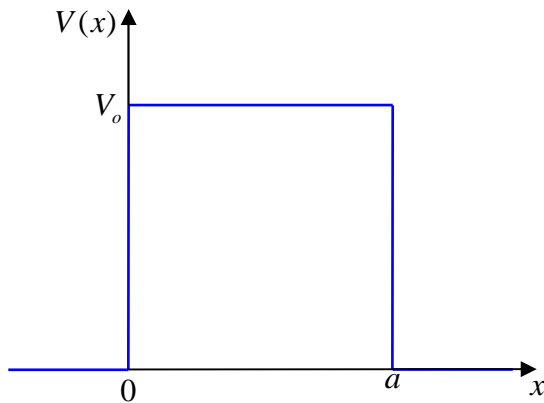


Clase 20: Potenciales en una dimensión – Barrera de potencial – Efecto túnel.

Clase 21: Coeficiente de transmisión sobre una barrera arbitraria – Ejemplos.



Este potencial tampoco es real, pero puede ser una versión, también muy simplificada, del potencial que encuentra un e^- que se aproxima al núcleo del átomo.

El potencial es:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 & \text{región 1} \\ V_0 & 0 \leq x \leq a & \text{región 2} \\ 0 & x \geq a & \text{región 3} \end{cases}$$

En otra sección vamos a ver que los resultados que obtengamos van a ser muy útiles en casos mucho más generales. Por supuesto, es un potencial discontinuo, así que valen las mismas consideraciones sobre la validez de la aproximación que en el caso anterior.

• Nuevamente, tenemos 3 zonas y 2 casos: a) $E > V_0$ y b) $0 \leq E < V_0$. Planteamos en general:

$$1) -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_1(x) = E \varphi_1(x)$$

$$2) -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_2(x) + V_0 \varphi_2(x) = E \varphi_2(x)$$

$$3) -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_3(x) = E \varphi_3(x)$$

El sistema de ecuaciones es idéntico al anterior; solo hay que cambiar $-V_0 \rightarrow V_0$.

Definiendo:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |(E - V_0)| > 0 \Rightarrow \begin{cases} \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) & \text{para } E > V_0 \\ \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) & \text{para } E < V_0 \end{cases}$$

$$\gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0$$

Resulta:

$$1) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_1(x) + \gamma^2 \varphi_1(x) = 0$$

$$2) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_2(x) \mp k^2 \varphi_2(x) = 0 \quad \text{donde el sg (-) corresponde a } E < V_0 \text{ y el sg (+) a } E > V_0$$

$$3) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_3(x) + \gamma^2 \varphi_3(x) = 0$$

Ahora comenzamos a considerar cada caso:

a) $E > V_0$

Como en el caso anterior, tenemos ondas viajeras:

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{i\gamma x} + B_1 e^{-i\gamma x}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}$$

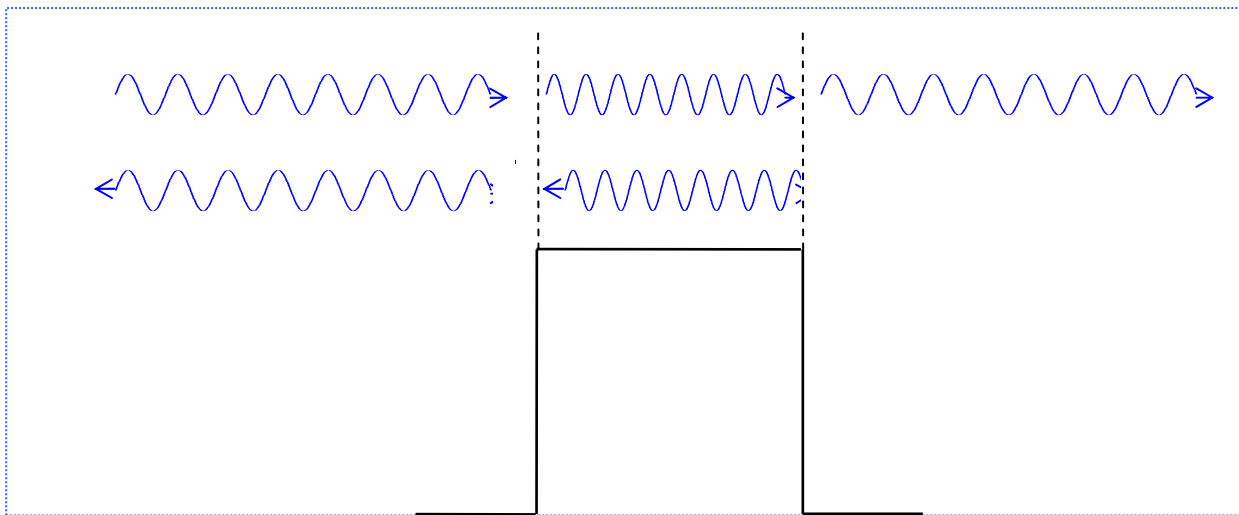
$$\varphi_3(x) = A_3 e^{i\gamma x} + B_3 e^{-i\gamma x}$$

donde:

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 e^{i\gamma x}}_{\substack{\text{onda incidente desde } -\infty \\ \rightarrow}} + \underbrace{B_1 e^{-i\gamma x}}_{\substack{\text{onda reflejada} \\ \leftarrow}} \text{ en la región 1}$$

$$\varphi_3(x) = \underbrace{A_3 e^{i\gamma x}}_{\substack{\text{onda transmitida} \\ \rightarrow}} + \underbrace{B_3 e^{-i\gamma x}}_{\substack{\text{onda incidente desde } +\infty \\ \leftarrow}} \text{ en la región 3}$$

Como en el caso anterior, vamos a considerar que solo tenemos partículas incidentes desde $(-\infty)$. En ese caso, $B_3 = 0$.



