Corriente de probabilidad y coeficientes de reflexión y transmisión. Potencial escalón unidimensional

June 22, 2018

Intuitivamente (en mecánica clásica), una partícula libre de masa m que viene moviéndose desde $x = -\infty$ (asumimos que solo existe una dimensión espacial) con una rapidez v_i tiene dos comportamientos posibles frente a una barrera de potencial V_0:

- Si $T = \frac{1}{2}mv_i^2 > V_0$,
  avanza con una velocidad disminuida $v_f = \sqrt{v_i^2 - 2V_0/m}$.
- Por el contrario, si $\frac{1}{2}mv_i^2 \leq V_0$,
  sólo puede revertir el signo de su velocidad $v_i \to -v_i$ y regresar por donde vino (asumiendo lo usualmente ideal que son nuestros sistemas)

En mecánica cuántica, la situación no es tan clara. Para empezar, no existe tal cosa como "una partícula moviéndose con velocidad v_i". Lo más cercano a eso es una onda plana que, como bien sufrimos, tiene ciertos problemas.

1 Una onda plana

La solución a la ecuación de Schrödinger en una dimensión en ausencia de potencial es una onda plana,

$$\psi_\pm(x,t) = C_\pm e^{\pm i\frac{(px - \frac{p^2 t}{2m})}{\hbar}} \tag{1}$$

Las dos soluciones tienen la misma energía $E_\pm = \frac{p^2}{2m}$ pero están degeneradas en momento: $+p$ representa una onda que viaja hacia la derecha y $-p$ una onda que viaja hacia la izquierda. La solución más general se escribe como :

$$\psi(x,t) = Ae^{+i\frac{(px - \frac{p^2 t}{2m})}{\hbar}} + Be^{-i\frac{(px - \frac{p^2 t}{2m})}{\hbar}} \tag{2}$$

Asumimos para esta primera parte que $B = 0$. La interpretación física es que,

$$|\psi(x,t)|^2 = |A|^2 \tag{3}$$

describe la densidad de probabilidad del sistema en función del tiempo. Como la ecuación de Schrödinger que estamos resolviendo es independiente del tiempo, la densidad de probabilidad es constante en el tiempo. El factor de normalización $|A|^2$ es problemático en ciertas situaciones pues la onda plana no es normalizable si el espacio es infinito. Debido al principio de incertidumbre, una onda plana no puede representar un estado físico. Sin embargo, las onda planas son una base completa y por lo tanto adecuada para expresar las verdaderas soluciones en la forma de paquetes de ondas(planas),

$$\psi(x_t)_{fisico} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \phi(p) e^{i\frac{(px-\frac{p^2 t}{2m})}{\hbar}} \tag{4}$$

En particular, cuando uno quiera estudiar reflexión y transmisión de un paquete de ondas cuántico a través de un potencial, la linealidad de la ecuación de Schrödinger garantiza que conocer lo que sucede con una onda plana permite reconstruir lo que sucede con todo el paquete de ondas.
Una caracterśtica de la onda plana que pone en evidencia otra diferencia entre el caso cuántico y el caso clásico es que mientras que en el caso clásico una partícula viaja con velocidad $v = \frac{p}{m}$, para la onda plana aparecen dos velocidades[1]:

$$v_{cl} = \frac{dE}{dp} = v \tag{5}$$

$$v_q = \frac{E}{p} = \frac{v}{2} \tag{6}$$

En particular, el análogo cuántico de una partícula que se mueve a velocidad v sería una onda plana con velocidad de grupo v y una velocidad de fase $\frac{v}{2}$ (¡La velocidad de fase puede ser menor, mayor o igual a la velocidad de grupo, la velocidad de fase incluso puede ser mayor a la de luz! Se puede demostrar sin embargo que la fase no transporta información y por lo tanto no se viola relatividad especial.). Otra manera de entender ésto es mediante la corriente de probabilidad $J(x,t)$. La corriente de probabilidad describe, como su nombre lo indica, como cambia la probabilidad de que el sistema se encuentre en un intervalo dado (a,b), con el tiempo. En una dimensión (para más dimensiones reemplazar $\frac{d}{dx} \to \vec{\nabla}$):

$$\frac{dP(a \leq x \leq b, t)}{dt} = (\vec{J}(a,t) - \vec{J}(b,t)) \cdot \hat{x} \tag{7}$$

$$\vec{J}(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \frac{d}{dx}\psi^* - \psi^* \frac{d}{dx}\psi) \tag{8}$$

