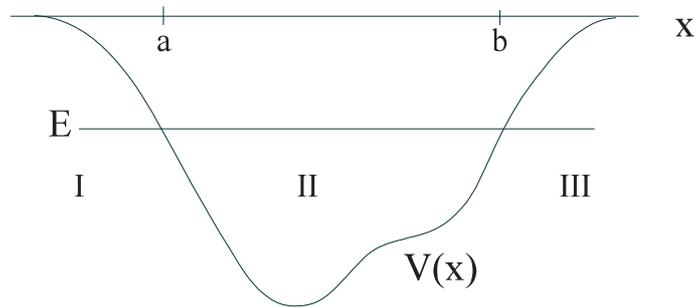


## Estados ligados. Regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld.

En este último apartado vamos a ver otra aplicación de la aproximación WKB y de las reglas de conexión, como es el cálculo de las energías de los estados estacionarios de un potencial. Como resultado, obtendremos la regla de cuantización de Böhrr-Sommerfeld que se utilizaba en la primitiva teoría cuántica.

Vamos a suponer que tenemos un potencial como el de la figura. Este potencial presentará estados ligados, de modo que para  $E < 0$  el espectro de energías será discreto. Vamos a considerar un valor de la energía para el cual los puntos de retorno clásicos se encuentran en  $x = a$  y en  $x = b$ .



Para un estado ligado sabemos que en la región I la función de onda será una exponencial decreciente, que de acuerdo con la aproximación WKB la podremos escribir como

$$\psi_{\text{I}}(x) = \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(-\int_x^a \rho(x) dx\right)$$

Ahora utilizamos las reglas de conexión para el caso de barrera a la izquierda para obtener la función de onda en la región II:

$$\psi_{\text{II}}(x) = \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_a^x k(x) dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

A continuación podemos utilizar de nuevo las reglas de conexión para obtener la función de onda en la región III, pero previamente debemos escribir la función de onda en la región II de una forma más adecuada:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II}}(x) &= \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} - \int_x^b k(x) dx + \frac{\pi}{4}\right) \\ \psi_{\text{II}}(x) &= \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} - \int_x^b k(x) dx + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) + \\ &\quad + \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned}$$

Podemos aplicar ya la reglas de conexión, de modo que la función de onda en la región III será de la forma:

$$\psi_{\text{III}}(x) = \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \cos \left( \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} \right) \exp \left( - \int_b^x \rho(x) dx \right) - \frac{2A}{\sqrt{\rho(x)}} \sin \left( \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} \right) \exp \left( \int_b^x \rho(x) dx \right)$$

Según podemos ver en esta ecuación, en la región III aparecen dos términos, que son una exponencial decreciente y una exponencial creciente respectivamente. Para obtener realmente un estado ligado la función de onda debe ser normalizable, de modo que no puede aparecer la exponencial creciente en la región III, y por tanto se debe verificar la siguiente condición:

$$\sin \left( \int_a^b k(x) dx - \frac{\pi}{2} \right) = 0$$

Es decir, que

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

Como la función  $k(x)$  depende de la energía, la ecuación anterior es una condición sobre los posibles valores que puede tomar la energía. La ecuación anterior se denomina la regla de cuantización de Böhr-Sommefeld y (salvo el factor 1/2) es la que se utilizaba en la primitiva teoría cuántica para obtener las energías de los estados estacionarios. Se puede comparar la ecuación anterior con la condición de obtener ondas estacionarias en una cuerda tensa con los extremos fijos. El desfase que se produce en la función de onda en la región clásicamente permitida es precisamente la integral que aparece en la ecuación anterior. Si tenemos una cuerda tensa, para obtener una onda estacionaria la integral anterior debe ser un múltiplo entero de  $\pi$ , de modo que algo similar ocurre para las ondas de materia entre los puntos de retorno, que serían los extremos clásicos entre los que se puede mover la partícula. El factor 1/2 proviene de que en la teoría cuántica la partícula puede penetrar en las regiones clásicamente prohibidas, de modo que tiene que oscilar un número de veces menor en la región clásicamente permitida para obtener una onda estacionaria.

