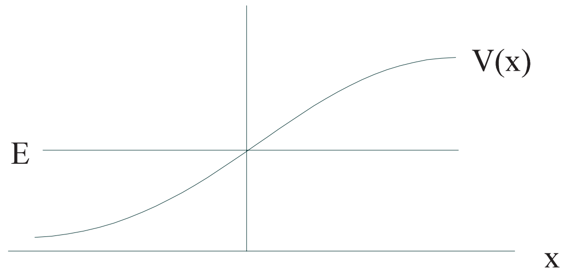
Fórmulas de conexión.

En el apartado anterior hemos visto que la aproximación WKB nos permite calcular la función de onda en todas las regiones del espacio, salvo en las cercanías de los puntos de retorno clásicos. Supongamos, por ejemplo, que tenemos un potencial como el que se muestra en la siguiente figura, de modo que el punto $x = 0$ es un punto de retorno.



Sabemos que a la izquierda del potencial la función de onda será oscilante mientras que a la derecha es una combinación de exponenciales crecientes y decrecientes. En particular podremos escribir la función de onda a la izquierda y a la derecha de la forma:

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_x^0 k(x)dx\right) + \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_x^0 k(x)dx\right) \qquad x \ll 0$$
$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(\int_0^x \rho(x)dx\right) + \frac{D}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(-\int_0^x \rho(x)dx\right) \qquad x \ll 0$$

donde $k(x) = \sqrt{2m\left(E - V(x)\right)/\hbar^2}$ y $\rho(x) = \sqrt{2m\left(V(x) - E\right)/\hbar^2}$

El problema consiste en que no sabemos cómo están relacionadas las constantes A y B con las constantes C y D, ya que en el punto de retorno no podemos utilizar la aproximación WKB. Si consiguiéramos de algún modo saber cómo están relacionadas, podríamos por lo menos obtener la función de onda en las dos regiones, aunque siguiéramos sin conocer la solución en el punto de retorno. Pues bien, lo que vamos a hacer a continuación es ver las relaciones que existen entre las constante, lo que se conoce como las fórmulas de conexión. Vamos a suponer que el potencial en el punto de retorno se puede aproximar por una recta, de modo que:

$$V(x) \simeq E + \alpha x \qquad \text{para } |x| \ll 1$$

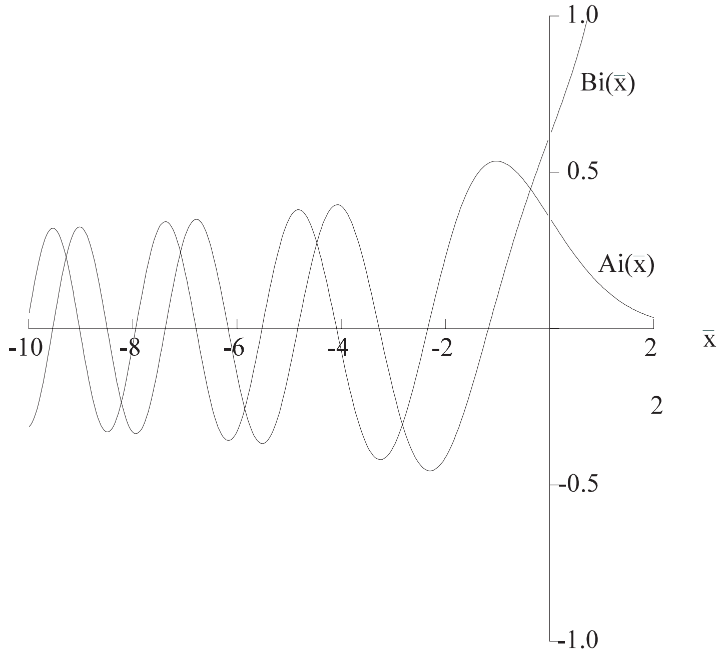
De esta forma, en las proximidades del punto de retorno la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo será aproximadamente:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha x \psi = 0$$

Podemos definir una nueva variable adimensional $\bar{x} = \left(2m\alpha/\hbar^2\right)^{1/3} x$, de modo que la ecuación anterior queda de la forma :

$$\frac{d^2\psi}{d\bar{x}^2} - \bar{x}\psi = 0$$

Esta ecuación parece muy sencilla de resolver, sin embargo no tiene solución analítica. Existen dos soluciones independientes de esta ecuación diferencial, conocidas como las funciones de Airy $Ai(\bar{x})$ y $Bi(\bar{x})$. La función $Ai(\bar{x})$ disminuye exponencialmente en la región $\bar{x} > 0$, mientras que la función $Bi(\bar{x})$ crece exponencialmente. En la siguiente figura se muestran las dos funciones de Airy.



