

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



Daniel Zamarrón Frías, J. Avendaño

Departamento de Física, ESFM-Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México., México
E-mail: dzamarron1700@alumno.ipn.mx, javendanol@ipn.mx

RESUMEN/ABSTRACT

Se analiza el problema de un electrón en una dimensión incidiendo sobre un sistema de dos barreras delta, 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 en lo que se obtienen estados cuasi-ligados que aproximan a las energías de resonancia.

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-delta. 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.

DISPERSIÓN

La ecuación de Schrödinger con un potencial de doble barrera delta simétrica en una dimensión [1-3]

$$\hat{H}(x)\psi(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + g[\delta(x+a) + \delta(x-a)] \right\} \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

Donde g es una constante positiva que recibe el nombre de intensidad de la delta y a constante positiva. 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]

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \\ \psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \end{cases} \quad (2)$$

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

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3)$$

El conjunto de ecuaciones (2) al aplicar las condiciones de frontera se reduce a un sistema de dos ecuaciones que representado de forma matricial se tiene

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (4)$$

donde los elementos de matriz están dados por

$$\begin{cases} M_{11} = M_{22} = \left[1 - \frac{i\alpha}{2k} \right] + \frac{\alpha^2}{4k^2} e^{-i4ka} \\ M_{21} = M_{12} = \frac{i\alpha}{2k} \left[1 - \frac{i\alpha}{2k} \right] e^{i4ka} + \frac{i\alpha}{2k} \left[1 + \frac{i\alpha}{2k} \right] \end{cases} \quad (5)$$

se ha definido el parámetro

$$\alpha = \frac{2mg}{\hbar^2} \quad (6)$$

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 $G=0$. El coeficiente de transmisión está dado por

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2}{4k^2} \left[2 \cos(2ka) + \frac{\alpha}{k} \sin(2ka) \right]^2} \quad (7)$$

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. De la ecuación (7) podemos observar que el coeficiente de transmisión toma el valor de 1, cuando

$$-\frac{2k}{\alpha} = \tan(ka) \quad (8)$$

Resolviendo la ecuación (8) para un electrón en el intervalo de energías [0eV, 200eV] y una separación entre las paredes porosas de $d = 2a = 2\text{Å}$, para los valores de la constante de las deltas de $g = 10eV\text{Å}, 100eV\text{Å}, 1keV\text{Å}$ se obtienen los valores

Energías (eV) $g = 10eV\text{Å}$	Energías (eV) $g = 100eV\text{Å}$	Energías (eV) $g = 1keV\text{Å}$
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		