Por otro lado, podemos ver que el estado fundamental se encuentra para  $\int_a^b k dx = \pi/2$ , de modo que contiene un cuarto de longitud de onda entre los dos puntos de retorno (la función de onda penetra 1/8 de longitud de onda en cada una de las regiones clásicamente prohibidas). La fase vale  $\pi/4$  en  $x = a$  y  $-\pi/4$  en  $x = b$ , de modo que la función de onda no presenta ningún cero dentro de la región clásicamente permitida. Sin embargo, el primer estado excitado contiene 3/4 longitudes de onda y por tanto tendrá un cero en la región clásicamente permitida y así sucesivamente. De modo que también en la aproximación WKB el número de ceros que tiene la función de onda nos indica a qué estado corresponde, de modo que el  $n$ -ésimo estado excitado tiene  $n$  ceros.

Por último, podemos resaltar que la integral que ha aparecido anteriormente, está relacionada con la variable de acción de la mecánica clásica, que se define de la siguiente forma:

$$J = \oint p dx = 2 \int_a^b p dx$$

de modo que para los estados estacionarios se verifica que:

$$J = 2\hbar \int_a^b k dx = \frac{h}{\pi} \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi = \left( n + \frac{1}{2} \right) h$$

En este sentido se dice que la constante de Planck es el cuanto de acción, de modo que el área encerrada por la trayectoria en el espacio de las fases para un estado estacionario es un múltiplo entero (salvo el factor 1/2) de la constante de Planck.

Para ver cómo funciona la aproximación WKB a la hora de reproducir las energías de los estados ligados vamos a ver algunos ejemplos.

El primer caso que vamos a considerar es el oscilador armónico. El calcular las energías de los estados estacionarios se reduce a calcular la integral de acción. La función  $k(x)$  para el caso del oscilador armónico vale:

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)}{\hbar^2}}$$

Para un determinado valor de la energía  $E$  los puntos de retorno se encuentran en  $x = \pm \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}$ , de modo que tenemos que hacer la siguiente integral:

$$\int_{-\frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}}^{\frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}} \sqrt{2m \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)} \frac{dx}{\hbar} =$$

Esta integral se hace fácilmente mediante un cambio de variable como sigue:

$$= \sqrt{2mE} \int_{-\frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}}^{\frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}} \sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E} x^2} \frac{dx}{\hbar}$$

hacemos  $\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} x = \sin \alpha$ , de modo que queda:

$$\begin{aligned} &= \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \frac{1}{\hbar} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sqrt{1 - \sin^2 \alpha} \cos \alpha d\alpha = 2 \frac{E}{\omega} \frac{1}{\hbar} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \alpha d\alpha = \\ &= 2 \frac{E}{\hbar\omega} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos 2\alpha \right) d\alpha = 2 \frac{E}{\hbar\omega} \frac{\pi}{2} = \frac{E}{\hbar\omega} \pi \end{aligned}$$

Aplicamos ahora la regla de cuantización de Böhr-Sommerfeld:

$$\frac{E}{\hbar\omega} \pi = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi$$

de modo que:

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Es decir, que hemos obtenido como posibles energías las que corresponden al oscilador armónico. Desde luego que aunque la aproximación WKB suele dar buenos resultados no podíamos esperar que nos diera la solución exacta. Como veremos a continuación esto no es normal y es algo particular del oscilador armónico.

Como segundo caso, vamos a estudiar un oscilador anarmónico. Vamos a suponer que una partícula se encuentra sometida al siguiente potencial:

$$V(x) = kx^4$$

El espectro de energías, lógicamente, será discreto, tal como ocurre con el oscilador armónico. Este problema no tiene solución analítica, de modo que existen dos formas de resolverlo: o bien encontrar soluciones numéricas, o bien utilizar algún método aproximado como el WKB. Vamos a ver que podemos encontrar los posibles valores de la energía utilizando la aproximación WKB. La función  $k(x)$  vendrá dada en este caso por:

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m(E - kx^4)}{\hbar^2}}$$

Los puntos de retorno clásicos para un valor dado de la energía se encuentran en  $x = \pm \left( \frac{E}{k} \right)^{1/4}$ , de modo que tenemos que calcular la siguiente integral:

$$\int_{-(E/k)^{1/4}}^{(E/k)^{1/4}} \sqrt{2m(E - kx^4)} \frac{dx}{\hbar} = 2 \int_0^{(E/k)^{1/4}} \sqrt{2m(E - kx^4)} \frac{dx}{\hbar} =$$

Vamos a ver si podemos escribir esta integral en función de alguna conocida.

$$= \frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \int_0^{(E/k)^{1/4}} \sqrt{1 - \frac{k}{E} x^4} dx =$$

hacemos el cambio de variable  $\frac{k}{E} x^4 = y$ :

$$= \frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \frac{1}{4} \left( \frac{E}{k} \right)^{1/4} \int_0^1 (1 - y)^{1/2} y^{-3/4} dy = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}} \frac{E^{3/4}}{k^{1/4}} \int_0^1 (1 - y)^{1/2} y^{-3/4} dy =$$

La última integral que aparece es una función beta de Euler, cuya definición es la siguiente:

$$B(z, w) = \int_0^1 t^{z-1} (1 - t)^{w-1} dt$$

de modo que nuestra integral vale:

$$= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{E^{3/4}}{k^{1/4}} B\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{2}\right)$$

El valor de la función beta se puede calcular a partir de la función gamma de Euler, y esta se puede obtener de cualquier libro de tablas matemáticas.

$$B(z, w) = \frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}$$

de modo que:

$$B\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{7}{4}\right)}$$

Por otro lado,  $\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 3.6256099082$ ,  $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\pi^{1/2} = 0.8862269254$  y  $\Gamma\left(\frac{7}{4}\right) = \frac{3}{4}\Gamma\left(\frac{3}{4}\right) = \frac{3}{4}1.2254167024 = 0.919062526$ , de modo que:

$$B\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{2}\right) = \frac{3.6256099082 \cdot 0.8862269254}{0.919062526} = 3.496076742$$

Por tanto, la integral que queríamos evaluar vale:

$$1.74803837 \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{E^{3/4}}{k^{1/4}}$$

Aplicamos ahora la regla de cuantización de Böhrr-Sommerfel para obtener las posibles energías de los estados ligados:

$$1.74803837 \cdot \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{E^{3/4}}{k^{1/4}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$

de modo que las posibles energías vienen dadas por la siguiente ecuación:

$$E_n = 2.1850693 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^{4/3} k^{1/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}$$

Podemos escribir las posibles energía de la siguiente forma:

$$E_n = c_n k^{1/3} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} \quad \text{donde} \quad c_n = 2.1850693 \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^{4/3}$$

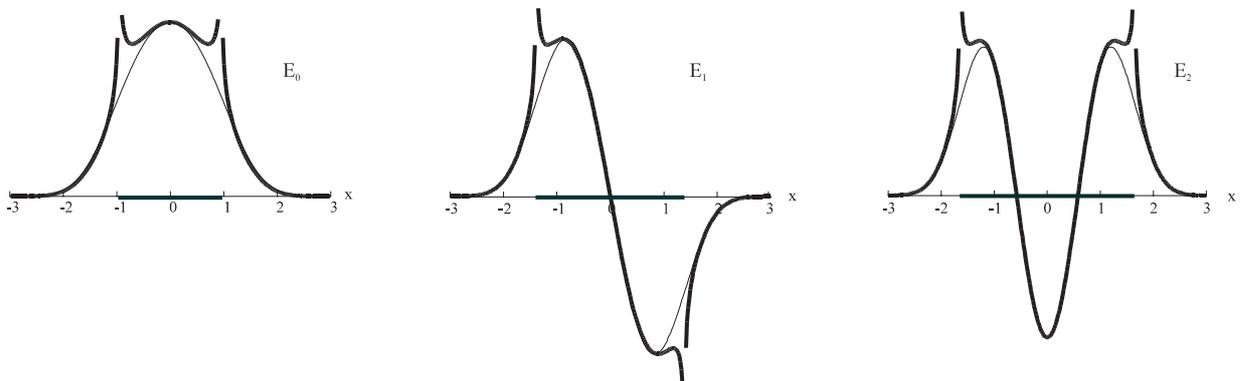
Para ver la validez de la aproximación WKB vamos a comparar con el valor exacto que se obtiene resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En la siguiente tabla se muestra una comparación entre el valor del coeficiente  $c_n$  que hemos obtenido mediante la aproximación WKB y el valor exacto que se ha obtenido numericamente. Como se puede comprobar, salvo en el estado fundamental (y quizá el primer estado excitado), los valores que se obtienen concinciden bastante bien con los valores exactos. Lógicamente podíamos esperar este resultado, ya que para el valor más bajo de la energía es cuando los puntos de retorno están más próximos y por tanto, es cuando obtendremos la peor aproximación.

