2\alpha}{k} \sin(n\pi + \varepsilon) \cos(n\pi + \varepsilon) + \frac{\alpha^2}{k^2} \sin^2(n\pi + \varepsilon). \quad (23)$$

Ahora, realizando una expansión en serie de Taylor para el seno y coseno con respecto a ε , se tiene

$$\begin{cases} \sin(n\pi + \varepsilon) = (-1)^n \varepsilon - \frac{1}{3!} (-1)^n \varepsilon^3 + \dots \\ \cos(n\pi + \varepsilon) = (-1)^n - \frac{1}{2!} (-1)^n \varepsilon^2 + \dots \end{cases}, \quad (24)$$

sustituyendo (24) en (23) y realizando un poco de algebra se obtiene

$$A_1^2 \approx \left(1 + \frac{\alpha}{k} \varepsilon\right)^2 + \frac{2\alpha}{k} [\dots] + \frac{\alpha^2}{k^2} [\dots], \quad (25)$$

como $A_1, \varepsilon \ll 1$ entonces podemos tomar ε como

$$\varepsilon = -\frac{k}{\alpha}, \quad (26)$$

sustituyendo (26) en (22) se tiene

$$ka = n\pi + \varepsilon = n\pi - \frac{k}{\alpha}, \quad (27)$$

despejando k de (27) y elevando al cuadrado

$$k^2 = \frac{n^2 \pi^2}{\left(a + \frac{1}{\alpha}\right)^2}, \quad (28)$$

sustituyendo (5) en (28) y despejando la energía obtenemos

$$E_n^i = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(a + \frac{1}{\alpha}\right)^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(a + \frac{\hbar^2}{2mg}\right)^2}, \quad (29)$$

donde el superíndice i en la energía indica que pertenece a las soluciones impares. Esta expresión define un conjunto infinito de energías para las cuales las funciones de onda impares son muy pequeñas en las regiones I y III comparadas con los valores que toma dentro de las paredes (región II), es decir, la Ec.(29) define las energías de los *estados impares cuasi-ligados*.

Ahora analizamos las soluciones pares (16). Una vez más, por la simetría del problema es suficiente aplicar las condiciones de frontera (6) solo en el punto $x = a$. La función de onda debe ser continua

$$\cos(ka) = A_2 \cos(ka + \omega_2), \quad (30)$$

y de la discontinuidad del flujo de probabilidad en $x = a$ implica que la derivada de la función de onda tenga la discontinuidad finita

$$-A_2 k \sin(ka + \omega_2) + k \sin(ka) = \frac{2mg}{\hbar^2} \cos(ka), \quad (31)$$

sustituyendo (9) en (31) y reescribiendo la ecuación se tiene

$$A_2^2 \sin^2(ka + \omega_2) = \left(\sin(ka) - \frac{\alpha}{k} \cos(ka)\right)^2, \quad (32)$$

desarrollando el lado derecho de (32) y aplicando identidades trigonométricas del lado izquierdo se tiene

$$A_2^2 - A_2^2 \cos^2(ka + \omega_2) = \sin^2(ka) - \frac{2\alpha}{k} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{\alpha^2}{k^2} \cos^2(ka), \quad (33)$$

elevando al cuadrado (30) y sustituyendo en (33) implica que

$$A_2^2 = 1 - \frac{2\alpha}{k} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{\alpha^2}{k^2} \cos^2(ka). \quad (34)$$

Igual que en el caso anterior, se quiere que la función de onda sea pequeña en las regiones no acotadas, entonces $A_2 \ll 1$. De (34) se sigue que para que A_2 sea pequeña se debe tener

$$ka \approx \frac{2n+1}{2} \pi + \varepsilon \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (35)$$

con $\varepsilon \ll 1$. Sustituyendo (35) en (34) se obtiene

$$A_2^2 \approx 1 - \frac{2\alpha}{k} \sin\left(\frac{2n+1}{2} \pi + \varepsilon\right) \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi + \varepsilon\right) + \frac{\alpha^2}{k^2} \cos^2\left(\frac{2n+1}{2} \pi + \varepsilon\right). \quad (36)$$

Efectuando ahora una expansión en serie de Taylor para el seno y coseno con respecto a ε , se tiene

$$\begin{cases} \sin\left(\frac{2n+1}{2} \pi + \varepsilon\right) = (-1)^n - \frac{1}{2!} (-1)^n \varepsilon^2 + \dots \\ \cos\left(\frac{2n+1}{2} \pi + \varepsilon\right) = -(-1)^n \varepsilon + \frac{1}{3!} (-1)^n \varepsilon^3 + \dots \end{cases}, \quad (37)$$

sustituyendo (37) en (36) y realizando un poco de algebra se obtiene

$$A_2^2 \approx \left(1 + \frac{\alpha}{k} \varepsilon\right)^2 - \frac{2\alpha}{k} [\dots] + \frac{\alpha^2}{k^2} [\dots], \quad (38)$$

como $A_2, \varepsilon \ll 1$, podemos tomar ε de igual forma que en (26), por lo que sustituyendo (26) en (35) se tiene

