



# Efecto túnel cuántico en barreras exóticas de potencial

Presentado por Juan Manuel Franco Patiño

Para optar al grado en física

Dirigido por

Manuel Lozano Leyva

Sevilla, 2017

# Índice de contenidos

I.	Introducción y metodología.....	1
II.	La aproximación semiclásica.....	2
III.	Las fórmulas de conexión.....	8
IV.	La condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld.....	15
V.	Efecto túnel cuántico para diferentes geometrías.....	20
VI.	Estados ligados de un pozo doble de potencial.....	32
VII.	Conclusiones.....	39
VIII.	Anexo I.....	40
IX.	Referencias.....	42
X.	Bibliografía.....	44

*A mis padres, simplemente gracias por todo.*

## *Resumen*

La aproximación WKB, nombrada así por los físicos Wentzel, Kramers y Brillouin que la desarrollaron a principio de los años 20, es un método utilizado para el cálculo aproximado de la función de onda de una partícula mediante el desarrollo de una cierta función en potencias de  $\hbar$ , la cual se puede considerar como muy pequeña en los sistemas que vamos a tratar. Es precisamente este hecho lo que hace que al método se le conozca también como aproximación semiclassical, brindando una valiosa conexión entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica mediante la ecuación de Hamilton-Jacobi. Usaremos el método desarrollado para estudiar, dentro de los límites de la aproximación, un efecto conocido comúnmente como efecto túnel por el cual una partícula puede atravesar una barrera de potencial aun teniendo una energía menor que el máximo del potencial. Además, se obtendrá la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld, fundamental en la denominada teoría cuántica antigua, con la que se podrá calcular la energía de los estados ligados de ciertos potenciales. Cabe destacar que el tratamiento que se va a hacer del método WKB, tanto el planteamiento del método en sí como algunas de las aplicaciones, va más allá de lo que suelen ofrecer los libros de mecánica cuántica modernos.



## I. Introducción: objetivos y metodología

El objetivo fundamental de este trabajo es el estudio del efecto túnel cuántico en el marco de la aproximación semiclásica, aunque también se emplearán los resultados obtenidos para el cálculo de energías de estados ligados mediante la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld. Para conseguir dichos objetivos, empezaremos planteando la base teórica de lo que será la aproximación semiclásica de la función de onda de una partícula y continuaremos con una de las partes más delicadas del método, la obtención de las fórmulas de conexión, que relacionarán las funciones de onda de la parte clásicamente permitida y la clásicamente prohibida. Una vez tengamos todo esto, podremos realizar el estudio del efecto túnel en potenciales con una determinada forma, algunos de los cuales permitirán el cálculo analítico del coeficiente de transmisión y su evaluación mediante el uso de un programa informático. Además de esto, usaremos el método WKB para dar una aproximación para los estados ligados de una partícula en un pozo doble de potencial separados por una barrera, en el que la partícula pasará de un pozo al otro atravesando la barrera mediante efecto túnel cuántico.

## II. La aproximación semiclásica

El método WKB es una potente herramienta utilizada para el cálculo aproximado de las soluciones de la ecuación de Schrödinger además de brindar la conexión entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica. Wentzel<sup>1</sup>, Kramers<sup>2</sup> y Brillouin<sup>3</sup> aplicaron el método para la resolución de la ecuación de Schrödinger a principio de los años 20, aunque la naturaleza de la aproximación se remonta más atrás en el tiempo hasta Liouville<sup>4</sup> y Green<sup>5</sup> que lo aplicaron a otras ramas de la física.

La constante de Planck  $h$ , cuyo valor en el SI es de  $6,626 \times 10^{-34}$  J s, es la que marca el límite entre el mundo clásico, gobernado por las leyes de Newton, y el mundo cuántico, gobernado por leyes estadísticas. Así, en aquellos sistemas cuyas acciones características sean muy grandes comparadas con  $h$  esta se puede considerar como muy pequeña, siendo este el límite clásico. Sin embargo, existen fenómenos puramente cuánticos como el efecto túnel, sin análogo clásico al igual que, por ejemplo, el spin. El método WKB intenta realizar un estudio del efecto túnel utilizando el marco de referencia de la mecánica clásica.

La ecuación de Schrödinger monodimensional e independiente del tiempo es:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

El desarrollo se podría hacer en principio para tres dimensiones, sin embargo, al final el paso al caso monodimensional será necesario ya que este primero es en general muy complicado de resolver, aunque se puede simplificar en casos muy especiales, como por ejemplo en potenciales con simetría esférica, en los que el problema tridimensional pasa a ser uno monodimensional con un término adicional de potencial comúnmente conocido como potencial centrífugo.

Proponemos una función de onda  $\Psi$  con la siguiente forma

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x)} \quad (2)$$

Sustituyendo (2) en (1), obtenemos una ecuación para  $S(x)$ :

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{dS(x)}{dx} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2S(x)}{dx^2} + V(x) = E \quad (3)$$

Proponemos un desarrollo en serie de potencias de  $\hbar$  de la función  $S(x)$ :

$$S(x) = s_0 + \frac{\hbar}{i} s_1 + \theta(\hbar^2) \quad (4)$$

Sustituyendo el desarrollo en (3) y agrupando los términos de las distintas potencias de  $\hbar$  tenemos que:

$$\hbar^0 \rightarrow \frac{s_0'^2}{2m} = E - V(x) \quad (5)$$

$$\hbar^1 \rightarrow s_0' s_1' + \frac{s_0''}{2} = 0 \quad (6)$$

Podemos identificar la ecuación (5) como la ecuación de Hamilton-Jacobi independiente del tiempo con  $s_0'$  igual al momento lineal de la partícula  $p(x)$ . Además, podemos resolver (6) para obtener una expresión de  $s_1$ , por lo que según (2) la función de onda tendrá la forma:

$$\psi(x) = \frac{A}{p(x)^{\frac{1}{2}}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'} \quad (7)$$

En la ecuación (4) hemos supuesto que la función  $S(x)$  se puede desarrollar en potencias de  $\hbar$  y además solo nos hemos quedado con los dos primeros términos del desarrollo. Sin embargo, los desarrollos de este tipo no siempre convergen dando una solución físicamente aceptable, sino que por lo general suelen divergir. Sabemos que en (4) nos podemos quedar con pocos términos del desarrollo si imponemos que  $\hbar \rightarrow 0$ , aunque esta condición matemática no tenga sentido físico en sí, ya que  $\hbar$  es una constante. Esto se puede interpretar como que el desarrollo es válido en sistemas con acciones características



muy grandes en comparación con  $\hbar$ . Sabemos que en el caso límite  $\hbar = 0$ , la ecuación de Schrödinger coincide con la ecuación de Hamilton-Jacobi, sin embargo, ese no es nuestro caso y, aunque,  $\hbar \rightarrow 0$ , debemos garantizar que los coeficientes del desarrollo (4) no son anormalmente grandes o pequeños. Por tanto, (4) será válido si:

$$s_0 \gg \hbar s_1 \quad (8)$$

A partir de (6) y recordando la expresión de la longitud de onda de De Broglie tenemos que:

$$1 \gg -\frac{\hbar s_0''}{s_0'^2} = \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{s_0'} \right) = \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \quad (9)$$

La expresión (9) puede reescribirse en función del incremento de la longitud de onda por unidad de longitud de onda quedando:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \ll 2\pi \quad (10)$$

Hemos obtenido (9) y equivalentemente (10) como la condición de validez de la aproximación WKB dada por (4), sin embargo, en nuestro caso, nos conviene intentar encontrar una condición para los potenciales  $V(x)$ , para saber qué condiciones deben cumplir estos para poder aplicar la aproximación, ya que para el estudio del efecto túnel cuántico, va a ser de vital importancia la forma que tenga el potencial. Para ello, partimos de la expresión general de la ecuación de Schrödinger dada en (1) pero ahora, teniendo en cuenta la forma de la función de onda obtenida en (7) dentro de la aproximación WKB, proponemos una forma más general de función de onda:

$$-k(x)^2\psi(x) = \frac{d^2\psi}{dx^2}; k(x)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)); \psi = Q(x)e^{iS(x)} \quad (11)$$

Sustituyendo la forma general de  $\Psi$  dada en (11) en la ecuación de Schrödinger y teniendo en cuenta que si  $a + ib = 0$  entonces  $a = 0$  y  $b = 0$ , obtenemos un par de ecuaciones función de K, Q y S y sus derivadas:

$$Q'' - S'^2 Q + K^2 Q = 0; 2Q'S' + S''Q = 0 \quad (12)$$

Multiplicando la segunda de ellas por  $Q$ , podemos resolver la ecuación diferencial obteniendo  $Q$  en función de  $S'$ :

$$2Q'S'Q + S''Q^2 = 0 \rightarrow \frac{d}{dx}(Q^2S') = 0 \rightarrow Q^2S' = cte \quad (13)$$

Con esto, podemos eliminar  $Q$  y sus derivadas de la primera ecuación en (12), dejándolo todo únicamente en función de  $S$ , sus derivadas y  $K$ :

$$\frac{3}{4}S''^2S'^{-2} - \frac{S'^{-1}S'''}{2} - S'^2 = -K^2 \quad (14)$$

La ecuación (14) a primera vista puede ser de dudosa resolución, sin embargo, a la vista de la ecuación (7), podemos ver que la dependencia con  $x$  de la función  $S(x)$  la carga el potencial  $V(x)$ . Así, si consideramos que el potencial tiene una dependencia suave con la posición, que en nuestro caso quiere decir que para una distancia típica de una longitud de onda el potencial cambia muy poco, como podemos ver en la figura 1, entonces  $S(x)$  también lo hará y aún más lento será el cambio de sus derivadas.

