

Capitolo 6

Approssimazione semiclassica

Il problema che affronteremo in questo capitolo è lo studio del limite $\hbar \rightarrow 0$ in meccanica quantistica, passo necessario per comprendere come si possa passare da una descrizione quantistica ad una trattazione classica dei fenomeni.

L'approssimazione semiclassica ha un “antenato” che precede la stessa formulazione della meccanica quantistica: la cosiddetta vecchia teoria dei quanti. Molti dei problemi di connessione con la meccanica classica si erano presentati negli anni compresi fra il 1900 ed il 1927, e non sempre avevano trovato una soluzione soddisfacente, e spesso nemmeno una parvenza di soluzione. Fino alla metà del secolo scorso l'approssimazione semiclassica era progredita come studio di una trattazione approssimata dell'equazione di Schrödinger ma non aveva fatto passi avanti significativi dal punto di vista di principio. I fatti nuovi che hanno cambiato le prospettive sono diversi: da una parte riscoprendo alcuni vecchi risultati di Einstein si è giunti ad una comprensione più profonda della quantizzazione di sistemi classicamente integrabili, dall'altra, sul versante classico, la formulazione del teorema KAM (Kolmogorov, Arnold, Moser) ha permesso di capire in modo più profondo i fenomeni nuovi che si presentano in sistemi classicamente non integrabili. Come conseguenza di queste indagini, dello sviluppo di metodi come il path integral, dello studio più approfondito delle proprietà degli sviluppi asintotici e di alcuni risultati nuovi nello studio del calcolo delle variazioni, si è cominciato ad esplorare il campo della interpretazione della quantizzazione in sistemi classicamente non integrabili, ed eventualmente in sistemi caotici.

In questo testo, per ovvi motivi di opportunità e di spazio, tratteremo solo gli aspetti elementari del problema, accennando quando possibile alle generalizzazioni ed agli sviluppi. Nel testo principale, come al solito, concentreremo i risultati essenziali, alcuni risultati particolari e alcune osservazioni di carattere più tecnico, saranno esposti nei complementi o proposti come problemi.

6.1 Approssimazione WKB

WKB sta per Wentzel, Kramers, Brillouin, che, contemporaneamente ad altri autori, hanno fra i primi proposto uno schema di approssimazione per il limite $\hbar \rightarrow 0$. L'approssimazione è sostanzialmente identica all'approssimazione di ottica geometrica per le equazioni di Max-

well, nel seguente senso: per piccole variazioni di lunghezza d'onda rispetto ai cammini ottici caratteristici ha senso descrivere la propagazione delle onde elettromagnetiche in termini di raggi e fronti d'onda, le cui leggi di evoluzione (l'equazione dell'iconale) costituiscono la base matematica della teoria dell'ottica geometrica. Una procedura simile può essere seguita approssimando la funzione d'onda di Schrödinger, ψ , in termini dell'analogo dell'iconale. Originariamente lo scopo era sicuramente quello di dare un'interpretazione "corpuscolare" alle onde descritte da ψ , ma occorre ricordare che la ψ rappresenta in realtà un'onda di probabilità e, soprattutto, mentre esiste una certa analogia fra la descrizione matematica di una funzione d'onda di singola particella, $\psi(x, t)$ e quella di un campo elettromagnetico, questa analogia viene a mancare nel caso di molti gradi di libertà: per N particelle la funzione d'onda è un'ampiezza di probabilità in uno spazio delle configurazioni a $3N$ dimensioni, cosa che non ha nessun corrispettivo in elettromagnetismo. Quindi prima di capire se, ed in che senso, vale l'analogia soffermiamoci sul perché è complicato, e singolare, il limite $\hbar \rightarrow 0$.

Consideriamo l'equazione di Schrödinger nel suo contesto più semplice: la determinazione degli stati stazionari per una particella in una sola dimensione in un potenziale $V(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x) \psi = E \psi. \quad (6.1)$$

Dalla (6.1) è ovvio che il limite $\hbar \rightarrow 0$ è singolare: in questo limite cambia l'ordine dell'equazione differenziale e quindi cambia la classe stessa di soluzioni possibili, addirittura nel caso della (6.1) si passa da un'equazione differenziale ad una equazione algebrica.