$$ka = \frac{2n+1}{2} \pi - \frac{k}{\alpha}, \quad (39)$$

despejando k de (39) y elevando al cuadrado

$$k^2 = \frac{\left(\frac{2n+1}{2}\right)^2 \pi^2}{\left(a + \frac{1}{\alpha}\right)^2}, \quad (40)$$

sustituyendo (5) en (40) y despejando la energía obtenemos

$$E_n^p = \frac{\left(\frac{2n+1}{2}\right)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(a + \frac{1}{\alpha}\right)^2} = \frac{\left(\frac{2n+1}{2}\right)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(a + \frac{\hbar^2}{2mg}\right)^2}, \quad (41)$$

el superíndice p en la energía indica que pertenece a las soluciones pares. Igual que en el caso anterior, esta ecuación (Ec.41) define las energías de los *estados pares cuasi-confinados* en el interior de las paredes porosas.

Las energías de los estados cuasi-ligados dependen de la constante de permeabilidad de las barreras delta, g , y de la separación de las paredes, $d = 2a$.

Considerando un electrón, una separación entre barreras delta de $d = 2\text{\AA}$ y constantes de las deltas $g = 10eV\text{\AA}$, $g = 100eV\text{\AA}$ y $g = 1keV\text{\AA}$ en las ecuaciones (29) y (41) se obtienen las primeras energías de los estados cuasi-ligados, estos valores se muestran en la Tabla II.

TABLA II.
ENERGÍAS DE ESTADOS CUASI-LIGADOS PARA DISTINTAS CONSTANTES DE PERMEABILIDAD

Estados cuasi-ligados $g = 10eV\text{\AA} (eV)$	Estados cuasi-ligados $g = 100eV\text{\AA} (eV)$	Estados cuasi-ligados $g = 1keV\text{\AA} (eV)$
$E_0^p = 4.9292$	$E_0^p = 8.7233$	$E_0^p = 9.3295$
$E_1^i = 19.7168$	$E_1^i = 34.8934$	$E_1^i = 37.3181$
$E_1^p = 44.3628$	$E_1^p = 78.5103$	$E_1^p = 83.9657$
$E_2^i = 78.8672$	$E_2^i = 139.5739$	$E_2^i = 149.2724$
$E_2^p = 123.2300$		

IV. RESULTADOS COMPARATIVOS

En las Tablas *I* y *II* se observa que las energías de resonancia para las cuales el flujo de probabilidad del electrón es la unidad y las energías de los estados cuasi-ligados para los cuales la probabilidad de encontrar el electrón se concentra dentro de las barreras, se acercan más y más conforme se aumenta la constante de permeabilidad de las paredes (constante g). Se calcularon los errores porcentuales entre las energías de resonancia y las energías de los estados cuasi-ligados con los valores de las Tablas *I* y *II*. Estos errores porcentuales se muestran en la Tabla *III*

TABLA III.
ERRORES PORCENTUALES ENTRE LAS ENERGÍAS DE RESONANCIA Y LOS ESTADOS CUASI-LIGADOS

Error porcentual (%) $g = 10eV\text{\AA}$ (eV)	Error porcentual (%) $g = 100eV\text{\AA}$ (eV)	Error porcentual (%) $g = 1keV\text{\AA}$ (eV)
10.2101	0.0320	0.0003
22.8920	0.1265	0.0002
30.1376	0.2738	0.0003
34.2888	0.4641	0.0006
36.8954		

IV. CONCLUSIONES

Como se observa en la Tabla *III* las energías de los estados ligados, conforme se aumenta la constante de las barreras delta, aproxima mucho mejor a las energías de resonancia, a tal grado de que al tener constantes de la delta de $g = 1keV\text{\AA}$ se tienen errores porcentuales del orden de 0.0001%, pero para constantes de las deltas de $g = 10eV\text{\AA}$ se tienen errores porcentuales del orden de 10%. En parte esto se debe que al aumentar la constante de las deltas se cumple mejor la condición de que (26) sea pequeño.

AGRADECIMIENTOS

J. Avendaño agradece el apoyo proporcionado por la COFAA-IPN y por la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN a través del proyecto SIP20220073.

REFERENCIAS

- [1] L. de la Peña, "Introducción a la mecánica cuántica, 3ra-edición", (Fondo de Cultura Económica, México, 2006).
- [2] A.F.J. Levi, "Applied Quantum Mechanics", (Cambridge University Press 2006).
- [3] E. Merzbacher, "Quantum Mechanics, 3rd. ed.", John Wiley & Sons, 1998, ch. 6, pp 97.
- [4] P. Erdős and R.C. Herndon, "Theories of electrons in one-dimensional disordered systems", Advances in Physics, Vol. 31, No. 22, pp 65-163.
- [5] J.A. Arriaga, "Efecto Túnel Resonante a Través de Arreglos de Barreras de Potencial (Tesis de Licenciatura), ESFM-IPN, 2010.
- [6] A. Mendoza, L.D. Cisneros, J. J. Flores, G.Fernández, "Non-Linear formalisms Applied to Electronic Properties an Quaqntum Transport" (Universidad Iberoamericana, 2015).