UNIVERSIDAD DE CHILE
Departamento de Física
Física Contemporánea 2010

Solución tarea 7

Profesor: Mario Molina **Ayudante**: Felipe González

Problema 1

Tenemos que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} < \check{\mathbf{p}} > &= \frac{d}{dt}\int \psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)\ dx \\
&= -i\hbar\frac{d}{dt}\int \psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\ dx \\
&= -i\hbar\int\left[\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} + \psi^*(x,t)\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x\partial t}\right]\ dx
\end{aligned} \tag{1}$$

en donde hemos cambiado el orden de derivación para el último término (si las derivadas de una función son funciones continuas, las derivadas conmutan). Recordando ahora que la ecuación de Schrödinger nos dice que

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t),$$

y a su vez, al conjugar,

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t} = H\psi^*(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t) + V(x)\psi^*(x,t),$$

podemos reemplazar el lado izquierdo de estas ecuaciones en la integral, para obtener

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} < \check{\mathbf{p}} > &= \int\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi^*(x,t)\right)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right] dx \\
&+ \int\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - V(x)\psi(x,t)\right)\right]\ dx \\
&= \int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} + V(x)\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right] dx \\
&+ \int\left[\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(x,t)\frac{\partial^3\psi(x,t)}{\partial x^3} - \psi^*(x,t)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi(x,t) - \psi^*(x,t)V(x)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right]\ dx
\end{aligned}$$

Notamos que el último término de cada integral es el el mismo, pero de signo contrario, lo que los anula. Luego

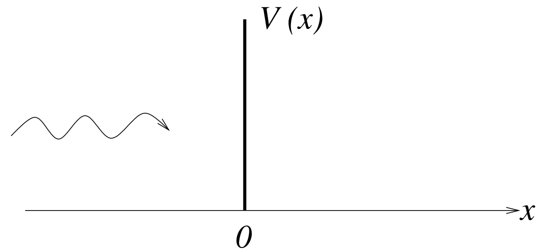
$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} < \check{\mathbf{p}} > &= \int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} + \frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(x,t)\frac{\partial^3\psi(x,t)}{\partial x^3}\right] - \int\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi(x,t)\right]\ dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right] - \int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi(x,t)\right]\ dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]\Bigg|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi(x,t)\right]\ dx
\end{aligned}$$

La función de onda y sus derivadas siempre se anulan en $\pm\infty$ en problemas donde tiene sentido preguntarse por $<\check{\mathbf{p}}>$ (i.e., evitando casos de partícula libre en estos extremos, donde los promedios no convergen). Esto permite anular el primer término, luego

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}<\check{\mathbf{p}}> &= -\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi(x,t)\right]\,dx\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\left[-\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right]\psi(x,t)\,dx\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)F(x)\psi(x,t)\,dx\\ &=<\check{\mathbf{F}}>\end{aligned}$$

Problema 2

Tenemos una barrera de potencial $V(x)=\frac{\hbar^2}{2m}\Omega\delta(x)$, graficado en la siguiente figura:



Consideremos que la partícula tiene una energía $E>0$.
Para todo $x\neq 0$, se tiene $V(x)=0$, por lo que la ecuación de Schrödinger unidimensional

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

se convierte en

$$\psi''(x)=-k^2\psi(x),$$

donde $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}>0$. Las soluciones son, por lo tanto,

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & \text{si } x\leqslant 0\\ Ce^{ikx}+De^{-ikx} & \text{si } x\geqslant 0\end{cases}$$

Notemos que $k^2>0$ implica que k es real, por lo tanto las soluciones en ningun caso se convierten en exponenciales decrecientes $e^{-\bar{k}x}$, son siempre oscilatorias (senos y cosenos). En esta forma de plantear las ecuaciones, podemos hacer la analogía con la óptica diciendo que Ae^{ikx} es una onda que viaja hacia la derecha y Be^{-ikx} una onda que viaja hacia la izquierda, es decir, la onda incidente y la reflejada, respectivamente.

