

2 Aproximación semiclásica

Estudiaremos en este capítulo el límite clásico de la mecánica cuántica y lo aplicaremos en la llamada aproximación WKB (por Wentzel, Kramers y Brillouin), también conocido como aproximación semiclásica.

2.1 Trigesimo cuarta Lección

Estudiaremos en esta lección el límite clásico de la mecánica cuántica y justificaremos la forma matemática de la función de onda en dicho límite. El formalismo que presentaremos en esta lección constituye la base de la llamada formulación de onda piloto de la mecánica cuántica, desarrollada por Louis de Broglie y David Bohm.

2.1.1 El límite clásico

El modelo matemático de la mecánica cuántica contiene al de la mecánica clásica en un determinado límite (más no viceversa). La pregunta es: en que momento, o bajo que circunstancias se dá este límite?

En mecánica cuántica se describe un electrón (un sistema físico en general) por una función de onda o un vector de estado, el cual es función de las variables del espacio de configuración y del tiempo. Dicha función es solución a la ecuación de Schödinger, una ecuación diferencial lineal en derivadas parciales y tanto la función, como sus primeras derivadas espaciales, deben satisfacer determinadas condiciones de frontera. En mecánica clásica un electrón, el cual se identifica con una

partícula puntual, se mueve en una trayectoria clásica (órbita), la cual está completamente determinada por la solución de las ecuaciones de movimiento (leyes de Newton) una vez conocidas las condiciones de frontera del problema.

Una correlación en cierto sentido similar a la existente entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica existe en la electrodinámica, entre la óptica ondulatoria y la óptica geométrica. En la óptica ondulatoria, las ondas electromagnéticas se describen por los vectores de campo eléctricos y magnéticos los cuales satisfacen un sistema determinado de ecuaciones diferenciales lineales (las ecuaciones de Maxwell). En la óptica geométrica, la propagación de la luz se describe por trayectorias determinadas llamadas rayos. Esta analogía nos permite concluir que el paso límite de la mecánica cuántica a la mecánica clásica se da de manera similar al paso límite que hay entre la óptica ondulatoria y la óptica geométrica.

Veamos de que manera ocurre el límite en óptica. Sea U una componente cualquiera de un campo en una onda electromagnética, la cual podemos escribir de la forma $U = U_0 e^{i\phi}$ con la amplitud U_0 y la fase $\phi = (\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t)$ cantidades reales. El caso límite de la óptica geométrica corresponde a longitudes de onda $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$ muy pequeñas tales que la fase ϕ (llamada en óptica geométrica el “eikonal”) varíe muy poco sobre distancias pequeñas, lo cual significa que uno puede suponer un valor muy grande en valor absoluto, para la fase ϕ .

De manera similar en el caso cuántico podemos partir de la hipótesis que nuestra función de onda ψ la podemos escribir como $\psi = A_0 e^{i\phi}$, con la amplitud A_0 una función real de las coordenadas del espacio de configuración y el tiempo la cual varía muy suavemente y la fase real ϕ tomando valores muy grandes. Sabemos igualmente que en mecánica clásica la trayectoria de una partícula se puede determinar de un principio variacional que estipula que la acción S de un sistema mecánico debe ser mínima (principio de mínima acción o de Hamilton). En la óptica geométrica la trayectoria de los rayos está determinada igualmente por un principio de mínima acción llamado el principio de Fermat, el cual establece que el camino óptico de un rayo de luz debe ser tal que su diferencia de fase del principio de su trayectoria al final de la misma,

debe ser mínima.

Partiendo de esta analogía podemos suponer que la fase ϕ de la función de onda en el límite clásico debe ser proporcional a la acción mecánica S del sistema físico, es decir $\phi \sim S$, con la igualdad obtenida mediante el uso de un coeficiente de proporcionalidad el cual debe tener unidades de acción (Joules por segundo). La constante fundamental que tenemos a mano con estas características es

$$\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ Jouls.Seg,}$$

la constante de Planck h dividida por 2π .

De esta forma, la función de onda de un sistema físico cuasi clásico la podemos escribir de la forma:

$$\psi = A_0 e^{iS/\hbar}, \quad (2.1)$$

con $|\psi|^2 = A_0^2$ una probabilidad. Que S en (2.1) es la acción clásica lo podemos ver a través del siguiente desarrollo.

