

DISPOSITIVOS OPTOELECTRÓNICOS

Tema 2: Fundamentos de mecánica cuántica

Lluís Prat Viñas

Escola Tècnica Superior d'Enginyers de Telecomunicació de
Barcelona (ETSETB)

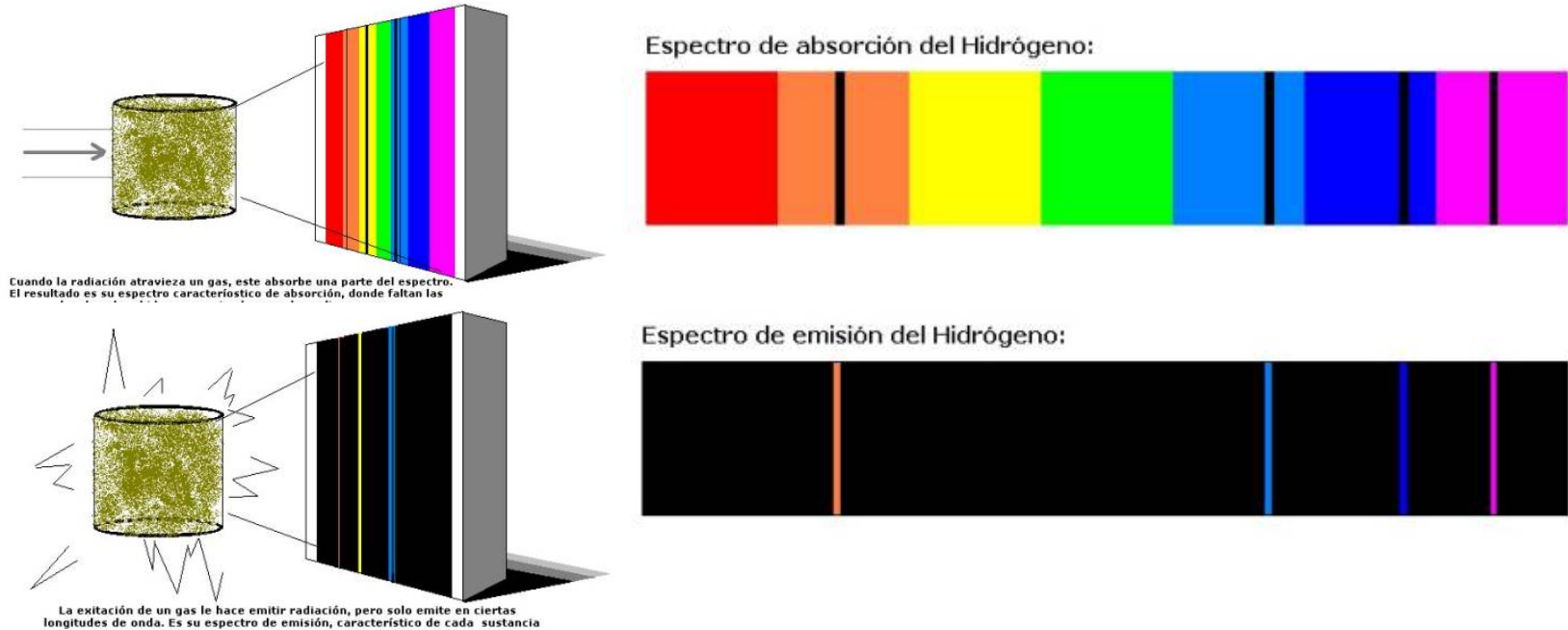
Universitat Politècnica de Catalunya

2.- Fundamentos de mecánica cuántica

- 2.1.- El modelo atómico de Bohr
- 2.2.- Dualidad onda corpúsculo en la mecánica cuántica
- 2.3.- El paquete de ondas
- 2.4.- Principio de incertidumbre de Heisenberg
- 2.5.- La ecuación de Schrödinger
- 2.6.- El efecto túnel
- 2.7.- El pozo cuántico
- 2.8.- Modelo cuántico del átomo

2.1.- EL MODELO ATÓMICO DE BOHR

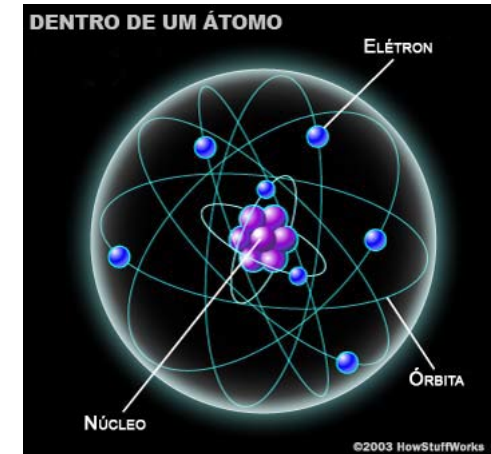
La física de 1900 (física clásica) no era capaz de explicar los espectros de absorción y de emisión que presentaban los gases.