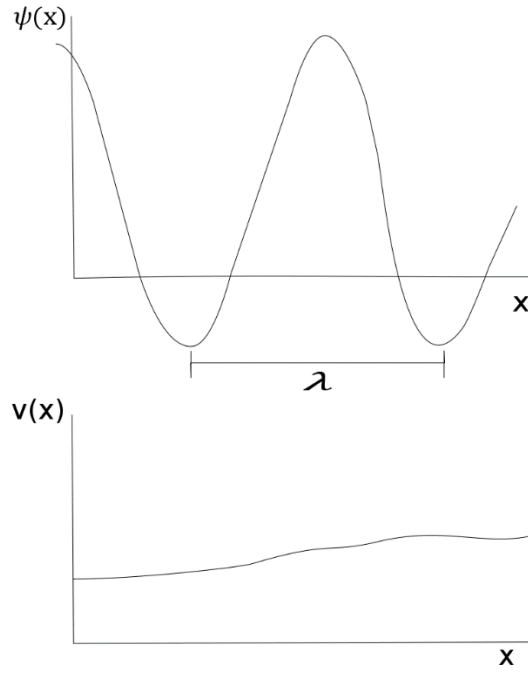


Figura 1. Un potencial  $v(x)$  y su función de onda asociada. Se puede ver que el potencial depende ligeramente de  $x$  y su variación es pequeña en una longitud de onda

$\lambda$

Con esto, podemos ver que los dos primeros términos de la izquierda en la ecuación (14) contienen derivadas segundas y terceras, con lo que podemos esperar que sean despreciables frente al tercer término, por lo que (14) se reduce simplemente a  $S' = K$ , que junto con el resultado de (13) hace que la función de onda propuesta en (11) tenga la misma forma que la función de onda de la aproximación WKB (7). Para obtener una condición en la que se puede hacer la aproximación en la ecuación (14), despreciamos el término más pequeño que lleva  $S'''$ , además del factor  $\frac{3}{4}$  y consideramos que:

$$S''^2 S'^{-2} \ll S'^2 \rightarrow S'' \ll S'^2 \quad (15)$$

Teniendo en cuenta que, en nuestro caso,  $S' = K$  y recordando de nuevo la relación de De Broglie, (15) pasa a ser:

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 2\pi \quad (16)$$

La expresión (16) es totalmente equivalente a (9) y por tanto a (10). Con todo esto, hemos obtenido que si imponemos que el potencial varíe lentamente con la posición en una longitud de onda de  $\Psi$  obtenemos la misma forma de la función de onda WKB y además que esta condición es equivalente a la condición de validez de la aproximación WKB. Este mismo resultado se puede obtener haciendo el cálculo explícito de  $S_2$  para el cual se obtiene<sup>6</sup>:

$$s_2(x) = \frac{1}{2} mp(x)^{-3} \frac{dV(x)}{dx} - \frac{1}{4} m^2 \int dx' p(x')^{-5} \left( \frac{dV(x')}{dx'} \right)^2$$

La última expresión es pequeña si  $\frac{dV(x)}{dx}$  es pequeño y además  $E - V(x)$  no es próximo a cero, lo cual está en consistencia con lo que hemos obtenido anteriormente.

A la vista de los resultados, cabe destacar dos cosas: por un lado, considerando los casos en los que la función de onda (7) sea normalizable, vemos que la densidad de probabilidad  $\rho(x) = |\psi(x)|^2$  es inversamente proporcional a la cantidad de movimiento  $p(x)$ , lo cual confirma el carácter semiclassical de la aproximación, ya que el tiempo invertido por una partícula clásica en recorrer un determinado segmento es inversamente proporcional a su cantidad de movimiento. Por otro lado, si tenemos en cuenta la forma de la función de onda WKB dada en (7), podemos ver que esta diverge en los denominados puntos de retorno clásicos en los que  $p(x) = 0$ . Además de esto, dado que  $p(x) = 0$  en estos puntos, entonces la longitud de onda de De Broglie  $\lambda \rightarrow \infty$  y no seríamos capaces de encontrar un potencial que variase lo suficientemente lento como para cumplir la condición de validez de la aproximación WKB, por lo que cerca de estos puntos la aproximación no es válida.

### III. Las fórmulas de conexión

Hemos obtenido una función de onda de la forma dada en (7) dentro de la aproximación “semiclásica” o WKB, sin embargo, dicha función de onda diverge para los puntos en los que el momento se anula o puntos de retorno clásicos, donde por tanto la aproximación deja de ser válida. Dado que la función de onda es la solución de una ecuación diferencial de segundo orden esta depende de dos constantes, por lo que tiene que ser posible encontrar una relación entre las constantes que aparecen en (17).

En las inmediaciones de los puntos de retorno no es posible considerar que la función de onda tenga la forma WKB, pero sí si estamos lo suficientemente alejados de ellos. Para poder encontrar las relaciones entre los distintos coeficientes, empezamos considerando el caso general presentado en la figura 2 donde en  $x = a$  tenemos un punto de retorno clásico. La función de onda para los puntos suficientemente alejados del punto de retorno tendrá la forma de (7):

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_1 e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'} \right) & x < a \\ \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_3 e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'} + c_4 e^{+\frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'} \right) & x > a \end{cases} \quad (17)$$

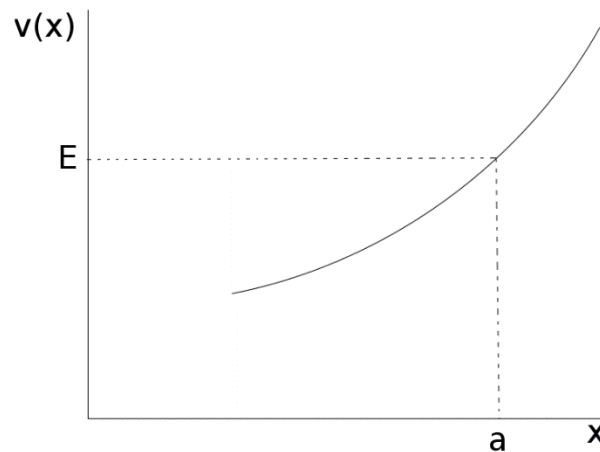


Figura 2. Potencial ascendente genérico con un punto de retorno en  $x = a$ .

Donde hemos elegido los argumentos de las exponenciales para que sean reales en sus respectivas zonas, es decir, para que  $p(x)$  y  $k(x)$  sean reales para  $x < a$  y para  $x > a$  respectivamente. Para los puntos cercanos al punto de retorno, dado que deja de cumplirse la condición de la validez de la aproximación, debemos buscar otra forma de encontrar la función de onda. Suponiendo que tenemos potenciales como los de la figura 2 y que además podemos realizar un desarrollo en serie de potencias de este, tenemos que:

$$V(x) = V(a) + V'(x - a) + \theta[(x - a)^2]; V' = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=a}$$

Donde hemos aproximado el potencial en las cercanías del punto de retorno hasta el primer orden en el desarrollo en potencias de  $x - a$  basándonos en que, dado que el potencial es de variación lenta con la posición, los demás términos del desarrollo son despreciables. Si sustituimos este potencial en la ecuación de Schrödinger (1) tenemos que:

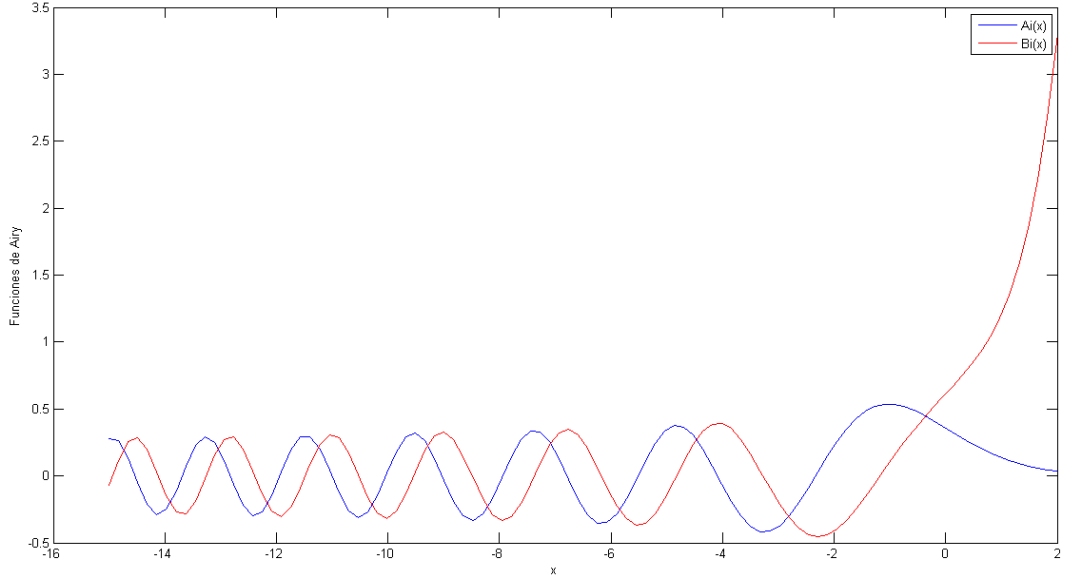
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + (V(a) + V'(x - a))\phi(x) = E\phi(x) \quad (18)$$

Si tenemos en cuenta que  $V(a) = E$  según la figura 2 y además hacemos el cambio de variable  $z = \left(\frac{2mV'}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x - a)$  la ecuación (18) se reduce a:

$$\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} - z\phi(z) = 0 \quad (19)$$

La ecuación (19) se denomina ecuación de Airy y sus dos soluciones independientes,  $Ai(z)$  y  $Bi(z)$ , se denominan funciones de Airy. En la figura 3 podemos ver que ambas funciones tienen un comportamiento oscilante para argumentos negativos y ambas tienen un comportamiento exponencial para argumentos positivos, pero  $Ai(z)$  decae a cero mientras  $Bi(z)$  se va a infinito. La función de onda  $\phi(z)$  solución de (19) vendrá dada como combinación lineal de las funciones de Airy:

$$\phi(z) = c_a Ai(z) + c_b Bi(z) \quad (20)$$



*Figura 3. Representación de  $Ai(x)$  y  $Bi(x)$  donde se ve claro su comportamiento oscilatorio para argumentos negativos y su decaimiento/crecimiento rápido para argumentos positivos.*

Ahora debemos conectar estas soluciones con las soluciones dadas en (17) y dado que estas son válidas para puntos suficientemente alejados de los puntos de retorno, consideramos los desarrollos asintóticos de  $Ai(z)$  y  $Bi(z)$  para argumentos grandes. Empezando por la izquierda, tenemos que  $z < 0$ , por tanto, consideramos los desarrollos asintóticos de  $Ai(z)$  y  $Bi(z)$  para argumentos negativos<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned}
 Ai(z) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \cos\left(-\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \quad z \ll 0 \\
 Bi(z) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \text{sen}\left(-\frac{2}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \quad z \ll 0
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

Si definimos el argumento de las funciones trigonométricas como  $\alpha(z)$ , sustituimos (21) en (20) y desarrollamos el seno y el coseno como exponenciales imaginarias, tenemos que:

$$\phi(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} [(c_a - ic_b)e^{i\alpha(z)} + (c_a + ic_b)e^{-i\alpha(z)}] \tag{22}$$

La función de onda (22) debe ser la misma que la función de onda  $\psi(x)$  definida en (17) en las inmediaciones del punto de retorno y para  $x < a$ . En esta zona, tomamos la aproximación de primer orden del potencial y por tanto:

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \approx (2mV'\hbar)^{\frac{1}{3}}(-z)^{\frac{1}{2}}; \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx \approx -\frac{2i}{3}(-z)^{\frac{3}{2}} \quad (23)$$

Si sustituimos el resultado en (17) para  $x < a$  y por tanto  $z < 0$ :

$$\psi(z) = \frac{1}{(2mV'\hbar)^{\frac{1}{6}}(-z)^{\frac{1}{4}}} \left[ c_1 e^{i(\alpha(z) - \frac{\pi}{4})} + c_2 e^{-i(\alpha(z) - \frac{\pi}{4})} \right] \quad (24)$$

Una comparación directa de (22) y (24) nos dice que  $\phi(z)$  y  $\psi(z)$  son iguales salvo un factor de fase constante de  $\frac{\pi}{4}$  y, además, los coeficientes tienen que cumplir las relaciones:

$$\begin{aligned} \frac{(c_a - ic_b)}{2\sqrt{\pi}} &= \frac{c_1}{(2mV'\hbar)^{\frac{1}{6}}} \\ \frac{(c_a + ic_b)}{2\sqrt{\pi}} &= \frac{c_2}{(2mV'\hbar)^{\frac{1}{6}}} \end{aligned} \quad (25)$$

