

Capítulo 6

Aproximación WKB*

Inmediatamente después del nacimiento de la mecánica cuántica, Wentzel, Kramers y Brillouin introdujeron en 1926 uno de los primeros métodos para obtener soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger, cuando el perfil del potencial $V(\mathbf{r})$ es más complicado que los seccionalmente constantes que estudiamos antes. Una cantidad muy importante de los potenciales de interés físico pertenecen a la clase de funciones no solubles. Sólo en casos excepcionales, como el oscilador armónico, el átomo de hidrógeno y los seccionalmente constantes, se puede resolver la ecuación de Schrödinger analíticamente. Por esta razón es importante estudiar un método aproximado como el semiclásico de WKB. En este capítulo presentaremos las ideas básicas de la aproximación WKB y veremos cómo obtener matrices de transferencia en ella. En otro capítulo estudiaremos aspectos básicos de la teoría de perturbaciones que es también muy utilizada en física para obtener resultados aproximados de la ecuación de Schrödinger. Por sencillez, la mayor parte de los resultados estarán dedicados a sistemas unidimensionales.

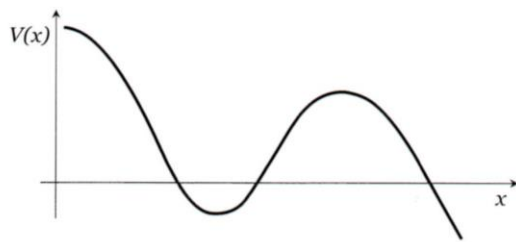


Figura 6.1: Un ejemplo de potencial con perfil arbitrario.

6.1. La aproximación semiclásica de WKB

Este método se basa en observar que, si la solución $\varphi(\mathbf{r})$ de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}), \quad (6.1)$$

se expresa como la exponencial de una acción (recuérdese que la \hbar de Planck tiene unidades de acción)

$$\varphi(\mathbf{r}) = e^{iS(\mathbf{r})/\hbar}, \quad (6.2)$$

la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S + V(\mathbf{r}) = E. \quad (6.3)$$

Esta ecuación es comparable con la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi

$$\frac{(\nabla S_c)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E, \quad (6.4)$$

cuando

$$\hbar|\nabla^2 S| \ll |(\nabla S)^2|. \quad (6.5)$$

Esto significa que, cuando la condición (6.5) se satisface, la acción cuántica S se puede aproximar por la acción clásica S_c . La idea central de la aproximación es obtener soluciones cuánticas como correcciones a las soluciones clásicas, más específicamente, que la acción S pueda desarrollarse como la serie en potencias de \hbar

$$S = S_c + i\hbar S_1 + (i\hbar)^2 S_2 + \dots \quad (6.6)$$

En este caso, S coincidirá con S_c en el límite de $\hbar \rightarrow 0$. Si se usa esta acción S en φ y en la ecuación de Schrödinger, se obtiene (a segundo orden de \hbar) la siguiente ecuación

$$\frac{(\nabla S_c)^2}{2m} + V + i\hbar(\nabla S_c \cdot \nabla S_1 - \frac{1}{2}\nabla^2 S_c) - \hbar^2(2\nabla S_2 \cdot \nabla S_c + (\nabla S_1)^2 - \nabla^2 S_1) = E. \quad (6.7)$$

6.1. La aproximación semiclásica de WKB

Igualando a cero los coeficientes de las diferentes potencias de \hbar tenemos el sistema de ecuaciones

$$\frac{(\nabla S_c)^2}{2m} + V = E, \quad (6.8)$$

$$\nabla S_1 \cdot \nabla S_c - \frac{1}{2} \nabla^2 S_0 = 0, \quad (6.9)$$

$$\nabla S_2 \cdot \nabla S_c - \frac{1}{2} \nabla^2 S_1 + \frac{1}{2} (\nabla S_1)^2 = 0. \quad (6.10)$$

La primera de estas ecuaciones es precisamente la ecuación de Hamilton-Jacobi. Para precisar el alcance de la aproximación WKB, conviene reescribir la condición (6.5) en términos de variables físicas más comunes. En la física clásica, existe una relación muy simple entre la acción y el momento lineal \mathbf{p} de la partícula. Esa relación es

$$\nabla S_c = \mathbf{p} \quad \text{o equivalentemente} \quad S_c = \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}. \quad (6.11)$$

Utilizando estas expresiones, se puede reescribir la condición de validez de la aproximación WKB (6.5) en la forma

$$\hbar |\nabla \cdot \mathbf{p}| \ll p^2. \quad (6.12)$$

El objetivo de la aproximación WKB es obtener las primeras correcciones a la acción clásica. En el caso unidimensional, las primeras dos ecuaciones se resuelven directamente y se obtiene fácilmente la acción clásica y la corrección cuántica de primer orden. Como se indicó en (6.11), la solución clásica es

$$S_c = \pm \int^x p(x) dx, \quad \text{con} \quad p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad (6.13)$$

y la corrección de primer orden se obtiene de la ecuación diferencial

$$p(x) \frac{dS_1}{dx} = \frac{1}{2} \frac{dp(x)}{dx}, \quad (6.14)$$

cuya solución es

$$S_1 = \ln \sqrt{p}. \quad (6.15)$$

Capítulo 6. Aproximación WKB*

En consecuencia, a primer orden en \hbar la acción es

$$S = \pm \int^x p(x) dx + i\hbar \ln \sqrt{p(x)}, \quad (6.16)$$

y la solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional es entonces

$$\varphi(x) = a e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p dx - \ln \sqrt{p}} + b e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p dx - \ln \sqrt{p}}. \quad (6.17)$$

Esta función puede escribirse en la forma

$$\varphi(x) = a \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx} + b \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x) dx}. \quad (6.18)$$

En las secciones que siguen consideraremos este tipo de funciones de onda.³⁵ En regiones en las que $E > V(x)$, escribiremos las funciones en la forma

$$\varphi(x) = a \frac{1}{\sqrt{k}} e^{i \int^x k(x) dx} + b \frac{1}{\sqrt{k}} e^{-i \int^x k(x) dx}, \quad (6.19)$$

cuando $E < V(x)$, el momento $\hbar k(x)$ se sustituye por $i\hbar q(x)$ y las soluciones serán de la forma

$$\varphi(x) = a \frac{1}{\sqrt{q}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^x q dx} + b \frac{1}{\sqrt{q}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x q dx}. \quad (6.20)$$

Aunque hay cierta semejanza con las funciones que teníamos con los potenciales seccionalmente constantes, no debe olvidarse que en estas funciones k y q dependen de la variable x . La dependencia en x está no sólo en la función exponencial sino también en los coeficientes $1/\sqrt{k}$ y $1/\sqrt{q}$. Si el potencial fuera independiente de x , la integral sería simplemente kx , esto es, tendríamos las soluciones de partícula en potencial constante.

