

# Approssimazione semiclassica o Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)

Alessandro Papa

Queste note sono una riscrittura, con qualche emendamento e qualche interpolazione, di contenuti del Landau-Lifshitz, “Meccanica quantistica - Teoria non-relativistica”, cap. VII.

## 1 Caso tridimensionale

L’equazione di Schrödinger in tre dimensioni è data da

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t) .$$

Scriviamo la funzione d’onda nella seguente forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = A(\vec{x}, t) e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)} , \quad A(\vec{x}, t) , S(\vec{x}, t) \in \mathbb{R} ,$$

e sostituiamo questa espressione nel primo membro dell’equazione di Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial S}{\partial t} \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} ,$$

e nel secondo membro,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left[ \left( \vec{\nabla} A + \frac{i}{\hbar} A \vec{\nabla} S \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} \right] + V A e^{\frac{i}{\hbar} S} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla^2 A + 2 \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S + \frac{i}{\hbar} A \nabla^2 S - \frac{1}{\hbar^2} A (\vec{\nabla} S)^2 \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} + V A e^{\frac{i}{\hbar} S} . \end{aligned}$$

Dopo l’eliminazione dai due membri del fattore comune  $e^{\frac{i}{\hbar} S}$ , l’uguaglianza delle parti immaginarie conduce a

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{m} \vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S + \frac{1}{2m} A \nabla^2 S = 0 , \tag{1}$$

mentre quella delle parti reali a

$$\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = 0 . \tag{2}$$

Moltiplicando membro a membro l'Eq. (1) per  $2A$ , si ottiene

$$2A \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2A}{m} \vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S + \frac{A^2}{m} \vec{\nabla}^2 S = 0 ,$$

che si può riscrivere anche

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \left( \frac{A^2}{m} \vec{\nabla} S \right) = 0 . \quad (3)$$

Se si ricordano le definizioni di densità di probabilità,

$$\rho(\vec{x}, t) \equiv |\psi|^2 = A^2 ,$$

e quella di densità di corrente di probabilità,

$$\vec{j}(\vec{x}, t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi] = \frac{A^2}{m} \vec{\nabla} S ,$$

si riconosce nella Eq. (3) l'equazione di continuità

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 .$$

Se nell'Eq. (2) si omette il termine  $-\hbar^2/(2m)\vec{\nabla}^2 A/A$ , si ottiene invece

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V = 0 , \quad (4)$$

in cui si riconosce l'*equazione di Hamilton-Jacobi* della meccanica classica. È allora naturale definire l'impulso "classico"  $\vec{p}_{cl}$  come in meccanica classica,

$$\vec{p}_{cl} = \vec{\nabla} S ,$$

da cui discende che

$$\vec{j} = \frac{A^2}{m} \vec{\nabla} S = \rho \frac{\vec{p}_{cl}}{m} = \rho \vec{v}_{cl} ,$$

che è consistente con la definizione di una densità di corrente. Vediamo allora che, nel limite in cui si può omettere il termine proporzionale ad  $\hbar^2$  nella (2), ad ogni funzione d'onda può essere associato un campo vettoriale di impulsi  $\vec{p}_{cl}(\vec{x}, t)$  che risulta essere ortogonale ad una superficie con  $S$  costante, cioè al *fronte* dell'onda descritta da  $\psi(\vec{x}, t)$ , analogamente a quello che succede ai raggi dell'ottica geometrica.

Per capire meglio il senso dell'approssimazione fatta, mettiamoci nel *caso stazionario*, consideriamo cioè soluzioni dell'equazione di Hamilton-Jacobi con energia costante  $E$ . Sappiamo allora dalla meccanica classica che

$$S(\vec{x}, t) = W(\vec{x}, t) - E t$$

e l'Eq. (2) prende la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\vec{\nabla}^2 A}{A} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 = E - V .$$

A questo risultato si può arrivare anche ripetendo gli stessi passaggi di sopra a partire dall'equazione di Schrödinger *indipendente* dal tempo.