[1] La ecuación de Schrödinger es la de un medio dispersivo y por lo tanto está representada por dos velocidades para cualquier paquete de ondas: la de fase y la de grupo.

Para una onda plana, sabiendo que $\frac{d}{dx}\psi(x,t) = \frac{ip}{\hbar}$, se ve que:

$$\begin{aligned} \vec{J}(x,t) &= v_{cl}|\psi(x,t)|^2\hat{x} && (9) \\ &= v_{cl}|A|^2\hat{x} && (10) \end{aligned}$$

En otras palabras, existe una corriente de probabilidad no nula. En particular, pareciera indicar que la probabilidad se desplaza con la velocidad de la partícula! Humeantemente, uno puede pensar que una onda plana consiste en infinitas partículas en todos los puntos del espacio, cada una viajando con velocidad v [2]. Por lo tanto, la corriente refleja el movimiento de cada partícula que compone a la onda plana. Sin embargo, uno sabe que la densidad de probabilidad es independiente del tiempo, debido a que uno tiene un estado estacionario. ¿Qué está pasando?

Si uno resuelve la ecuación para la probabilidad entre a y b, ve que:

$$\begin{aligned} \frac{dP(a \leq x \leq b, t)}{dt} &= v_{cl}(P(x=a,t) - P(x=b,t)) && (11) \\ \frac{dP(a \leq x \leq b, t)}{dt} &= 0 && (12) \end{aligned}$$

Donde se utilizó que la probabilidad estar en un dado punto es independiente del punto en cuestión (o, más obviamente, la ecuación 3). A pesar de que existe una corriente no nula, la probabilidad de encontrar a la partícula es un intervalo fijo no cambia con el tiempo debido a que el flujo de corriente es cero. Toda la probabilidad que entra en $x = a$ sale en $x = b$ al mismo tiempo. El sistema está localmente balanceado. Para facilitar un poco la comprensión, uno puede pensar en un circuito estacionario con corriente I y tensión V. La corriente I indica que hay un desplazamiento de carga con el tiempo. Sin embargo, como el circuito es estacionario, la e.m.f garantiza que toda la carga que sale por una determinada región del circuito es compensada por la carga que entra. Esto sucede, por ejemplo, con un circuito puramente resistivo en el regimen estacionario.

2 Potencial escalón

Como vimos en la sección anterior, las ondas planas permiten estudiar los efectos de reflexión y transmisión de un paquete de ondas a través de un potencial. El efecto túnel es recurrente, aparece por ejemplo en la fisión nuclear del sol y en dispositivos nanoelectrónicos construidos con semiconductores y es interesante porque permite identificar diferencias entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica. En lugar de estudiar el efecto túnel en sí, estudiemos un caso en apariencia más simple: el potencial semiinfinito. Para x negativos, el potencial es nulo, $V_0(x<0) = 0$, y la ecuación de Schrödinger

[2] Una manera matemática de decir esto es que $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\delta(x-x_0)e^{ikx} = e^{ikx_0}$.