6.2. Región de validez de la aproximación WKB

En la motivación de la aproximación WKB se dijo que la ecuación de Schrödinger escrita en términos de la acción S se reduce a la clásica si

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll (\nabla S)^2 \quad \text{o si} \quad \hbar |\nabla \cdot \mathbf{p}| \ll p^2. \quad (6.21)$$

³⁵ Obsérvese que el factor $1/\sqrt{p}$ diverge en los puntos de retorno clásicos. Un análisis más detallado se puede encontrar, por ejemplo, en L. Schiff *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, Nueva York, 1949). Consúltense también Sukhatme U. y Pagnamenta A. *Am. J. Phys.* **59** 944 (1991).

6.2. Región de validez de la aproximación WKB

Veremos ahora qué significación física tiene esta condición en sistemas unidimensionales. Por lo pronto la condición anterior se transforma en

$$\hbar \frac{dp}{dx} \ll p^2(x), \quad (6.22)$$

y puede expresarse de distintas formas, por ejemplo como

$$-\frac{\hbar m}{p(x)} \frac{dV}{dx} \ll p^2(x) \quad \text{y como} \quad \hbar m \frac{F(x)}{p(x)} \ll p^2(x). \quad (6.23)$$

Estas condiciones requieren que el potencial sea una función de variación suave con x . Alternativamente, si aproximamos $V(x)$ al primer orden de su desarrollo

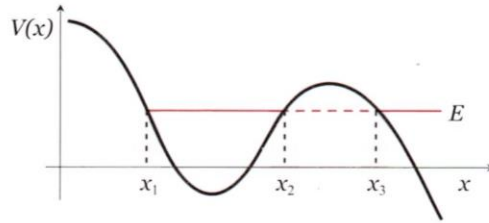


Figura 6.2: Puntos de retorno en un potencial arbitrario.

de Taylor alrededor de un punto de retorno x_i (cualquiera de los puntos x_1 , x_2 o x_3 de la figura 6.2)

$$\begin{aligned} V(x) &= V(x_i) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_i} (x - x_i) \\ &= E - F(x_i)(x - x_i), \end{aligned} \quad (6.24)$$

entonces el momento $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ podrá escribirse como

$$p \simeq \sqrt{2mF(x_i)|x - x_i|}; \quad (6.25)$$

que, al sustituir en (6.22), nos permite escribir la condición en la forma

$$|x - x_i| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{mF(x_i)} \right)^{1/3}, \quad \text{con} \quad x_i = x_1, x_2, \dots \quad (6.26)$$

Estas relaciones y (6.23) definen las condiciones de validez de la aproximación WKB. Mientras (6.23) se refería a la variación suave del potencial, (6.26) establece que el método semiclásico dará una mejor descripción en regiones suficientemente alejadas de los puntos de retorno x_i . Esta condición no impide la búsqueda de continuidad de las soluciones cuando éstas se aproximan a los puntos de retorno. La imposición de condiciones de continuidad nos permitirá, en la sección 6.3, extender el uso del método de la matriz de transferencia también para esta clase de sistemas.

6.2.1. Continuidad y fórmulas de conexión

Un análisis detallado de las condiciones matemáticas relacionadas con la continuidad en los puntos de retorno está más allá del propósito de este libro. Asumiremos como válidas las relaciones de conexión entre las soluciones en puntos de retorno como el a de la figura 6.3 y el b de la figura 6.4. Las fórmulas de conexión que se sugieren para un punto tipo a son

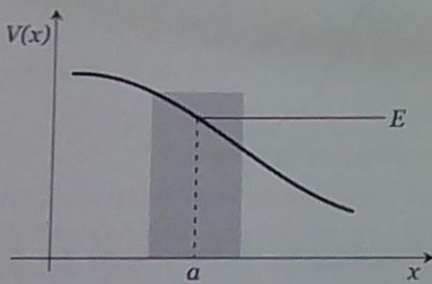


Figura 6.3: Punto de retorno a .

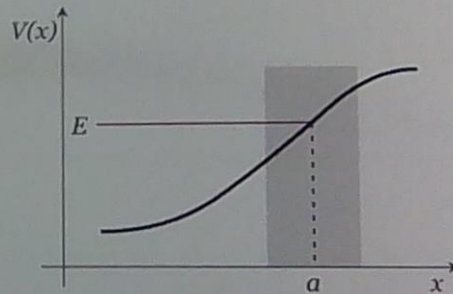


Figura 6.4: Punto de retorno b .

$$\frac{1}{\sqrt{q}} e^{-\int_x^a q dx} \longleftrightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^x k dx - \frac{\pi}{4}\right), \quad (6.27)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{q}} e^{\int_x^a q dx} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^x k dx - \frac{\pi}{4}\right), \quad (6.28)$$

mientras que en puntos del tipo b de la figura 6.4, las fórmulas de conexión entre las soluciones en uno y otro lado del punto son

$$\frac{2}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^b k dx - \frac{\pi}{4}\right) \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{q}} e^{-\int_b^x q dx}, \quad (6.29)$$

$$\frac{2}{\sqrt{k}} \operatorname{sen}\left(\int_x^b k dx - \frac{\pi}{4}\right) \longleftrightarrow -\frac{1}{\sqrt{q}} e^{\int_b^x q dx}, \quad (6.30)$$

Estas relaciones se deben utilizar en el sentido indicado por las dobles flechas.