La física clásica tampoco era capaz de explicar el modelo atómico a partir del descubrimiento del electrón (1897) y del experimento de Rutherford (1911) que mostraba que el átomo estaba vacío con la masa y carga positiva concentrada en un diminuto núcleo.

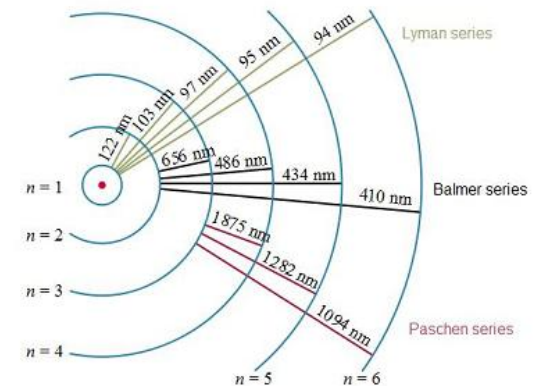
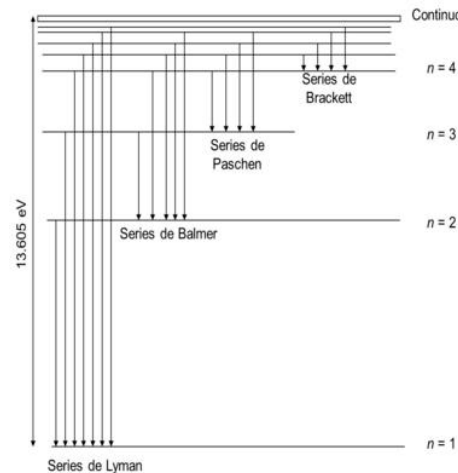
El modelo atómico de Bohr (1913) daba respuesta a estas cuestiones “parcheando” la física clásica:

- a.- El electrón se mueve en una órbita circular en la que la fuerza centrífuga es igual a la fuerza centrípeta (clásico)
- b.- Solo están permitidas aquellas órbitas en las que el momento angular es múltiplo entero de \hbar (no clásico).
- c.- Cuando un electrón se encuentra en una órbita permitida no irradia energía (no clásico)
- d.- En la transición desde una órbita E_i a otra órbita E_f el electrón absorbe o emite un fotón de energía $hf = E_f - E_i$



El modelo explicaba los espectros de emisión y absorción.

La energía estaba cuantificada: el electrón solo podía tener determinados valores de energía en el átomo (una energía en cada órbita).



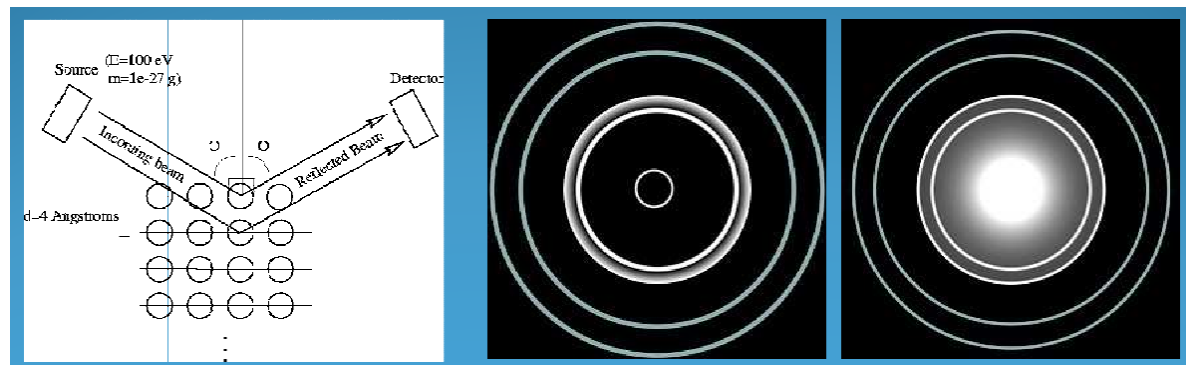
2.2.- DUALIDAD ONDA-CORPÚSCULO EN LA MECÁNICA CUÁNTICA