2.1.2 Ecuación de Bohm-de Broglie

Veámos la forma que adquiere la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}, t) \psi, \quad (2.2)$$

cuando la función de onda es de la forma $\psi = A_0 e^{iS/\hbar}$ con A_0 y S funciones reales. Utilizando

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= e^{iS/\hbar} \left(\frac{\partial A_0}{\partial t} + \frac{iA_0}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \right) \\ \vec{\nabla} \psi &= e^{iS/\hbar} \left(\vec{\nabla} A_0 + \frac{iA_0}{\hbar} \vec{\nabla} S \right) \\ \nabla^2 \psi = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \psi &= e^{iS/\hbar} \left[\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S \cdot \left(\vec{\nabla} A_0 + \frac{iA_0}{\hbar} \vec{\nabla} S \right) + \nabla^2 A_0 \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} A_0 \cdot \vec{\nabla} S + \frac{iA_0}{\hbar} \nabla^2 S \right], \end{aligned}$$

lo cual reemplazado en la ecuación (2.2) y suprimiendo el factor común $e^{iS/\hbar}$ nos da la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial A_0}{\partial t} - A_0 \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{2i}{\hbar} \vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} A_0 - \frac{A_0}{\hbar^2} \vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} S + \nabla^2 A_0 + \frac{iA_0}{\hbar} \nabla^2 S \right] + V A_0, \quad (2.3)$$

ecuación que contiene una parte real y una imaginaria. Tomando primero su parte real tenemos

$$-A_0 \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{A_0}{2m} (\vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} S) + V A_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 A_0, \quad (2.4)$$

de la cual podemos despreciar el término proporcional a \hbar^2 el cual es muy pequeño comparado con los demás términos; luego de eliminar el factor común A_0 obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = 0, \quad (2.5)$$

ecuación conocida en la mecánica clásica como la ecuación de Hamilton-Jacobi para la acción clásica S . De esta manera justificamos la presencia de la acción clásica en la función de onda $\psi = A_0 e^{iS/\hbar}$.

La parte imaginaria de la ecuación (2.3) la podemos escribir como

$$i\hbar \frac{\partial A_0}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} A_0 - \frac{i\hbar}{2m} A_0 \nabla^2 S,$$

la cual, luego de cancelar el factor común $i\hbar$ y multiplicar por $2A_0$ podemos escribirla de la forma

$$\frac{\partial A_0^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(A_0^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0, \quad (2.6)$$

ecuación que podemos interpretar físicamente como la ecuación clásica de la continuidad de la densidad de probabilidad $|\psi|^2 = A_0^2$ ya que $\vec{\nabla} S/m = \vec{p}/m = \vec{v}$ es la velocidad clásica con que se mueve el sistema físico.

En el formalismo de Bohm-de Broglie de la mecánica cuántica se incluye el término $-\hbar^2 \nabla^2 A_0 / (2m)$ que hemos despreciado. La nueva

hipótesis es que la ecuación fundamental de la teoría es la generalización cuántica de la ecuación de Hamilton-Jacobi, la cual toma la forma

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 + V_T = 0, \quad (2.7)$$

con $V_T = V(\vec{r}, t) + V_{qm}$, donde V_{qm} es un potencial cuántico que corrige el potencial clásico $V(\vec{r}, t)$, el cual es de la forma

$$V_{qm} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A_0}{A_0}, \quad (2.8)$$

potencial que entra a jugar un papel relevante en la teoría, cuando el espacio de fase del sistema físico unidimensional es del orden de \hbar (recuerde que el espacio de fase es un retículo en un espacio cartesiano de las coordenadas y los momentums lineales).

La dualidad onda partícula en esta formulación de la mecánica cuántica aparece de manera simple, cuando se le asocia al electrón un caracter ondulatorio a través de la ecuación de Schrödinger (2.2) y simultáneamente se le asocia a la partícula masiva la ecuación de movimiento (2.7) que llamaremos ecuación de Bohm-de Broglie, la cual tiene por solución

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}, t) - \vec{\nabla}V_{qm}, \quad (2.9)$$

la cual nos permite mirar el electrón como una partícula de momentum $\vec{p} = \vec{\nabla}S$ sometido no solo al potencial clásico $V(\vec{r})$ si no también al potencial cuántico V_{qm} el cual es el dominante cuando el espacio de fase del sistema físico es del orden de \hbar . La conexión entre la acción clásica $S = \int L(q, \dot{q}; dt)dt$ y la función de onda ψ está dada por (2.1).

2.2 Trigesimo quinta Lección

Abordaremos en esta lección el estudio de la aproximación WKB (por Wentzel, Kramers y Brillouin), también conocida como la aproximación semiclásica.

