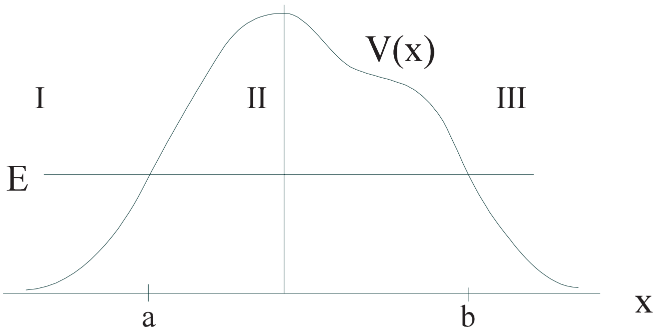
Transmisión a través de una barrera.

La primera aplicación que vamos a estudiar de la aproximación WKB y las fórmulas de conexión, consiste en el cálculo del coeficiente de transmisión a través de una barrera de potencial. Vamos a suponer que tenemos una barrera de potencial arbitraria como la que se muestra en la figura.



Sabemos que si la energía es menor que la de la barrera hay cierta probabilidad de que las partículas atraviesen la barrera, que es un hecho que no se puede explicar desde el punto de vista clásico. Vamos a ver cómo podemos calcular el coeficiente de transmisión de la barrera. Si las partículas inciden desde la izquiera, en la zona III tendremos una función de onda que se propaga hacia la derecha, y de acuerdo con la aproximación WKB se puede expresar de la siguiente forma:

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(i \int_b^x k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right), \qquad k(x) = \sqrt{2m\left(E - V(x)\right)/\hbar^2}$$

donde hemos incluido el factor $\pi/4$ por comodidad para aplicar ahora las reglas de conexión (aunque lógicamente no hace falta). Para aplicar las reglas de conexión escribimos la función de onda en forma de senos y cosenos:

$$\psi_{\mathrm{III}}(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^x k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right) + i\frac{A}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_b^x k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

Podemos obtener ahora la forma de la solución en la zona II aplicando las fórmulas de conexión para el caso de barrera a la izquierda, de modo que:

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathrm{II}}(x) &= \frac{A}{2\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(-\int_x^b \rho(x)dx\right) - i\frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(\int_x^b \rho(x)dx\right), \\
\rho(x) &= \sqrt{2m\left(V(x) - E\right)/\hbar^2}
\end{aligned}$$

Acontinuación podemos obtener la función de onda en la región I, aplicando de nuevo las fórmulas de conexión. Para ello, vamos a escribir la función de onda anterior de una forma más adecuada:

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{A}{2\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(\int_a^x \rho(x)dx - \int_a^b \rho(x)dx\right) - i\frac{A}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left(-\int_a^x \rho(x)dx + \int_a^b \rho(x)dx\right)$$

Aplicando las fórmulas de conexión para el caso en que la barrera está a la derecha queda que:

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = -\frac{A}{2\sqrt{k(x)}} \exp\left(-\int_a^b \rho(x)dx\right) \sin\left(\int_x^a k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right) -$$
$$-i\frac{2A}{\sqrt{k(x)}} \exp\left(\int_a^b \rho(x)dx\right) \cos\left(\int_x^a k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

Por último, vamos a escribir la función de onda anterior como esponenciales imaginarias para ver cuál es la onda incidente y la reflejada:

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \left[\exp\left(\int_a^b \rho(x)dx\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\int_a^b \rho(x)dx\right)\right] e^{i\left(\int_a^x k(x)dx - \frac{\pi}{4}\right)} +$$
$$+\frac{A}{\sqrt{k(x)}} \left[\exp\left(\int_a^b \rho(x)dx\right) - \frac{1}{4}\exp\left(-\int_a^b \rho(x)dx\right)\right] e^{-i\left(\int_a^x k(x)dx + \frac{3\pi}{4}\right)}$$