L'idea per capire la procedura di limite corretta è fornita dall'esempio più semplice, una particella libera. Sappiamo che in questo caso una funzione di Schrödinger corrispondente ad un autostato dell'energia, e dell'impulso, ha la forma

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

Per $\hbar \rightarrow 0$, a fisso p , la funzione ha delle oscillazioni sempre più rapide in un tratto finito dell'asse reale, la lunghezza d'onda va a zero con $\lambda = \hbar/p$, ma è proprio questa rapida oscillazione che permette l'eliminazione del fattore \hbar^2 davanti alla derivata seconda nella (6.1): ogni derivata produce un fattore \hbar^{-1} e quindi la derivata seconda fornisce un fattore \hbar^{-2} che cancella il termine \hbar^2 . Si potrà quindi parlare del limite $\hbar \rightarrow 0$ solo come una correzione a questo tipo di comportamento obbligato dalla struttura della (6.1). È naturale quindi cercare un'approssimazione scrivendo

$$\psi(x) = \exp(i \frac{\sigma}{\hbar}), \quad (6.2)$$

e assumere che σ , non ψ , sia una funzione sviluppabile in \hbar :

$$\sigma(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^k \sigma_k = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots \quad (6.3)$$

I fattori $1/i$ nella (6.3) sono introdotti convenzionalmente per semplificare le formule seguenti. Sostituendo la (6.2) nella (6.1) si ottiene

$$(\sigma')^2 - i \hbar \sigma'' = p^2(x). \quad (6.4)$$

Abbiamo introdotto la notazione

$$p^2(x) = 2m(E - V(x)), \quad (6.5)$$

che rappresenta, per $E > V(x)$, l'impulso classico. L'equazione (6.3) è equivalente all'equazione originaria (6.1), ed è un'equazione¹ del *primo ordine*, non lineare, nella variabile $y = \sigma'$. Una delle due costanti arbitrarie della soluzione generale della (6.1) è semplicemente la costante d'integrazione per passare da y a σ . Sostituendo lo sviluppo (6.3) nella (6.4) si ottiene, all'ordine 0

$$(\sigma'_0)^2 = p^2; \quad \sigma_0 = \pm \int p(x) dx; \quad p(x) = +\sqrt{2m(E - V(x))}. \quad (6.6)$$

Ai due segni possibili della determinazione della radice corrispondono due soluzioni linearmente indipendenti. Per $n > 0$, uguagliando a 0 i vari coefficienti di \hbar^n si ha

$$\sum_{k=0}^n \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} = 0. \quad (6.7)$$

La (6.7) fornisce un'espressione ricorsiva per σ_n , infatti σ'_n compare solo in due addendi, quelli che moltiplicano σ'_0 :

$$\sigma'_1 = -\frac{1}{2\sigma'_0} \sigma''_0 \Rightarrow \sigma_1 = -\frac{1}{2} \log(p); \quad (6.8a)$$

$$\sigma'_n = -\frac{1}{2\sigma'_0} \left(\sum_{k=1}^{n-1} \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} \right). \quad n \geq 2. \quad (6.8b)$$

Scegliendo, ad esempio, la soluzione $\sigma'_0 = +p(x)$ e si ha esplicitamente

$$\sigma'_2 = -\frac{1}{2p} \left[\sigma'^2_1 + \sigma''_1 \right] = \frac{1}{4} \frac{p''}{p^2} - \frac{3}{8} \frac{p'^2}{p^3} = -\frac{1}{2p^{1/2}} \frac{d^2}{dx^2} p^{-1/2}; \quad (6.9a)$$

$$\sigma'_3 = -\frac{1}{2p} (2\sigma'_1 \sigma'_2 + \sigma''_2) = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{\sigma'_2}{p}. \quad (6.9b)$$

All'ordine \hbar^2 si ha perciò:

$$e^{i \frac{\sigma}{\hbar}} \simeq \frac{1}{\sqrt{p(x) e^{-\hbar^2 \frac{\sigma'_2}{p}}}} \exp \left(i \int_{x_0}^x \left[\frac{1}{\hbar} p(x) + \hbar \frac{1}{2p^{1/2}} \frac{d^2}{dx^2} p^{-1/2} \right] dx \right). \quad (6.10)$$

Dalla relazione (6.8b) discendono due cose:

- 1) I termini σ_n con n pari sono dispari in p , e, ricordando la (6.3), per $p(x)$ reale contribuiscono alla *fase* della funzione d'onda ψ .

¹Questo procedimento, la sostituzione della variabile ψ a favore di una funzione incognita y nella forma

$$\psi = \exp \left(\int^x y(\xi) d\xi \right)$$

è del tutto generale, l'equazione risultante prende il nome di equazione di Riccati.

2) I termini σ_n con n dispari sono pari in p , quindi sono gli stessi per entrambe le soluzioni. Per p reale $i(\hbar\sigma_n/i)^n$ è reale e quindi contribuisce all'ampiezza della funzione ψ .