2.2.1 La función de onda semiclásica

Si la longitud de onda de de Broglie para las partículas del sistema físico son pequeñas, comparadas con las dimensiones del sistema bajo consideración, entonces decimos que las propiedades del sistema son semiclásicas.

Haremos a continuación un estudio más detallado de las propiedades de los sistemas semiclásicos. Para este efecto, hagamos en la ecuación de autovalores de la energía o ecuación de Schrödinger para n partículas

$$\sum_{j=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 \psi + (E - V)\psi = 0 \quad (2.10)$$

el reemplazo

$$\psi = C e^{i\sigma/\hbar}, \quad (2.11)$$

con C una constante de normalización y σ una expresión compleja. Reemplazando (2.11) en (2.10) obtenemos para la función σ la ecuación (luego de eliminar el exponencial común)

$$\sum_j \frac{1}{2m_j} (\vec{\nabla}_j \sigma)^2 - \sum_j \frac{i\hbar}{2m_j} \nabla_j^2 \sigma = E - V. \quad (2.12)$$

Hagamos ahora una expansión de σ en potencia de \hbar . Tenemos

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots,$$

donde σ_j , $j = 0, 1, 2, \dots$ son elementos reales. Empecemos por analizar el caso más simple, es decir, el de una partícula puntual de masa m moviéndose en una sola dimensión x . Para este sistema la ecuación (2.12) toma la forma

$$\frac{1}{2m} \sigma'^2 - \frac{i\hbar}{2m} \sigma'' = E - V(x), \quad (2.13)$$

donde la prima significa derivada con respecto a la variable x . Empecemos por tomar la aproximación de orden cero, es decir, hagamos en

la ecuación (2.13) la aproximación $\sigma \approx \sigma_0$ y despreciemos términos del orden de \hbar , tenemos

$$\frac{1}{2m}\sigma_0'^2 = E - V(x), \quad (2.14)$$

la cual tiene por solución

$$\sigma_0 = \pm \int dx \sqrt{2m[E - V(x)]} = \pm \int dx p(x), \quad (2.15)$$

donde $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ es conocido como el momentum clásico.

El análisis anterior tiene sentido físico siempre y cuando el término que despreciamos en la ecuación (2.13) sea pequeño comparado con los demás términos; es decir, se tenga que

$$\hbar \left| \frac{\sigma''}{\sigma'^2} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{\sigma'} \right) \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (2.16)$$

donde de conformidad con la ecuación (2.14) hemos usado en primera aproximación $p = \sigma'$. Lo anterior establece la condición de semiclasismo la cual consiste en tener la partícula una longitud de onda (de de Broglie) que varíe muy poco en el espacio. Las fórmulas aquí derivadas tienen validez siempre y cuando se satisfaga esta condición.

Clásicamente podemos escribir la condición (2.16) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right| &= \hbar \left| \frac{dp^{-1}}{dx} \right| = \hbar p^{-2} \frac{dp}{dx} = \frac{\hbar}{p^2} \frac{d}{dx} \sqrt{2m[E - V(x)]} = \frac{m\hbar}{p^3} \left| -\frac{dV}{dx} \right| \\ &= \frac{m\hbar}{p^3} |F| \ll 1, \end{aligned}$$

donde $F = -dV/dx$ es la fuerza clásica que siente la partícula en el campo exterior $V(x)$. De esta última relación podemos ver que la aproximación semiclásica no se puede aplicar cuando el momentum de la partícula p es muy pequeño, lo cual ocurre sin lugar a dudas en aquellos puntos en los que $E = V(x)$, llamados puntos de rebote clásicos. En estos puntos la longitud de onda de de Broglie tiende a ser infinita y no podría considerarse de ninguna manera como pequeña.