• Planteando las condiciones de contorno:

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad \Rightarrow \quad A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0} \quad \Rightarrow \quad i\gamma(A_1 - B_1) = ik(A_2 - B_2)$$

$$\varphi_3(a) = \varphi_2(a) \quad \Rightarrow \quad A_3 e^{i\gamma a} = A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika}$$

$$\left. \frac{d\varphi_3}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=a} \quad \Rightarrow \quad i\gamma A_3 e^{i\gamma a} = ik(A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika})$$

Resolviendo el sistema, se llega a:

$$A_1 = \left[\cos(ka) - i \frac{\gamma^2 + k^2}{2\gamma k} \operatorname{sen}(ka) \right] e^{i\gamma a} A_3$$

$$B_1 = i \frac{k^2 - \gamma^2}{2\gamma k} \operatorname{sen}(ka) e^{i\gamma a} A_3$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \left[A_1 \left(1 + \frac{\gamma}{k} \right) + B_1 \left(1 - \frac{\gamma}{k} \right) \right]$$

$$B_2 = \frac{1}{2} \left[A_1 \left(1 - \frac{\gamma}{k} \right) + B_1 \left(1 + \frac{\gamma}{k} \right) \right]$$

Nuevamente, el determinante no impone restricciones sobre la energía, así que, como correspondía, el espectro de energías es continuo (no hay estados ligados). Por otra parte, tampoco podemos imponer la condición de normalización.

• Vamos a estudiar cuál es la probabilidad de que la partícula se refleje (es decir, vuelva sobre sus pasos), R , y cuál es la probabilidad de que se transmita, T . Las probabilidades las vamos a calcular como siempre: número de casos favorables/número total de casos, es decir:

$$\text{probabilidad de ser reflejada} \equiv R = \frac{\text{flujo de partículas reflejadas}}{\text{flujo de partículas incidentes}}$$

$$\text{probabilidad de ser transmitida} \equiv T = \frac{\text{flujo de partículas transmitidas}}{\text{flujo de partículas incidentes}}$$

A la probabilidad R se la llama *coeficiente de reflexión*, mientras que T es el *coeficiente de transmisión*. La magnitud física que nos da el flujo de partículas es la corriente de probabilidad (cf. clase 18). Por lo tanto:

$$R = \frac{|\bar{J}_R|}{|\bar{J}_I|} \quad \text{y} \quad T = \frac{|\bar{J}_T|}{|\bar{J}_I|}$$

$$\bar{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

En una dimensión:

$$\bar{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \hat{x}$$

En la zona 1 está el flujo incidente y el reflejado, mientras que en la zona 3, se encuentra el transmitido. Calculemos, entonces, la corriente de probabilidad en la zona 1:

$$\begin{aligned} \bar{J} &= \frac{\hbar}{2mi} \left[(A_1^* e^{-i\gamma x} + B_1^* e^{i\gamma x}) i\gamma (A_1 e^{i\gamma x} - B_1 e^{-i\gamma x}) - (A_1 e^{i\gamma x} + B_1 e^{-i\gamma x}) i\gamma (-A_1^* e^{-i\gamma x} + B_1^* e^{i\gamma x}) \right] \hat{x} = \\ &= \frac{\hbar\gamma}{2m} \left[|A_1|^2 - |B_1|^2 - A_1^* B_1 e^{-2i\gamma x} + B_1^* A_1 e^{2i\gamma x} + |A_1|^2 - |B_1|^2 + A_1^* B_1 e^{-2i\gamma x} - B_1^* A_1 e^{2i\gamma x} \right] \hat{x} \end{aligned}$$

$$\bar{J} = \frac{\hbar\gamma}{m} \left[|A_1|^2 - |B_1|^2 \right] \hat{x} \equiv \bar{J}_I - \bar{J}_R$$

Se ve fácilmente de la expresión cuál es el flujo incidente y cuál el reflejado.

Para el flujo transmitido, calculamos en la región 3 (queda como ejercicio) y resulta:

$$\vec{J}_T = \frac{\hbar\gamma}{m} |A_3|^2 \hat{x}$$

• Con esto:

$$R = \frac{\frac{\hbar\gamma}{m} |B_1|^2}{\frac{\hbar\gamma}{m} |A_1|^2} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad T = \frac{\frac{\hbar\gamma}{m} |A_3|^2}{\frac{\hbar\gamma}{m} |A_1|^2} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

En este caso particular los factores $\frac{\hbar\gamma}{m}$ se simplifican porque a ambas regiones les corresponde el mismo γ , pero eso no ocurre siempre y hay que tener en cuenta ese factor.