Per un dato potenziale  $V$  e una data energia  $E$ , la condizione sotto cui è lecito omettere il primo termine è data da

$$\left| \hbar^2 \frac{\vec{\nabla}^2 A}{A} \right| \ll (\vec{\nabla} S)^2 \quad \longrightarrow \quad \left| \frac{\vec{\nabla}^2 A}{A} \right| \ll \left( \frac{\vec{\nabla} S}{\hbar} \right)^2 .$$

Il modulo di  $\frac{\vec{\nabla} S(\vec{x})}{\hbar}$  rappresenta l'inverso della *lunghezza d'onda ridotta di de Broglie locale*  $\lambda(\vec{x})$ , come si può vedere osservando che

$$e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x} + \delta \vec{x}, t)} \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x})} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} S(\vec{x}) \cdot \delta \vec{x}} \equiv e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x})} e^{i \vec{k}(\vec{x}) \cdot \delta \vec{x}} ,$$

con  $|\vec{k}(\vec{x})| = 1/\lambda(\vec{x})$ . La quantità  $|\vec{\nabla}^2 A/A|$  ha le dimensioni dell'inverso di una lunghezza al quadrato, quindi possiamo porre

$$\left| \frac{\vec{\nabla}^2 A}{A} \right| \equiv \frac{1}{L^2} ,$$

dove  $L$  rappresenta la lunghezza caratteristica su cui varia il modulo della funzione d'onda. L'approssimazione fatta può allora essere riscritta nella forma

$$\frac{1}{L^2} \ll \frac{1}{\lambda^2} \quad \longrightarrow \quad \frac{\lambda}{L} \ll 1 ,$$

che vale in tutti i punti dello spazio in cui la lunghezza d'onda ridotta di de Broglie locale è molto minore della lunghezza tipica su cui varia l'ampiezza della funzione d'onda.

La lunghezza  $L$  è tanto più grande quanto  $V$  è debolmente variabile; nel caso limite in cui il potenziale è costante,  $L$  tende a infinito e l'approssimazione è sempre soddisfatta. Per  $V$  costante, nel caso stazionario, anche  $\vec{\nabla} S \equiv \vec{p}$  è costante e la forma *esatta* per funzione d'onda diventa

$$\psi(\vec{x}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)} , \quad A \text{ costante} ,$$

i cui fronti d'onda sono piani ortogonali al vettore costante  $\vec{p}$ .

## 2 Caso unidimensionale

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo in una dimensione è data da

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) .$$

Scriviamo la funzione d'onda nella seguente forma:

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)} , \quad \sigma(x) \in \mathbb{C} .$$

Sostituendo questa espressione nell'equazione di Schrödinger, si trova

$$-i \frac{\hbar}{2m} \sigma'' + \frac{1}{2m} (\sigma')^2 + V = E . \quad (5)$$

Quando il termine con  $\sigma''$  può essere omissso, l'equazione si riduce a

$$\frac{1}{2m}(\sigma')^2 + V = E ,$$

che rappresenta l'equazione di Hamilton-Jacobi della meccanica classica in una dimensione nel caso stazionario. Da questa espressione ricaviamo che

$$\sigma'(x) \equiv \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$$

rappresenta l'impulso classico  $p(x)$  nelle regioni classicamente accessibili, cioè laddove  $V(x) < E$ . La condizione sotto la quale è lecito omettere il termine con  $\sigma''$  è

$$|\hbar\sigma''| \ll (\sigma')^2 \quad \rightarrow \quad \left| \hbar \frac{\sigma''}{(\sigma')^2} \right| \ll 1 \quad \rightarrow \quad \left| \hbar \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{\sigma'} \right) \right| \ll 1 ,$$

che equivale alla condizione

$$\left| \frac{d}{dx} \lambda(x) \right| \ll 1 ,$$

dove  $\lambda(x)$  è la lunghezza d'onda ridotta di de Broglie locale. Questa identificazione segue dal fatto che

$$e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x+\delta x)} \simeq e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)} e^{\frac{i}{\hbar}\sigma'(x)\delta x} \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)} e^{ik(x)\delta x} ,$$

con  $k(x) = 1/\lambda(x)$ . In altri termini, le regioni di validità dell'approssimazione sono quelle in cui la lunghezza d'onda ridotta di de Broglie varia di poco quando ci si sposta di un tratto dell'ordine della lunghezza d'onda stessa. Osservando che  $\sigma'(x) = p(x)$ , la condizione di validità dell'approssimazione può essere riscritta anche nel modo seguente:

$$\left| \hbar \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{\sigma'} \right) \right| = \left| \hbar \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{p(x)} \right) \right| = \left| \frac{\hbar}{p^2(x)} \frac{dp(x)}{dx} \right| = \left| \frac{\hbar}{p^2(x)} \frac{dp}{dt} \frac{dt}{dx} \right| = \left| \frac{\hbar}{p^2(x)} F(x) \frac{m}{p(x)} \right| = \left| \frac{\hbar F(x)m}{p^3(x)} \right| \ll 1 ,$$

che è sicuramente violata laddove  $p(x) = 0$ , cioè nei *punti di inversione* del moto classico.