Considerando esta analogía, $D=0$ ya que en el lado derecho no hay una onda reflejada (Ce^{ikx} no choca con nada). Ahora, como ψ es continua en 0, entonces

$$\psi(0)=A+B=C.$$

Por otro lado, al integrar la ecuación de Schrödinger entre $-\varepsilon$ y ε, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)]+\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V(x)\psi(x)\,dx=\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}E\psi(x)\,dx$$

lo cual es equivalente a

$$(ikCe^{ik\varepsilon})-(ikAe^{-ik\varepsilon}-ikBe^{ik\varepsilon})-\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V(x)\psi(x)\,dx=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}E\psi(x)\,dx$$

donde, al reemplazar el potencial, se obtiene

$$(ikCe^{ik\varepsilon}) - (ikAe^{-ik\varepsilon} - ikBe^{ik\varepsilon}) - \Omega\psi(0) - \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\psi(x)\ dx = 0$$

Tomando el límite $\varepsilon \to 0$, tenemos

$$ikC - (ikA - ikB) - \Omega C = 0$$

o bien,

$$\frac{C}{A} = \left(1 - \frac{B}{A}\right)\frac{ik}{ik - \Omega}.$$

Anteriormente habíamos obtenido que $A + B = C$, lo que significa que

$$\frac{B}{A} = \frac{C}{A} - 1 = \left(1 - \frac{B}{A}\right)\frac{ik}{ik - \Omega} - 1.$$

Con esto, el coeficiente de reflexión queda determinado despejando B/A:

$$\boxed{R = \frac{k}{k}\left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{\Omega}{2ik - \Omega}\right|^2 = \frac{\Omega^2}{4k^2 + \Omega^2}}\ . \tag{2}$$

El coeficiente de transmisión está dado, básicamente, por $C/A = B/A - 1$, es decir,

$$\boxed{T = \frac{k}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \left|\frac{2ik}{2ik - \Omega}\right|^2 = \frac{4k^2}{4k^2 + \Omega^2}}\ . \tag{3}$$

Notamos que $T + R = 1$, como debe ser.

- Es muy interesante notar que si $\Omega = 0$, es decir, quitamos la barrera, se tiene $T = 1$ y $R = 0$, es decir, se transmite todo y no se refleja nada, como era de esperar.
- En el caso $\Omega \to \infty$ (un potencial angosto muy intenso), nos lleva a $R = 1$, $T = 0$, lo que corresponde a la intuición clásica.
- Otro caso interesante es que para $\Omega = 2k$, se transmite y se refleja lo mismo ($R = T$).
- Por último, notamos que invertir la barrera significa cambiar $\Omega \to -\Omega$, lo que no cambia en absoluto los coeficientes R y T.

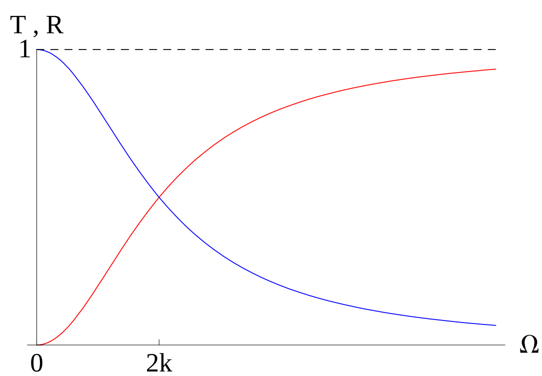


Figura 1: Transmisión (en azul) y reflexión (en rojo) para una barrera delta $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\Omega$.