Calculemos ahora la aproximación σ_1 en la expansión de σ :

$$\frac{1}{2m}(\sigma'_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma'_1)^2 - \frac{i\hbar}{2m}(\sigma''_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma''_1) = E - V(x), \quad (2.17)$$

la cual, despreciando términos de orden \hbar^2 implica

$$\sigma_0'^2 + \frac{2\hbar}{i}\sigma_0'\sigma_1' - i\hbar\sigma_0'' = 2m(E - V); \quad (2.18)$$

es decir

$$\sigma_0'\sigma_1' + \frac{\sigma_0''}{2} = 0, \quad (2.19)$$

de la cual obtenemos

$$\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = -\frac{1}{2}\frac{p'}{p} = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}(\ln p) = -\frac{d}{dx}(\ln \sqrt{p}), \quad (2.20)$$

la cual podemos integrar para obtener

$$\sigma_1 = -\ln \sqrt{p}. \quad (2.21)$$

Agrupando todos los resultados anteriores tenemos que la función de onda en la aproximación semiclásica la podemos escribir como

$$\psi \approx C e^{\frac{i}{\hbar}(\sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1)} = C e^{\frac{i}{\hbar}\sigma_0} e^{\sigma_1} = C e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx} e^{-\ln \sqrt{p}} = C \frac{e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx}}{e^{\ln \sqrt{p}}} = C \frac{e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx}}{\sqrt{p}}.$$

Es decir, la función de onda en la aproximación semiclásica, solución a la ecuación de segundo orden, la podemos escribir como

$$\psi(x) = C_1 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx}}{\sqrt{p}} + C_2 \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \int p dx}}{\sqrt{p}}, \quad (2.22)$$

con C_1 y C_2 constantes arbitrarias, como corresponde a una solución general de una ecuación diferencial de segundo orden.

La presencia del factor $1/\sqrt{p}$ en la función de onda anterior admite una interpretación física simple, ya que la probabilidad de hallar la partícula entre x y $x+dx$ está dada por el módulo cuadrado $|\psi|^2$ la cual es proporcional a $1/p$ que es precisamente lo que debiéramos esperar

para una partícula cuasiclásica, ya que dicha probabilidad debe ser proporcional al inverso de la velocidad (o el momentum) con que se mueve la partícula.

Para una región del espacio donde $E < V(x)$, la cual es no accesible clásicamente, el momentum clásico es imaginario puro ($P = \sqrt{2m[E - V(x)]} = i\sqrt{2m[V(x) - E]} = i|p|$) y podemos escribir la función de onda semiclassical dentro de esta región de la forma

$$\psi(x) = C_1' \frac{e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx}}{\sqrt{|p|}} + C_2' \frac{e^{\frac{1}{\hbar} \int |p| dx}}{\sqrt{|p|}}, \quad (2.23)$$

expresión de nuevo válida siempre y cuando estemos alejados del punto de rebote clásico $E = V(x)$.

2.2.2 Condiciones en la frontera

Sea $x = a$ un punto de rebote clásico, es decir, sea $E = V(a)$ y sea $V(x) > E$ para $x > a$, de suerte que la región a la derecha del punto de rebote es clásicamente inaccesible. Como en el lím $x \rightarrow \infty$ la función de onda debe de anularse, entonces la función de onda a la derecha del punto de rebote clásico debe ser de la forma

$$\psi(x > a) = C \frac{e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx}}{2\sqrt{|p|}}. \quad (2.24)$$

A la izquierda del punto de rebote, la función de onda será entonces de la forma

$$\psi(x < a) = C_1 \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx}}{\sqrt{p}} + C_2 \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx}}{\sqrt{p}}. \quad (2.25)$$

Como manejar el problema en el polo $E = V(x)$, donde la solución semiclassical no es válida? En la vecindad de estos puntos el reemplazo de la ecuación de Schrödinger por la ecuación (2.13) no es aceptable. Para obtener la solución completa, la que incluya los puntos donde $E = V(x)$, una solución exacta a la ecuación de Schrödinger debe proveerse y un empalme de la solución exacta y la soluciones aproximadas debe obtenerse en puntos en la vecindad de los polos. Dicha solución exacta

no está disponible en la mayoría de las situaciones de interés y en la práctica no es necesario conocer dichas soluciones ya que todo lo que necesitamos saber es como relacionar las soluciones de la aproximación WKB a lado y lado de las singularidades; en otras palabras, hallar una relación entre los coeficientes C , C_1 y C_2 en (2.24) and (2.25). El método matemático de resolver el problema consiste en hacer una continuación analítica de la variable x , es decir, tomarla como compleja y hacer una rotación compleja (llamada rotación de Wick) alrededor del punto ($x = a$), de tal manera que la solución a derecha del polo coincida con la solución a izquierda del mismo. El método matemático riguroso está fuera del alcance de estas notas y aquí solo presentaremos los resultados finales, es decir, las condiciones de acople entre las dos soluciones las cuales son $C_2 = Ce^{-i\pi/4}/2$ y $C_1 = Ce^{i\pi/4}/2$, de suerte que la función de onda (2.25) toma la forma final

$$\psi(x < a) = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right), \quad (2.26)$$

donde se ha hecho uso de la relación $\cos x = \sin(\frac{\pi}{2} - x)$.