L'approssimazione semiclassica può essere organizzata in modo sistematico, scrivendo  $\sigma(x)$  come una serie di potenze di  $\hbar$ :

$$\sigma(x) = \sigma_0(x) + \frac{\hbar}{i}\sigma_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2(x) + \dots \quad (6)$$

Sostituendo questa espansione nella (5), si ottiene

$$-i\frac{\hbar^2}{2m} \left( \sigma_0'' + \frac{\hbar}{i}\sigma_1''(x) + \dots \right) + \frac{1}{2m} \left( \sigma_0' + \frac{\hbar}{i}\sigma_1'(x) + \dots \right)^2 + V = E , \quad (7)$$

che fornisce, all'ordine  $\hbar^0$ ,

$$\frac{1}{2m}(\sigma_0')^2 + V = E ,$$

da cui si ricava che

$$\sigma'_0(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))} \equiv \pm p(x) \quad \text{per } V(x) < E \quad (\text{regione classicamente accessibile}),$$

e

$$\sigma'_0(x) = \pm i \sqrt{2m(V(x) - E)} \equiv \pm i\tilde{p}(x) \quad \text{per } V(x) > E \quad (\text{regione classicamente inaccessibile}).$$

Pertanto, la soluzione più generale si scriverà, a quest'ordine di approssimazione, nel modo seguente:

$$\psi_{\text{WKB}}^{(0)}(x) = c_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right) + c_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right), \quad \text{per } V(x) < E,$$

e

$$\psi_{\text{WKB}}^{(0)}(x) = \tilde{c}_1 \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \tilde{p}(x') dx'\right) + \tilde{c}_2 \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \tilde{p}(x') dx'\right), \quad \text{per } V(x) > E.$$

In queste espressioni,  $x_0$  è un punto arbitrariamente scelto, la cui ridefinizione comporta solo quella delle costanti arbitrarie  $c_{1,2}$  e  $\tilde{c}_{1,2}$ .

Quando si prende invece il termine di *ordine*  $\hbar^1$  nell'Eq. (7), si ottiene

$$\sigma''_0 + 2\sigma'_0\sigma'_1 = 0 \quad \longrightarrow \quad \sigma'_1 = -\frac{\sigma''_0}{2\sigma'_0} = \frac{d}{dx} \ln |\sigma'_0|^{-1/2} \quad \longrightarrow \quad \sigma_1 = \ln |\sigma'_0|^{-1/2} + \text{costante}.$$

Pertanto, la soluzione più generale si scriverà, all'ordine  $\hbar^1$ , nel modo seguente:

$$\psi_{\text{WKB}}^{(1)}(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right) + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'\right), \quad \text{per } V(x) < E,$$

e

$$\psi_{\text{WKB}}^{(1)}(x) = \frac{\tilde{c}_1}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \tilde{p}(x') dx'\right) + \frac{\tilde{c}_2}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \tilde{p}(x') dx'\right), \quad \text{per } V(x) > E.$$

D'ora in poi lavoreremo sempre a quest'ordine di approssimazione, quindi ometteremo di riportare il pedice <sup>(1)</sup>.

Osserviamo che, nella regione classicamente accessibile (che è quella nella quale la funzione d'onda prende il contributo dominante), si ha  $\psi_{\text{WKB}}(x) \propto 1/v(x)$ , quindi la densità di probabilità di posizione  $|\psi_{\text{WKB}}(x)|^2$  è proporzionale a  $1/v(x)$ , in accordo con l'aspettativa classica (una particella spende meno tempo negli intervalli in cui è più veloce).

### 3 Stati legati in approssimazione semiclassica

Sia dato un potenziale unidimensionale come quello in Figura 1, per il quale, fissata una certa energia  $E$ , si ha che  $V(x) > E$  negli intervalli  $x < a$  e  $x > b$ , con  $a < b$ .

La soluzione WKB, valida sufficientemente lontano dai punti di inversione, prende la seguente forma:

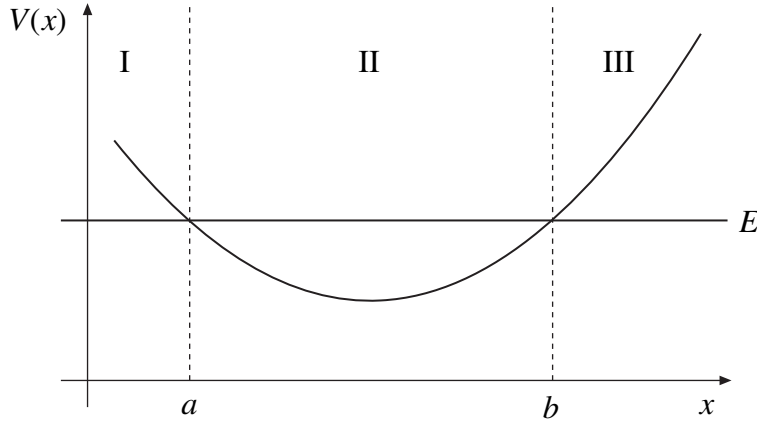


Figura 1

- regione  $x < a$ :