• Los coeficientes resultan:

$$R = \frac{(\gamma^2 - k^2) \text{sen}^2(ka)}{4\gamma^2 k^2 + (\gamma^2 - k^2) \text{sen}^2(ka)}$$

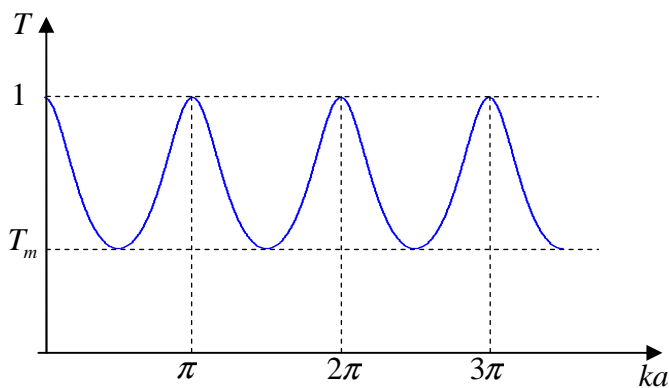
$$T = \frac{4\gamma^2 k^2}{4\gamma^2 k^2 + (\gamma^2 - k^2) \text{sen}^2(ka)}$$

Se ve claramente que $R + T = 1$ ya que la partícula, o bien se refleja, o bien se transmite.

• En función de la energía, el coeficiente de transmisión resulta:

$$T = \frac{4E(E - V_o)}{4E(E - V_o) + V_o^2 \text{sen}^2(ka)}$$

Supongamos que E y V_o son fijos.



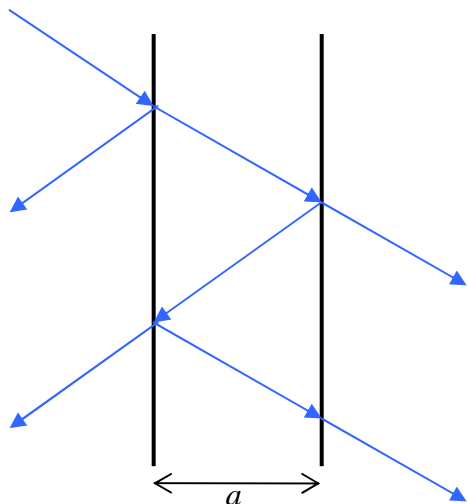
Entonces, $T = T(a)$, resulta una función oscilante de a , entre dos valores extremos:

$$T_M = 1 \Rightarrow ka = n\pi$$

$$T_m = \frac{4E(E - V_o)}{4E(E - V_o) + V_o^2} \Rightarrow ka = \frac{2n+1}{2}\pi$$

Contrariamente a las predicciones de la mecánica clásica, la partícula puede ser reflejada. Esto es propio de la mecánica ondulatoria. Al llegar al escalón, la onda se divide en dos, una reflejada y otra transmitida. En mecánica cuántica esto significa que la partícula tiene cierta probabilidad de ser reflejada y el resto, de transmitirse. Si pensamos en un flujo de partículas, noten que este, bajo ciertas condiciones, tiene probabilidad de transmitirse totalmente, pero no así de reflejarse totalmente (siempre hay una fracción transmitida).

- Del gráfico $T(a)$ se ve que se obtienen resonancias para $ka = n\pi$, es decir, cuando a es múltiplo entero



de semi-longitudes de onda de la partícula en la región 2. Esto es similar a lo que en óptica se conoce como un *interferómetro de Fabry-Perot*. En el interferómetro tengo dos placas reflectoras y uno hace incidir un rayo. Tenemos una parte que se refleja y otra que se transmite; la parte que se transmite, al llegar a la 2da placa sufre una transmisión y una reflexión, y así sucesivamente. La condición de resonancia se da cuando en la región entre las dos placas puede existir un conjunto de ondas estacionarias. Esto se da cuando la distancia entre placas, a , es $a = n \frac{\lambda}{2}$. Lejos de la resonancia, se produce

interferencia destructiva entre las ondas reflejadas en $x = 0$ y $x = a \Rightarrow$ el valor de la función de onda es chico y, por lo tanto, también se transmite menos.

b) $E < V_o$ (y **Efecto túnel**)

En este caso, cambia la parte de la función de onda de la región 2, ya que:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi_2(x) - k^2 \varphi_2(x) = 0 \quad \text{con} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E)$$

Por lo tanto, la solución es:

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx}$$

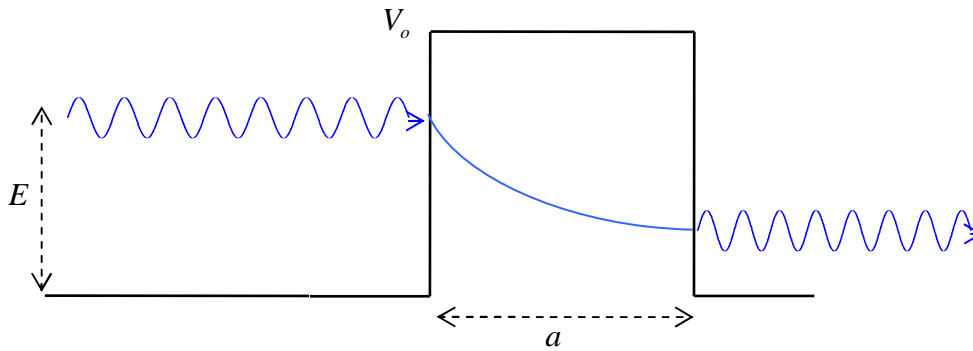
Vamos a calcular, en este caso, el coeficiente de transmisión. Tenemos que hacer todas las cuentas de nuevo? Si miramos con cuidado la solución, vemos que, para pasar de una solución a la otra, todo lo que tenemos que hacer es cambiar:

$$\begin{array}{lcl} E > V_o & \rightarrow & E < V_o \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & \rightarrow & \varphi_2(x) = A_2 e^{kx} + B_2 e^{-kx} \\ k & \rightarrow & -ik \end{array}$$