A la vista de la dualidad onda corpúsculo que presentaba la radiación electromagnética, el francés De Broglie propuso (en 1924) que un corpúsculo de energía E y momento p tiene asociada una onda piloto de parámetros λ y f dadas por:

$$f = \frac{E}{h} \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$

Un electron de 1 eV tendría una longitud de onda $\lambda = h/p = h/(2mE)^{1/2} = 1,22 \cdot 10^{-9}$ m

El experimento de Davisson y Germer (1927) demostró experimentalmente que los electrones presentaban diagramas de interferencia, que son específicos de las ondas. Por tanto, el electron tiene una naturaleza ondulatoria (además de la corpuscular).



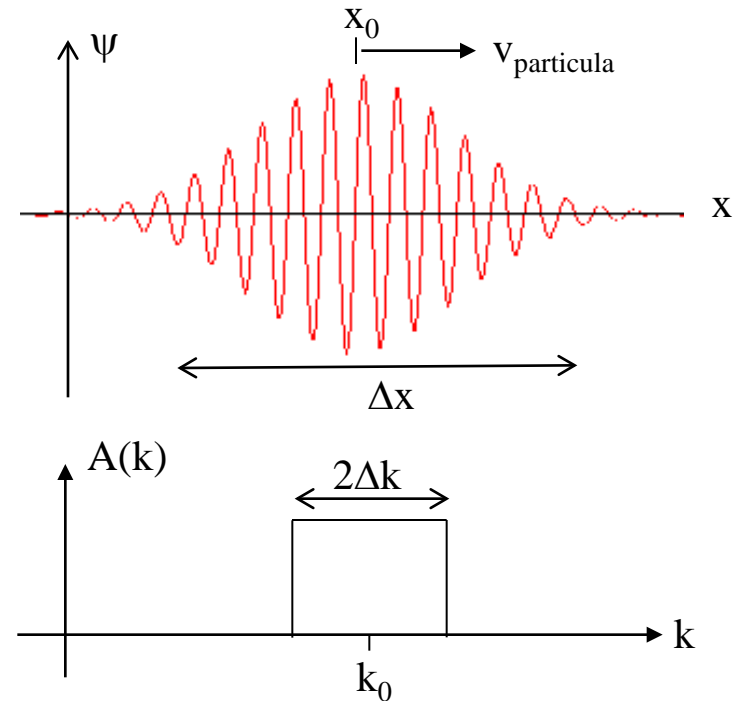
2.3.- EL PAQUETE DE ONDAS

La onda asociada a la partícula puede imaginarse como un paquete de ondas que viaja a la velocidad de la partícula.

Para construir matemáticamente un paquete de ondas:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot e^{j(kx - \omega t)} dk$$

con $A(k)$ como se indica en la figura.



Notar que hay una “indeterminación” en la posición (Δx) y en el momento de la partícula ($\Delta p = \hbar\Delta k$ ($\hbar = h/2\pi$)). Si se desea un menor Δx hay que construir el paquete de ondas con un Δk mayor.

2.4.- EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG

«Es imposible conocer simultáneamente con exactitud la posición y el momento de una partícula. Si la indeterminación en la posición es Δx y la indeterminación en el momento es Δp , resulta $\Delta x \cdot \Delta p \cong \hbar/2$ ».

Al observar una partícula para medir su posición se perturba su momento (hay que colisionarla con un fotón, como mínimo).

El principio de indeterminación implica pasar de una física determinista (la física clásica) a una física probabilística (probabilidad de que la partícula esté en la posición x).

2.5.- LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Una partícula de energía E y momento p está caracterizada por una función de onda $\psi(r,t)$ que es la solución de la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + V(r,t) \cdot \Psi = j\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

siendo $V(r,t)$ la energía potencial de la partícula.

La función de onda $\psi(r,t)$ debe cumplir:

- Condición de normalización: $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot \Psi \cdot dx = 1$
- La función de onda ψ y $d\psi/dx$ deben ser finitas, continuas y univaluadas.