Pasamos ahora al análisis a la derecha del punto de retorno, por lo que  $z > 0$  y por tanto consideramos los desarrollos de las funciones de Airy para argumentos muy grandes<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned} Ai(z) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}(z)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}} \quad z \gg 0 \\ Bi(z) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}(z)^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}} \quad z \gg 0 \end{aligned} \quad (26)$$

Si definimos el argumento de las exponenciales como  $\beta(z)$  y sustituimos (26) en (20), tenemos que:

$$\phi(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{\frac{1}{4}}} \left[ c_a e^{-\beta(z)} + 2c_b e^{+\beta(z)} \right] \quad (27)$$



Al igual que en el caso anterior, (27) tiene que ser la misma función de onda  $\psi(x)$  en (17) para  $x > a$  y cerca del punto de retorno, por lo que:

$$k(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)} \approx (2mV'\hbar)^{\frac{1}{3}}(z)^{\frac{1}{2}}; \frac{1}{\hbar} \int_a^x k(x')dx \approx \frac{2}{3}(z)^{\frac{3}{2}} = \beta(z) \quad (28)$$

Sustituyendo el valor de  $k(x)$  en (17) tenemos que:

$$\psi(z) = \frac{1}{(2mV'\hbar)^{\frac{1}{6}}(z)^{\frac{1}{4}}} [c_3 e^{-\beta(z)} + c_4 e^{\beta(z)}] \quad (29)$$

Vemos que los argumentos de las exponenciales coinciden en (27) y (29) y los coeficientes deben cumplir las relaciones:

$$\begin{aligned} \frac{c_a}{2\sqrt{\pi}} &= \frac{c_3}{(2mV'\hbar)^{\frac{1}{6}}} \\ \frac{c_b}{\sqrt{\pi}} &= \frac{c_4}{(2mV'\hbar)^{\frac{1}{6}}} \end{aligned} \quad (30)$$

De (25) y (30) podemos despejar las relaciones entre los coeficientes de las soluciones oscilatorias, que corresponden a  $x < a$  y los coeficientes de las exponenciales reales, que son las soluciones en la región clásicamente prohibida, es decir,  $x > a$  :

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -i/2 \\ 1 & i/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} \quad (31)$$

Las ecuaciones en (31) son el primer par de fórmulas de conexión, que no son más que las relaciones que tiene que haber entre las soluciones a la izquierda y a la derecha de un punto de retorno clásico de la forma presentada en la figura 2 para que (17) tienda a la forma asintótica de las funciones de Airy en las cercanías del punto de retorno, donde ellas son las soluciones de la ecuación de Schrödinger. Además, no hay que olvidar que en (17) hay que añadir un desfase de  $\frac{\pi}{4}$  a la función de onda de la región  $x < a$  tal y como obtuvimos anteriormente.

Las primeras fórmulas de conexión se han obtenido para el caso de un potencial con un punto de retorno del tipo mostrado en la figura 2 pero podríamos considerar también un punto de retorno como el de la figura 4. En este último caso, tendríamos que la función de onda WKB a ambos lados del punto de retorno  $x = b$  es:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_r e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'} + c_l e^{-\frac{i}{\hbar} \int_b^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'} \right) & x > b \\ \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_d e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'} + c_g e^{+\frac{1}{\hbar} \int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'} \right) & x < b \end{cases} \quad (32)$$

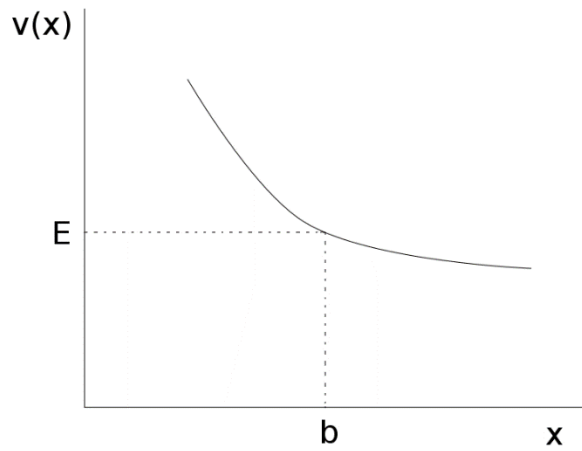


Figura 4. Potencial descendente con un punto de retorno en  $x = b$ .

En el caso de la figura 4 procederíamos exactamente de la misma forma que en el primer caso, desarrollando el potencial hasta el término lineal con  $x$  e involucrando los desarrollos asintóticos de las funciones de Airy, tal y como hicimos en el caso anterior, para conectarlas con la forma de la función de onda (32) en las regiones a la izquierda y a la derecha del punto de retorno. De esta manera, se obtiene, en analogía con el caso anterior, que hay que añadirle un desfase de  $-\frac{\pi}{4}$  a la función de onda (32) en la región  $x > b$  para que conecte correctamente con las funciones de Airy y, además, se obtienen el segundo par de fórmulas de conexión que relacionan los cuatro coeficientes que aparecen en (32):

$$\begin{pmatrix} c_g \\ c_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_r \\ c_l \end{pmatrix} \quad (33)$$

Hay que destacar que la obtención de las llamadas fórmulas de conexión no es única, ya que a lo largo de la historia distintos autores han propuesto métodos variados para obtenerlas, por ejemplo, se puede pasar de la zona clásicamente permitida a la prohibida mediante un arco en el plano complejo que rodee el punto de retorno<sup>8</sup> obteniendo resultados análogos a los que hemos obtenido en nuestro caso.

#### IV. La condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld

Antes del desarrollo de lo que ahora conocemos como la mecánica cuántica moderna, existía una teoría conocida hoy en día como teoría cuántica antigua que se basaba en ciertos postulados heurísticos y cuyo máximo exponente fue la teoría atómica de Bohr que postulaba a los electrones como partículas que describían órbitas alrededor del núcleo, pero no todas las órbitas eran permitidas, solo lo eran aquellas que obedecían la condición de Bohr-Sommerfeld. En su momento el modelo fue ampliamente aceptado ya que conseguía dar una explicación teórica de la fórmula de Rydberg, sin embargo, no podía dar explicación de la estructura fina de las líneas espectrales. Hoy en día se sabe que esta teoría no es más que las primeras correcciones cuánticas de la mecánica clásica, y dado que el centro de nuestro estudio hasta ahora ha sido precisamente una aproximación semiclásica de la mecánica cuántica, vamos a deducir la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld a partir de los resultados de los apartados anteriores.

Hasta ahora hemos obtenido que la función de onda en la zona clásicamente permitida dentro de la aproximación WKB tiene la forma:

$$\psi(x) = \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( A e^{i \left( \frac{\int_a^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'}{\hbar} \pm \frac{\pi}{4} \right)} + B e^{-i \left( \frac{\int_a^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'}{\hbar} \pm \frac{\pi}{4} \right)} \right) \quad (34. a)$$

Donde el signo + corresponde al caso donde la zona clásicamente permitida esté a la izquierda del punto de retorno ( $x = a$ ) y el signo - al caso en el que la zona clásicamente permitida esté a la derecha del punto de retorno. En cuanto a la zona clásicamente prohibida, hemos obtenido que la función de onda es:

$$\psi(x) = \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} \left( A' e^{\frac{\int_a^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'}{\hbar}} + B' e^{-\frac{\int_a^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'}{\hbar}} \right) \quad (34. b)$$

Las relaciones entre los distintos coeficientes de las exponenciales en los casos expuestos en las figuras 2 y 4 vienen dados por las relaciones de conexión (31) y (33).

Vamos a considerar ahora el caso de una partícula ligada moviéndose en un potencial que tiene la forma presentada en la figura 5. En él, para una energía de la partícula  $E$ , hay dos puntos de retorno clásicos en  $x = a$  y en  $x = b$  y, además, dado que consideramos que el potencial tiende a infinito a la izquierda de  $a$  y la derecha de  $b$ , no es posible que se dé efecto túnel. Designadas las tres distintas regiones, escribimos la función de onda de la partícula en cada una de ellas:

$$\psi_I = \frac{1}{k_I(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_g e^{\frac{\int_a^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'}{\hbar}} + c_d e^{-\frac{\int_a^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'}{\hbar}} \right) \quad x < a \quad (35)$$

$$\psi_{II} = \begin{cases} \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_r e^{i \left( \frac{\int_a^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right)} + c_l e^{-i \left( \frac{\int_a^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right)} \right) \\ \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_1 e^{i \left( \frac{\int_b^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right)} + c_2 e^{-i \left( \frac{\int_b^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx'}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right)} \right) \end{cases} \quad a < x < b \quad (36)$$

$$\psi_{III} = \frac{1}{k_{III}(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_4 e^{\frac{\int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'}{\hbar}} + c_3 e^{-\frac{\int_b^x \sqrt{2m(V(x')-E)} dx'}{\hbar}} \right) \quad x > b \quad (37)$$

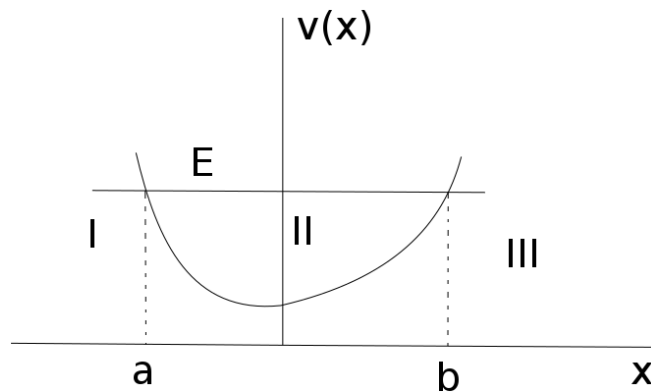


Figura 5. Pozo de potencial genérico con dos puntos de retorno

En la región II, en principio, podemos escribir dos expresiones distintas para la función de onda que se diferencia en los límites de integración de las exponenciales, uno para un

punto de retorno y otro para el otro punto, así como los correspondientes factores  $\pm \frac{\pi}{4}$ , positivo para el caso del punto de retorno  $x = b$  en el que el potencial es ascendente y negativo en otro caso, tal y como habíamos obtenido en el apartado de las fórmulas de conexión.