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{\tilde{c}}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x \tilde{p}(x') dx'\right),$$

dove abbiamo preso il solo termine che decresce a zero per  $x \rightarrow -\infty$ ;

- regione  $a < x < b$ :

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \alpha\right)$$

oppure

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{d}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' + \beta\right);$$

- regione  $x > b$ :

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{\tilde{d}}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \tilde{p}(x') dx'\right),$$

dove abbiamo preso il solo termine che decresce a zero per  $x \rightarrow +\infty$ .

Per trovare la relazione tra i coefficienti dei vari “pezzi” della soluzione, non possiamo usare le condizioni di raccordo per continuità della funzione e della sua derivata prima nei punti  $x = a$  e  $x = b$ , poiché le funzioni WKB non valgono troppo vicino a questi punti. Se ci mettiamo, però, in un intorno sufficientemente stretto del punto  $a$ , ad esempio, possiamo linearizzare in questo intorno il potenziale, risolvere il problema di Schrödinger in questa approssimazione e, dal confronto tra questa soluzione e l'approssimazione WKB *nei domini delle regioni*  $x < a$  e  $x > a$  *in cui entrambe le approssimazioni sono valide*, possiamo stabilire la *formula di connessione* tra i coefficienti  $c$  e  $\tilde{c}$  e determinare anche la fase  $\alpha$ . Lo stesso ragionamento può essere ripetuto intorno al punto  $b$ .

Sufficientemente vicino al punto  $x = a$ , possiamo scrivere

$$V(x) = V(a) + V'(a)(x - a) + \dots \equiv E - F_0 \cdot (x - a) + \dots ,$$

con  $F_0 > 0$ . L'equazione di Schrödinger diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - F_0 \cdot (x - a) = 0 .$$

Questa è l'*equazione di Airy*, la cui soluzione è data da una combinazione lineare delle funzioni di Airy  $\text{Ai}(x)$  e  $\text{Bi}(x)$ . Non occorre riportare qui la forma generale di queste funzioni (per approfondire, si vedano, ad esempio, il Griffiths o il Landau-Lifshitz), ma è sufficiente osservare che si ha

- regione  $x \ll a$ :

$$\psi_{\text{lin}}(x) \simeq \frac{C}{2} \frac{1}{[2mF_0(a-x)]^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}}(a-x)^{3/2}\right] ; \quad (8)$$

- regione  $x \gg a$ :

$$\psi_{\text{lin}}(x) \simeq C \frac{1}{[2mF_0(x-a)]^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}}(x-a)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] . \quad (9)$$

Vogliamo confrontare queste soluzioni con quelle WKB nel dominio delle regioni  $x < a$  e  $x > a$  dove si può assumere per il potenziale l'approssimazione lineare. Abbiamo allora

- regione  $x < a$ :

$$\begin{aligned} \tilde{p}(x) &= \sqrt{2m(V(x) - E)} \simeq \sqrt{2mF_0(a-x)} , \\ \int_a^x \tilde{p}(x') dx' &\simeq \int_a^x \sqrt{2mF_0(a-x')} dx' = -\frac{2}{3} \sqrt{2mF_0}(a-x)^{3/2} , \\ \psi_{\text{WKB}}(x) &\simeq \frac{\tilde{c}}{[2mF_0(a-x)]^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}}(a-x)^{3/2}\right] ; \end{aligned} \quad (10)$$

- regione  $a < x < b$ :

$$\begin{aligned} p(x) &= \sqrt{2m(E - V(x))} \simeq \sqrt{2mF_0(x-a)} , \\ \int_a^x p(x') dx' &\simeq \int_a^x \sqrt{2mF_0(x'-a)} dx' = \frac{2}{3} \sqrt{2mF_0}(x-a)^{3/2} , \\ \psi_{\text{WKB}}(x) &\simeq \frac{c}{[2mF_0(x-a)]^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}}(x-a)^{3/2} + \alpha\right] . \end{aligned} \quad (11)$$