Problema 3

Tenemos un potencial "doble escalón" dado por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0 \\ V_0 & \text{si} \quad 0 \leqslant x < L \\ V_1 & \text{si} \quad L \leqslant x \end{cases}$$

Ejemplificamos la situación en la siguiente figura:

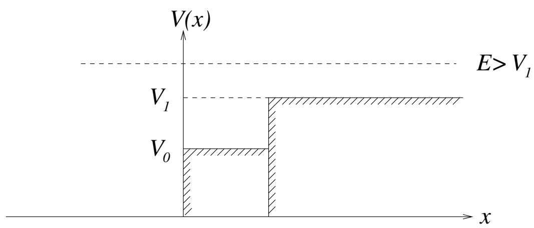


Figura 2: Potencial "doble escalón".

La ecuación de Schrödinger en representación posición nos dice que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

es decir,

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

Para $x < 0$, tenemos $V(x) = 0$, por lo tanto

$$\boxed{\psi''(x) = -k_1^2\psi(x)}\,, \tag{4}$$

con $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E > 0$.

Para $0 < x < L$, tenemos $V(x) = V_0$, por lo tanto

$$\boxed{\psi''(x) = -k_2^2\psi(x)}\,, \tag{5}$$

con $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$.

Para $x > L$, tenemos $V(x) = V_1$, por lo tanto

$$\boxed{\psi''(x) = -k_3^2\psi(x)}\,, \tag{6}$$

con $k_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1) > 0$.

Con estas definiciones, nos aseguramos que k_i es real (ya que $k_i^2 > 0$). La solución para ψ compatible con estas ecuaciones diferenciales será

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} & \text{si} \quad x < 0 \\ Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} & \text{si} \quad 0 \leqslant x < L \\ Ce^{ik_3x} + C'e^{-ik_3x} & \text{si} \quad L \leqslant x \end{cases}$$

es decir, tenemos una superposición de ondas que viajan hacia la derecha (e^{ikx}) y ondas que viajan hacia la izquierda (e^{-ikx}) en cada una de las zonas consideradas. En la primera zona, la onda correspondiente a A' es la onda reflejada producto del choque de la onda incidente A con la barrera de potencial. En la segunda zona, B es la parte de la onda A que logra atravezar la primera barrera de potencial (onda transmitida), mientras que B' es la parte de la onda B que se refleja con la segunda barrera. Por último, C es la parte de la onda B que atravieza la segunda barrera; pero esta onda no choca con ninguna barrera nueva, lo que implica que C' se anula (no hay onda reflejada). Por lo tanto

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} & \text{si} \quad x < 0 \\ Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} & \text{si} \quad 0 \leqslant x < L \\ Ce^{ik_3x} & \text{si} \quad L \leqslant x \end{cases}$$

De la continuidad de la función ψ en 0, tenemos

$$\boxed{\psi(0) = A + A' = B + B'}\ , \tag{7}$$

mientras que en L,

$$\boxed{\psi(L) = Be^{ik_2L} + B'e^{-ik_2L}}\ . \tag{8}$$

Por otro lado, la derivada de la función es también continua (son ondas viajeras, senos y cosenos) por lo que tenemos las ecuaciones

$$\boxed{\psi'(0) = ik_1(A - A') = ik_2(B - B')} \tag{9}$$

y

$$\boxed{\psi'(L) = ik_2(Be^{ik_2L} - B'e^{-ik_2L}) = ik_3Ce^{ik_3L}}\ . \tag{10}$$

Escribimos las ecuaciones (8) y (10) como

$$\begin{aligned} Be^{ik_2L} + B'e^{-ik_2L} &= Ce^{ik_3L} \\ Be^{ik_2L} - B'e^{-ik_2L} &= \frac{k_3}{k_2}Ce^{ik_3L} \end{aligned}$$

de donde podemos concluír, sumando, que

$$\boxed{B = \frac{C}{2}e^{i(k_3-k_2)L}\left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right)}\ , \tag{11}$$

mientras que restando se obtiene

$$\boxed{B' = \frac{C}{2}e^{i(k_3+k_2)L}\left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right)}\ . \tag{12}$$