Nótese finalmente que si en el punto de rebote o inflexión $x = a$ hubiese una barrera infinita de potencial, la solución (2.24) tomaría el valor $\psi(x \geq a) = 0$ y en $x < a$ se debería de tener $C_1 = -C_2$, lo cual implicaría:

$$\psi(x < a) = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx. \quad (2.27)$$

2.3 Trigesimo sexta lección

En esta lección aplicaremos el método WKB a dos problemas: la penetración de una barrera de potencial y los niveles de energía de un pozo de potencial.

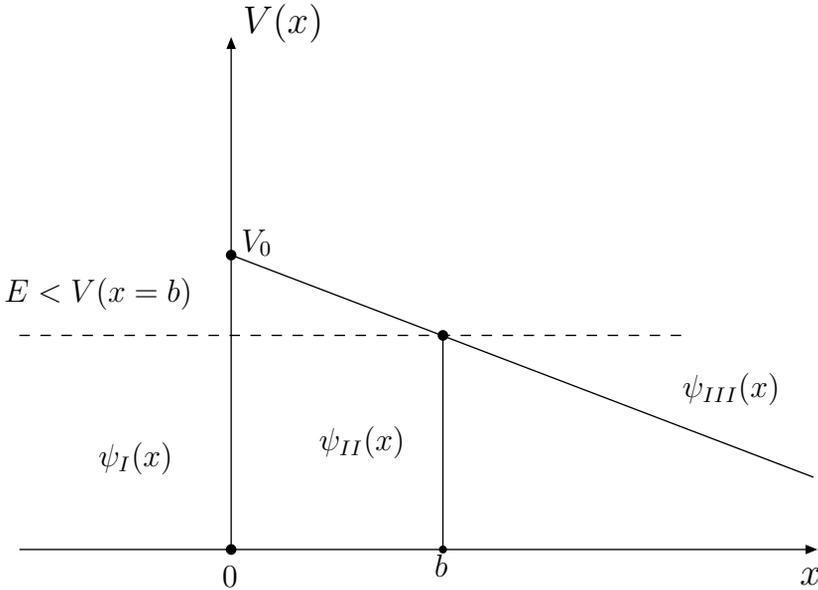


Figura 2.1: Barrera de Potencial.

2.3.1 Barrera de potencial semiclásica

Calculemos utilizando la aproximación WKB, el coeficiente de transmisión a través de la siguiente barrera de potencial unidimensional:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : -\infty < x < 0 \\ V_0 = cte > 0 & : x = 0 \\ 0 & : \lim x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (2.28)$$

con $V(x)$ una función positiva, arbitraria, continua y finita en la variable x , la cual decrece suavemente en el intervalo $0 \leq x < \infty$, con $V(x = 0) = V_0$ y $V(x \rightarrow \infty) = 0$ como se muestra en la figura (2.3.1). La energía total de la partícula que incide de izquierda a derecha en la región I es tal que $E = V(x = b) < V_0$, como se puede ver de la figura. El punto de discontinuidad en $x = 0$ y el de inflexión en $x = b$ nos dividen el espacio en tres regiones I, II y III, con funciones de onda $\psi_I(x)$, $\psi_{II}(x)$ y $\psi_{III}(x)$ respectivamente. Tomemos para comenzar la función de onda en la región I dada por la solución exacta

$$\psi_I(x \leq 0) = Ae^{ip_1x/\hbar} + Be^{-ip_1x/\hbar}, \quad (2.29)$$

donde A y B son constantes, que de acuerdo a la forma como se han escrito las funciones, corresponden a una normalización a la distribución delta de Dirac. En la expresión anterior $Ae^{ip_ix/\hbar}$ representa una onda incidente desde $-\infty$ hasta la barrera de potencial en $x = 0$ y $Be^{-ip_ix/\hbar}$ una onda reflejada, con $p_i = +\sqrt{2mE} = \hbar k_i$ el momentum lineal constante de la partícula libre incidente. En las regiones II y III trabajaremos con una función de onda aproximada, dada por la solución WKB. De esta manera, la función de onda en la región II será de la forma

$$\psi_{II}(0 \leq x \leq b) = C \frac{e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x)| dx}}{\sqrt{|p(x)|}} + D \frac{e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x)| dx}}{\sqrt{|p(x)|}}, \quad (2.30)$$