Nos interesará, en las secciones que siguen, desarrollar el método WKB en el formalismo de la matriz de transferencia. Para esto es conveniente reescribir las funciones trigonométricas en su representación exponencial y las fórmulas de conexión en una representación matricial. En la vecindad de a tenemos

$$\frac{1}{\sqrt{q}} \begin{pmatrix} e^{-\int_x^a q dx} \\ e^{\int_x^a q dx} \end{pmatrix} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{i\int_a^x k dx} \\ e^{-i\int_a^x k dx} \end{pmatrix}, \quad (6.31)$$

mientras que en la vecindad de b tendremos

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{-i\int_x^b k dx} \\ e^{i\int_x^b k dx} \end{pmatrix} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i & \frac{1-i}{2} \\ 1-i & \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{q}} \begin{pmatrix} e^{\int_b^x q dx} \\ e^{-\int_b^x q dx} \end{pmatrix}. \quad (6.32)$$

Las matrices de conexión que aparecen en estas relaciones son el análogo de las matrices de transición. Para facilitar la referencia a estas fórmulas de conexión, definimos las matrices de conexión

$$C_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 1+i \\ 1+i & 1-i \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}, \quad (6.33)$$

y también

$$C_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i & \frac{1-i}{2} \\ 1-i & \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11}^* & c_{21}^* \\ c_{12}^* & c_{22}^* \end{pmatrix} = C_a^\dagger. \quad (6.34)$$

Es una consecuencia de la aproximación WKB que C_b coincida con la adjunta³⁶ de C_a y no como sería deseable, con su inversa.

6.2.2. Cuantización de la energía en un pozo de potencial

Sabemos que si tenemos un pozo de potencial como el de la figura 6.5, la energía debe discretizarse. Veremos ahora cómo obtenemos esas energías en la aproximación semiclásica.

³⁶ La adjunta de una matriz es su traspuesta conjugada, es decir, $C^\dagger = (C^T)^*$.

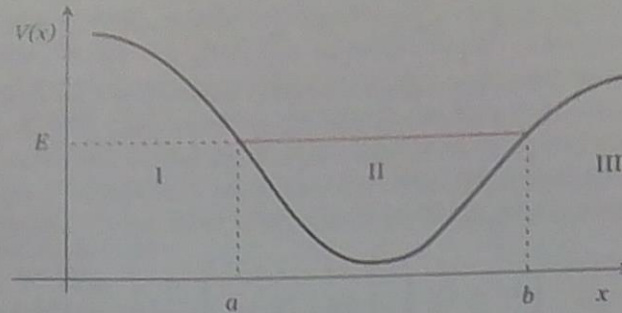


Figura 6.5: Pozo de potencial.

La condición de finitud de las soluciones en las regiones I y III implica que las funciones exponenciales que podrían divergir, para valores grandes (positivos o negativos) de x , deben anularse. Esto significa hacer cero sus correspondientes coeficientes. En consecuencia

$$\varphi_{\text{I}}(x) = A_1 \frac{1}{\sqrt{q(x)}} e^{-\int_x^a q(x) dx}, \quad \text{cuando } x < a, \quad (6.35)$$

y

$$\varphi_{\text{III}}(x) = A_3 \frac{1}{\sqrt{q(x)}} e^{-\int_b^x q(x) dx}, \quad \text{cuando } x > b. \quad (6.36)$$

En este caso las relaciones de conexión aplicables son la (6.27), que define la función a la derecha del punto a , y la (6.29), que define la función a la izquierda del punto b . Esto significa que la solución estacionaria en la región II puede escribirse en la forma

$$\varphi_{\text{II}}(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_a^x k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right), \quad (6.37)$$

o en la forma

$$\tilde{\varphi}_{\text{II}}(x) = \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.38)$$

Ambas soluciones deben ser iguales. Por lo tanto una debe transformarse en la otra. Utilizaremos esta condición para deducir un resultado físico importante.

Veamos: la función coseno que aparece en (6.37) se puede reescribir como aparece en el segundo miembro de la ecuación que sigue

$$\cos\left(\int_a^x k dx - \frac{\pi}{4}\right) = \cos\left(\int_a^b k dx - \int_b^x k dx + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}\right). \quad (6.39)$$

Si definimos la fase

$$\eta = \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2}, \quad (6.40)$$

tenemos

$$\begin{aligned} \cos\left(\int_a^x k dx - \frac{\pi}{4}\right) &= \cos \eta \cos\left(\int_b^x k dx - \frac{\pi}{4}\right) \\ &\quad + \sin \eta \sin\left(\int_b^x k dx - \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (6.41)$$

Es fácil ver que si $\cos \eta = 1$, o equivalentemente si $\sin \eta = 0$, entonces

$$\cos\left(\int_a^x k dx - \frac{\pi}{4}\right) = \cos\left(-\int_b^x k dx + \frac{\pi}{4}\right) = \cos\left(\int_x^b k dx - \frac{\pi}{4}\right), \quad (6.42)$$

que establece la igualdad de las función $\varphi_{II}(x)$ y $\tilde{\varphi}_{II}(x)$ en las ecuaciones (6.37) y (6.38). Esta coincidencia ocurre cuando

$$\eta = \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} = n\pi. \quad (6.43)$$

Si tomamos en cuenta que el momento $p(x)$ cambia de signo cuando se integra de b a a , podemos aceptar la siguiente igualdad

$$\int_a^b k(x) dx = \int_b^a k(x) dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.44)$$

En consecuencia

$$\oint p(x) dx = h\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (6.45)$$

que no es otra cosa que la regla de cuantización de Sommerfeld-Ishiwara-Wilson.

6.3. Matrices de transferencia en la aproximación WKB

Veremos ahora cómo se obtienen las matrices de transferencia para pozos y barreras de formas arbitrarias, que satisfacen las condiciones de validez de la aproximación WKB. Nuestro objetivo es obtener matrices de transferencia compatibles con el método WKB. Las matrices que obtendremos en esta sección pueden utilizarse en aplicaciones concretas. En las secciones que sigue aparecen repetidamente muchas integrales. Para simplificar la notación usaremos algunas definiciones.