Introduciendo estas dos ecuaciones en (7) se obtiene

$$\begin{aligned} A + A' &= B + B' \\ &= \frac{C}{2}e^{ik_3L}\left[e^{-ik_2L}\left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) + e^{ik_2L}\left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right)\right] \\ &= \frac{C}{2}e^{ik_3L}\left[2\cos(k_2L) - 2i\frac{k_3}{k_2}\sin(k_2L)\right] \end{aligned}$$

lo que implica que

$$\boxed{1+\frac{A'}{A}=\frac{C}{A}e^{ik_3}\left[\cos(k_2L)-i\frac{k_3}{k_2}\sin(k_2L)\right]}\,. \tag{13}$$

Al introducirlas en (9) se obtiene

$$\begin{aligned}
A-A' &= \frac{k_2}{k_1}(B-B') \\
&= \frac{k_2}{k_1}\left[\frac{C}{2}e^{ik_3L}\left(e^{-ik_2L}\left(1+\frac{k_3}{k_2}\right)-e^{ik_2L}\left(1-\frac{k_3}{k_2}\right)\right)\right] \\
&= \frac{k_2}{k_1}\left[\frac{C}{2}e^{ik_3L}\left[-2i\sin(k_2L)+\frac{k_3}{k_2}2\cos(k_2L)\right]\right]
\end{aligned}$$

lo que implica que

$$\boxed{1-\frac{A'}{A}=\frac{C}{A}e^{ik_3}\left[\frac{k_3}{k_1}\cos(k_2L)-i\frac{k_2}{k_1}\sin(k_2L)\right]}\,. \tag{14}$$

Sumando (13) y (14), se obtiene

$$\boxed{\frac{C}{A}=2e^{-ik_3L}\left[\left(1+\frac{k_3}{k_1}\right)\cos(k_2L)-i\left(\frac{k_2}{k_1}+\frac{k_3}{k_2}\right)\sin(k_2L)\right]^{-1}}\,. \tag{15}$$

Dividiendo (13) y (14), se obtiene

$$\boxed{\frac{A'}{A}=\frac{\left(1-\frac{k_3}{k_1}\right)\cos(k_2L)+i\left(\frac{k_2}{k_1}-\frac{k_3}{k_2}\right)\sin(k_2L)}{\left(1+\frac{k_3}{k_1}\right)\cos(k_2L)-i\left(\frac{k_2}{k_1}+\frac{k_3}{k_2}\right)\sin(k_2L)}}\,. \tag{16}$$

Los coeficientes de reflexíon y transmisión están dados por

$$\mathscr{R}=\frac{k_1}{k_1}\left|\frac{A'}{A}\right|^2,\qquad \mathscr{T}=\frac{k_3}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2,$$

es decir, básicamente, la onda que se refleja dividido la onda incidente en un caso, y la onda que se transmite dividida por la onda incidente en el otro. El valor absoluto cuadrado de un complejo es igual al complejo por su conjugado ($|z|^2=z\cdot z^*$), lo cual nos lleva a

$$\boxed{\mathscr{T}=\frac{4\left(\frac{k_3}{k_1}\right)}{\left(1+\frac{k_3}{k_1}\right)^2\cos^2(k_2L)+\left(\frac{k_2}{k_1}+\frac{k_3}{k_2}\right)^2\sin^2(k_2L)}} \tag{17}$$

para el coeficiente de transmisión, y

$$\boxed{\mathscr{R}=\frac{\left(1-\frac{k_3}{k_1}\right)^2\cos^2(k_2L)+\left(\frac{k_2}{k_1}-\frac{k_3}{k_2}\right)^2\sin^2(k_2L)}{\left(1+\frac{k_3}{k_1}\right)^2\cos^2(k_2L)+\left(\frac{k_2}{k_1}+\frac{k_3}{k_2}\right)^2\sin^2(k_2L)}}\,. \tag{18}$$

para el de reflexión.