# La aproximación WKB.

Vamos a comenzar con el estudio formal de la aproximación o método WKB. Este método fue desarrollado por Wentzel, Kramers y Brillouin independientemente, para obtener soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el caso de problemas unidimensionales. El método también se puede aplicar a problemas en tres dimensiones en los que el potencial tenga simetría esférica. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que es la que se pretende resolver es:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E - V(x))\,\psi(x) = 0$$

Vamos a escribir la función de onda de la siguiente forma:

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

donde $S$ es en general una función compleja. Podemos ver cuál es la ecuación diferencial que satisface la función $S$:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi(x)}{dx} &= \frac{i}{\hbar}\frac{dS}{dx}e^{\frac{i}{\hbar}S} \\ \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= \frac{i}{\hbar}\frac{d^2S}{dx^2}e^{\frac{i}{\hbar}S} - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar}S} \end{aligned}$$

Si introducimos esta derivada en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo obtenemos que:

$$\frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S}{dx^2} - \frac{1}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 + (E - V(x)) = 0$$

(donde se han eliminado los factores exponenciales)

La ecuación diferencia que satisface $S$ resulta que es no lineal. Podemos pensar que es un atraso el utilizar esta función $S$ en lugar de la función de onda, sin embargo no es así. Lo que vamos a hacer es precisamente utilizar la no linealidad de ecuación diferencial anterior para obtener así soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger. Vamos a desarrollar la función $S$ en potencias de la constante de Planck $\hbar$, de modo que si se puede considerar pequeña nos podremos quedar en los primeros términos:

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \cdots$$

Si introducimos este desarrollo en la ecuación diferencial para $S$ queda:

$$\frac{i\hbar}{2m}\left(S_0'' + \hbar S_1'' + \hbar^2 S_2'' + \cdots\right) - \frac{1}{2m}\left(S_0' + \hbar S_1' + \hbar^2 S_2' + \cdots\right)^2 + (E - V(x)) = 0$$

Vamos a agrupar los términos por potencias en $\hbar$:

$$E - V(x) - \frac{1}{2m}S_0'^2 + \frac{\hbar}{2m}\left(iS_0'' - 2S_0'S_1'\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\left(iS_1'' - S_1'^2 - 2S_0'S_2'\right) + \cdots = 0$$

El truco consiste en considerar que $\hbar$ es un parámetro pequeño arbitrario, de modo que si el desarrollo anterior en potencias de $\hbar$ es nulo es porque todos los términos del desarrollo son nulos de forma independiente. Por tanto se obtiene la siguiente jerarquía de ecuaciones:

$$\begin{gathered} 2m\left(E-V(x)\right)-S_0'^2=0 \\ iS_0''-2S_0'S_1'=0 \\ iS_1''-S_1'^2-2S_0'S_2'=0 \\ \vdots \end{gathered}$$

Estas ecuaciones nos permiten encontrar sucesivamente todos los términos del desarrollo de la función $S$. Vamos a calcular los primeros términos del desarrollo.

$$S_0'=\pm\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}\Longrightarrow S_0=\pm\int^x\sqrt{2m(E-V(x)}dx$$

$$S_1'=\frac{i}{2}\frac{S_0''}{S_0'}=\frac{i}{2}\frac{d}{dx}\left(\ln S_0'\right)\Longrightarrow S_1=\frac{i}{2}\ln S_0'=\frac{i}{2}\ln\left(\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}\right)$$

$$S_2'=\frac{i}{2}\frac{S_1''}{S_0'}-\frac{1}{2}\frac{S_1'^2}{S_0'}$$

$$S_1'=-i\frac{m}{2}\frac{dV/dx}{2m\left(E-V(x)\right)}\qquad \text{y}\qquad S_1''=-i\frac{m}{2}\frac{d^2V/dx^2}{2m\left(E-V(x)\right)}-im^2\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^2}$$

entonces

$$\begin{aligned} \frac{i}{2}\frac{S_1''}{S_0'}-\frac{1}{2}\frac{S_1'^2}{S_0'} &= \frac{m}{4}\frac{d^2V/dx^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{3/2}}+\frac{m^2}{2}\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{5/2}}+\frac{m^2}{8}\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{5/2}} \\ &= \frac{m}{4}\frac{d^2V/dx^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{3/2}}+\frac{5m^2}{8}\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{5/2}}= \\ &= \frac{d}{dx}\left(\frac{m}{4}\frac{dV/dx}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{3/2}}\right)-\frac{m^2}{8}\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{5/2}} \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow S_2=\frac{m}{4}\frac{dV/dx}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{3/2}}-\int\frac{m^2}{8}\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{5/2}}dx$$

Por tanto, los primeros términos quedan:

$$\begin{aligned} S_0 &= \pm\int^x\sqrt{2m(E-V(x)}dx \\ S_1 &= \frac{i}{2}\ln S_0'=\frac{i}{2}\ln\left(\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}\right) \\ S_2 &= \frac{m}{4}\frac{dV/dx}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{3/2}}-\int\frac{m^2}{8}\frac{\left(dV/dx\right)^2}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{5/2}}dx \\ & \ldots \end{aligned}$$