6.3.1. Matriz de transferencia de un pozo

En esta parte definiremos las siguientes funciones:

$$\xi_1(x) = \int_{x_1}^x k(x)dx, \quad \xi_2(x) = \int_x^{x_2} k(x)dx, \quad (6.46)$$

$$\zeta_1(x) = \int_x^{x_1} q(x)dx, \quad \zeta_2(x) = \int_{x_2}^x q(x)dx. \quad (6.47)$$

con $k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}/\hbar$ y con $q(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)}/\hbar$. En un pozo de potencial arbitrario como el que se muestra en la figura 6.6, las soluciones WKB en las regiones I, II y III son, respectivamente,

$$\varphi_I(x) = \frac{A_1}{\sqrt{q(x)}} e^{-\zeta_1(x)} + \frac{B_1}{\sqrt{q(x)}} e^{\zeta_1(x)}, \quad \text{para } x < x_1, \quad (6.48)$$

$$\varphi_{II}(x) = \frac{A_2}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_1(x)} + \frac{B_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_1(x)}, \quad \text{para } x_1 < x < x_2,$$

$$\tilde{\varphi}_{II}(x) = \frac{A'_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_2(x)} + \frac{B'_2}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_2(x)}, \quad (6.49)$$

$$\varphi_{III}(x) = \frac{A_3}{\sqrt{q(x)}} e^{\zeta_2(x)} + \frac{B_3}{\sqrt{q(x)}} e^{-\zeta_2(x)}, \quad \text{para } x > x_2. \quad (6.50)$$

Para la región II escribimos las dos representaciones de la función de onda. Como en los problemas de potencial seccionalmente constante, las funciones deberían satisfacer las condiciones de continuidad en x_1 y en x_2 . Pero no podemos evaluarlas en los puntos de retorno porque las funciones $p(x)$ y $q(x)$ se hacen cero y las funciones de onda divergen. Evaluaremos las funciones cerca de x_1 y x_2 y

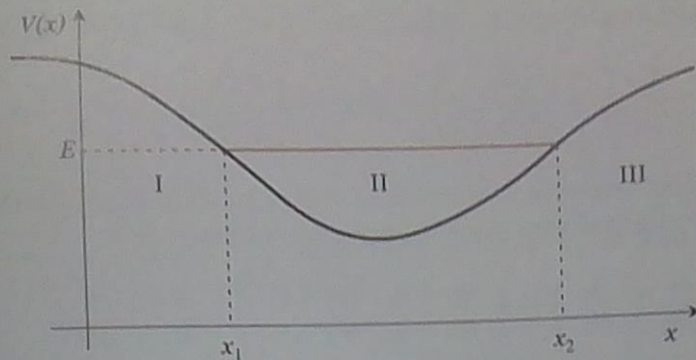


Figura 6.6: Pozo de potencial arbitrario.

haremos que ajusten sus coeficientes como para que la función y su derivada a un lado y otro de los puntos de retorno sean iguales. En x_1 queremos que

$$\varphi_1(x_1 - \epsilon) \simeq \varphi_2(x_1 + \epsilon) \quad \text{y} \quad \varphi_1'(x_1 - \epsilon) = \varphi_2'(x_1 + \epsilon), \quad (6.51)$$

en donde $\epsilon = |x - x_i|_{x \rightarrow x_i}$ de tal forma que la condición (6.26) se satisfaga. La primera condición de continuidad da lugar a la ecuación

$$\frac{A_1}{\sqrt{q(x_1^-)}} + \frac{B_1}{\sqrt{q(x_1^-)}} \simeq \frac{A_2}{\sqrt{k(x_1^+)}} + \frac{B_2}{\sqrt{k(x_1^+)}} \quad (6.52)$$

y la segunda a

$$\frac{A_1}{q^{3/2}} \left(\frac{dq}{dx} + q^2 \right) \Big|_{x=x_1} + \frac{B_1}{q^{3/2}} \left(\frac{dq}{dx} - q^2 \right) \Big|_{x=x_1} \simeq \frac{A_2}{k^{3/2}} \left(\frac{dk}{dx} + ik^2 \right) \Big|_{x=x_1} + \frac{B_2}{k^{3/2}} \left(\frac{dk}{dx} - ik^2 \right) \Big|_{x=x_1}, \quad (6.53)$$

que en la aproximación WBK, válida cuando

$$\hbar \left| \frac{dq}{dx} \right| \ll q^2 \quad \text{y} \quad \hbar \left| \frac{dk}{dx} \right| \ll k^2, \quad (6.54)$$

se reduce a la forma

$$q(x_1^-) \left(\frac{A_1}{\sqrt{q(x_1^-)}} - \frac{B_1}{\sqrt{q(x_1^-)}} \right) \simeq ik(x_1^+) \left(\frac{A_2}{\sqrt{k(x_1^+)}} - \frac{B_2}{\sqrt{k(x_1^+)}} \right). \quad (6.55)$$

Para simplificar usaremos la notación $q_1 = q(x_1^-)$ y $k_1 = k(x_1^+)$. Las ecuaciones (6.52) y (6.55) las podemos expresar en forma compacta así:

$$2i \frac{k_1}{\sqrt{k_1}} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} ik_1 + q_1 & ik_1 - q_1 \\ ik_1 - q_1 & ik_1 + q_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{q_1}}, \quad (6.56)$$

o mejor aún así:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \simeq \frac{1}{2\sqrt{k_1 q_1}} \begin{pmatrix} k_1 - iq_1 & k_1 + iq_1 \\ k_1 + iq_1 & k_1 - iq_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (6.57)$$

Es notable, en esta ecuación, la semejanza de la matriz de transición con la correspondiente para el pozo de potencial rectangular. De igual manera obtenemos la relación

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \simeq \frac{1}{2\sqrt{q_2 k_2}} \begin{pmatrix} q_2 + ik_2 & q_2 - ik_2 \\ q_2 - ik_2 & q_2 + ik_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix}. \quad (6.58)$$

Con las matrices de transición de las relaciones anteriores, tenemos una parte importante de nuestro objetivo. Para completar el cálculo necesitamos aún la relación entre el vector de coeficientes A'_2, B'_2 y el de los coeficientes A_2, B_2 .