Si la función potencial solamente depende de la posición $V(r,t) \equiv V(r)$ la función de onda $\psi(r,t)$ admite separación de variables: $\Psi(r,t) = \Phi(r) \cdot g(t)$ con $g(t) = \exp[-j(E/\hbar)t]$ y $\Phi(r)$ es la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right] + V(r) \cdot \Phi = E\Phi$$

La función de onda $\Psi(r,t)$ contiene la información de todas las magnitudes de la partícula, como la posición, el momento y la energía.

El valor medio de una magnitud f se obtiene mediante: $\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot f_{op} \cdot \Psi \cdot dx$

Siendo f_{op} el operador asociado a la magnitud f .

Magnitud física	Operador
Posición x	x
Momento p	$(\hbar/j) \cdot d/dx$
Energía E	$-(\hbar^2/2m) \cdot d^2/dx^2$

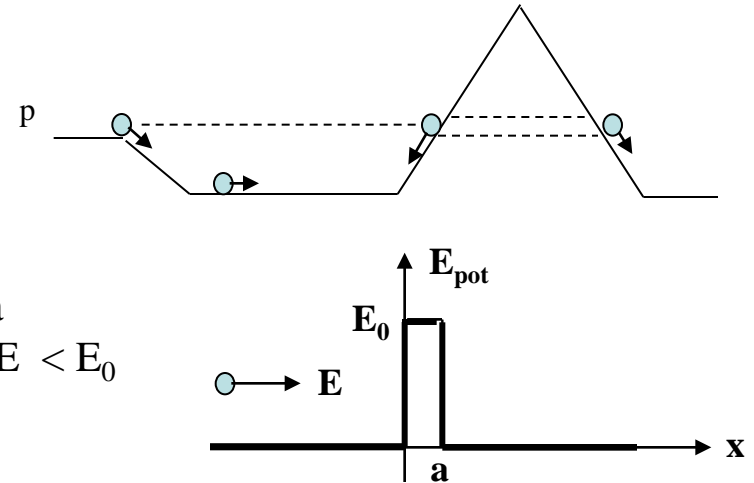
Así, la posición de una partícula en el instante t es: $\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \cdot x \cdot \Psi \cdot dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot \Psi^* \cdot \Psi \cdot dx$

De ahí que $\Psi \cdot \Psi^*$ es la probabilidad de que la partícula esté en x en el instante t , y si solo hay una partícula se deduce la condición de normalización.

2.6.- EL EFECTO TÚNEL

Según la física clásica una partícula p , que está en reposo en la situación inicial (ver figura), nunca podrá superar el pico y alcanzar su derecha. Según la física cuántica hay una cierta probabilidad de que esto ocurra: es como si hiciera un “túnel”.

Consideremos la barrera de energía potencial de la figura inferior, con una partícula con energía cinética E . Como $E < E_0$ la partícula debería estar confinada en $x < 0$.



Resolviendo la ecuación de Schrödinger para $x < 0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial x^2} = E\Phi_1 \Rightarrow \Phi_1 = Ae^{jkx} + Be^{-jkx}; \quad k^2 = 2mE / \hbar^2$$

Análogamente para $0 < x < a$ resulta:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial x^2} + E_0\Phi_2 = E\Phi_2 \Rightarrow \Phi_2 = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}; \quad \alpha^2 = 2m(E_0 - E) / \hbar^2$$

Y para $x > a$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi_3}{\partial x^2} = E\Phi_3 \Rightarrow \Phi_3 = Fe^{jkx} + Ge^{-jkx}; \quad k^2 = 2mE / \hbar^2$$

Interpretación: Como $\Psi(x,t) = \Phi(x) \cdot \exp(-j\omega t)$, $\Phi(x) = \exp(jkx)$ representa una onda plana avanzando hacia las x crecientes, mientras que $\exp(-jkx)$ es una onda que avanza hacia las x decrecientes. En la última solución $G = 0$ ya que no hay ondas reflejadas que viajen hacia las x decrecientes.

Condiciones de contorno de la ecuación de Schrödinger (continuidad de Φ y de $d\Phi/dx$):

$$\Phi_1(0) = \Phi_2(0); \quad \Phi_2(a) = \Phi_3(a); \quad d\Phi_1/dx|_0 = d\Phi_2/dx|_0; \quad d\Phi_2/dx|_a = d\Phi_3/dx|_a$$

Operando se determinan B, C, D y F en función de A.