(todo el resto no cambia). Entonces:

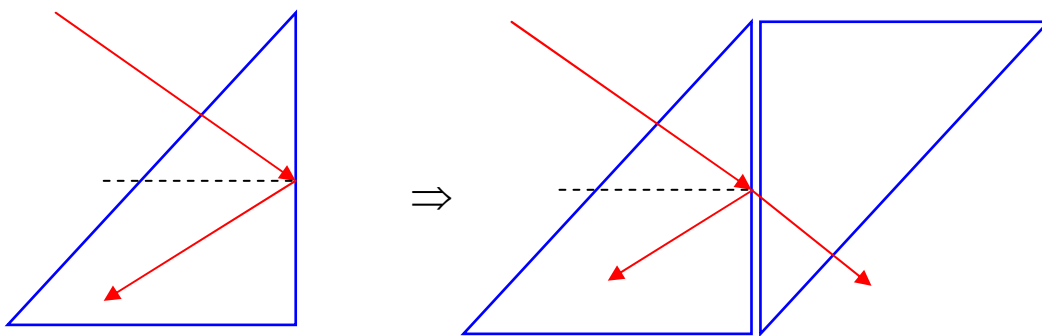
$$T = \frac{4E(V_o - E)}{4E(V_o - E) + V_o^2 \hbar^2 (ka)}$$

Qué significa esto? *La partícula tiene probabilidad no nula de cruzar la barrera de potencial.* Este es un efecto típicamente ondulatorio:



- La onda que llega a la barrera empalma con la exponencial decreciente. Si la barrera baja a cero después de una cierta distancia $a < \infty$, a la salida se observa una onda. Este efecto se llama **efecto túnel** (el nombre proviene de la imagen mental que nos hacemos, como si imagináramos que la partícula “cava” un túnel por dentro de la barrera para pasar del otro lado).
- En la región 2 la onda tiene la pinta de una onda evanescente (similar a lo que pasa, desde el punto de vista del electromagnetismo clásico, cuando una onda electromagnética llega a un conductor).
- Hay un fenómeno en óptica que es muy similar \rightarrow *reflexión total interna frustrada*:

Todos sabemos que, para una onda de luz que atraviesa un prisma, hay un ángulo de incidencia para el cual, la onda se refleja totalmente. Si acercamos otro prisma, se observa que también vamos a tener onda transmitida:



La película de aire entre ambos prismas actúa como una barrera de potencial. Si la distancia entre ambos prismas es suficientemente chica, la onda evanescente en la película de aire no disminuye tanto, y, por lo tanto, permite que se reconstruya onda en el segundo prisma.

- Volvamos a la cuántica. El coeficiente de transmisión T es tanto más chico cuanto menor sea la energía de la partícula respecto de la altura de la barrera V_0 . Esto está de acuerdo con el resultado clásico, donde se tienen barreras de potencial enormes comparadas con las cuánticas, es decir, $V_0 \rightarrow \infty$. También, la barrera no debe ser tan ancha como para que la onda evanescente no disminuya demasiado, es decir, en orden de magnitud, $a < \frac{1}{k}$.

- En el caso más desfavorable, $ka \gg 1$. Vamos a ubicarnos en esa situación para estimar una cota inferior para el coeficiente de transmisión. Esta cota es lo que generalmente se usa, como vamos a ver, para estimar la transmisión por efecto túnel. Entonces, en ese caso:

$$sh^2(ka) = \frac{e^{2ka} + e^{-2ka} - 2}{4} \rightarrow \frac{e^{2ka}}{4}$$

$$T \approx \frac{4E(V_o - E)}{4E(V_o - E) + V_o^2 \frac{e^{2ka}}{4}} \approx \frac{16E(V_o - E)}{V_o^2} e^{-2ka}$$

Por ejemplo, supongamos un e^- de $E = 1eV$, $V_o = 2eV$ y $a = 1 \text{ \AA}$:

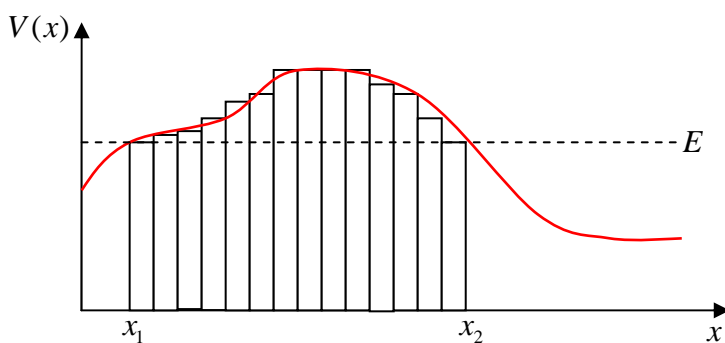
$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow T \approx 0.78$$

Para un p^+ , bajo las mismas condiciones:

$$T \approx 4 \times 10^{-19}$$

- **Coefficiente de transmisión sobre una barrera arbitraria (método WKB).**

El coeficiente de transmisión T de una barrera cuadrada, en su versión menos optimista, nos va a servir para estimar la probabilidad de que una partícula pueda pasar del otro lado de una barrera de potencial de cualquier forma. Este es el fundamento del método WKB.



- Supongamos un potencial de cualquier forma:

La partícula tiene una energía E , por lo que, para ella, existe una barrera $x_1 \leq x \leq x_2$.