Dado que el potencial se va a infinito a la izquierda del primer punto de retorno y a la derecha del segundo, debemos exigir que  $c_4 = c_d = 0$  ya que sus correspondientes exponenciales divergen para  $x \rightarrow \pm\infty$  respectivamente. Con estas condiciones y usando las relaciones de conexión (31) y (33) obtenemos que necesariamente  $c_r = c_l = c_g$  y  $c_1 = c_2 = c_3$ , por lo que la función de onda en la región II se reduce a:

$$\psi_{II} = \frac{2c_g}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad (38)$$

Vamos a ver bajo qué condiciones se cumple la igualdad entre los dos miembros de la ecuación (38). Empezamos trabajando con el término más a la derecha, al que cambiamos el signo del argumento del coseno basándonos en que es una función par y alteramos los límites de integración de forma que podemos escribir  $-\int_b^x = \int_a^b - \int_a^x$ . Además, ponemos  $-\frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}$  por lo que:

$$\begin{aligned} \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) &= \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2}\right) = \\ &= \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \operatorname{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que  $\operatorname{sen}(a - b) = \operatorname{sen}(a) \cos(b) - \cos(a) \operatorname{sen}(b)$ , tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) &= \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left[ \operatorname{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx'\right) \cos\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \right] - \\ &\quad - \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left[ \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx'\right) \operatorname{sen}\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \right] \end{aligned}$$

Si  $\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' = (2n + 1) \frac{\pi}{2}$  con  $n = 0, 1, 2, 3 \dots$  entonces  $\cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx'\right) = 0$  y  $\text{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx'\right) = (-1)^n$ . Teniendo en cuenta de nuevo la paridad del coseno, tenemos que:

$$\frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \text{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2c_3}{p(x)^{\frac{1}{2}}} (-1)^n \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right)$$

Por tanto, la igualdad en (38) se cumple si  $c_g = (-1)^n c_3$  y además si:

$$\int_a^b p(x') dx' = (2n + 1) \frac{\hbar\pi}{2} \rightarrow \oint p(x') dx' = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (39)$$

La ecuación (39) es la denominada condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld, donde la integral se extiende a un periodo completo del movimiento semiclásico que describe la partícula entre los dos puntos de retorno. Con esta condición, es posible obtener los niveles de energía  $E(n)$  dentro de la aproximación semiclásica, lo que en nuestro caso quiere decir que es válida para  $n$  suficientemente grande. En muchos casos, la relación  $E(n)$  dada por (39) no coincidirá con la solución obtenida resolviendo la ecuación de Schrödinger exacta, pero en otros casos sí. Para ilustrar esto, vamos a tomar el ejemplo de un pozo con la forma de un oscilador armónico, por lo que  $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

y los puntos de retorno serán  $a = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$  y  $b = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ . Según (39) tenemos que:

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

Con el cambio  $\frac{m\omega^2 x^2}{2E} = \text{sen}(\xi)^2$  conseguimos reducir la ecuación a:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' = \frac{2E}{\hbar\omega} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos(\xi)^2 d\xi = \frac{E\pi}{\hbar\omega}$$

Según (39):

$$\frac{E\pi}{\hbar\omega} = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \rightarrow E(n) = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (40)$$

Sabemos de antemano el resultado exacto de las energías de una partícula en un potencial de oscilador armónico y coincide con el obtenido en (40). Además, dado que sabemos que la función de onda viene dada por (35), (36) y (37), es posible obtener que para el caso del oscilador armónico dichas formas de la función de onda coinciden con la solución exacta dada en función de los polinomios de Hermite salvo en los puntos en los que la aproximación falla, es decir, en los puntos de retorno<sup>9</sup>.



## v. Efecto túnel cuántico para diferentes geometrías

Con el desarrollo de la aproximación WKB tenemos la herramienta necesaria para empezar el estudio del efecto que nos ocupa en este trabajo, el efecto túnel cuántico. Para ello, vamos a empezar considerando un potencial como el de la figura 6, con dos puntos de retorno en  $x = a$  y  $x = b$  y con una función de onda WKB para las tres regiones dadas por:

$$\psi_I(x) = \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_1 e^{i \left( \frac{\int_a^x p(x') dx'}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right)} + c_2 e^{-i \left( \frac{\int_a^x p(x') dx'}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right)} \right) \quad x < a \quad (41)$$

$$\psi_{II}(x) = \begin{cases} \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_4 e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^x k(x') dx'} + c_3 e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x k(x') dx'} \right) \\ \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_g e^{\frac{1}{\hbar} \int_b^x k(x') dx'} + c_d e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x k(x') dx'} \right) \end{cases} \quad a < x < b \quad (42)$$

$$\psi_{III}(x') = \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} \left( c_r e^{i \left( \frac{\int_b^x p(x') dx'}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right)} + c_l e^{-i \left( \frac{\int_b^x p(x') dx'}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right)} \right) \quad x > b \quad (43)$$

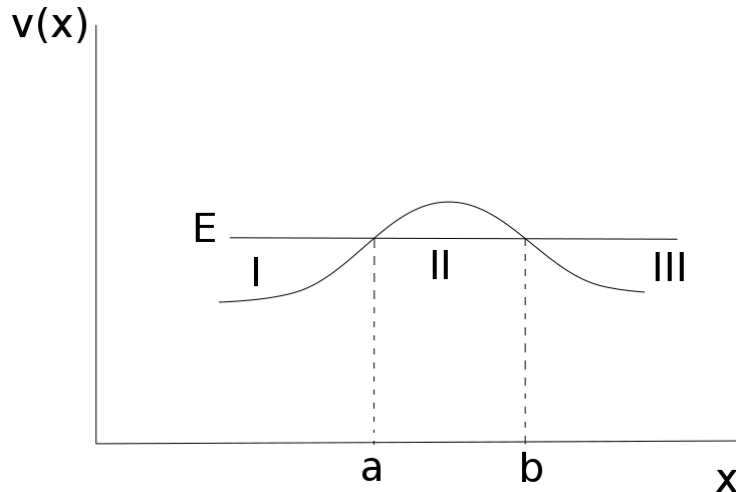


Figura 6. Potencial genérico  $v(x)$  con dos puntos de retorno. Dicho potencial además de tener que cumplir la condición de validez de la aproximación WKB tiene que presentar un buen comportamiento, es decir, tiene que ser continuo..

Dado que en la región III solo hay onda transmitida  $c_l = 0$  y además dentro de la zona prohibida podemos poner  $\int_a^x k(x')dx' = \int_a^b k(x')dx' + \int_b^x k(x')dx'$  por lo que podemos encontrar un par de relaciones entre los coeficientes de esta zona:

$$c_g = c_4 e^{\frac{\int_a^b k(x')dx'}{\hbar}}; c_d = c_3 e^{-\frac{\int_a^b k(x')dx'}{\hbar}} \quad (44)$$

A partir de las relaciones de conexión (31) y (33), tenemos que:

$$c_1 = c_3 - \frac{i}{2} c_4; c_g = \frac{1}{2} c_r; c_d = -i c_r \quad (45)$$

Sustituimos  $c_3$  y  $c_4$  en (45) usando las relaciones (44) y a su vez ponemos  $c_g$  y  $c_d$  en función de  $c_r$ , por lo que al final nos queda:

$$c_1 = -\frac{i}{4} c_r \left[ 4e^{\frac{\int_a^b k(x')dx'}{\hbar}} + e^{-\frac{\int_a^b k(x')dx'}{\hbar}} \right] \quad (46)$$

Por definición, el coeficiente de transmisión  $T$ , que representa la probabilidad de encontrar una partícula en la región  $x > b$  cuando inicialmente incide desde la región  $x < a$  según la figura 6, es:

$$T = \frac{|c_r|^2}{|c_1|^2} \quad (47)$$

Tomando módulo al cuadrado en (46), podemos obtener la expresión del coeficiente de transmisión  $T$ :

$$T = \frac{16}{16e^{\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x')dx'} + e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x')dx'} + 8} \quad (48)$$

Utilizando la otra fórmula de conexión, podemos relacionar  $c_2$  con  $c_3$  y  $c_4$  y junto con (44) y (45) obtener:

$$c_2 = c_3 + \frac{i}{2}c_4 = -\frac{ic_r}{4} \left[ 4e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'} - e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'} \right] \quad (49)$$

De forma análoga a la definición del coeficiente de transmisión, definimos el coeficiente de reflexión  $R$  como:

$$R = \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2} \quad (50)$$

La ecuación (46) junto con la ecuación (49) nos permite obtener el coeficiente de reflexión en el caso presentado en la figura 6:

$$R = \frac{16e^{\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'} + e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'} - 8}{16e^{\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'} + e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'} + 8} \quad (51)$$

Una sencilla suma nos permite confirmar que ambos coeficientes obtenidos respetan la conservación de la corriente de probabilidad cumpliéndose que  $T + R = 1$ . Cabe destacar, además, que las expresiones de los coeficientes (48) y (51) valen para cualquier potencial que cumpla la condición de validez de la aproximación WKB y que tenga la forma presentada en la figura 6, es decir, con dos puntos de retorno. En la mayoría de los casos prácticos en los que es posible emplear la aproximación, tenemos que el exponente de las exponenciales que aparecen en (48) son grandes haciendo que  $T \sim e^{\frac{2}{\hbar} \int_a^b k(x') dx'}$ , aproximación ampliamente utilizada en la literatura solo válida para el caso de exponentes muy grandes, ya que en ese caso (51) se reduce a  $R = 1$  por lo que, en teoría,  $T$  debería ser cero para que se conserve la corriente de probabilidad, pero  $T$  no es estrictamente cero pero sí muy pequeño. El principal motivo por el que ocurre esto es por estar trabajando dentro de una aproximación, por lo que, dado que la conservación de la corriente de probabilidad es necesaria, en el caso de exponenciales grandes, la aproximación será mejor cuanto mayor sea el exponente y por tanto más cercano a cero esté el coeficiente de transmisión. Un ejemplo de potencial analítico con dos puntos de retorno viene dado por (52) y un caso particular representado en la figura 7:

$$V(x) = v_o \left( 1 - \frac{x^n}{d^n} \right) \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (52)$$

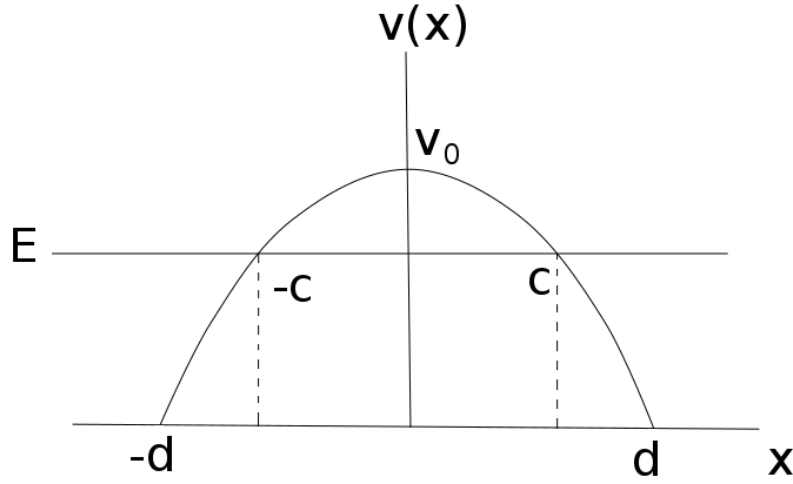


Figura 7. Potencial cuadrático ( $n=2$ ) con dos puntos de retorno.