Como ya se dijo antes, las funciones $\varphi_{II}(x)$ y $\tilde{\varphi}_{II}(x)$ en (6.49) son iguales; en consecuencia los vectores

$$\phi_2(x) = \begin{pmatrix} e^{i \int_{x_1}^x k(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{x_1}^x k(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (6.59)$$

y

$$\tilde{\phi}_2(x) = \begin{pmatrix} e^{-i \int_{x_2}^x k(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{i \int_{x_2}^x k(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix}, \quad (6.60)$$

también serán iguales. Esto nos permite escribir la relación

$$\begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i \int_{x_1}^{x_2} k dx} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{x_1}^{x_2} k dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (6.61)$$

en la que aparece la matriz de propagación del punto x_1^+ al punto x_2^- del pozo. Por comodidad utilizaremos la notación

$$\xi(x_2, x_1) = \int_{x_1^+}^{x_2^-} k(x) dx. \quad (6.62)$$

Combinando (6.57), (6.58) y (6.61), se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \simeq \frac{1}{4(q_1 k_1 q_2 k_2)^{1/2}} \begin{pmatrix} q_2 + ik_2 & q_2 - ik_2 \\ q_2 - ik_2 & q_2 + ik_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\xi} & 0 \\ 0 & e^{-i\xi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 - iq_1 & k_1 + iq_1 \\ k_1 + iq_1 & k_1 - iq_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (6.63)$$

Si usamos la expresión del potencial definida en (6.24):

$$V(x) = E - F(x_i)(x - x_i), \quad (6.64)$$

con $F(x_1^-) \cong F(x_1^+) = F_1 \geq 0$ y también con $F(x_2^-) \cong F(x_2^+) = F_2 \leq 0$ tenemos³⁷

$$q_1 k_2 \simeq \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{F_1 |F_2| |x_1^\pm - x_1| |x_2^\pm - x_2|} \simeq q_2 k_1, \quad (6.65)$$

$$q_1 q_2 \simeq \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{F_1 |F_2| |x_1^\pm - x_1| |x_2^\mp - x_2|} \simeq k_1 k_2. \quad (6.66)$$

Es fácil verificar que la relación (6.63), después de multiplicar y hacer uso de estas equivalencias, se simplifica enormemente y queda en la forma

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \xi & \text{sen } \xi \\ -\text{sen } \xi & \cos \xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (6.67)$$

³⁷ Hay que tener cuidado con estas igualdades, especialmente cuando a un lado y otro del punto de retorno el potencial cambia abruptamente o cuando la masa efectiva cambia.

con

$$M_p(x_2^+, x_1^-) = \begin{pmatrix} \cos \xi & \operatorname{sen} \xi \\ -\operatorname{sen} \xi & \cos \xi \end{pmatrix}, \quad (6.68)$$

la matriz de transferencia del pozo en la aproximación WKB, para perfil de potencial arbitrario. Esta matriz tiene una representación extraordinariamente compacta. Si se utilizan las fórmulas de conexión, se obtiene una matriz semejante con factores numéricos de 2 y 1/2 en los términos de la diagonal que pueden ser cuestionables (véase el problema ilustrativo 6.4). La matriz de transferencia (6.68) es compatible con la cuantización de Sommerfeld-Ishiwara-Wilson (véase el problema ilustrativo 6.1). No debemos olvidar, sin embargo, que el argumento ξ de las funciones trigonométricas es una integral.

6.3.2. Matriz de transferencia y tunelaje en la barrera

En esta parte usaremos las definiciones

$$\xi_1(x) = \int_x^{x_1} k(x) dx, \quad \xi_2(x) = \int_{x_2}^x k(x) dx, \quad (6.69)$$

$$\zeta_1(x) = \int_{x_1}^x q(x) dx, \quad \zeta_2(x) = \int_x^{x_2} q(x) dx. \quad (6.70)$$

con $k(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}/\hbar$ y con $q(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)}/\hbar$. El cálculo de la matriz de transferencia y los coeficientes de reflexión y transmisión de una barrera de potencial arbitraria, como la que se muestra en la figura 6.7, es un objetivo importante.

Obtendremos estos coeficientes de reflexión y transmisión utilizando el método WKB. En las regiones I, II, y III tenemos las siguientes soluciones

$$\varphi_I(x) = \frac{A_1}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_1(x) + i\pi/4} + \frac{B_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_1(x) - i\pi/4}, \quad (6.71)$$

$$\varphi_{II}(x) = \frac{A'_2}{\sqrt{q(x)}} e^{-\eta_1(x)} + \frac{B'_2}{\sqrt{q(x)}} e^{\eta_1(x)}, \quad (6.72)$$

$$\tilde{\varphi}_{II}(x) = \frac{A'_2}{\sqrt{q(x)}} e^{-\eta_2(x)} + \frac{B'_2}{\sqrt{q(x)}} e^{\eta_2(x)}, \quad (6.73)$$

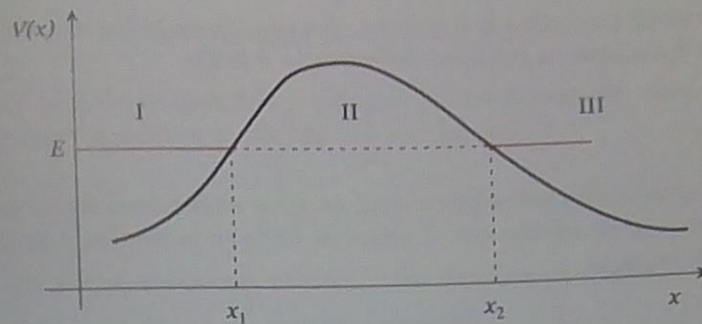


Figura 6.7: Barrera de potencial.

y por último:

$$\varphi_{III}(x) = \frac{A_3}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_2(x) - i\pi/4} + \frac{B_3}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_2(x) + i\pi/4}. \quad (6.74)$$

De las condiciones de continuidad en x_1 y x_2 tenemos, en representación matricial, las relaciones

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{q_1 k_1}} \begin{pmatrix} q_1 + ik_1 & q_1 - ik_1 \\ q_1 - ik_1 & q_1 + ik_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 e^{i\pi/4} \\ B_1 e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}, \quad (6.75)$$

$$\begin{pmatrix} A_3 e^{-i\pi/4} \\ B_3 e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{q_2 k_2}} \begin{pmatrix} k_2 - iq_2 & k_2 + iq_2 \\ k_2 + iq_2 & k_2 - iq_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ b'_2 \end{pmatrix}. \quad (6.76)$$

La igualdad de las soluciones $\varphi_{II}(x)$ y $\tilde{\varphi}_{II}(x)$ significa que

$$\begin{pmatrix} e^{-\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{-\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (6.77)$$

de donde resulta la relación

$$\begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{-\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (6.78)$$