y en la región III, de conformidad a las condiciones de frontera analizadas en la lección anterior, tendremos

$$\psi_{III}(x) = F \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx}}{\sqrt{p(x)}}, \quad (2.31)$$

con $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} = \hbar k'(x)$. La continuidad de la función de onda y de su primera derivada en $x = 0$ nos permite escribir las siguientes ecuaciones

$$A + B = \frac{C}{\sqrt{\hbar k'(0)}} + \frac{D}{\sqrt{\hbar k'(0)}}, \quad (2.32)$$

$$ik_i(A - B) = [C\sqrt{k'(0)} - D\sqrt{k'(0)}]/\sqrt{\hbar}, \quad (2.33)$$

con $k_i = \sqrt{2mE}$, $k'(0) = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ y se ha despreciado en la primera derivada de la función de onda en (2.33) el término proporcional a $dp(x)/dx$, como lo pide el límite de validez de la aproximación semiclassical.

Ahora, en el punto $x = b$, las condiciones de frontera propias de la aproximación WKB nos permiten escribir las siguientes ecuaciones

$$C = Fe^{i\pi/4}/\sqrt{2}, \quad (2.34)$$

$$D = Fe^{-i\pi/4}/\sqrt{2}. \quad (2.35)$$

La manipulación de las ecuaciones (2.32)-(2.35) nos permite escribir primero

$$B = \frac{[k_i - k'(0)]}{[k_i + k'(0)]} A, \quad (2.36)$$

de donde podemos hallar el coeficiente de reflexión

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|(k_i - k'(0))|^2}{|k_i + k'(0)|^2}.$$

Ahora, para hallar el coeficiente de transmisión $T = |F/A|^2$ debemos primero normalizar la función de onda en la región (I), de la misma forma como está normalizada la función de onda en las regiones (II) y (III) (normalización a la WKB). Para esto es necesario definir las nuevas constantes $A = A'/\sqrt{p_i}$ y $B = B'/\sqrt{p_i}$ (en los textos se suele normalizar una función de onda de partícula libre, dividiendo la onda plana por \sqrt{v} , con v la velocidad de la partícula en la onda incidente, lo cual es completamente equivalente a la normalización anterior. Reemplazando entonces (2.34), (2.35) y (2.36) en (2.32), podemos obtener, luego de un álgebra simple:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4k_i^2 k'(0)^2}{[k_i + k'(0)]^2}.$$

De las expresiones anteriores podemos chequear que $R + T = 1$ como debiera serlo.

2.3.2 El pozo de potencial semiclásico

Consideremos en este caso el movimiento finito unidimensional de una partícula que se puede mover en la región clásica $b \leq x \leq a$; es decir, donde a y b coinciden con los puntos de rebote clásicos. De nuevo, dichos puntos me dividen el espacio en tres regiones I ($x < b$), II ($b < x < a$) y III ($x > a$). En las regiones I y III buscamos por soluciones WKB que decrezcan exponencialmente, es decir tendremos

$$\psi(x < b) = A \frac{e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x a|p(x)|dx}}{\sqrt{|p(x)|}}, \quad (2.37)$$

$$\psi(x > a) = B \frac{e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx}}{\sqrt{|p(x)|}}, \quad (2.38)$$

con A y B constantes que se pueden determinar por normalización. En la región a derecha del punto clásico $x = a$, la función de onda estará dada por

$$\frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.39)$$

En la región a izquierda del punto clásico de inflexión $x = b$ la función de onda será

$$\frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.40)$$

Para que estas funciones sean iguales en toda la región del espacio entre $b \leq x \leq a$ la suma de sus fases debe ser un múltiplo de π , es decir se debe cumplir que

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{\pi}{4} = n' \pi, \quad (2.41)$$

con $n' = 1, 2, 3, \dots$, es decir

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a p dx + \frac{\pi}{2} = (n + 1)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.42)$$

siempre y cuando simultáneamente se cumpla la relación $C = (-1)^n C'$. Todo lo anterior implica que

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx + \frac{\pi}{2} = (n + 1)\pi, \quad (2.43)$$

lo cual podemos escribir como

$$\oint p dx + = 2\pi\hbar(n + 1/2), \quad (2.44)$$

que no es más que la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld. El método anterior nos ha dado no solo los niveles de energía, sino también las funciones de onda aproximadas en toda la región del espacio, excepto en pequeñas regiones alrededor de los puntos de inflexión clásicos a y b .