Dal confronto dell'Eq. (8) con l'Eq. (10), si deduce che

$$\frac{C}{2} = \tilde{c} ,$$

mentre da quello dell'Eq. (9) con l'Eq. (11), si deduce che

$$C = c , \quad \alpha = \frac{\pi}{4} ,$$

quindi

$$c = 2\tilde{c}$$

e si può scrivere

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \begin{cases} \frac{\tilde{c}}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x \tilde{p}(x') dx'\right), & x < a, \\ \frac{2\tilde{c}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), & a < x < b. \end{cases} \quad (12)$$

Lo stesso ragionamento può essere ripetuto in modo analogo intorno al punto  $x = b$  e porta alla seguente espressione:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \begin{cases} \frac{2\tilde{d}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), & a < x < b, \\ \frac{\tilde{d}}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \tilde{p}(x') dx'\right), & x > b. \end{cases} \quad (13)$$

Nella regione  $a < x < b$  devono valere sia la (12) che la (13), quindi

$$\tilde{c} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = \tilde{d} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right),$$

che è equivalente a

$$\tilde{c} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = \tilde{d} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right),$$

ovvero

$$\begin{aligned} \tilde{c} \sin\left(\phi(x) + \frac{\pi}{4}\right) &= \tilde{d} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \phi(x) + \frac{\pi}{4}\right) \\ &= -\tilde{d} \sin\left(\phi(x) - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right), \end{aligned} \quad (14)$$

avendo usato la definizione

$$\phi(x) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'.$$

L'Eq. (14) è soddisfatta per

$$\tilde{c} = (-1)^{n+1} \tilde{d},$$

$$\left(\phi(x) + \frac{\pi}{4}\right) - \left(\phi(x) - \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots$$

La seconda equazione è equivalente a

$$\int_a^b p(x) dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$



oppure a

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

dove quest'ultimo integrale è esteso su un intero periodo del moto classico della particella. L'Eq. (15) (o anche la (16)) è la *condizione di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld*: essa consente di trovare i valori permessi per l'energia  $E$  di un sistema nell'approssimazione semiclassica. È notevole il fatto che, in questa approssimazione, il calcolo dei livelli energetici di uno spettro discreto non richieda la soluzione di alcuna equazione differenziale.

L'integrale nell'Eq. (16) rappresenta l'area della regione delimitata dalla curva del moto nello spazio delle fasi del sistema (si veda la Figura 2). La condizione di quantizzazione esprime il fatto che quell'area è quantizzata e che il suo valore minimo è raggiunto per  $n = 0$  e vale  $\pi\hbar$ .

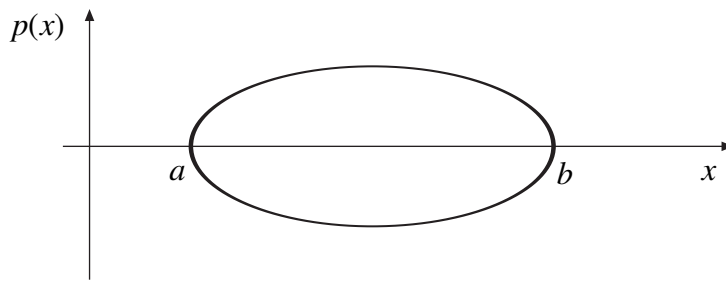


Figura 2

Prendiamo ora in esame la soluzione WKB nella regione  $a < x < b$ , scritta nella forma data in (12),

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{2\tilde{c}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \equiv \frac{2\tilde{c}}{\sqrt{p(x)}} \sin(\alpha(x)),$$

e osserviamo che  $\alpha(x)$  prende valori nell'intervallo

$$\left[ \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx \right]$$

quando  $x$  varia tra  $a$  e  $b$ . Pertanto, quando  $n = 0$ , cioè quando l'energia  $E_0$  è tale che

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \frac{\pi}{2},$$

abbiamo che  $\alpha(x)$  prende valori nell'intervallo  $[\pi/4, 3\pi/4]$  e la funzione seno non si annulla mai, cioè ha *zero nodi*; quando  $n = 1$ , cioè quando l'energia  $E_1$  è tale che

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \frac{3\pi}{2},$$

$\alpha(x)$  prende valori nell'intervallo  $[\pi/4, 7\pi/4]$  e la funzione seno si annulla in un punto, cioè ha *un nodo*, e così via, in accordo con il teorema delle oscillazioni.