$c_n$			
$n$	WKB	Exacto	Error (%)
0	0.867	1.060	18
1	3.752	3.800	1.3
2	7.414	7.456	$5.6 \cdot 10^{-3}$
3	11.612	11.645	$2.8 \cdot 10^{-3}$
4	16.234	16.262	$1.7 \cdot 10^{-3}$
5	21.214	21.238	$1.1 \cdot 10^{-3}$
6	26.506	26.529	$8.7 \cdot 10^{-4}$
7	32.078	32.099	$6.5 \cdot 10^{-4}$
8	37.904	37.923	$5.0 \cdot 10^{-4}$
9	43.964	43.981	$3.9 \cdot 10^{-4}$
10	50.240	50.256	$3.2 \cdot 10^{-4}$

El método WKB no sólo nos permite obtener los posibles valores de la energía para los estado ligados, sino también las funciones de onda (autofunciones del Hamiltoniano). De acuerdo con lo que hemos visto anteriormente, podemos escribir la función de onda en cada una de las tres zonas de la forma:

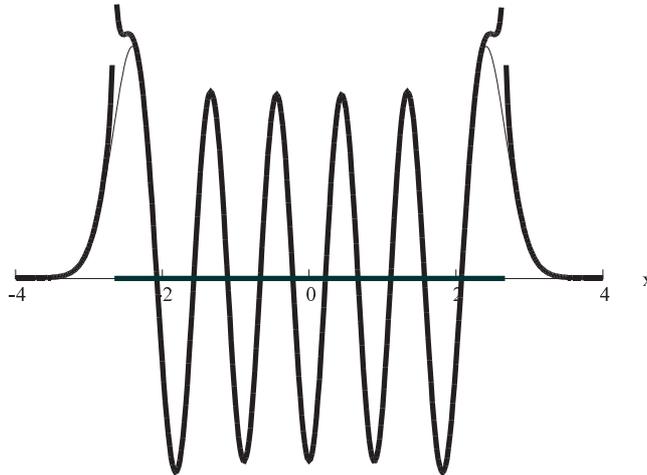
$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(-\int_x^a \rho(x) dx\right) & \text{para } x < a \\ \frac{2A}{\sqrt{k(x)}} (-1)^n \cos\left(\int_x^b k(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) & \text{para } a < x < b \\ \frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} (-1)^n \exp\left(-\int_b^x \rho(x) dx\right) & \text{para } x > b \end{cases}$$

En las siguiente figuras se puede ver una comparación de los tres primeros estados estacionarios que se obtienen a partir de la aproximación WKB y resolviendo numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.



Como se puede observar, el resultado es bastante bueno salvo en los puntos de retorno, en los que lógicamente la función de onda de la aproximación WKB tiende a infinito. Cuanto mayor es la energía mejor es el acuerdo de la aproximación WKB. Por último,

en la siguiente figura se muestra el décimo estado excitado en el que se puede apreciar que la función de onda de la aproximación WKB se solapa con la solución numérica salvo alrededor de los puntos de retorno.



Con este tema termina el estudio de los problemas unidimensionales. En estos dos temas hemos visto cómo se puede resolver analíticamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para algunos problemas que admiten solución analítica, como los potenciales cuadrados o el oscilador armónico. Por otro lado, hemos visto que en el caso en que un problema no se pueda resolver analíticamente se puede utilizar la aproximación WKB. Este método se puede utilizar para obtener fácilmente coeficientes de transmisión, autovalores del hamiltoniano y funciones de onda. En el siguiente tema comenzaremos con el estudio de problemas tridimensionales.