Podemos descomponer dicha barrera en una sucesión de barreras cuadradas de ancho Δx_i . Vamos a suponer, razonablemente,

que la probabilidad de pasar una barrera no se ve influenciada por la probabilidad de pasar las barreras que le siguen, es decir, la probabilidad de pasar cada barrera es independiente de las otras. Entonces, la probabilidad de pasar todas las barreras va a ser el producto de todas las probabilidades:

$$T \cong T_1 T_2 T_3 \dots T_n = \prod_{i=1}^n T_i$$

Vamos a trabajar con el \ln (así pasamos a una suma):

$$\ln T \cong \ln T_1 + \ln T_2 + \dots + \ln T_n = \sum_{i=1}^n \ln T_i$$

Para considerar cada T_i , tomamos en cuenta el factor que nos da el orden de magnitud, es decir:

$$T_i \approx e^{-2k_i \Delta x_i}$$

Entonces:

$$\ln T_i \approx -2k_i \Delta x_i = -\frac{2\sqrt{2m(V(x_i) - E)}}{\hbar} \Delta x_i \Rightarrow \ln T = -2 \sum_{i=1}^n \frac{\sqrt{2m(V(x_i) - E)}}{\hbar} \Delta x$$

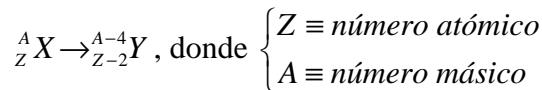
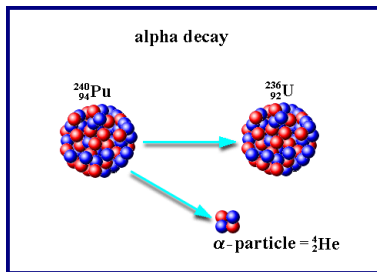
Si ahora hacemos tender $\Delta x_i \rightarrow 0$:

$$\ln T = -2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar} dx$$

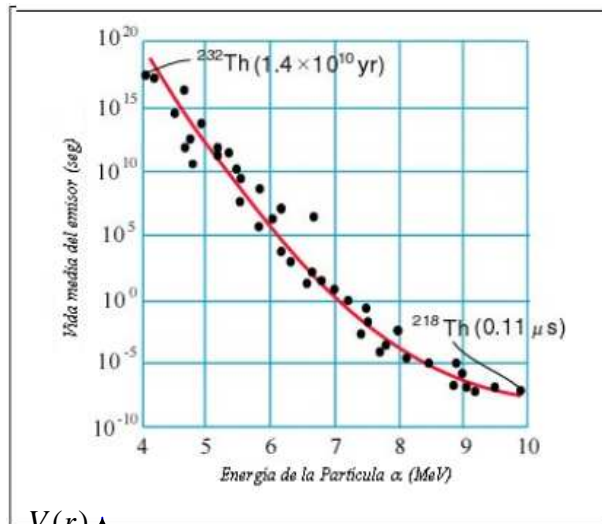
-----⊗-----

- Vamos a ver algunos fenómenos que se explican por efecto túnel.
- **Decaimiento α (George Gamow-1928)**

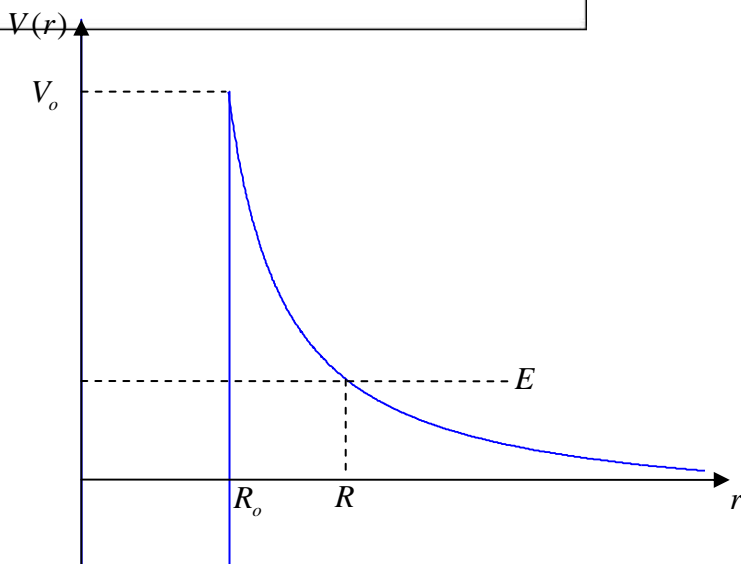
En física nuclear uno suele tener un núcleo muy pesado, que en su interior contiene partículas α ($2p^+ + 2n^0$). En determinado momento, una de estas partículas α puede escaparse del núcleo. Cuando la partícula α está dentro del núcleo, en realidad se encuentra atrapada en un pozo de potencial que la retiene en un estado ligado. Cuando se produce el decaimiento, es decir, la partícula α escapa del núcleo, el elemento cambia:



por ejemplo $^{234}_{92}\text{U} \rightarrow ^{230}_{90}\text{Th}$ (no es el ejemplo de la figura)



La vida media de los elementos pesados que emiten partículas α varía alrededor de 20 órdenes de magnitud, desde $0.1 \mu\text{s}$ hasta 10 billones de años. Este amplísimo rango depende fuertemente de la energía observada de las partículas α , que varía solamente entre 4 y 9 Mev (el de la figura es un gráfico logarítmico). Esta dependencia sugiere un proceso exponencial el cual, como vamos a ver, se explica por efecto túnel. La teoría la desarrolló Georges Gamow, hecho por el cual ganó el premio Nobel.