El cálculo del coeficiente de transmisión (48) se reduce al cálculo de la integral  $\theta = \frac{1}{\hbar} \int_{-c}^c \sqrt{2m(V(x) - E)} dx$ . Introduciendo la forma del potencial (52) tenemos que:

$$\theta = \frac{1}{\hbar} \int_{-c}^c \sqrt{2m(V(x) - E)} dx = \sqrt{\frac{2m(v_0 - E)}{\hbar^2}} \int_{-c}^c \sqrt{1 - \frac{v_0 x^n}{d^n(v_0 - E)}} dx$$

Sabemos que el potencial es una función par, dado que  $n$  es par, y además teniendo en cuenta los puntos de corte vienen dados por  $c = d \sqrt[n]{1 - \frac{E}{v_0}}$  y haciendo el cambio de variable  $x = d \sqrt[n]{\frac{v_0 - E}{v_0}} z$ , entonces:

$$\theta_n = \sqrt{\frac{8md^2}{\hbar^2}} \left( \frac{(v_0 - E)^{\frac{n+2}{2}}}{v_0} \right)^{\frac{1}{n}} \int_0^1 \sqrt{(1 - z^n)} dz = \sqrt{\frac{8m\pi d^2}{\hbar^2}} \left( \frac{(v_0 - E)^{\frac{n+2}{2}}}{v_0} \right)^{\frac{1}{n}} \frac{\Gamma(\frac{1}{n})}{(n+2)\Gamma(\frac{n+2}{2n})} \quad (53)$$

A continuación, utilizamos un programa informático para representar los coeficientes dados en (48) y (51) para potenciales de la forma (52) para distintos valores de  $n$ . Concretamente vamos a utilizar el código de MATLAB expuesto en el anexo I para representar los coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial armónico ( $n=2$ ) y cuártico ( $n=4$ ) frente a  $E$  y obtener los resultados de la figura 8:

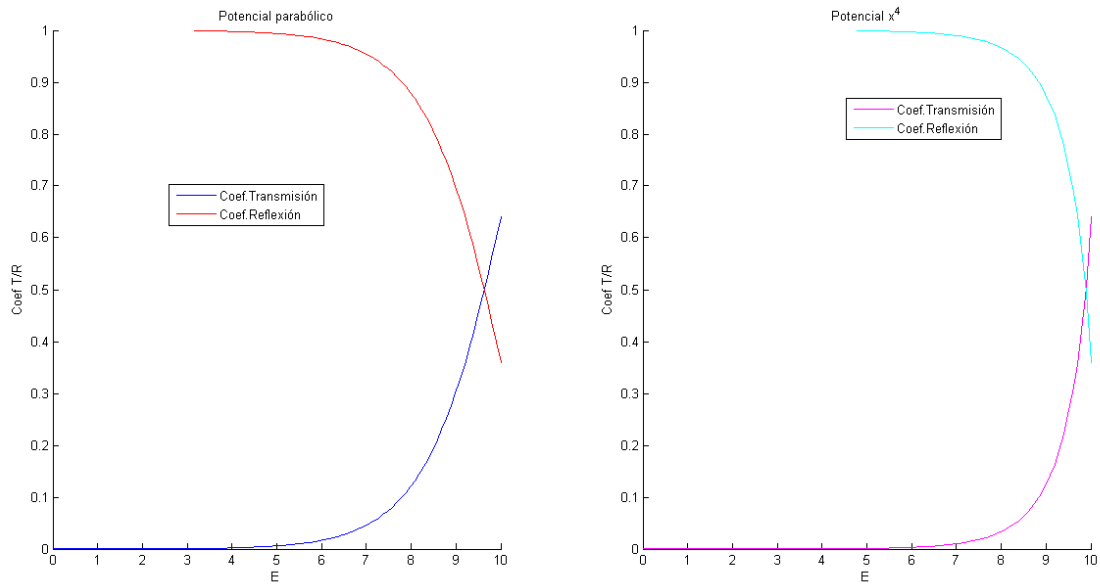


Figura 8. Coeficientes de transmisión y reflexión de un electrón para un par de potenciales en función de  $E$ . La altura  $v_0$  se ha tomado como  $10 \text{ eV}$  y  $d=2 \text{ \AA}$ .

A parte de esto, también podemos evaluar la dependencia de los coeficientes con la distancia  $d$ . En la figura 9 representamos el coeficiente de transmisión para el potencial cuadrático frente a  $E$  para distintos valores de  $d$ :

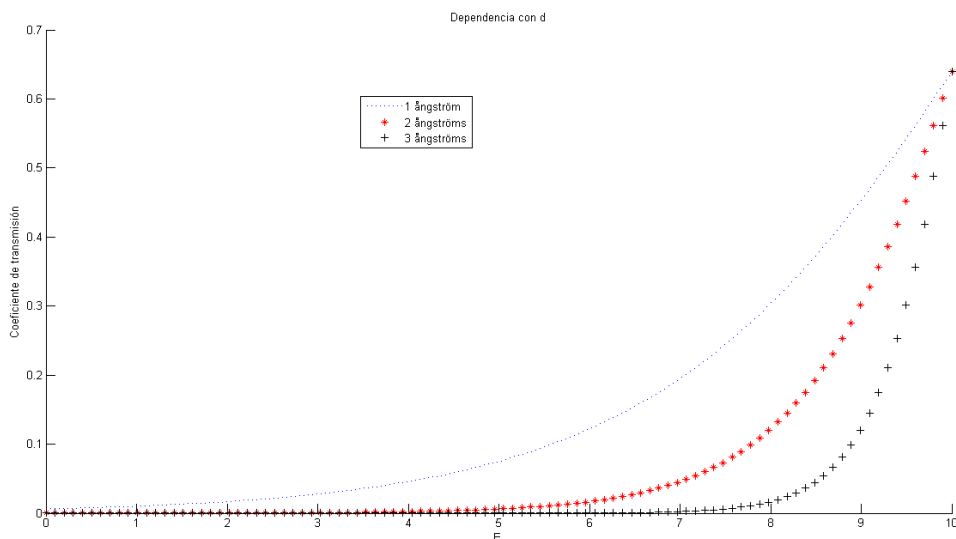


Figura 9. Coeficiente de transmisión de un electrón a través de una barrera cuadrática de altura  $v_0 = 10 \text{ eV}$  frente a  $E$  para distintos valores de  $d$ .

En la figura 10 podemos ver la dependencia del coeficiente de transmisión con la altura de la barrera  $v_0$ , que tal como cabría esperar, para una determinada energía  $E$ , el

coeficiente de transmisión es menor para alturas de la barrera mayores, ya que la partícula tiene que penetrar una distancia mayor dentro de la zona clásicamente prohibida a medida que aumenta la altura de la barrera.

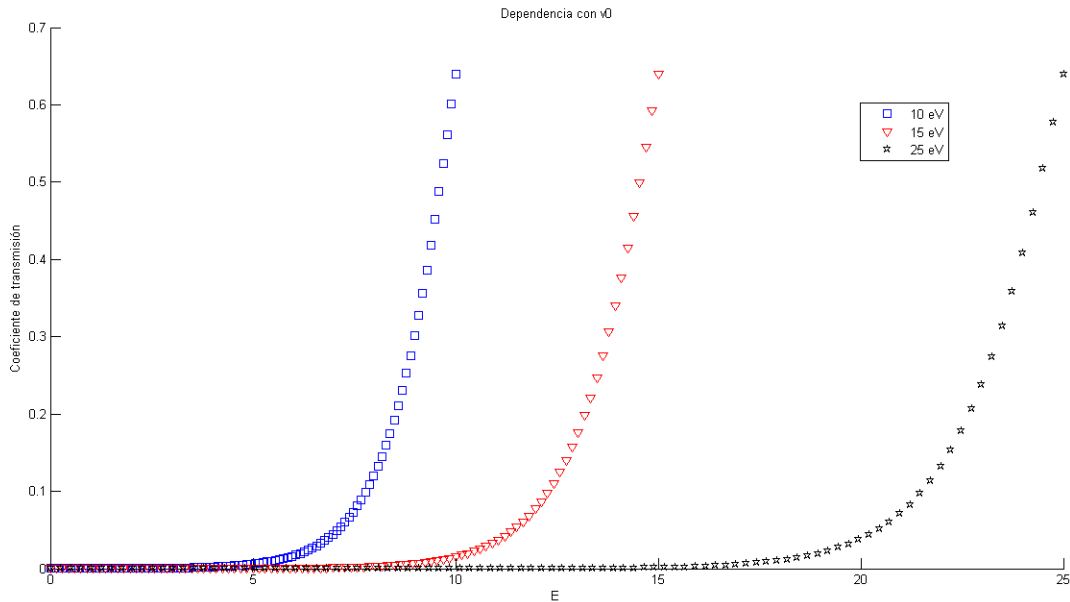
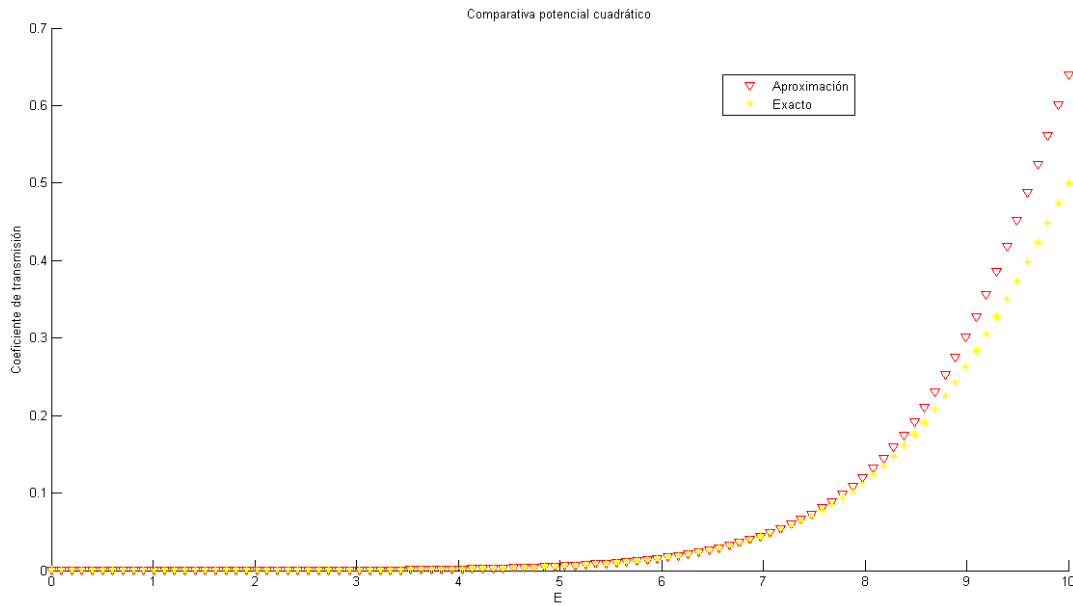


Figura 10. Dependencia del coeficiente de transmisión de un electrón con la altura de la barrera para el potencial cuadrático con  $d=2 \text{ \AA}$ .

En las figuras 8,9 y 10 hemos utilizado las expresiones (48) y (51) de los coeficientes que en principio cumplen que  $R + T = 1$  para cualquier energía E de la partícula incidente, aunque sabemos que la aproximación WKB solo es válida para energías mucho menores que el máximo del potencial por lo que los valores de los coeficientes para valores de la energía próximos al máximo del potencial no se ajustan a la realidad, ya que en estos casos la aproximación WKB falla.