es la de una partícula libre. En particular, como estamos interesados en una onda incidente que proviene de $x = -\infty$, interactúa con el potencial y produce una onda reflejada y una transmitida, postulamos que, para $x < 0$,

$$\psi_{x<0}(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \tag{13}$$

Donde A es el coeficiente de la onda incidente y B el de la onda reflejada. Si uno calcula la corriente de probabilidad, tiene que:

$$\vec{J}_{x<0}(x,t) = v_{cl}(|A|^2 + |B|^2 + 2Re(A^*B))\hat{x} \tag{14}$$

Nuevamente, aparece la dualidad onda-partícula. La corriente de probabilidad se corresponde con una partícula que avanza con v_{cl}, una que retrocede con la misma velocidad y un factor de interferencia entre ambos (que da cuenta del carácter ondulatorio del sistema). Si la parte real de A^*B fuese cero, no habría interferencia y las particulas no se "verían" entre sí. La densidad de probabilidad para $x < 0$ es:

$$|\psi_{x<0}(x,t)|^2 \quad = \quad |A|^2 + |B|^2 + 2Re(A^*B) \tag{15}$$

Para $x > 0$ existen dos casos:

- i) $E > V_0$
- ii) $E < V_0$

2.1 $E < V_0$

Para estudiar el efecto túnel nos interesa la condición ii), clásicamente bajo esta condición $x > 0$ es una región prohibida para la partícula, pero vamos a ver que la probabilidad no se anula en esta zona en el caso cuántico. La ecuación de Schrödinger da lugar entonces a exponenciales reales,

$$\psi_{x>0}(x,t) \quad \sim \quad e^{\pm\frac{Px-iEt}{\hbar}} \tag{16}$$

$$P^2 \quad = \quad 2m(V_0 - E) \tag{17}$$

donde usamos $(E - V_0) < 0$.

Dado que el potencial es semi-infinito, una de las condiciones de contorno de la función $\psi_{x>0}$ es que se anule en $x \to +\infty$ [3]. Por lo tanto, sólo sobrevive la exponencial con exponente negativo,

$$\psi_{x>0}(x,t) = Ce^{-\frac{Px-iEt}{\hbar}} \tag{18}$$

La densidad de probabilidad se deduce fácilmente. ¿Qué pasa si calculamos la corriente de probabilidad? Debido a que $\frac{d\psi_+}{dx} = -\frac{P}{\hbar}\psi_+$, $\psi\frac{d\psi^*}{dx} = \psi^*\frac{d\psi}{dx}$ y se tiene que:

[3] Esta condición no se cumple para $\psi_{x<0}$ si consideramos únicamente una onda plana, pero puede imponerse a través de la función $\phi(p)$.

$$
\begin{aligned}
|\psi_{x>0}(x,t)|^2 &= |C|^2 e^{-\frac{2Px}{\hbar}} && (19)\\
\vec{J}_{x>0}(x,t) &= 0\hat{x} && (20)
\end{aligned}
$$

Entonces, para una densidad de probabilidad no nula (y estacionaria aunque dependiende de x), la corriente de probabilidad se anula. Se puede pensar que, en la región donde el sistema clásico no puede estar, la densidad de probabilidad no se desplaza, satisfaciendo automáticamente que el flujo de probabilidad es nulo y la densidad no varía en el tiempo. Volviendo a la analogía del circuito, en este caso el circuito es estacionario porque todas las cargas están quietas, anulando la corriente eléctrica (es, por ejemplo, un circuito puramente capacitivo).

Tanto para x positivo como para x negativo, la densidad de probabilidad es constante en el tiempo para cualquier intervalo elegido. Esto implica que toda corriente de probabilidad que entra por un extremo del intervalo sale por el otro. Cuando no hay potencial, la corriente de probabilidad refleja el análogo clásico: una partícula moviéndose con velocidad v_{cl} y rebotando. Cuando hay un potencial mayor a la energía cinética inicial, la corriente de probabilidad es nula: no hay desplazamiento posible en esa región del espacio, 'la onda no se propaga'.