- Modelemos el potencial que “ve” la partícula α .
- En un estado ligado dentro del núcleo, la partícula se encuentra atrapada en un pozo de potencial. Sin perder

generalidad, supongamos un pozo cuadrado (eso no influye en el cálculo). Cuando la partícula está fuera del pozo, el núcleo queda cargado con una carga positiva $(Z-2)e$. Por lo tanto, más allá del pozo, la partícula α va a enfrentar una barrera coulombiana:

$$V(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{r}$$

• Vamos a encontrar el coeficiente de transmisión en función de la energía de la partícula α . Usando el método WKB:

$$\ln T = -2 \int_{R_0}^R \frac{\sqrt{2m(V(r) - E)}}{\hbar} dr$$

R_0 corresponde a la dimensión del pozo y es $R_0 \approx 10^{-12} \text{ cm}$. La altura de la barrera es $V_0 = \frac{2(Z-2)e^2}{R_0}$.

Entonces, podemos escribir el potencial como:

$$V(r) = \frac{R_0}{r} V_0$$

La energía de la partícula es:

$$E = V(R) = \frac{R_0}{R} V_0$$

Con esto:

$$\begin{aligned} \ln T &= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{R_0}^R \left(\frac{R_0}{r} V_0 - E \right)^{\frac{1}{2}} dr \\ &= -\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{R_0}^R \left(\frac{R}{r} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} dr \end{aligned}$$

• Suponiendo que $R_0 \ll R$ (es decir, $E \ll V_0$), de tablas:

$$\begin{aligned} \int_{R_0}^R \left(\frac{R}{r} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} dr &= R \left[\frac{\pi}{2} - \underbrace{\arcsen\left(\frac{R_0}{R}\right)^{\frac{1}{2}}}_{\approx \left(\frac{R_0}{R}\right)^{\frac{1}{2}}} - \left(\frac{R_0}{R}\right)^{\frac{1}{2}} \underbrace{\left(1 - \frac{R_0}{R}\right)^{\frac{1}{2}}}_{\approx 1} \right] \cong R \left[\frac{\pi}{2} - 2\left(\frac{R_0}{R}\right)^{\frac{1}{2}} \right] = \\ &= \frac{\pi}{2} \frac{V_0}{E} R_0 - 2\left(\frac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}} R_0 \end{aligned}$$

El último paso se debe a que queremos que $T = T(E)$. Entonces:

$$\ln T \cong -\pi \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{V_0 R_0}{\sqrt{E}} + \frac{4\sqrt{2mV_0}}{\hbar} R_0$$

Por lo tanto:

$$T(E) \cong Ae^{-\frac{C}{\sqrt{E}}}$$

$$\text{con } C = \frac{\pi\sqrt{2mV_0R_0}}{\hbar} = \frac{2\pi\sqrt{2m}}{\hbar}(Z-2)e^2$$

Ejercicio:

Usando la constante de estructura fina $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ y $\hbar c = 197 \text{ Mev.Fm}$ ($1 \text{ Fm} = 10^{-13} \text{ cm}$) y los siguientes datos:

$$m = 6.6 \times 10^{-24} \text{ g}$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ c} = 4.8 \times 10^{-10} \text{ ues}$$

$$\hbar = 1.054 \times 10^{-27} \text{ erg} \times \text{s}$$

$$1 \text{ Mev} = 1.602 \times 10^{-6} \text{ erg}$$

Calcular el coeficiente de transmisión de la partícula α en función del número atómico del núcleo que se desintegra, y aplicarlo al caso de la desintegración ${}_{92}^{234}\text{U} \rightarrow {}_{90}^{230}\text{Th}$, sabiendo que la energía de la partícula α es $E = 4.76 \text{ Mev}$.

-
- Vamos a hacer un cálculo semi-clásico (de los que no me gustan) del tiempo de vida medio de un núcleo que sufre una desintegración α . (cuando lleguen a Teórica 2 y/o Estructura 4, lo van a hacer bien).
 - Suponiendo que la partícula α se mueve dentro del pozo con una cierta velocidad \bar{v} (ya empezamos mal...), se puede pensar que “golpea” la pared del pozo en un tiempo:

$$t = \frac{2R_0}{v}$$

En la unidad de tiempo, va a haber $\frac{n}{t} = \frac{v}{2R_0}$ golpes. Cada vez que llega al borde de la barrera, tiene una

probabilidad T de atravesarla. Luego, en $\frac{v}{2R_0}$ golpes por unidad de tiempo, tendrá una probabilidad por

unidad de tiempo de atravesar la barrera:

$$\frac{\text{prob}}{t} = \frac{v(E)}{2R_0} T \equiv \lambda \quad \text{donde } \lambda \equiv \text{cte de desintegración.}$$

Si atraviesa la barrera, su probabilidad vale 1, y el tiempo va a ser el tiempo de vida medio $\tau_{1/2}$. Entonces:

$$\frac{1}{\tau_{1/2}} = \frac{v}{2R_0} T \Rightarrow \boxed{\tau_{1/2} = \frac{2R_0}{v} T^{-1} = \frac{1}{\lambda}} \quad \text{y } \lambda = \frac{v}{2R_0} T = \frac{v}{2R_0} A e^{-\frac{C}{\sqrt{E}}}$$

Se suele graficar el log de la constante de desintegración en función de $E^{-\frac{1}{2}}$:

$$\boxed{\log \lambda = C' - CE^{-\frac{1}{2}}}$$

Esta ley lineal se cumple muy bien y se llama ley de Geiger-Nutall (1911).