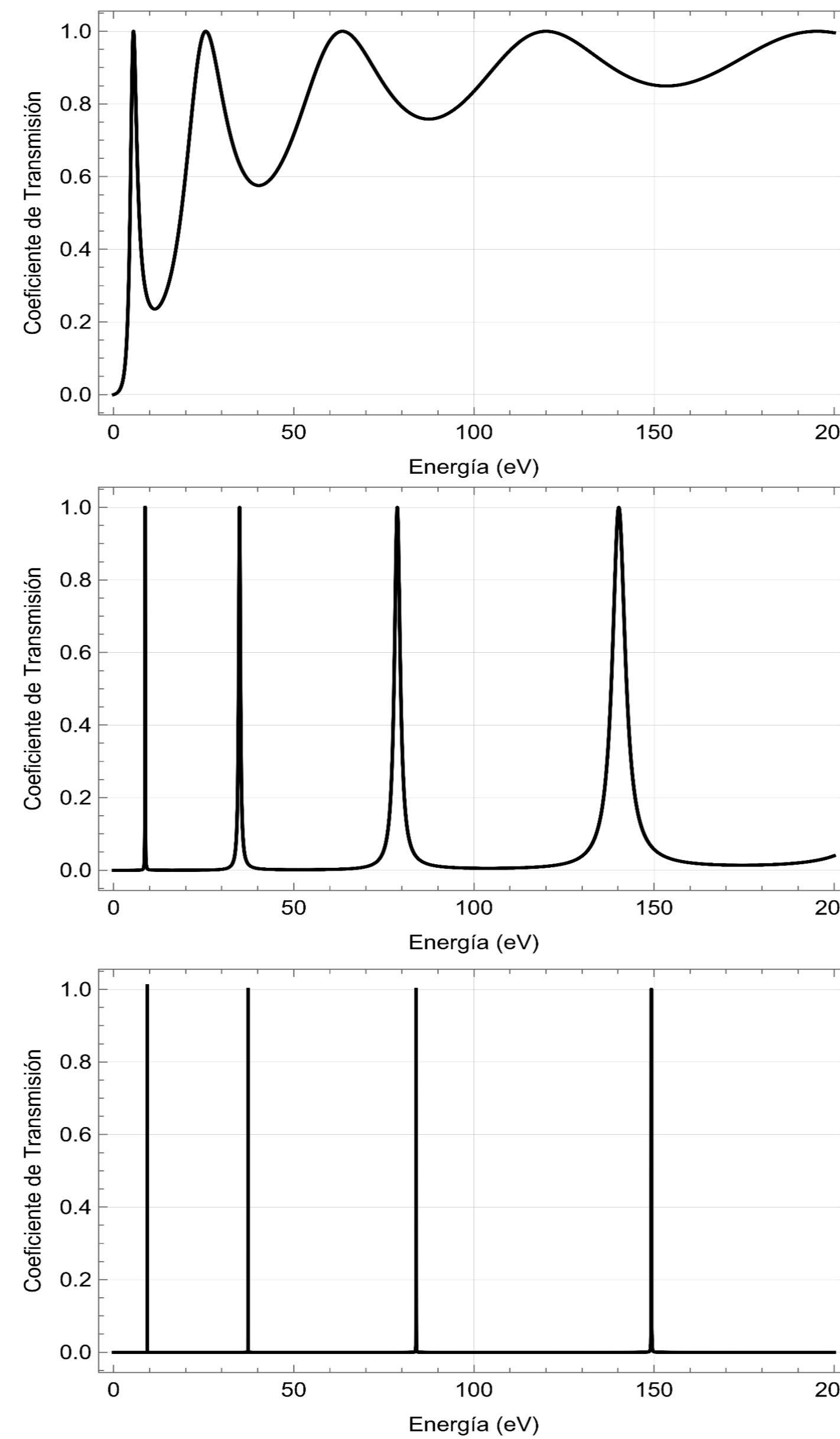


Fig 1. Coeficiente de transmisión para un electrón atravesando una doble barrera delta con una separación entre barreras $d = 2\text{Å}$ y constantes de las deltas de $g = 10eV\text{Å}, 100eV\text{Å}, 1k eV\text{Å}$

ESTADOS CUASI-LIGADOS

Como el hamiltoniano del sistema (1) es invariante ante reflexiones del espacio, 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 la paridad definida [1-3]. Como las soluciones en (2) son la suma de exponenciales complejas, entonces por lo anterior las soluciones deben ser senos o cosenos. Por lo tanto, el conjunto de soluciones en (2) se pueden describir por dos conjuntos de soluciones.

$$\text{impar} \begin{cases} \phi_I(x) = A_1 \sin(kx - \omega_1) \\ \phi_{II}(x) = \sin(kx) \\ \phi_{III}(x) = A_1 \sin(kx + \omega_1) \end{cases} \quad (9)$$

$$\text{par} \begin{cases} \phi_I(x) = A_2 \cos(kx - \omega_2) \\ \phi_{II}(x) = \cos(kx) \\ \phi_{III}(x) = A_2 \cos(kx + \omega_2) \end{cases} \quad (10)$$

Donde A_1, A_2 constantes y ω_1, ω_2 corrimientos en la fase. En el pozo infinito (con paredes impermeables) las funciones de onda están confinadas en el interior del pozo [1-3]. En cambio, en el caso de paredes permeables, la función de onda fuera de las paredes no es nula. 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 casi-ligados.

Analizando primero las soluciones impares (9). Por la simetría del problema, es suficiente analizar las condiciones de frontera solo en el punto $x = a$

$$\begin{cases} \sin(ka) = A_1 \sin(ka + \omega_1) \\ A_1 k \cos(ka + \omega_1) - k \cos(ka) = \frac{2mg}{\hbar^2} \sin(ka) \end{cases} \quad (11)$$

Con un poco de algebra se obtiene

$$A_1^2 = 1 + \frac{2\alpha}{k} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{\alpha^2}{k^2} \sin^2(ka) \quad (12)$$

Como requerimos que la función de onda sea pequeña en las regiones no acotadas, debemos exigir que $A_1 \ll 1$. Entonces se debe tener

$$ka \approx n\pi + \epsilon \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

con $\epsilon \ll 1$. Sustituyendo (13) en (12) se obtiene

$$A_1^2 \approx 1 + \frac{2\alpha}{k} \sin(n\pi + \epsilon) \cos(n\pi + \epsilon) + \frac{\alpha^2}{k^2} \sin^2(n\pi + \epsilon) \quad (14)$$