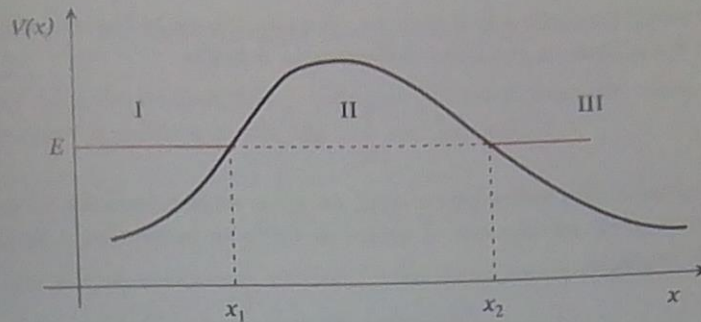


Figura 6.7: Barrera de potencial.

y por último:

$$\varphi_{\text{III}}(x) = \frac{A_3}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_2(x) - i\pi/4} + \frac{B_3}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_2(x) + i\pi/4}. \quad (6.74)$$

De las condiciones de continuidad en x_1 y x_2 tenemos, en representación matricial, las relaciones

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{q_1 k_1}} \begin{pmatrix} q_1 + ik_1 & q_1 - ik_1 \\ q_1 - ik_1 & q_1 + ik_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 e^{i\pi/4} \\ B_1 e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}, \quad (6.75)$$

$$\begin{pmatrix} A_3 e^{-i\pi/4} \\ B_3 e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{q_2 k_2}} \begin{pmatrix} k_2 - iq_2 & k_2 + iq_2 \\ k_2 + iq_2 & k_2 - iq_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ b'_2 \end{pmatrix}. \quad (6.76)$$

La igualdad de las soluciones $\varphi_{\text{II}}(x)$ y $\tilde{\varphi}_{\text{II}}(x)$ significa que

$$\begin{pmatrix} e^{-\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{-\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (6.77)$$

de donde resulta la relación

$$\begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} & 0 \\ 0 & e^{-\int_{x_1}^{x_2} q(x) dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (6.78)$$

En esta ecuación tenemos a la matriz de propagación en la barrera, del punto x_1 al x_2 . Para simplificar la notación definimos la función

$$\zeta(x_1^-, x_2^+) = \int_{x_1^-}^{x_2^+} q(x) dx. \quad (6.79)$$

Con los resultados obtenidos hasta aquí, estamos en condiciones de conectar el vector de onda en la derecha con el vector de onda en la izquierda de la barrera. Sustituyendo se tiene

$$\begin{pmatrix} A_3 e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ B_3 e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} = \frac{1}{4\sqrt{q_1 k_1 q_2 k_2}} \begin{pmatrix} k_2 - iq_2 & k_2 + iq_2 \\ k_2 + iq_2 & k_2 - iq_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^\zeta & 0 \\ 0 & e^{-\zeta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 + ik_1 & q_1 - ik_1 \\ q_1 - ik_1 & q_1 + ik_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 e^{i\frac{\pi}{4}} \\ B_1 e^{-i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix}. \quad (6.80)$$

Después de multiplicar y hacer uso de las igualdades en (6.65), tenemos:

$$\begin{pmatrix} A_3 e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ B_3 e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \zeta & -i \sinh \zeta \\ i \sinh \zeta & \cosh \zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 e^{i\frac{\pi}{4}} \\ B_1 e^{-i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix}. \quad (6.81)$$

También en este caso la matriz de transferencia tiene una forma simple y compacta. La matriz de transferencia de una barrera arbitraria en la aproximación WKB es

$$M_b(x_2^+, x_1^-) = \begin{pmatrix} \cosh \zeta & -i \sinh \zeta \\ i \sinh \zeta & \cosh \zeta \end{pmatrix}. \quad (6.82)$$

Esta matriz difiere también por factores numéricos de la matriz que se obtiene usando las fórmulas de conexión (véase el problema ilustrativo 6.4). La matriz de transferencia en (6.82) tiene la forma

$$M_b = \begin{pmatrix} \alpha_b & \beta_b \\ \beta_b^* & \alpha_b^* \end{pmatrix}, \quad (6.83)$$

característica de interacciones que satisfacen reversibilidad temporal. Entre las aplicaciones importantes de este resultado está el cálculo de los coeficientes de transmisión por la barrera. Para calcular estos coeficientes utilizamos nuevamente las relaciones que existen entre los elementos de matriz

$$\alpha_b = \cosh \zeta = \frac{1}{2}(e^\zeta + e^{-\zeta}), \quad (6.84)$$

6.3. Matrices de transferencia en la aproximación WKB

$$\beta_b = -i \operatorname{senh} \zeta = -\frac{i}{2}(e^\zeta - e^{-\zeta}), \quad (6.85)$$

y las amplitudes de transmisión y reflexión. El coeficiente de transmisión que obtenemos para la barrera es

$$T_b = \frac{1}{|\alpha_b|^2} = \frac{4}{(e^\zeta + e^{-\zeta})^2}, \quad (6.86)$$

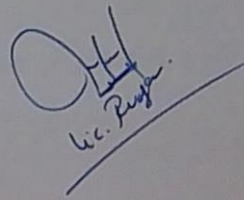
mientras que el que se obtiene, utilizando las fórmulas de conexión, es³⁸

$$T_b = \frac{4}{(2e^\zeta + \frac{1}{2}e^{-\zeta})^2}. \quad (6.87)$$

Aunque estas expresiones coinciden en el límite ζ grande, tienen diferencias importantes para ζ pequeña. En efecto, el coeficiente de transmisión que se obtiene aquí puede tomar valores en el intervalo $[0, 1]$ mientras que los obtenidos con las fórmulas de conexión toman valores en el intervalo $[0, 0.64]$. Si $\zeta \gg 1$, se tiene en ambos casos

$$T_b \simeq \frac{1}{e^{2\zeta}} \propto e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} q(x) dx}. \quad (6.88)$$

Éste es un resultado muy conocido y utilizado, por ejemplo, en la explicación del decaimiento α . Las matrices de transferencia que se obtuvieron en esta sección y en la anterior son fundamentales en la solución de diversos problemas. La aproximación WKB es, en la mayor parte de los casos, una excelente aproximación.