La fracción de núcleos que se desintegran en la unidad de tiempo es:

$$\frac{dN}{Ndt} = \lambda \left(\frac{\text{prob}}{t} \right)$$

Si integramos:

$$\frac{dN}{N} = \lambda dt \Rightarrow \boxed{N(t) = N_0 e^{-\lambda t}}$$

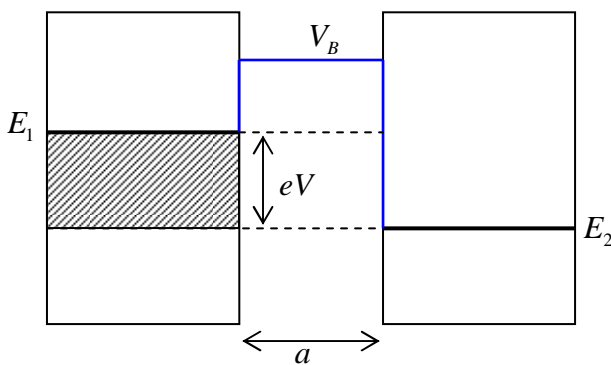
-----⊗-----

- **Microscopio de efecto túnel**

En 1986, G. Binnig y H. Rohrer, de IBM (Zurich) ganaron el Nobel por la invención de un microscopio basado en el efecto túnel, que tiene resolución a nivel atómico.

Por una ley no escrita de la física, que es la ley de conservación de la dificultad, el principio en el que se basa el microscopio es relativamente sencillo, lo cual significa que su ejecución es sumamente complicada. Vamos a dar alguna idea de su principio de funcionamiento:

- Supongamos dos electrodos metálicos enfrentados, a una distancia a , y vacío entre ellos.



En los sólidos, los niveles de energía se agrupan en bandas y así, hay bandas de energías permitidas y bandas de energías prohibidas. E_1 y E_2 son las energías de los máximos niveles ocupados en cada uno de los electrodos (se llaman energías de Fermi, como vamos a ver en la última clase). Si los electrodos no están conectados, en la zona entre ellos va a haber una barrera de potencial V_B , ya que $V_B - E = W$ es la función trabajo del material.

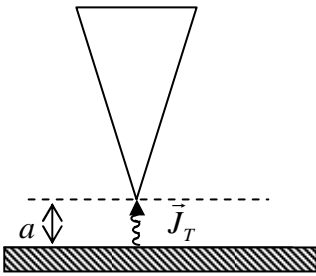
Se puede producir efecto túnel (se dice que los e^- *tunelean*) del material 1 al 2 entre E_1 y E_2 , ya que por encima de E_1 , no hay e^- (son estados vacantes), y por debajo de E_2 , todos los niveles ya están ocupados. Si se conecta una diferencia de potencial V entre ambos materiales, se puede controlar que la diferencia de energías sea $E_1 - E_2 = eV$, o sea, la energía de los e^- que pueden tunelear.

El coeficiente de transmisión va como:

$$T \propto e^{-2ka} \quad \text{donde} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_B - E)$$

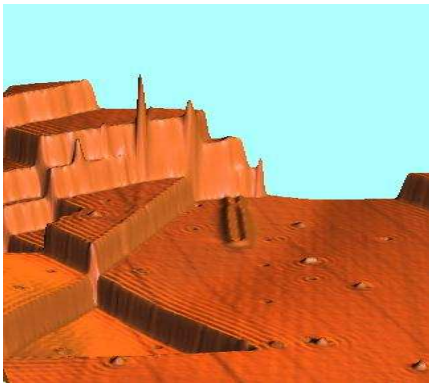
y como $V_B - E = W$ es típicamente 4-5 eV, entonces se ve que $k^{-1} \approx 1 \text{ \AA}$. Entonces, la corriente de e^- que pasa por efecto túnel baja un orden de magnitud por cada \AA de separación entre los electrodos. Esto hace que solo se pueda observar para separaciones muy pequeñas.

- Cuál es la idea, entonces?

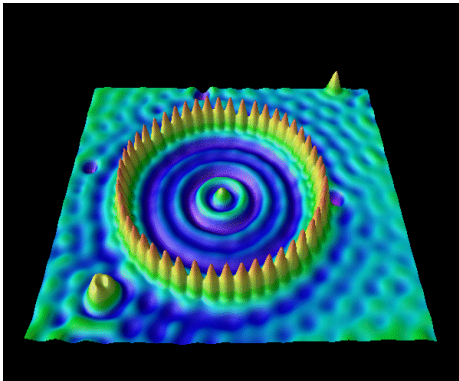


Una punta de metal muy aguda (debería, típicamente, terminar en un átomo) se mantiene a una distancia suficientemente pequeña de la superficie a analizar, tal que los e^- puedan tunear a través de la barrera de vacío que separa la punta de la superficie. La corriente \bar{J}_T es muy sensible a la distancia a . La punta escanea la superficie de tal manera de mantener $|\bar{J}_T| = cte$. Eso hace que la distancia entre la punta y la superficie también sea $a = cte$. Como la corriente baja un orden de magnitud por cada Å , el aparato tiene resolución a nivel atómico, es decir, se puede reproducir la “topografía” de la superficie de la muestra a nivel atómico. Obviamente, entre el dato de la corriente y el resultado del escaneo, hay un montón de software en el medio.

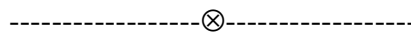
- Para muestra, estas son imágenes de IBM (se pueden buscar en Internet). Por supuesto, la coloración es artificial.