Dentro de la aproximación, es posible obtener un coeficiente de transmisión válido para cualquier energía, incluidas las energías cercanas al máximo del potencial, a partir de cálculos más elaborados<sup>10, 11</sup>. Con esto, realizamos una comparativa del coeficiente de transmisión exacto y el obtenido en nuestro caso para la barrera parabólica cuyos resultados podemos ver en la figura 11:



*Figura 11. Comparativa entre el coeficiente de transmisión para una barrera parabólica utilizando la expresión en (48) y la expresión válida para energías cerca del máximo obtenida con  $d=2 \text{ \AA}$  y  $V_0=10 \text{ eV}$ .*

Tal y como se ha dicho, la expresión que se ha obtenido para el coeficiente de transmisión es válida para energías alejadas del máximo del potencial, resultado que concuerda con el obtenido en la figura 11, en la cual a partir de un valor de la energía próxima al máximo del potencial los valores del coeficiente de transmisión se alejan de los valores exactos.

Hasta ahora, hemos trabajado, tanto en la deducción de la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld como en la deducción de (48), con potenciales con dos únicos puntos de retorno clásicos, sin embargo, es posible generalizar los cálculos para potenciales con un número mayor de puntos de retorno, en particular podemos estudiar un potencial de la forma dado en la figura 12:

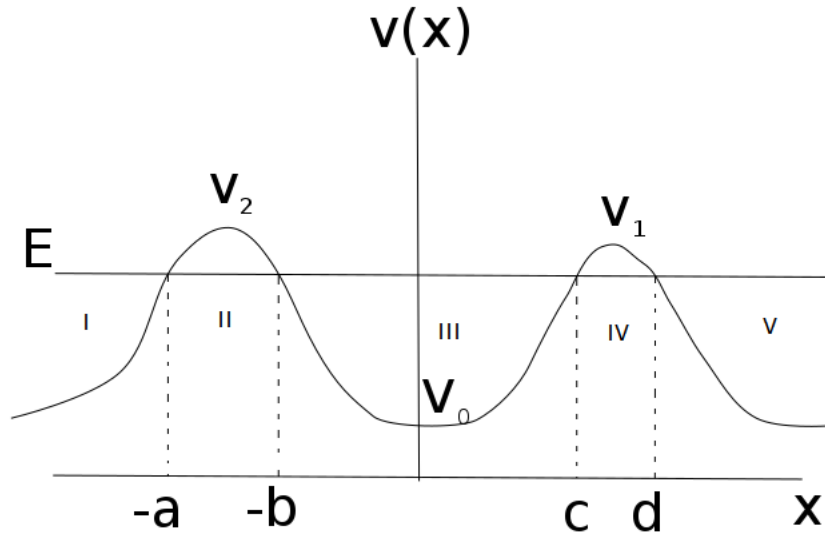


Figura 12. Potencial genérico con cuatro puntos de retorno para energías comprendidas entre  $v_0$  y  $v_1$ , intervalo en el que hay 4 puntos de retorno.

Al igual que en el caso de dos puntos de retorno, empezamos planteando la función de onda en las distintas regiones:

$$\psi_I = \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_1 e^{i(l_1 + \frac{\pi}{4})} + c_2 e^{-i(l_1 + \frac{\pi}{4})}] \quad (54)$$

$$\psi_{II} = \begin{cases} \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_4 e^{l_2} + c_3 e^{-l_2}] \\ \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_g e^{l_3} + c_d e^{-l_3}] \end{cases} \quad (55)$$

$$\psi_{III} = \begin{cases} \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_r e^{i(l_4 - \frac{\pi}{4})} + c_l e^{-i(l_4 - \frac{\pi}{4})}] \\ \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_1' e^{i(l_5 + \frac{\pi}{4})} + c_2' e^{-i(l_5 + \frac{\pi}{4})}] \end{cases} \quad (56)$$

$$\psi_{IV} = \begin{cases} \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_4' e^{l_6} + c_3' e^{-l_6}] \\ \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_g' e^{l_7} + c_d' e^{-l_7}] \end{cases} \quad (57)$$

$$\psi_V = \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_r' e^{i(l_8 - \frac{\pi}{4})} + c_l' e^{-i(l_8 - \frac{\pi}{4})}] \quad (58)$$



Donde sabemos las relaciones entre los distintos coeficientes dadas por las relaciones de conexión (31) y (33) y además las integrales definidas en las anteriores expresiones son:

$$I_1 = \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x') dx'; I_2 = \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x k(x') dx'; I_3 = \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x k(x') dx'; I_4 = \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^x p(x') dx';$$

$$I_5 = \frac{1}{\hbar} \int_c^x p(x') dx'; I_6 = \frac{1}{\hbar} \int_c^x k(x') dx'; I_7 = \frac{1}{\hbar} \int_d^x k(x') dx'; I_8 = \frac{1}{\hbar} \int_d^x p(x') dx'$$

Para las regiones en las que se pueden definir dos funciones de onda, es decir, en las regiones II, III y IV, podemos encontrar relaciones entre los coeficientes de dichas regiones haciendo cambios convenientes en los límites de integración de los argumentos de las exponenciales que forman las distintas funciones de onda de estas regiones, al igual que hicimos en el caso con dos puntos de retorno. Teniendo en cuenta esto último, tenemos que:

$$I_6 = \mu + I_7; I_4 = \eta + I_5; I_2 = \Omega + I_3 \quad (59)$$

$$\mu = \frac{1}{\hbar} \int_c^d k(x') dx'; \eta = \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^c p(x') dx'; \Omega = \frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-b} k(x') dx' \quad (60)$$

Con (59) encontramos las siguientes relaciones entre los coeficientes de las regiones II, III y IV:

$$c_g = c_4 e^{\Omega}; c_d = c_3 e^{-\Omega}; c'_1 = c_r e^{i(\eta - \frac{\pi}{2})}; c'_2 = c_l e^{-i(\eta - \frac{\pi}{2})}; c'_3 = c'_d e^{\mu}; c'_4 = c'_g e^{-\mu} \quad (61)$$

Dado que en la región V no hay onda viajera hacia la izquierda, tenemos que  $c'_l = 0$ . Esto junto con una de las fórmulas de conexión hacen que:

$$\begin{pmatrix} c'_g \\ c'_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_r \\ c'_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_r \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow c'_g = \frac{1}{2} c'_r; c'_d = -i c'_r \quad (62)$$

Sustituimos los resultados de (62) en sus correspondientes expresiones en (61) y obtenemos:

$$c'_4 = \frac{c'_r}{2} e^{-\mu}; c'_3 = -i c'_r e^{\mu} \quad (63)$$

Utilizando la otra fórmula de conexión y el resultado (63) tenemos que:

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -i/2 \\ 1 & i/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_3 \\ c'_4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{aligned} c'_1 &= c'_3 - \frac{i}{2} c'_4 = -\frac{i}{4} c'_r (4e^\mu + e^{-\mu}) \\ c'_2 &= c'_3 + \frac{i}{2} c'_4 = -\frac{i}{4} c'_r (4e^\mu - e^{-\mu}) \end{aligned} \quad (64)$$

Sustituimos las expresiones de  $c'_1$  y  $c'_2$  dadas en (64) en sus correspondientes ecuaciones dadas en (61), por tanto:

$$c_r = -\frac{i}{4} c'_r (4e^\mu + e^{-\mu}) e^{-i(\eta - \frac{\pi}{2})}; \quad c_l = -\frac{i}{4} c'_r (4e^\mu - e^{-\mu}) e^{i(\eta - \frac{\pi}{2})} \quad (65)$$

Usando de nuevo la primera fórmula de conexión y teniendo en cuenta (65):

$$\begin{aligned} c_g &= \frac{1}{2} (c_r + c_l) = -\frac{i}{8} c'_r \left[ (4e^\mu + e^{-\mu}) e^{-i(\eta - \frac{\pi}{2})} + (4e^\mu - e^{-\mu}) e^{i(\eta - \frac{\pi}{2})} \right] \\ c_d &= -i(c_r - c_l) = \frac{1}{4} c'_r \left[ -(4e^\mu + e^{-\mu}) e^{-i(\eta - \frac{\pi}{2})} + (4e^\mu - e^{-\mu}) e^{i(\eta - \frac{\pi}{2})} \right] \end{aligned}$$

Reagrupando los términos comunes reducimos las expresiones a:

$$c_g = -\frac{i}{4} c'_r \left[ 4e^\mu \cos\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) - i \operatorname{sen}\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) e^{-\mu} \right] \quad (66)$$

$$c_d = \frac{1}{2} c'_r \left[ 4ie^\mu \operatorname{sen}\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) - \cos\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) e^{-\mu} \right] \quad (67)$$

Sustituimos los resultados (66) y (67) en su lugar correspondiente en las expresiones dadas en (61):

$$c_4 = -\frac{i}{4} c'_r \left[ 4e^\mu \cos\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) - i \operatorname{sen}\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) e^{-\mu} \right] e^{-\Omega} \quad (68)$$

$$c_3 = \frac{1}{2} c'_r \left[ 4ie^\mu \operatorname{sen}\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) - \cos\left(\eta - \frac{\pi}{2}\right) e^{-\mu} \right] e^{\Omega} \quad (69)$$

Usando de nuevo las fórmulas de conexión junto con (68) y (69) tenemos que:

$$c_1 = c_3 - \frac{i}{2}c_4 = c'_r \left( i \operatorname{sen} \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \left[ 2e^{\mu+\Omega} + \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right] - \cos \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \cosh(\Omega - \mu) \right) \quad (70)$$

$$c_2 = c_3 + \frac{i}{2}c_4 = c'_r \left( i \operatorname{sen} \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \left[ 2e^{\mu+\Omega} - \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right] - \cos \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) \operatorname{senh}(\Omega - \mu) \right) \quad (71)$$

Teniendo en cuenta que  $\operatorname{sen} \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) = -\cos(\eta)$  y  $\cos \left( \eta - \frac{\pi}{2} \right) = \operatorname{sen}(\eta)$  entonces:

$$\frac{c'_r}{c_1} = \frac{-1}{\left( i \cos(\eta) \left[ 2e^{\mu+\Omega} + \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right] + \operatorname{sen}(\eta) \cosh(\Omega - \mu) \right)} \quad (72)$$

$$\frac{c'_r}{c_2} = \frac{-1}{\left( i \cos(\eta) \left[ 2e^{\mu+\Omega} - \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right] + \operatorname{sen}(\eta) \operatorname{senh}(\Omega - \mu) \right)} \quad (73)$$

A partir de (72) y (73) podemos encontrar las expresiones de los coeficientes de transmisión y reflexión:

$$T = \frac{|c'_r|^2}{|c_1|^2} = \frac{1}{\cos(\eta)^2 \left( 2e^{(\mu+\Omega)} + \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right)^2 + \operatorname{sen}(\eta)^2 \cosh(\Omega - \mu)^2} \quad (74)$$

$$R = \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2} = \frac{\cos(\eta)^2 \left( 2e^{(\mu+\Omega)} - \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right)^2 + \operatorname{sen}(\eta)^2 \operatorname{senh}(\Omega - \mu)^2}{\cos(\eta)^2 \left( 2e^{(\mu+\Omega)} + \frac{1}{8}e^{-(\Omega+\mu)} \right)^2 + \operatorname{sen}(\eta)^2 \cosh(\Omega - \mu)^2} \quad (75)$$