La probabilidad de transmisión túnel será:

$$T_t = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{(\alpha^2 + k^2)^2}{4\alpha^2 k^2} \text{Sh}^2(\alpha a)} = \frac{1}{1 + \frac{E_0^2}{4E(E_0 - E)} \text{Sh}^2(\sqrt{2m(E_0 - E)a^2 / \hbar^2})}$$

T_t solo toma valores significativos si la barrera es estrecha (a pequeña) y $(E_0 - E)$ es pequeña.

2.7.- EL POZO CUÁNTICO (QUANTUM WELL)

Se denomina pozo de potencial a la estructura de energía potencial de la figura. Para simplificar las matemáticas supondremos un pozo de potencial cuadrado, de altura infinita y de anchura $2a$.

Para $-a < x < a$, $V(x) = 0$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} = E\Phi \Rightarrow \Phi = Ae^{jkx} + Be^{-jkx} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Para $x < -a$ y para $x > a$: $V(x) = \infty$. Por tanto $\Phi(a) = \Phi(-a) = 0$

Condiciones de contorno:

$$\Phi(a) = 0 \Rightarrow A\exp(jka) + B\exp(-jka) = 0 \Rightarrow -B/A = \exp(j2ka)$$

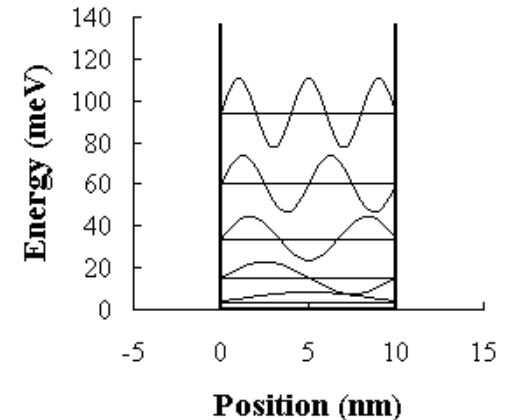
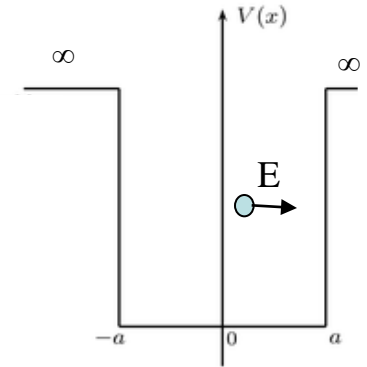
$$\Phi(-a) = 0 \Rightarrow A\exp(-jka) + B\exp(jka) = 0 \Rightarrow -B/A = \exp(-j2ka)$$

$$\text{De ahí: } \exp(j2ka) = \exp(-j2ka) \quad 2ka = n\pi \quad k = n\pi/2a \quad (n \text{ entero})$$

Solo hay solución para los valores de $k = n\pi/2a$ (k cuantificado)

$$\Rightarrow E = \hbar^2 k^2 / 2m = (\pi^2 \hbar^2 / 8ma^2) n^2 \quad (E \text{ cuantificado})$$

El electron en un pozo cuántico tiene la energía cuantificada.



2.8.- MODELO CUÁNTICO DEL ÁTOMO

El núcleo del átomo crea un pozo de potencial $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$. El procedimiento para analizar la energía de los electrones es similar al estudio del pozo de potencial.

La función de onda resulta ser $\Phi = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \phi(\phi)$ siendo r , θ y ϕ las coordenadas esféricas.

$\phi(\phi) = \exp(jm\phi)$ con $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

$\Theta(\theta) =$ polinomio de Legendre Θ_{lm} con $l = |m|, |m|+1, |m|+2, \dots$

$R(r) =$ polinomio de Laguerre $R_{nl}(r)$ con $n = l+1, l+2, l+3, \dots$

Las constantes n , l , m se denominan números cuánticos.

El número cuántico n cuantifica la energía del electron: $E_n = -m_0 Z^2 e^4 / (2\pi\epsilon_0 2\hbar^2 n^2)$

El número cuántico l cuantifica el momento angular: $L = r \wedge mv$; $|L| = \hbar[l(l+1)]^{1/2}$

El número cuántico m cuantifica la inclinación de la órbita $L_z = m\hbar$

Hay un cuarto número cuántico, el spin: m_s , que puede tomar dos valores $1/2$ y $-1/2$.

Estos resultados validan el modelo atómico de Bohr