Cu(1,1,1) - Las “ondas” sobre la superficie son debidas a “estados electrónicos superficiales”. Estos electrones son libres de moverse sobre la superficie del cristal, pero no pueden penetrar en él. Alrededor de los defectos se forman ondas estacionarias (diám=15Å)

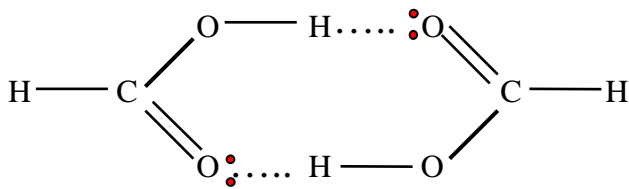


“Corral cuántico” - Electrones de superficie en estados estacionarios (diam=71.3Å). Se observa interferencia causada por el “scattering” del gas de electrones con los defectos del cristal.



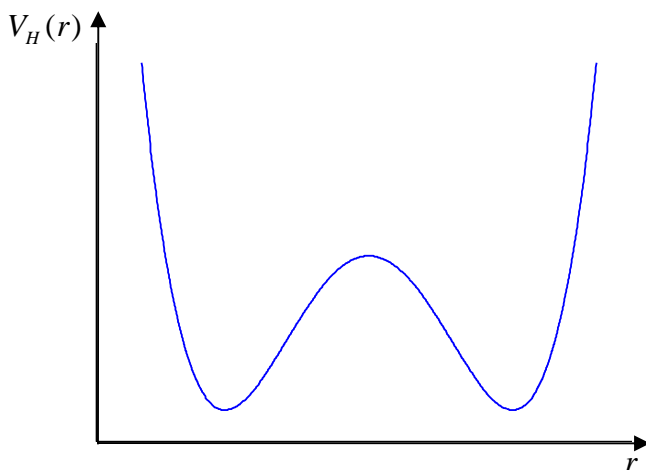
- **Tema extra: Puentes de hidrógeno**

Los puentes de hidrógeno (HB) son un tipo particular de unión química, fundamentalmente de tipo electrostático, donde dos átomos, generalmente electronegativos, comparten un hidrógeno, formando así un puente entre ellos. Estos puentes pueden ser dentro de una misma molécula (intramoleculares) o uniendo dos moléculas (intermoleculares). Uno de los átomos (el aceptor) tiene electrones que no están formando ninguna unión, llamados electrones (o pares) libres. Estos electrones son los que atraen al protón, que está unido por un enlace al otro átomo (donor):



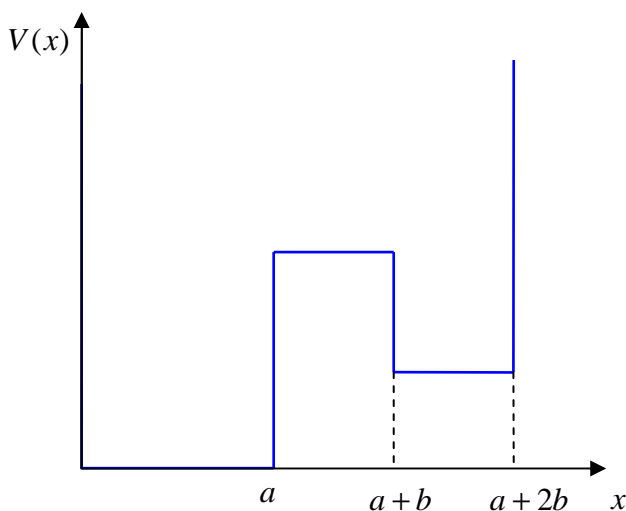
La figura muestra un dímero de ácido fórmico, con dos HBs, cada uno formado por el enlace O-H y los pares libres del otro oxígeno.

El potencial que “ve” el H es, generalmente, un doble pozo con una barrera entre ambos, con dos mínimos, que corresponden a las dos posiciones de equilibrio cerca de cada uno de los dos átomos que lo comparten:



El doble pozo puede ser simétrico o asimétrico, dependiendo de los átomos que comparten el H. El puente de hidrógeno es un pseudo enlace más largo que los enlaces comunes. Por ejemplo, el agua sólida está formada por moléculas de agua unidas por puentes de hidrógeno. Esto hace que el volumen ocupado por una masa de hielo sea mayor que el volumen de la misma masa de agua líquida.

- Dependiendo de las características de la barrera, puede haber transferencia del protón de un pozo al otro por efecto túnel. Esta es una de las causas (hay otras), por ejemplo, que produce errores en el código genético, ya que las bases nucleicas de una hélice del ADN están unidas con sus complementarias en la otra hélice, por uniones puente de hidrógeno. Si hay un error en la secuencia, este se multiplica como una serie geométrica cuando las células se van duplicando. Estadísticamente, es imposible que no se produzcan errores. (Y esto, “engancha” con lo que vimos en la clase 5, sobre la pérdida de información que no puede restituirse y que conduce a que el individuo se comporte como aislado y evolucione de acuerdo al segundo principio...).
- Propongo como ejercicio: calcular la probabilidad de que se produzca transferencia del protón de un pozo al otro por efecto túnel, en esta versión simplificada del potencial del HB:



$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ V_0 & a \leq x \leq (a+b) \\ \frac{V_0}{2} & (a+b) \leq x \leq (a+2b) \\ \infty & x > (a+2b) \end{cases}$$

con $b < a$