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

$$\begin{cases} \sin(n\pi + \epsilon) = (-1)^n \epsilon - \frac{1}{3!} (-1)^n \epsilon^3 + \dots \\ \cos(n\pi + \epsilon) = (-1)^n - \frac{1}{2!} (-1)^n \epsilon^2 + \dots \end{cases} \quad (15)$$

Sustituyendo (15) en (14) y realizando un poco de algebra se obtiene

$$A_1^2 \approx \left(1 + \frac{\alpha}{k} \epsilon \right)^2 + \frac{2\alpha}{k} [\dots] + \frac{\alpha^2}{k^2} [\dots] \quad (16)$$

Como $A_1, \epsilon \ll 1$ entonces podemos tomar ϵ como

$$\epsilon = -\frac{k}{\alpha} \quad (17)$$

De (17) en (13) y de (3) se obtiene

$$E_n^i = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(a + \frac{1}{\alpha} \right)^2} \quad (18)$$

Donde el superíndice i en la energía indica que pertenece a las soluciones impares. Análogamente en las soluciones pares (10), aplicando las condiciones de frontera en el punto $x = a$

$$\begin{cases} \cos(ka) = A_2 \cos(ka + \omega_2) \\ -A_2 k \sin(ka + \omega_2) + k \sin(ka) = \frac{2mg}{\hbar^2} \cos(ka) \end{cases} \quad (19)$$

Con un poco de algebra se obtiene

$$A_2^2 = 1 - \frac{2\alpha}{k} \sin(ka) \cos(ka) + \frac{\alpha^2}{k^2} \cos^2(ka) \quad (20)$$

Como requerimos que la función de onda sea pequeña en las regiones no acotadas, debemos exigir que $A_2 \ll 1$. Entonces se debe tener

$$ka \approx \frac{2n+1}{2} \pi + \epsilon \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (21)$$

con $\epsilon \ll 1$. Sustituyendo (21) en (20) se obtiene

$$A_2^2 \approx 1 - \frac{2\alpha}{k} \sin \left(\frac{2n+1}{2} \pi + \epsilon \right) \cos \left(\frac{2n+1}{2} \pi + \epsilon \right) + \frac{\alpha^2}{k^2} \cos^2 \left(\frac{2n+1}{2} \pi + \epsilon \right) \quad (22)$$

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

$$\begin{cases} \sin \left(\frac{2n+1}{2} \pi + \epsilon \right) = (-1)^n - \frac{1}{2!} (-1)^n \epsilon^2 + \dots \\ \cos \left(\frac{2n+1}{2} \pi + \epsilon \right) = -(-1)^n \epsilon + \frac{1}{3!} (-1)^n \epsilon^3 + \dots \end{cases} \quad (23)$$

Sustituyendo (23) en (22) y realizando un poco de algebra se obtiene

$$A_2^2 \approx \left(1 + \frac{\alpha}{k} \epsilon \right)^2 - \frac{2\alpha}{k} [\dots] + \frac{\alpha^2}{k^2} [\dots] \quad (24)$$

Como $A_2, \epsilon \ll 1$ entonces de igual forma se toma ϵ como en (17). De (17) en (21) y de (3) se obtiene

$$E_n^p = \frac{\left(\frac{2n+1}{2} \right)^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(a + \frac{1}{\alpha} \right)^2} \quad (25)$$

El superíndice p en la energía indica que pertenece a las soluciones pares

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

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

RESULTADOS COMPARATIVOS

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

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

Error porcentual (%) $g = 10eV\text{Å}$	Error porcentual (%) $g = 100eV\text{Å}$	Error porcentual (%) $g = 1keV\text{Å}$
10.2101	0.0320	0.0003
22.8920	0.1265	0.0002
30.1376	0.2738	0.0003
34.2888	0.4647	0.0006
36.8954		

CONCLUSIONES

Como se observa en la Tabla III las energías de los estados ligados, conforme 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 $g = 1keV\text{Å}$ se tienen errores porcentuales del orden de 0.0001%, pero para constantes de las deltas de $g = 10eV\text{Å}$ se tienen errores porcentuales del orden de 10%. En parte se debe que al aumentar la constante de las deltas se cumple mejor la condición de que (17) sea pequeño.

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 onedimensional disordered systems", Advances in Physic, 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).