En la región $\bar{x} < 0$, lógicamente, las dos funciones presentan un comportamiento oscilatorio. Los comportamientos asintóticos de las funciones de Airy nos van a permitir encontrar las fórmulas de conexión. En muchos libros de tablas matemáticas se pueden encontrar estos comportamientos asintóticos, que son los siguientes:

$$Ai(\bar{x}) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{\bar{x}^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\bar{x}^{3/2}\right) \qquad \bar{x} \gg 1$$

$$Ai(\bar{x}) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(-\bar{x})^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-\bar{x})^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \qquad -\bar{x} \gg 1$$

$$Bi(\bar{x}) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\bar{x}^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}\bar{x}^{3/2}\right) \qquad \bar{x} \gg 1$$

$$Bi(\bar{x}) \sim -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(-\bar{x})^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-\bar{x})^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \qquad -\bar{x} \gg 1$$

Alrededor del punto de retorno podemos expresar el número de ondas de la forma:

$$k(x) \simeq \sqrt{-2m\alpha x/\hbar^2} \quad \text{y} \quad \rho(x) \simeq \sqrt{2m\alpha x/\hbar^2}$$

de modo que las ecuaciones anteriores se pueden expresar en función de estas dos magnitudes de la forma:

$$
\begin{aligned}
Ai(\bar{x}) &\sim \frac{1}{2}\frac{\gamma}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left(-\int_0^x \rho(x)dx\right) && \bar{x} \gg 1 \\
Ai(\bar{x}) &\sim \frac{\gamma}{\sqrt{k(x)}}\cos\left(\int_x^0 k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right) && -\bar{x} \gg 1 \\
Bi(\bar{x}) &\sim \frac{\gamma}{\sqrt{\rho(x)}}\exp\left(\int_0^x \rho(x)dx\right) && \bar{x} \gg 1 \\
Bi(\bar{x}) &\sim -\frac{\gamma}{\sqrt{k(x)}}\sin\left(\int_x^0 k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right) && -\bar{x} \gg 1
\end{aligned}
$$

donde $\gamma = \left(2m\alpha/\hbar^2\right)^{1/6}/\sqrt{\pi}$. De estas soluciones asintóticas podemos ver ya la conexión que existe entre las soluciones a la derecha y a la izquierda de un punto de retorno. Para el caso que estamos considerando en el que la barrera se encuentra a la derecha, si el punto de retorno se encuentra en $x = a$ las fórmulas de conexión son:

$$
\begin{aligned}
\frac{2}{\sqrt{k}}\cos\left(\int_x^a kdx - \frac{\pi}{4}\right) &\rightleftarrows \frac{1}{\sqrt{\rho}}\exp\left(-\int_a^x \rho dx\right) \\
\frac{1}{\sqrt{k}}\sin\left(\int_x^a kdx - \frac{\pi}{4}\right) &\rightleftarrows -\frac{1}{\sqrt{\rho}}\exp\left(\int_a^x \rho dx\right)
\end{aligned}
$$

Por el contrario, si la barrera se encuentra a la izquierda las fórmulas de conexión son:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{\rho}}\exp\left(-\int_x^a \rho dx\right) &\rightleftarrows \frac{2}{\sqrt{k}}\cos\left(\int_a^x kdx - \frac{\pi}{4}\right) \\
-\frac{1}{\sqrt{\rho}}\exp\left(\int_x^a \rho dx\right) &\rightleftarrows \frac{1}{\sqrt{k}}\sin\left(\int_a^x kdx - \frac{\pi}{4}\right)
\end{aligned}
$$

Estas formulas de conexión sólo se pueden aplicar cuando nos encontramos relativamente lejos del punto de retorno y nos sirven para conectar las soluciones a la izquierda y a la derecha del punto de retorno. Se puede encontrar una solución aproximada que también es válida en el punto de retorno. Sin embargo, esta solución viene dada mediante las funciones de Airy, de modo que no es de gran utilidad. En los siguientes apartados vamos a ver cómo se pueden utilizar estas fórmulas de conexión y veremos que no hace falta tener una solución asintóticamente válida en todas las regiones, ya que simplemente con las fórmulas de conexión podemos calcular magnitudes de interés como coeficientes de transmisión y energías de los estados estacionarios.