En esta función de onda el primer término representa una onda que viaja hacia la derecha y que corresponde, por tanto, a la onda incidente, mientras que el segundo término corresponde a la onda reflejada. Las funciones de onda que aparecen están escritas como un número real que multiplica a un factor de fase, es decir $\psi = A\exp(iS/\hbar)$, de modo que se puede calcular directamente el flujo como $j = \frac{A^2}{m}\frac{dS}{dx}$. Si además consideramos que $\frac{d}{dx}\int_a^x k(x')dx' = k(x)$, los diferentes flujos que aparecen son:

$$j_i = \frac{A^2}{m}\left[\exp\left(\int_a^b \rho(x)dx\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\int_a^b \rho(x)dx\right)\right]^2$$
$$j_r = -\frac{A^2}{m}\left[\exp\left(\int_a^b \rho(x)dx\right) - \frac{1}{4}\exp\left(-\int_a^b \rho(x)dx\right)\right]^2$$
$$j_t = \frac{A^2}{m}$$

A partir de estos resultados podemos escribir ya la expresión del coeficiente de transmisión:

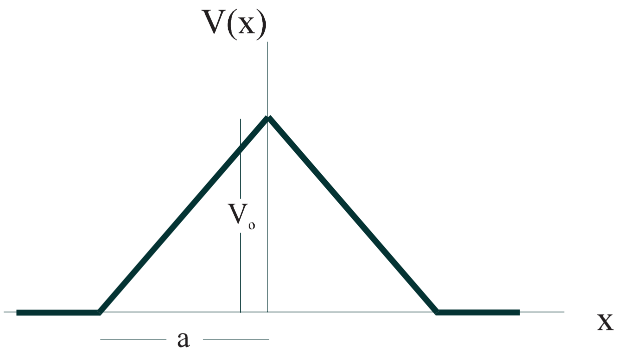
$$T = \left[\exp\left(\int_a^b \rho(x)dx\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\int_a^b \rho(x)dx\right)\right]^{-2}$$

Para que el coeficiente de transmisión anterior sea válido, los dos puntos de retorno deben estar suficientemente alejados, ya que sólo en este caso será válido utilizar los comportamientos asintóticos de las funciones de Airy en la región intermedia. Por tanto, la expresión anterior sólo será válida si la integral $\int_a^b \rho(x)dx$ es mucho mayor que la unidad. En este caso podremos simplificar la expresión anterior, ya que la segunda exponencial es mucho menor que la primera, de modo que:

$$T = \exp\left(-2\int_a^b \rho(x)dx\right)$$

Esta expresión del coeficiente de transmisión se conoce como la fórmula de Gamow. Podemos ver que se obtenía una expresión muy parecida (salvo coeficientes multiplicativos que son del orden de la unidad) para el coeficiente de transmisión de una barrera de potencial cuadrada para valores grandes de la anchura de la barrera. En ningún caso se pueden utilizar las expresiones anteriores cuando la energía esté próxima al máximo de la barrera, ya que en ese caso los puntos de retorno estarán muy próximos.

Para ilustrar cómo funciona la expresión que hemos obtenido para el coeficiente de transmisión, vamos a analizar un caso concreto. Vamos a estudiar la transmisión a través de la barrera que se muestra en la siguiente figura:



Podemos expresar el potencial matemáticamente de la siguiente forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < a \text{ y } x > a \\ V_0 - V_0 \dfrac{|x|}{a} & \text{para } -a < x < a \end{cases}$$

Para calcular el coeficiente de transmisión mediante la aproximación WKB tenemos que evaluar la siguiente integral:

$$\int_{-b}^{b} \sqrt{2m\left(V(x) - E\right)} \frac{dx}{\hbar}$$

donde $-b$ y b son los puntos de retorno, en los que la energía se iguala al potencial. Los puntos de retorno se obtienen por tanto de la condición $V(x) = E$, es decir:

$$V_0 - V_0 \frac{|x|}{a} = E$$

de modo que $b = a\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)$ y la integral valdrá:

$$\int_{-a(1-E/V_0)}^{0} \sqrt{2m\left(V_0 - E + V_0 x/a\right)} \frac{dx}{\hbar} + \int_{0}^{a(1-E/V_0)} \sqrt{2m\left(V_0 - E - V_0 x/a\right)} \frac{dx}{\hbar} =$$