Consideriamo ora  $n$  grandi e calcoliamo la separazione tra due livelli energetici contigui,

$$E_{n+1} - E_n \equiv \hbar\omega ,$$

dove  $\omega$  rappresenta la frequenza della radiazione emessa (o assorbita) in seguito ad una transizione tra i livelli in gioco. Abbiamo che

$$\begin{aligned} h &= \oint p_{E_{n+1}}(x) dx - \oint p_{E_n}(x) dx = \Delta E \frac{\partial}{\partial E} \oint p_E(x) dx = 2\Delta E \frac{\partial}{\partial E} \int_a^b \sqrt{2m(E - V)} dx \\ &= 2\Delta E \int_a^b \frac{m}{\sqrt{2m(E - V)}} dx = 2\Delta E \int_a^b \frac{m}{p(x)} dx = 2\Delta E \int_a^b \frac{1}{v(x)} dx \\ &= 2\Delta E \int_{t(a)}^{t(b)} dt = 2\Delta E \cdot \frac{T}{2} = \Delta E \cdot T = \hbar\omega \cdot T , \end{aligned}$$

da cui discende che

$$\omega = \frac{2\pi}{T} ,$$

cioè la frequenza della radiazione emessa (o assorbita) è pari a quella del moto classico.

## 4 Formule di connessione: approccio alternativo

È possibile ottenere le formule di connessione mediante una procedura che non fa uso delle proprietà delle funzioni di Airy.

Consideriamo un potenziale  $V(x)$  ed un valore dell'energia  $E$ , per i quali si abbia che  $V(x) > E$  per  $x > b$ , mentre  $V(x) < E$  per  $x < b$  (si veda la Figura 3).

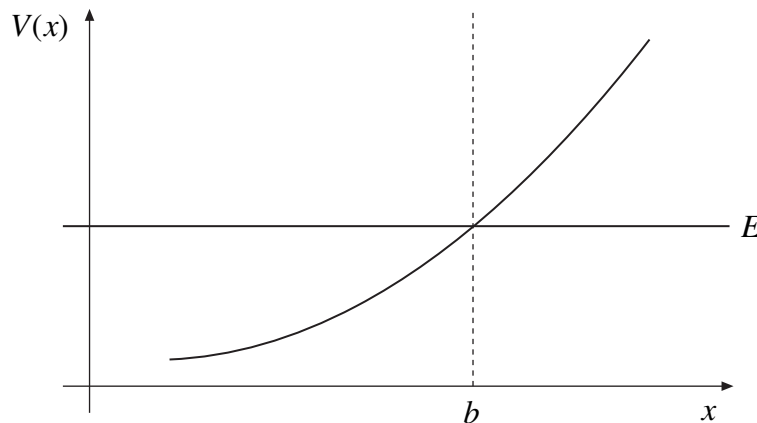


Figura 3

Abbiamo allora che

- regione  $x > b$ :

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{\tilde{c}}{2\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \tilde{p}(x') dx'\right), \quad (17)$$

- regione  $x < b$ :

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx'\right) + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx'\right). \quad (18)$$

Nella regione  $x > b$  in cui vale *anche* l'approssimazione lineare del potenziale, si ha

$$E - V(x) \simeq F_0(x - b), \quad F_0 < 0,$$

per cui possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \psi_{\text{WKB}}(x) &= \frac{\tilde{c}}{2[-2mF_0(x-b)]^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \sqrt{-2mF_0(x'-b)} dx'\right) \\ &= \frac{\tilde{c}}{2[-2mF_0(x-b)]^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} \sqrt{\frac{-2mF_0}{\hbar^2}} (x-b)^{3/2}\right). \end{aligned} \quad (19)$$

Se consideriamo questa una funzione della variabile *complessa*  $x$ , possiamo *continuarla analiticamente* da un punto lungo l'asse reale  $x > b$  a un punto lungo l'asse reale  $x < b$  muovendoci lungo una semicirconferenza di raggio  $\rho = |x - b|$  e centro  $x = b$  nel semipiano complesso *superiore*, restando così sempre *lontani* dal punto di inversione  $x = b$ , dove l'approssimazione semiclassica non vale. Ciò equivale a scrivere

$$x - b = \rho e^{i\phi},$$

con  $\phi$  che varia tra 0 e  $\pi$ , da cui segue che

$$(x-b)^{3/2} = \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\phi} \xrightarrow{\phi \rightarrow \pi} -i\rho^{3/2} = -i|x-b|^{3/2}, \quad (x-b)^{1/4} = \rho^{1/4} e^{i\frac{\phi}{4}} \xrightarrow{\phi \rightarrow \pi} \rho^{1/4} e^{i\pi/4} = |x-b|^{1/4} e^{i\pi/4}.$$