Es posible simplificar las expresiones (74) y (75) considerando el caso particular en el que el potencial de la figura 12 es simétrico, por lo que  $\mu = \Omega = \epsilon$  y por tanto  $\cosh(\Omega - \mu) = 1$  y  $\operatorname{senh}(\Omega - \mu) = 0$ , por lo que las expresiones se reducen a:

$$T = \frac{1}{\cos(\eta)^2 \left( 2e^{2\epsilon} + \frac{1}{8}e^{-2\epsilon} \right)^2 + \operatorname{sen}(\eta)^2} \quad (76)$$

$$R = \frac{\cos(\eta)^2 \left( 2e^{2\epsilon} - \frac{1}{8}e^{-2\epsilon} \right)^2}{\cos(\eta)^2 \left( 2e^{2\epsilon} + \frac{1}{8}e^{-2\epsilon} \right)^2 + \operatorname{sen}(\eta)^2} \quad (77)$$

De las ecuaciones obtenidas podemos ver que  $T + R = 1$  y que además hay determinados valores de la energía incidente para los cuales  $T = 1$  y  $R = 0$ . Dichas energías vienen dadas por la condición:

$$\eta = \frac{1}{\hbar} \int_{-b}^c p(x') dx' = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \quad (78)$$

La ecuación (78) es la condición de Bohr-Sommerfeld que nos da las energías del pozo de la figura 12, es decir, que la barrera doble de potencial es totalmente transparente para la partícula incidente si esta lleva exactamente la energía correspondiente a uno de los autovalores del pozo de potencial. Un ejemplo de potencial de la forma presentada en la figura 12 es uno de la forma  $V(x) = Ax^2 + Bx^4$  con los coeficientes elegidos de manera adecuada. Este tipo de potencial ya se ha estudiado<sup>12</sup>, tanto en caso de energías por debajo del máximo, donde es válida la aproximación WKB, como para energías mayores, comprobándose la aparición de resonancias para valores de la energía iguales a los autovalores del pozo.

## VI. Estados ligados de un pozo doble de potencial

Hasta ahora, hemos hecho un análisis más o menos profundo del efecto túnel cuántico bajo potenciales con diferentes formas, aunque, la aproximación WKB también nos da una herramienta para el cálculo de las energías de estados ligados para distintos potenciales. Por tanto, resulta interesante utilizar el método para dar una expresión aproximada de los estados ligados del potencial presentado en la figura 13, donde supondremos que el potencial tiende a  $\infty$  a medida que  $x \rightarrow \pm\infty$  y además supondremos energías más bajas que el máximo central del potencial. Como en las demás ocasiones, comenzamos definiendo la función de onda WKB en las distintas regiones:

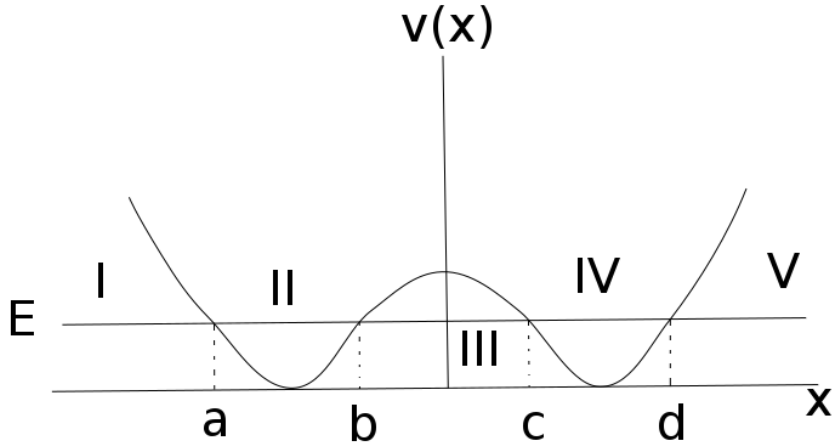


Figura 13. Pozo de potencial doble

$$\psi_I = \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_g e^{\alpha} + c_d e^{-\alpha}] \quad (79)$$

$$\psi_{II} = \begin{cases} \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_r e^{i(\beta - \frac{\pi}{4})} + c_l e^{-i(\beta - \frac{\pi}{4})}] \\ \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_1 e^{i(\gamma + \frac{\pi}{4})} + c_2 e^{-i(\gamma + \frac{\pi}{4})}] \end{cases} \quad (80)$$

$$\psi_{III} = \begin{cases} \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_4 e^{\Omega} + c_3 e^{-\Omega}] \\ \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_g' e^{\eta} + c_d' e^{-\eta}] \end{cases} \quad (81)$$

$$\psi_{IV} = \begin{cases} \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_r' e^{i(\xi - \frac{\pi}{4})} + c_l' e^{-i(\xi - \frac{\pi}{4})}] \\ \frac{1}{p(x)^{\frac{1}{2}}} [c_1' e^{i(\sigma + \frac{\pi}{4})} + c_2' e^{-i(\sigma + \frac{\pi}{4})}] \end{cases} \quad (82)$$

$$\psi_V = \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} [c_4' e^{\vartheta} + c_3' e^{-\vartheta}] \quad (83)$$

Donde de nuevo se han elegido los subíndices de los coeficientes de forma que nos sea sencillo utilizar las relaciones de conexión (31) y (33). Además, las distintas expresiones de las integrales en el argumento de las exponenciales son:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{\hbar} \int_a^x k(x') dx'; \quad \beta = \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'; \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx'; \quad \Omega = \frac{1}{\hbar} \int_b^x k(x') dx'; \\ \eta &= \frac{1}{\hbar} \int_c^x k(x') dx'; \quad \xi = \frac{1}{\hbar} \int_c^x p(x') dx'; \quad \vartheta = \frac{1}{\hbar} \int_d^x k(x') dx'; \quad \sigma = \frac{1}{\hbar} \int_d^x p(x') dx' \end{aligned}$$

Podemos encontrar una relación entre los coeficientes de la región IV de la siguiente forma:

$$\xi = \theta + \sigma; \quad \theta = \frac{1}{\hbar} \int_c^d p(x') dx' \quad (84)$$

$$c_r' e^{i(\theta - \frac{\pi}{2})} = c_1'; \quad c_l' e^{-i(\theta - \frac{\pi}{2})} = c_2' \quad (85)$$

Y de forma análoga podemos hacer lo mismo con los coeficientes de la zona II:

$$\beta = \tau + \gamma; \quad \tau = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' \quad (86)$$

$$c_r' e^{i(\tau - \frac{\pi}{2})} = c_1; \quad c_l' e^{-i(\tau - \frac{\pi}{2})} = c_2 \quad (87)$$

Dado que el potencial se va a infinito a la izquierda de  $x = a$  y a la derecha de  $x = d$ , exigimos que  $c_4' = c_d = 0$  que junto con una de las fórmulas de conexión hacen que  $c_1' =$

$c'_3 = c'_2 = A$  y  $c_r = c_l = c_g = B$ . Teniendo en cuenta las relaciones (85) y (87) y aplicando de nuevo las fórmulas de conexión tenemos que:

$$c'_g = A \cos\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right); c'_d = -2A \operatorname{sen}\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) \quad (88)$$

$$c_3 = B \cos\left(\tau - \frac{\pi}{2}\right); c_4 = -2B \operatorname{sen}\left(\tau - \frac{\pi}{2}\right) \quad (89)$$

Por otro lado, para la región III, podemos definir relaciones similares a (84) - (87) pero para esta región:

$$\Omega = \phi + \eta; \phi = \frac{1}{\hbar} \int_b^c k(x') dx' \quad (90)$$

$$c_4 e^\phi = c'_g; c_3 e^{-\phi} = c'_d \quad (91)$$

Sustituyendo (88) y (89) en (91) y teniendo en cuenta que  $\operatorname{sen}\left(x - \frac{\pi}{2}\right) = -\cos(x)$  y  $\cos\left(x - \frac{\pi}{2}\right) = \operatorname{sen}(x)$  tenemos un par de ecuaciones:

$$2B \cos(\tau) e^\phi = A \operatorname{sen}(\theta) \quad (92)$$

$$B \operatorname{sen}(\tau) e^{-\phi} = 2A \cos(\theta) \quad (93)$$

Dividiendo (92) y (93) entre sí obtenemos:

$$4e^{2\phi} = \tan(\tau) \tan(\theta) \quad (94)$$

La ecuación (94) es una ecuación trascendental cuyas soluciones nos dan los valores aproximados de la energía de los estados ligados del potencial de la figura 13. Considerando que dicho potencial es simétrico, entonces tenemos que  $\tau = \theta$  y la ecuación (94) se reduce a:

$$\pm 2e^\phi = \tan(\theta) \quad (95)$$

De la condición (94) aparecen dos condiciones distintas en (95) al considerar que el potencial es simétrico. Esto nos lleva a pensar que cada una de las dos condiciones nos da un valor distinto de la energía en función de la paridad de la función de onda, que, al ser el potencial simétrico, puede ser una función par o impar. Para comprobar esto, sabemos que la función de onda en la región III viene dada por (81) que teniendo en cuenta la relación (88) pasa a ser:

$$\psi_{III} = A \frac{1}{k(x)^{\frac{1}{2}}} \left( \text{sen}(\theta) e^{\frac{1}{\hbar} \int_c^x k(x') dx'} + 2 \cos(\theta) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_c^x k(x') dx'} \right) \quad (96)$$

Si consideramos la función de onda impar, entonces esta tiene que cumplir la condición  $\psi(0) = 0$ , la cual aplicada a (96) pasa a ser:

$$\tan(\theta) = -2e^{-\frac{2}{\hbar} \int_c^0 k(x') dx'} = -2e^{\frac{1}{\hbar} \int_b^c k(x')} = -2e^{\phi} \quad (97)$$

Donde hemos utilizado que el potencial  $v(x)$  es una función par según se puede observar en la figura 13. Si consideramos a continuación que la función de onda es una función par, entonces  $\psi'(0) = 0$ , que aplicada a (96) nos lleva a que:

$$\frac{A}{k(0)^{\frac{1}{2}}} \left[ -\frac{k'(0)}{2k(0)^{\frac{3}{4}}} \left( \text{sen}(\theta) e^{\frac{1}{\hbar} \int_c^0 k(x') dx'} + 2 \cos(\theta) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_c^0 k(x') dx'} \right) + \frac{k(0)}{\hbar} \left( \text{sen}(\theta) e^{\frac{1}{\hbar} \int_c^0 k(x') dx'} - 2 \cos(\theta) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_c^0 k(x') dx'} \right) \right] = 0$$

Donde hemos utilizado el primer teorema fundamental del cálculo y el hecho de que  $k(x)$  se anula en  $x = c$  porque es un punto de retorno. Dado que el potencial es una función par, entonces  $k(x)$  también lo es y por tanto  $k'(0) = 0$ , por lo que nos lleva a:

$$\tan(\theta) = 2e^{-\frac{2}{\hbar} \int_c^0 k(x') dx'} = 2e^{\frac{1}{\hbar} \int_b^c k(x')} = 2e^{\phi} \quad (98)$$

Hemos comprobado así que el signo + en la ecuación (95) nos da los autovalores de la función de onda par y el signo – los de la función de onda impar.