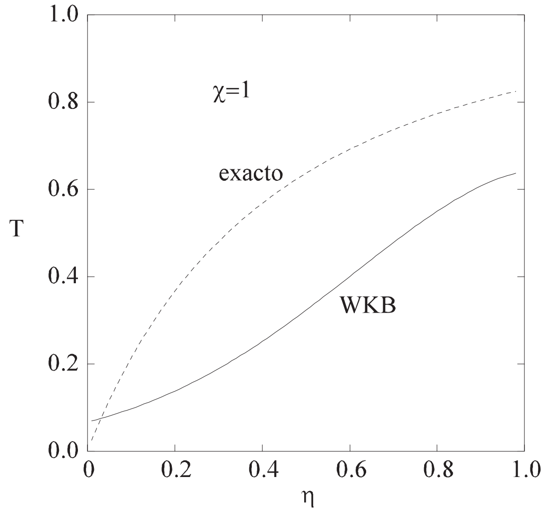
$$= \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)^{3/2}$$

Podemos definir dos parámetros adimensionales, que caracterizan tanto la energía como el potencial, y que son: $\eta = \dfrac{E}{V_0}$ y $\chi = \sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}} a$, de modo que la integral queda $\int_{-b}^{b} \rho(x) dx =$

$\frac{4}{3}\,\chi\,(1-\eta)^{3/2}$ y el coeficiente de transmisión valdrá:

$$T = \left[\exp\left(\frac{4}{3}\chi\,(1-\eta)^{3/2}\right) + \frac{1}{4}\exp\left(-\frac{4}{3}\chi\,(1-\eta)^{3/2}\right)\right]^{-2}$$

Vamos a ver la validez de esta expresión comparando con el valor exacto del coeficiente de transmisión. En la siguiente figura está representado el valor exacto del coeficiente de transmisión y el valor que se obtiene mediante la aproximación WKB, para el caso particular $\chi = 1$.



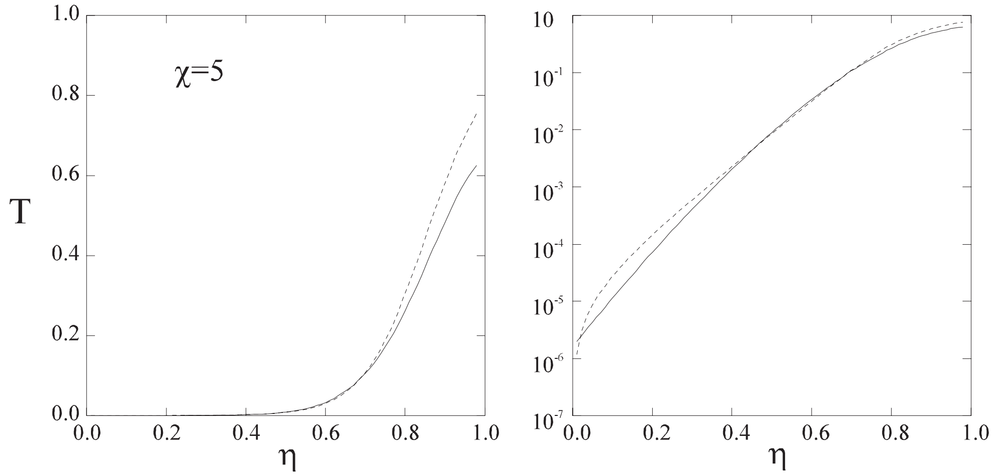
Como podemos ver, la aproximación WKB no funciona nada bien en este caso. Se unen dos motivos por los cuales la aproximación WKB no funciona, por un lado la variación del potencial en la zona de la barrera viene dada por:

$$\left|\frac{dV(x)}{dx}\right| = \frac{V_0}{a}$$

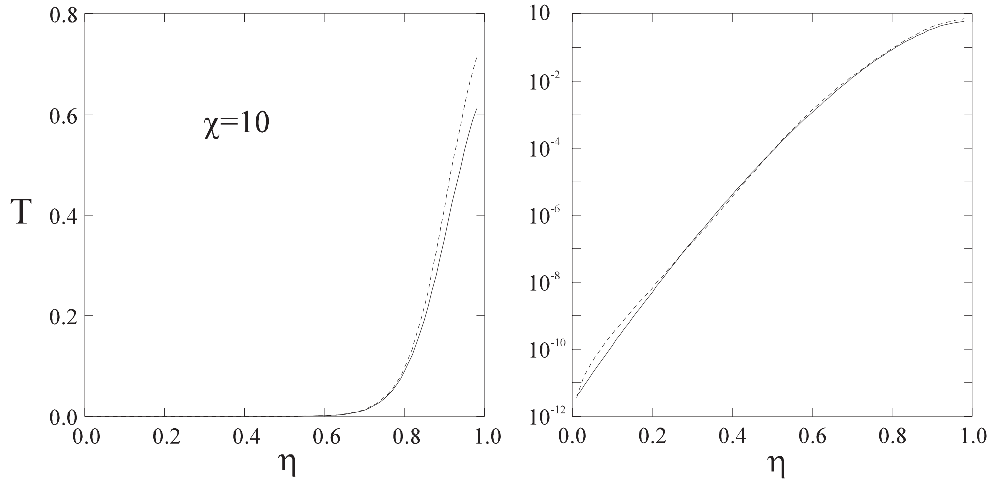
Según vimos anteriormente, para que la aproximación WKB se aproxime a la solución exacta se debe verificar la siguiente condición:

$$\frac{2m\hbar\,|dV/dx|}{(2m\,(E-V(x)))^{3/2}} = \frac{1}{\chi\,(\eta - 1 + |x|\,/a)} \ll 1$$

de modo que para χ del orden de la unidad no podemos esperar un buen resultado. Por otro lado, para este valor de χ los puntos de retorno están muy próximos, de modo que no es válido utilizar las reglas de conexión. Sin embargo, si aumentamos el valor de χ debemos obtener mejores resultados, como vamos a ver a continuación. En la siguiente figura se ha representado el coeficiente de transmisión para el caso $\chi = 5$, tanto el valor exacto como el que se obtiene mediante la aproximación WKB. Como podemos comprobar la aproximación WKB funciona bastante bien en este caso. La aproximación WKB difiere del valor exacto en dos regiones: por un lado, para valores de η del orden de la unidad, ya que los puntos de retorno se aproximan, y por otro lado, para valores de η muy pequeños, ya que la distancia característica de variación de la función de onda se aproxima a la distancia que existe entre los puntos de retorno (recordar que cuanto menor es la energía mayor es la longitud de onda). Se ha representado el coeficiente de transmisión tanto en escala lineal como logarítmica, para que se pueda apreciar que la aproximación WKB es bastante buena prácticamente en todo el rango de valores de la energía.



Por último, en la siguiente figura se ha representado el coeficiente de transmisión para el caso $\chi = 10$. Como se puede comprobar la aproximación WKB es aún mejor en este caso, aunque presenta también diferencias respecto del valor exacto para energías extremas, tanto muy grandes como muy pequeñas.



En este apartado hemos visto como las reglas de conexión nos permiten calcular magnitudes sin necesidad de calcular la función de onda. Como ejemplo, para calcular el coeficiente de transmisión lo único que hay que hacer es calcular una integral. En el siguiente apartado vamos a ver cómo se pueden utilizar las reglas de conexión para calcular las energías de los estados ligados de un potencial.