Resta aún responder la pregunta más importante: cómo es la respuesta del sistema si mi estado inicial es un paquete de ondas que viaja desde $x = -\infty$? Para eso, defino el coeficiente de reflexión del sistema como la probabilidad relativa de que tener una onda reflejada dada una onda incidente[4]:

$$
R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \tag{21}
$$

Como el potencial es semi-infinito, no existe una onda plana transmitida del otro lado que represente el paquete de onda que puedo medir en $x = \infty$. Por lo tanto, el coeficiente de transmisión es automáticamente nulo. No hay probabilidad de transmitir una onda dada una determinada onda incidente. Para resolver el sistema, puedo utilizar las dos condiciones de contorno en $x = a$:

1. la continuidad de la función de onda : $\psi_{x<0}|_{x=a} = \psi_{x>0}|_{x=a}$
   $\rightarrow A + B = C$

2. la continuidad de la derivada la función de onda : $\psi'_{x<0}|_{x=a} = \psi'_{x>0}|_{x=a}$
   $\rightarrow (A - B) = \frac{iP}{p}C$

Notar que si $V_0(x=0) \rightarrow \infty$ *la condición de contorno sería* $\psi(x=a,t) = 0$.

[4]Puede definirse de manera más general utilizando corrientes de probabilidad.

Con un poquito de ayuda de nuestros amigos los números complejos, se puede llegar a:

$$\frac{B}{A} = \frac{1 - iP/p}{1 + iP/p} \rightarrow R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \tag{22}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2}{1 + iP/p} \tag{23}$$

Donde p minúscula representa el momento de la onda en ausencia de potencial $p^2 = 2mE$ y P el momento en la región de potencial no nulo, $P^2 = 2m(V_0 - E)$.

El coeficiente de reflexión es 1 y por lo tanto $T = 1 - R = 0$, no hay efecto túnel. Cómo el potencial impide transmitir una onda debido a que $E < V_0$, toda la onda se refleja y, cuando vuelvo a medir, obtengo el mismo paquete de onda que recibí.

2.2 $E > V_0$

Ahora analicemos el caso i) donde $E > V_0$: para $x > 0$ la función de onda es parecida a la de una onda plana. ¿Cuál es la diferencia? Su relación de dispersión es ahora:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0 \tag{24}$$

Por lo que no es exactamente una onda plana. Sin preocuparnos demasiado por eso sabemos que, dado que hay una única dirección de propagación:

$$\psi'_{x>0}(x,t) = Fe^{\frac{i}{\hbar}(P'x - Et)} \tag{25}$$

$$P'^2 = 2m(E - V_0) \tag{26}$$

La corriente de probabilidad vuelve a ser no nula pero ahora con una velocidad diferente, correspondiendo con la velocidad que tendría la partícula clásica $v'_{cl} = \frac{P'}{m} = \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$. Dado que el estado final no es una onda plana, definir el coeficiente de transmisión no es trivial como decir $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$. Es más fácil utilizar que $T + R = 1$. Aplicando nuevamente las condiciones de contorno, puede verse que:

$$R = \frac{(p - P')^2}{(p + P')^2} = \frac{(1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2} \tag{27}$$

$$T = \frac{4pP'}{(p + P')^2} = \frac{4\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2} \tag{28}$$

Donde se ve que las amplitudes dependen de la energía y el potencial (o, equivalentemente, de los momentos p y P'). Por lo tanto, las ondas reflejada y transmitida tienen otra amplitud relativa y, al integrar sobre todas las ondas planas incluidas en el paquete de onda, la dependencia de estas amplitudes con el momento de las ondas planas, muestra que el perfil de onda será diferente en ambos casos al del paquete incidente.

$$\psi_r \sim \int_{-\infty}^{\infty} dp\phi(p,t)B(p,V_0)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \tag{29}$$

$$\psi_t \sim \int_{-\infty}^{\infty} dp\phi(p,t)F(p,V_0)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \tag{30}$$

Donde en ambos casos uso las ondas planas con momento p (no P) dado que esa es mi base (y por eso no podía definir tan fácilmente T). Un buen límite es que, si la energía E es muy alta en comparación con V_0, $R = 0$ y $T = 1$. En este límite, la partícula no ve al potencial por lo que la transmisión es mucho más probable que la reflexión. Si nos vamos al caso límite en que $E = V_0$, recuperamos que $R = 1$ y $T = 0$.