L. P. P.

³⁸ Véase por ejemplo E. Merzbacher *Quantum Mechanics* (John Wiley & sons, Nueva York, 1961).

6.4. Problemas ilustrativos

Problema 6.1

Utilizando la relación (6.67) entre los coeficientes de $\phi_{III}(x_2^+)$ y $\phi_I(x_1^-)$ para el pozo en la aproximación WKB, obtenga la regla de cuantización que se encontró en la sección 6.2.2.

Solución. La relación que se obtuvo en la sección 6.3.1 entre los coeficientes de los vectores de onda $\phi_{III}(x_2^+)$ y $\phi_I(x_1^-)$ en un pozo con perfil arbitrario, en el que $V(x_1^-) = V(x_1^+) = V_1$ y $V(x_2^-) = V(x_2^+) = V_2$, es

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \xi & \text{sen } \xi \\ -\text{sen } \xi & \cos \xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (6.89)$$

La condición de finitud de las funciones en las regiones I y III exige que los coeficientes B_1 y A_3 se anulen. La ecuación anterior se escribe entonces en la forma

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \xi & \text{sen } \xi \\ -\text{sen } \xi & \cos \xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \cos \xi \\ -A_1 \text{sen } \xi \end{pmatrix}, \quad (6.90)$$

que se cumple cuando

$$\cos \xi = 0 \quad \text{y} \quad B_3 = -A_1 \text{sen } \xi. \quad (6.91)$$

La primera de estas ecuaciones se satisface si $\xi = (n + \frac{1}{2})\pi$, es decir, si

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad (6.92)$$

que es compatible con (6.45) y la regla de cuantización de Sommerfel-Ishiwara-Wilson.

Problema 6.2

Utilizando la regla de cuantización del problema anterior, muestre que los niveles de energía del oscilador armónico, cuyo potencial es $V(x) = kx^2/2$, son

$$E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}). \quad (6.93)$$

Aquí $\omega = \sqrt{k/m}$ es la frecuencia clásica de la partícula.

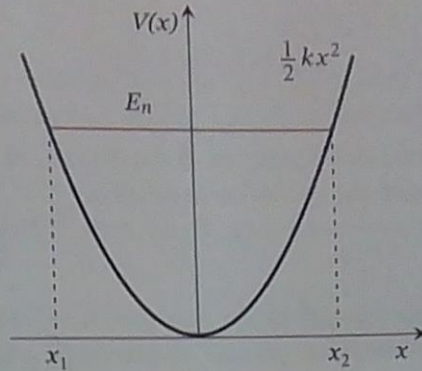


Figura 6.8: Potencial armónico. En los puntos de retorno $E_n = kx_i^2/2$.

Solución. La regla de cuantización (6.92) aplicada al oscilador armónico es

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m \left(E_n - \frac{1}{2} kx^2 \right)} dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (6.94)$$

Conviene sacar de la raíz el factor \sqrt{mk} ; tenemos entonces:

$$\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2E_n}{k} - x^2} dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (6.95)$$

Recordemos que en los puntos de retorno $2E_n/k = x_1^2 = x_2^2$. Es fácil ver que la integral de esta ecuación es del tipo $\int_{-a}^a \sqrt{a^2 - x^2} dx$. Esta integral se conoce y tiene el siguiente resultado

$$\int_{-a}^a \sqrt{a^2 - x^2} dx = \left[\frac{x\sqrt{a^2 - x^2}}{2} + \frac{a^2}{2} \sin^{-1} \frac{x}{a} \right]_{-a}^a = 2 \frac{a^2}{2} \frac{\pi}{2}. \quad (6.96)$$

Si sustituimos a^2 por $2E_n/k$ y $\sqrt{k/m}$ por ω , queda

$$\frac{\pi E_n}{\hbar \omega} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (6.97)$$

que evidentemente puede reescribirse en la muy conocida fórmula para los eigenvalores del oscilador armónico

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.98)$$

Esta fórmula la obtendremos después, en el capítulo 8, al resolver rigurosamente la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico.

Problema 6.3

Considere el pozo de potencial de la figura 6.6. Utilizando las fórmulas de conexión 6.31 y 6.32, demuestre que las matrices de transición, definidas por las relaciones

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_{t1} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_{t2} \begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix}, \quad (6.99)$$

son $M_{t1} = C_1^T$ y $M_{t2} = C_2^T$, con $C_1 = C_a$ y $C_2 = C_b$, definidas en la subsección 6.2.1.

Solución. Supondremos que las soluciones WKB en las regiones I, II y III son como las que escribimos en (6.48), (6.49) y (6.50), es decir:

$$\varphi_I(x) = \frac{A_1}{\sqrt{q(x)}} e^{-\zeta_1(x)} + \frac{B_1}{\sqrt{q(x)}} e^{\zeta_1(x)}, \quad \text{para } x < x_1, \quad (6.100)$$

$$\varphi_{II}(x) = \frac{A_2}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_1(x)} + \frac{B_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_1(x)}, \quad (6.101)$$

para $x_1 < x < x_2$,

$$\bar{\varphi}_{II}(x) = \frac{A_2'}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\xi_2(x)} + \frac{B_2'}{\sqrt{k(x)}} e^{i\xi_2(x)}, \quad (6.102)$$

$$\varphi_{III}(x) = \frac{A_3}{\sqrt{q(x)}} e^{\zeta_2(x)} + \frac{B_3}{\sqrt{q(x)}} e^{-\zeta_2(x)}, \quad \text{para } x > x_2. \quad (6.103)$$

Y las fórmulas de conexión, en los puntos x_1 y x_2 , son respectivamente:

$$\frac{1}{\sqrt{q}} \begin{pmatrix} e^{-\zeta_1(x)} \\ e^{\zeta_1(x)} \end{pmatrix} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{i\xi_1(x)} \\ e^{-i\xi_1(x)} \end{pmatrix}, \quad (6.104)$$

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi_2(x)} \\ e^{i\xi_2(x)} \end{pmatrix} \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_{11}^* & c_{21}^* \\ c_{12}^* & c_{22}^* \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{q}} \begin{pmatrix} e^{\zeta_2(x)} \\ e^{-\zeta_2(x)} \end{pmatrix}. \quad (6.105)$$