Effettuando queste trasformazioni nella (19), essa diventa

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{\tilde{c}}{2[-2mF_0(b-x)]^{1/4}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \exp\left(i\frac{2}{3} \sqrt{\frac{-2mF_0}{\hbar^2}} (b-x)^{3/2}\right),$$

che è valida ora per  $x < b$  e può quindi essere confrontata con la (18). Si può vedere facilmente che, usando l'approssimazione lineare per il potenziale, il pezzo con  $c_2$  prende la forma

$$\frac{c_2}{[-2mF_0(b-x)]^{1/4}} \exp\left(i\frac{2}{3} \sqrt{\frac{-2mF_0}{\hbar^2}} (b-x)^{3/2}\right),$$

quindi, per confronto, deve valere

$$c_2 = \frac{\tilde{c}}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}}.$$

Il termine con  $c_1$  non viene raggiunto con questa continuazione analitica: in effetti, se si procede alla rovescia, provando a continuare analiticamente da sinistra verso destra nel semipiano superiore i due termini della funzione d'onda, si può vedere che quello con  $c_1$  diventa subito esponenzialmente più piccolo di quello con  $c_2$  e viene quindi perso nello "sfondo" di quello con  $c_2$ .

Per ottenere il termine con  $c_1$  occorre continuare analiticamente la funzione (19) muovendosi questa volta lungo una semicirconfenza nel semipiano *inferiore*. Si ottiene allora che deve valere

$$c_1 = \frac{\tilde{c}}{2} e^{i\frac{\pi}{4}}.$$

In definitiva, si può concludere che vale la corrispondenza

$$\underbrace{\frac{\tilde{c}}{2\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \tilde{p}(x') dx'\right)}_{x>b, V(x)>E} \rightarrow \underbrace{\frac{\tilde{c}}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right)}_{x<b, V(x)<E}. \quad (20)$$

Si può procedere in modo analogo quando si abbia un potenziale  $V(x)$  ed un valore dell'energia  $E$ , per i quali valga che  $V(x) > E$  per  $x < a$  e  $V(x) < E$  per  $x > a$  (si veda la Figura 4).

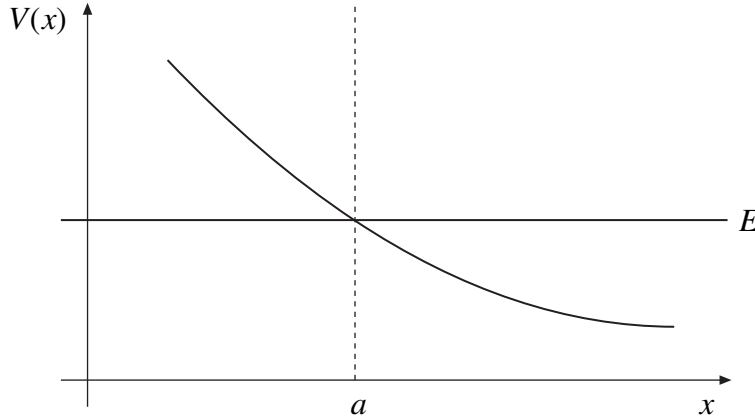


Figura 4

In tal caso la regola di corrispondenza diventa

$$\underbrace{\frac{\tilde{c}}{2\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^a \tilde{p}(x') dx'\right)}_{x<a, V(x)>E} \rightarrow \underbrace{\frac{\tilde{c}}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right)}_{x>a, V(x)<E}. \quad (21)$$

È importante osservare che le regole di corrispondenza sono valide solo se usate nel *verso della freccia*.

Osserviamo infine che, se la regione classica ( $V(x) < E$  per  $x < a$ ) è delimitata da una barriera di potenziale infinitamente alta posta in  $x = a$ , allora l'approssimazione semiclassica vale fino al punto di inversione, mentre per  $x > a$  la funzione d'onda è identicamente nulla. Per la condizione di continuità in  $x = a$  vale allora che

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \begin{cases} \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'\right), & x < a, \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

## 5 Attraversamento di una barriera di potenziale

Si vuole studiare in approssimazione semiclassica il problema dell'attraversamento di una barriera di potenziale unidimensionale, come quella indicata in Figura 5. Chiameremo rispettivamente regioni I, II e III, le regioni  $x < a$ ,  $a < x < b$  e  $x > b$ .