Sabemos de  $\phi$  se hace muy grande en el caso en el que la barrera de potencial sea muy alta en comparación con la energía de la partícula ya que en ese caso la probabilidad de que esta atraviese la barrera disminuye mucho y sabemos que el coeficiente de



transmisión va como  $T \sim e^{-2\phi}$ . Si suponemos que la barrera central de la figura 13 es muy alta en comparación con la energía de la partícula  $E$ , entonces de (95) deducimos que  $\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}$ , por lo que en este caso podemos escribir:

$$\theta = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi + \varepsilon; \quad |\varepsilon| \ll 1 \quad (99)$$

Donde  $n = 0, 1, 2 \dots$  y  $\varepsilon$  es un número muy pequeño. Sustituyendo (99) en (95) tenemos que:

$$\tan\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi + \varepsilon\right) = \pm 2e^\phi \quad (100)$$

Sabiendo que  $\tan(a + b) = \frac{\tan(a) + \tan(b)}{1 - \tan(a)\tan(b)}$  tenemos que:

$$\tan\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi + \varepsilon\right) = \lim_{x \rightarrow \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi} \frac{\tan(x) + \tan(\varepsilon)}{1 - \tan(\varepsilon)\tan(x)} = -\frac{1}{\tan(\varepsilon)} \quad (101)$$

Como  $\varepsilon \ll 1$ , entonces  $\tan(\varepsilon) \approx \varepsilon$ , que junto con (100) nos lleva a que:

$$\varepsilon \approx \mp \frac{e^{-\phi}}{2} \quad (102)$$

Sustituyendo (102) en (99) obtenemos:

$$\theta \approx \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \mp \frac{e^{-\phi}}{2} \quad (103)$$

Por tanto, la condición (103), aproximación de (95) en el caso de barrera alta, nos da las energías de los estados ligados del caso simétrico del potencial de la figura 13 dependiendo de si la función de onda es par (signo - en (103)) o impar (signo + en (103)). Como caso particular de potencial, podemos considerar el definido como:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(x+a)^2 & \text{si } x > 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (104)$$

Dado que en el apartado de la condición de Bohr-Sommerfeld estudiamos los estados ligados del oscilador armónico, sabemos que  $\theta = \frac{E\pi}{\hbar\omega}$  por la ecuación (40), por tanto (103) pasa a ser:

$$E_n \cong \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \mp \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\phi} \quad (105)$$

Según (105), si la barrera fuera impenetrable, entonces  $\phi \rightarrow \infty$  y por tanto los niveles de energía serían  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$  y estarían degenerados, ya que la partícula podría estar tanto en el pozo de la izquierda como en el de la derecha con la misma energía. Sin embargo, en cuanto la barrera se hace finita, la partícula puede atravesarla por efecto túnel y se rompe la degeneración haciendo que los estados pares estén más ligados que los estados impares según (105).

Hasta ahora, hemos trabajado en todo momento con estados estacionarios, es decir, independientes del tiempo, sin embargo, en este caso resulta interesante hacer un análisis, aunque sea poco profundo, de la situación dinámica. Empezamos considerando en el instante inicial que la partícula está en el pozo de la derecha, lo cual podemos escribirlo con la siguiente función de onda:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n^+ + \psi_n^-) \quad (106)$$

La función de onda en un instante  $t$  vendrá dada por:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_n^+ e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^+ t} + \psi_n^- e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^- t}\right) \quad (107)$$

Teniendo en cuenta las expresiones de los autovalores de las funciones de onda pares e impares dadas en (105) tenemos que:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})} \left( \psi_n^+ e^{\frac{i\omega}{2\pi} e^{-\phi} t} + \psi_n^- e^{-\frac{i\omega}{2\pi} e^{-\phi} t} \right) \quad (108)$$

Podemos calcular la densidad de probabilidad  $\rho(x, t)$  sabiendo que la función de onda  $\psi(x, t)$  es una función real:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} [|\psi_n^+|^2 + |\psi_n^-|^2] + \psi_n^+ \psi_n^- \cos\left(\frac{\omega}{\pi} e^{-\phi} t\right) \quad (109)$$

A partir del término oscilatorio de la ecuación (109), podemos tener una expresión del periodo de oscilación de la partícula, que va pasando a través de la barrera para estar en el pozo de la izquierda o en la derecha:

$$\frac{2\pi}{\tau} = \frac{\omega}{\pi} e^{-\phi} \rightarrow \tau = \frac{2\pi^2}{\omega} e^{\phi} \quad (110)$$

La dependencia con  $\phi$  de la ecuación (110) pone de manifiesto que, en el caso de una barrera infinita,  $\phi \rightarrow \infty$  y por tanto  $\tau \rightarrow \infty$ , es decir, la partícula no puede oscilar entre los pozos.

## VII. Conclusiones

Con el método WKB tenemos una valiosa herramienta para el cálculo, no solo de funciones de onda y niveles de energía aproximados, sino también para el estudio del efecto túnel cuántico dentro de su rango de aplicación, que cubre un importante espectro de energías. Tal y como se ha visto, es posible mejorar la aproximación ya sea escogiendo mejores formas de obtener las fórmulas de conexión o considerar más términos en el desarrollo de  $S(x)$ , aunque a partir del término incluido dentro de la aproximación usual los cálculos se complican mucho.

## VIII. Anexo I

En este anexo, incluimos el código de MATLAB utilizado para generar las figuras 8,9, 10 y 11. Empezamos por el código principal:

```
clc
clear all
v0=10; %eV
E=linspace(0,v0);
E1=linspace(0,v0+5);
E2=linspace(0,v0+15);
subplot(1,2,1)
hold on
xlabel 'E'
ylabel 'Coef T/R'
title 'Potencial parabólico'
plot(E,T1(E,2,2,10),'-b')
plot(E,R1(E,2,2,10),'-r')
legend('Coef.Transmisión','Coef.Reflexión')
hold off
subplot(1,2,2)
hold on
xlabel 'E'
ylabel 'Coef T/R'
title 'Potencial x^4'
plot(E,T1(E,4,2,10),'-m')
plot(E,R1(E,4,2,10),'-c')
legend('Coef.Transmisión','Coef.Reflexión')
hold off
figure
title 'Dependencia con d'
hold on
plot(E,T1(E,2,1,10),':b')
plot(E,T1(E,2,2,10),'*r')
plot(E,T1(E,2,4,10),'+k')
legend('1 ångström ','2 ångströms ','3 ångströms ')
xlabel 'E'
ylabel ('Coeficiente de transmisión')
hold off
figure
title 'Dependencia con v0'
hold on
plot(E,T1(E,2,2,10),'sb')
plot(E1,T1(E1,2,2,15),'vr')
plot(E2,T1(E2,2,2,25),'pk')
legend('10 eV ','15 eV ','25 eV ')
xlabel 'E'
ylabel ('Coeficiente de transmisión')
hold off
figure
title 'Comparativa potencial cuadrático'
hold on
plot(E,T1(E,2,2,10),'vr')
plot(E,TeXac(E,2,2,10),'*y')
legend ('Aproximación','Exacto')
xlabel 'E'
ylabel ('Coeficiente de transmisión')
hold off
```

Las funciones T1, R1 y Texac están definidas se la siguiente manera:

```
function [T1] = T1(E,n,d,v0 )
%delta en A, u en eV
hc=1970;%A*ev, fm*Mev
mc2=511*10^3;
C=d*sqrt((8*mc2*pi)/(hc^2));
T1=exp(-2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*((v0-
E).^((n+2)./2))./(v0)).^(1/n)...
)./(1+(1/4)*exp(-
2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*((v0-
E).^((n+2)./2))./(v0)).^(1/n)...
)).^2;
end

function [R1 ] = R1(E,n,d,v0)
%d en A, v0 en eV
hc=1970;%A*ev
mc2=511*10^3;%masa del electrón en eV
C=d*sqrt((8*mc2*pi)/(hc^2));
R1=(16*exp(2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*((v0-
E).^((n+2)./2))./(v0)).^(1/n)...
)+exp(-2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*((v0-
E).^((n+2)./2))./(v0)).^(1/n)...
)-
8)./(16*exp(2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*((v0-
-E).^((n+2)./2))./(v0)).^(1/n)...
)+exp(-2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*((v0-
E).^((n+2)./2))./(v0)).^(1/n))) + 8);
end

function [Texac]=Texac(E,n,d,v0 )
%delta en A, u en eV
hc=1970;%A*ev, fm*Mev
mc2=511*10^3;
C=d*sqrt((8*mc2*pi)/(hc^2));
Texac=1./(1+exp(2*((gamma(1./n))./(n+2).*(gamma((n+2)./(2*n))))).*C.*(
((v0-E).^((n+2)./2))./...
(v0)).^(1/n)))));
```

End

## IX. Referencias

- [1] Wentzel, Gregor (1926). *Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik*. Zeitschrift für Physik. **38** (6–7): 518–529. doi:10.1007/BF01397171.
- [2] Kramers, Hendrik A. (1926). *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*. Zeitschrift für Physik. **39** (10–11): 828–840. doi:10.1007/BF01451751
- [3] Brillouin, Léon (1926). *La mécanique ondulatoire de Schrödinger: une méthode générale de résolution par approximations successives*. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. **183**: 24–26.
- [4] Liouville, Joseph (1837). «*Sur le développement des fonctions et séries..*». Journal de Mathématiques Pures et Appliquées **1**: 16-35.
- [5] Green, George (1837). «*On the motion of waves in a variable canal of small depth and width*». Transactions of the Cambridge Philosophical Society **6**: 457-462.
- [6] B.H. Bransden and C.J. Joachain, *Quantum Mechanics (2nd ed.)*, Pearson, Prentice Hall, p 410.
- [7] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables (1972 ed)*, United States Department of Commerce, National Bureau of Standards, pp 446-450.
- [8] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum mechanics non- relativistic theory (2nd ed.)*, Pergamon press, pp 161-162.
- [9] Ajoy Ghatak and S. Lokanathan, *Quantum mechanics: Theory and applications*, Springer Science+ Business Media, B, V, p 436.
- [10] L. D. Landau and E.M Lifshitz, *Quantum mechanics non- relativistic theory (2nd ed.)*, Pergamon press, pp 176-177.
- [11] E.C. Kemble, *Phys.Rev.***48**, 549 (1935).

[12] J.A. Caballero Carretero and A. Martín Sánchez, (1986), *Transmission coefficients in anharmonic symmetrical potentials*, Badajoz (Spain).



## X. Bibliografía

-R.G. Littlejohn. (2016). *The WKB Method*. Berkeley, EU.

<http://bohr.physics.berkeley.edu/classes/221/9697/wkb.pdf>. Última vez consultado el 30/08/2017.

-D. J. Griffiths. (1994). *Introduction to Quantum Mechanics*, New Jersey, UE. Prentice Hall, Chapter 8.

- L. D. Landau and E.M Lifshitz, *Quantum mechanics non- relativistic theory (2nd ed.)*, Pergamon press, Chapter 7.

-L. F. Casado Jiménez (1986), *aproximación WKB*, Badajoz (España).