Con los elementos c_{ij} definidos en (6.33). En (6.104) tenemos dos ecuaciones escalares. Si multiplicamos la primera por A_1 , la segunda por B_1 y las sumamos tenemos

$$\frac{A_1}{\sqrt{q(x)}} e^{-\zeta_1(x)} + \frac{B_1}{\sqrt{q(x)}} e^{\zeta_1(x)} \longleftrightarrow (c_{11}A_1 + c_{21}B_1) \frac{e^{i\xi_1(x)}}{\sqrt{k(x)}} + (c_{12}A_1 + c_{22}B_1) \frac{e^{-i\xi_1(x)}}{\sqrt{k(x)}}; \quad (6.106)$$

el primer miembro de esta relación es $\varphi_{I}(x)$ y el segundo miembro de esta ecuación es la función $\varphi_{II}(x)$ con la que se conecta en x_1 . Esto implica las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} A_2 &= c_{11}A_1 + c_{21}B_1; \\ B_2 &= c_{12}A_1 + c_{22}B_1; \end{aligned} \quad (6.107)$$

que se pueden escribir en la forma

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} \\ c_{12} & c_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M_{t1} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (6.108)$$

Comparando la matriz de transición M_{t1} , definida en esta ecuación, con la matriz C_1 de la ecuación (6.33), resulta que

$$M_{t1} = C_1^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & \frac{1+i}{2} \\ 1+i & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix}. \quad (6.109)$$

Procediendo de igual manera con la fórmula de conexión en el punto x_2 se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix} = M_{t2} \begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix}. \quad (6.110)$$

Por lo tanto

$$M_{t2} = C_2^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} & 1-i \\ \frac{1-i}{2} & 1+i \end{pmatrix}. \quad (6.111)$$

Hay que notar que M_{t2} no es la inversa de M_{t1} , sino su adjunta. Ésta es posiblemente una de las razones por las que la expresión que se obtiene para las matrices de transferencia, utilizando las fórmulas de conexión WKB, tiene una estructura que no es completamente satisfactoria.

Problema 6.4

Obtenga las matrices de transferencia $M_b(x_2^+, x_1^-)$ y $M_p(x_2^+, x_1^-)$, del pozo y de la barrera, en la aproximación WKB utilizando las fórmulas de conexión en los puntos x_1 y x_2 .

Solución. Para obtener la matriz de transferencia que se pide aquí, tenemos prácticamente todos los ingredientes. En el problema anterior obtuvimos las matrices M_{t1} y M_{t2} que relacionan los coeficientes a un lado y otro de los puntos de retorno. En la subsección 6.3.1 obtuvimos

$$\begin{pmatrix} A_2' \\ B_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i \int_{x_1}^{x_2} k dx} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{x_1}^{x_2} k dx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (6.112)$$

Es evidente entonces la relación

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_{t2} \begin{pmatrix} e^{i\xi} & 0 \\ 0 & e^{-i\xi} \end{pmatrix} M_{t1} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (6.113)$$

en donde se utilizó la notación $\xi = \int_{x_1}^{x_2} k dx$. Para la matriz de transferencia del pozo resulta

$$\begin{aligned} M_p &= M_{t2} \begin{pmatrix} e^{i\xi} & 0 \\ 0 & e^{-i\xi} \end{pmatrix} M_{t1} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & \frac{1+i}{2} \\ 1+i & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\xi} & 0 \\ 0 & e^{-i\xi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i & \frac{1+i}{2} \\ 1+i & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix}, \\ M_p &= \begin{pmatrix} 2 \cos \xi & -\operatorname{sen} \xi \\ \operatorname{sen} \xi & \frac{1}{2} \cos \xi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.114)$$

Similarmente, para la matriz de transferencia de la barrera se obtiene

$$\begin{aligned}
 M_b &= M_{t1} \begin{pmatrix} e^\zeta & 0 \\ 0 & e^{-\zeta} \end{pmatrix} M_{t2} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i & \frac{1+i}{2} \\ 1+i & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^\zeta & 0 \\ 0 & e^{-\zeta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-i & \frac{1+i}{2} \\ 1+i & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix}; \\
 M_b &= \begin{pmatrix} e^\zeta + \frac{1}{4}e^{-\zeta} & -i \left(e^\zeta - \frac{1}{4}e^{-\zeta} \right) \\ i \left(e^\zeta - \frac{1}{4}e^{-\zeta} \right) & e^\zeta + \frac{1}{4}e^{-\zeta} \end{pmatrix}. \tag{6.115}
 \end{aligned}$$

6.5. Problemas

1. Demuestre que la matriz de transición en x_2 es evidentemente la ecuación (6.63) y se reduce a la forma (6.67).
2. Demuestre que si la matriz de conexión en un punto como el b de la figura 6.4 es $C_b = (C_a)^{-1}$, entonces la relación entre las matrices de transición será $M_{tb} = (M_{ta})^{-1}$.
3. Obtenga la matriz de transferencia de la barrera en la figura 6.7, en el supuesto de que la matriz de transición M_{t2} en el punto x_2 es el inverso de M_{t1} en el punto x_1 .
4. Demuestre que la ecuación de eigenvalores de un doble pozo simétrico, como el que se muestra en la figura 6.9 es

$$\tan \xi = \pm e^{\zeta}. \quad (6.116)$$

5. Obtenga analíticamente los primeros eigenvalores del doble pozo si, para energías suficientemente bajas, el potencial se puede aproximar por una función parabólica, como se ve en la figura 6.9.
6. Muestre que en la solución gráfica de la ecuación de eigenvalores del problema 4:
 - a) las energías se desdoblan;
 - b) las energías más bajas coinciden con las que se obtienen analíticamente en la aproximación $V(x) \simeq kx^2/2$.

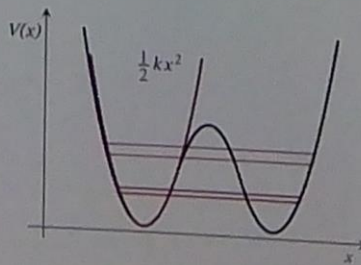


Figura 6.9: Doble pozo simétrico y la aproximación parabólica en los pozos. Los niveles de energía se desdoblan.