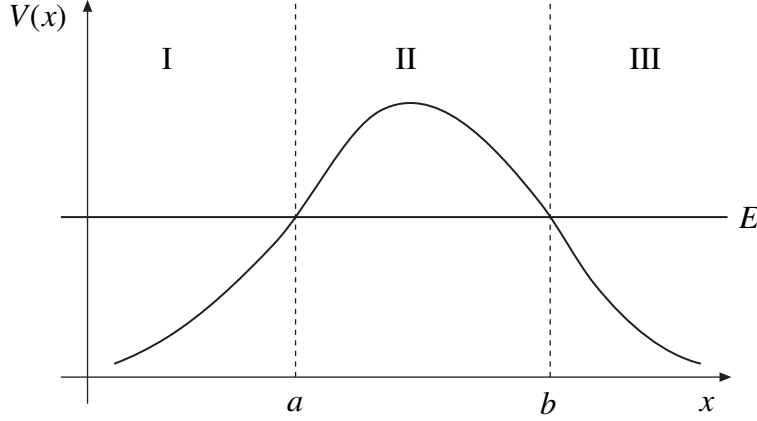


Figura 5

Se si conviene che il fascio di particelle incidenti viaggi da sinistra verso destra, nella regione III avremo solo l'onda progressiva che possiamo scrivere, con una scelta conveniente della fase, nel modo seguente:

$$\psi_{\text{WKB}}^{(\text{III})}(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + i\frac{\pi}{4}\right).$$

Per costruire la soluzione nella regione II, procediamo per continuazione analitica dalla regione III lungo una semicirconfenza nel semipiano superiore. Avremo

$$E - V(x) \simeq F_0(x - b), \quad F_0 > 0,$$

$$\begin{aligned} \psi_{\text{WKB}}^{(\text{III})}(x) &= \frac{c}{[2mF_0(x - b)]^{1/4}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x \sqrt{2mF_0(x' - b)} dx' + i\frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{c}{[2mF_0(x - b)]^{1/4}} \exp\left(i\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}} (x - b)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}\right), \end{aligned} \quad (22)$$

$$x - b = \rho e^{i\phi},$$

$$(x - b)^{3/2} = \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\phi} \xrightarrow{\phi \rightarrow \pi} -i\rho^{3/2} = -i|x - b|^{3/2}, \quad (x - b)^{1/4} = \rho^{1/4} e^{i\frac{\phi}{4}} \xrightarrow{\phi \rightarrow \pi} \rho^{1/4} e^{i\pi/4} = |x - b|^{1/4} e^{i\pi/4},$$

da cui discende

$$\psi_{\text{WKB}}^{(\text{II})}(x) = \frac{c}{[2mF_0(b - x)]^{1/4}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \exp\left(\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}} (b - x)^{3/2} + i\frac{\pi}{4}\right),$$

nella regione  $x < b$  in cui si può linearizzare il potenziale. A questa soluzione corrisponde quella WKB, valida anche fuori dalla regione lineare, della forma

$$\begin{aligned}\psi_{\text{WKB}}^{(\text{II})}(x) &= \frac{c}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b \tilde{p}(x') dx'\right) = \frac{c}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b \tilde{p}(x) dx\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x \tilde{p}(x') dx'\right) \\ &\equiv \frac{c}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} e^\gamma \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x \tilde{p}(x') dx'\right),\end{aligned}$$

dove è stato definito

$$e^\gamma = \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b \tilde{p}(x) dx\right).$$

Nella regione II c'è anche un altro pezzo di soluzione, che si può ottenere dalla  $\psi_{\text{WKB}}^{(\text{III})}$  per continuazione analitica nel semipiano inferiore; questo pezzo di soluzione, tuttavia, risulta essere proporzionale a  $e^{-\gamma}$  e lo si può trascurare rispetto al pezzo di soluzione già trovato, che è invece proporzionale a  $e^\gamma$ . Questa approssimazione è tanto migliore quanto più la barriera è larga e/o l'energia  $E$  piccola rispetto al potenziale  $V(x)$  nella regione  $a < x < b$ .

Per costruire la soluzione nella regione I, possiamo utilizzare la regola di corrispondenza (20), ottenendo

$$\begin{aligned}\psi_{\text{WKB}}^{(\text{I})}(x) &= 2 \frac{c}{\sqrt{p(x)}} e^\gamma \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \\ &= \frac{c}{\sqrt{p(x)}} e^\gamma \left[ \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' + i\frac{\pi}{4}\right) + \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - i\frac{\pi}{4}\right) \right].\end{aligned}$$

Le funzioni nella parentesi quadra descrivono rispettivamente l'onda incidente e quella riflessa. Il coefficiente di trasmissione  $T$  si ottiene allora confrontando il coefficiente dell'onda trasmessa  $\psi_{\text{WKB}}^{(\text{III})}$  con quello dell'onda incidente in  $\psi_{\text{WKB}}^{(\text{I})}$  e risulta essere

$$T = \frac{|c|^2}{|c e^\gamma|^2} = e^{-2\gamma}.$$