Así sucesivamente se pueden obtener el resto de los términos. Vamos a ocuparnos ahora de cuántos términos son suficientes para obtener un buen resultado. La serie de $S$ en potencias de $\hbar$ resulta que no es convergente, de modo que se dice que es un desarrollo asintótico de la función $S$. Sin embargo, si nos quedamos con un número finito de términos del desarrollo podemos obtener un buen resultado. Lógicamente nos tenemos que quedar con el término de orden cero como mínimo. El término de primer orden es logarítmico, de modo que no tiene por qué ser mucho menor que el de orden cero y por tanto también lo debemos mantener. Sin embargo, el término de segundo orden si que lo podemos eliminar y cortar el desarrollo en este término. Este término depende de la derivada del potencial, de modo que el desarrollo será correcto si dicha derivada es pequeña. En particular, para poder eliminar este término el desfase que produce debe ser mucho menor que la unidad, es decir $\hbar S_2 \ll 1$. En $S_2$ aparecen dos términos que son del mismo orden, de modo que si queremos cortar el desarrollo en dicho término y quedarnos sólo con los dos primeros se debe verificar la siguiente condición:

$$\frac{m\hbar \left|dV/dx\right|}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{3/2}} \ll 1$$

Esta es precisamente la condición que consideramos anteriormente para que fuera válida la función de onda cuasiclásica. La condición anterior se verificará si el potencial varía lentamente en el espacio, salvo en los puntos de retorno clásicos. Por tanto, si nos quedamos con los dos primeros términos obtenemos una solución correcta en todas las regiones en las que el potencial no varíe de forma apreciable. En ningún caso será válida en los puntos de retorno.

Vamos a ver cómo es la solución si nos quedamos sólo con los dos primeros términos.

$$S \simeq S_0 + \hbar S_1 = \pm \int^x \sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}dx + \hbar \frac{i}{2} \ln\left(\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}\right)$$

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S} = e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(E-V(x))}dx - \frac{1}{2}\ln\left(\sqrt{2m(E-V(x))}\right)} = \frac{e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(E-V(x))}dx}}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{1/4}}$$

Esta es precisamente la solución que propusimos anteriormente de forma intuitiva para la función de onda en el límite clásico (el signo $\pm$ tiene en cuenta la propagación en las dos direcciones mientras que anteriormente sólo consideramos la propagación hacia la derecha a lo largo del eje $x$). Hemos encontrado dos soluciones independientes, de modo que la solución general será de la forma:

$$\psi(x) = A\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(E-V(x))}dx}}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{1/4}} + B\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(E-V(x))}dx}}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{1/4}}$$

En las regiones en las que $E > V(x)$ las soluciones anteriores son oscilatorias. Por el contrario, en las regiones en las que $E < V(x)$ las soluciones son exponenciales crecientes y decrecientes de la forma:

$$\psi(x) = A\frac{e^{\frac{1}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(V(x)-E)}dx}}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{1/4}} + B\frac{e^{-\frac{1}{\hbar}\int^x \sqrt{2m(V(x)-E)}dx}}{\left(2m\left(E-V(x)\right)\right)^{1/4}}$$

Por último vamos a comprobar que una partícula descrita mediante las funciones de onda anteriores describe la trayectoria clásica. Vamos a suponer que una partícula parte del punto $x_0$ y se mueve a lo largo del eje $x$ hacia la derecha y en una región en la que $E > V(x)$. La función de onda que describirá la partícula en el instante inicial será una superposición de funciones de onda del tipo:

$$\frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V(x))}dx}$$

Podemos por tanto escribir la función de onda en el instante inicial de la forma:

$$\psi(x,0) = \int dE\ f(E)\frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V(x))}dx}$$

donde $f(E)$ será una función que presente un máximo para el valor de la energía clásica de la partícula. En el instante $t$ la función de onda que describe a la partícula será:

$$\psi(x,t) = \int dE\ f(E)\frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V(x))}dx - Et\right)}$$

Vamos a ver dónde se encuentra el máximo del paquete de ondas en el instante $t$. Para que las diferentes ondas que constituyen el paquete interfieran constructivamente la fase debe ser un extremal, de modo que:

$$\frac{d}{dE}\left(\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}dx - Et\right) = \int_{x_0}^{x}\frac{m}{\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}}dx - t = 0$$

Por tanto, en el instante $t$ la partícula se encontrará en el punto $x$ que verifique la condición:

$$t = \int_{x_0}^{x}\frac{m}{\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}}dx$$

donde $E$ es el valor para el cual $f(E)$ presenta el máximo. La integral anterior se puede escribir de la forma:

$$t = \int_{x_0}^{x}\frac{dx}{v(x)}$$

y este es justamente el tiempo que necesita la partícula para cubrir la distancia de $x_0$ a $x$ en el tiempo $t$, por tanto la partícula se encontrará en el punto que describe la trayectoria clásica. Lógicamente la partícula no pasará instantáneamente por el punto $x$ ya que el paquete de ondas tiene una cierta anchura. El tiempo que tarda la partícula en pasar por un punto concreto se puede estimar a partir del principio de indeterminación, de modo que $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$.