L'approssimazione WKB consiste nel considerare i termini dominanti nelle espressioni precedenti e quindi assumere

$$\psi(x) = b_1 \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx} + b_2 \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx}, \quad (6.11)$$

x_0 è un punto di riferimento, il valore delle costanti b_1 e b_2 cambia al variare di x_0 . Se l'approssimazione (6.11) fosse *uniforme*, cioè valeesse per tutti i valori di x , avremmo trovato una soluzione approssimata.

Riscriviamo l'approssimazione nella forma

$$\exp\left(i \int_{x_0}^x \sigma' \right) = \exp\left(i \int_{x_0}^x (\sigma'_0 - i\hbar\sigma'_1 - \hbar^2\sigma'_2 + \dots)\right).$$

L'approssimazione è buona se valgono le diseguaglianze

$$\hbar^2 \frac{|\sigma'_2|}{|\sigma'_0|} \ll \hbar \frac{|\sigma'_1|}{|\sigma'_0|} \ll 1. \quad (6.12)$$

La seconda diseguagliaza, usando l'espressione (6.8) si scrive (assumiamo p reale)

$$\frac{1}{2} \hbar \frac{p'}{p^2} \ll 1 \Rightarrow \frac{1}{4\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll 1; \quad \lambda = \frac{h}{p}, \quad (6.13)$$

λ è la lunghezza d'onda di de Broglie. La (6.13) dice che l'approssimazione è buona quando la variazione della lunghezza d'onda è piccola, e questo è il punto che lega l'approssimazione all'analogo sviluppo in elettromagnetismo. Se si pone l'accento sulle caratteristiche meccaniche del problema, possiamo scrivere

$$p' = \frac{d}{dx} \sqrt{2m(E - V(x))} = \frac{1}{2} 2m \frac{V'}{p} = -m \frac{F}{p},$$

F è la forza. La (6.13) impone allora

$$m \hbar \frac{F}{p^3} \ll 1.$$

La condizione viene senz'altro violata nei punti in cui F è troppo grande oppure p è troppo piccolo, in particolare nei *punti di inversione* classici del moto, in cui $p = 0$.

Considerazioni analoghe si possono fare per la prima diseguagliaza (6.13). Notiamo che le diseguaglianze (6.13) impongono dei vincoli locali, ma la limitazione su σ_2 può non essere sufficiente. Nelle zone classicamente permesse σ_0 e σ_2 fanno ambidue la fase della funzione ψ , che è definita naturalmente modulo 2π . Potrebbe allora accadere che $\sigma'_2 \ll \sigma'_0$, ma ciò nonostante la *fase* complessiva dovuta a σ'_2 potrebbe essere rilevante, visto che in ogni caso la fase dovuta a σ_0 è considerata modulo 2π . In altre parole affinché l'approssimazione WKB funzioni deve essere verificata la richiesta globale

$$\int_{x_0}^x \hbar^3 \sigma'_2 dx \ll 1,$$

a prescindere da eventuali punti di inversione o singolarità del potenziale.

La presenza di punti di inversione provoca una partizione nell'insieme delle coordinate, x : in ogni intervallo, sufficientemente lontano dai punti di inversione, la funzione d'onda è approssimata da un'espressione del tipo (6.3). La particolare soluzione dell'equazione di Schrödinger che soddisfa date condizioni al contorno richiede di determinare queste costanti, occorre quindi stabilire delle *formule di connessione* fra i vari intervalli.

6.2 Formule di connessione

In questo paragrafo presenteremo una trattazione semplificata delle formule di connessione nel caso di un singolo punto di inversione, una trattazione più approfondita è data nei complementi, § 6.F.

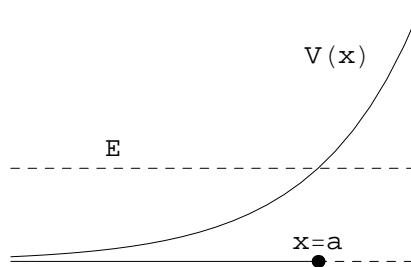


Figura 6.1: Schema per un singolo punto di inversione. $x < a$ è la zona permessa classicamente, $x > a$ quella vietata.

Sia $x = a$ una radice dell'equazione $E - V(x) = 0$. Supponiamo per fissare le idee che $V(x) > E$ per $x > a$. La situazione è quella rappresentata schematicamente in figura 6.1. La zona $x < a$ è detta *permessa classicamente*, la zona $x > a$ è la zona *vietata classicamente*.

Per $x < a$ due soluzioni semiclassiche linearmente indipendenti sono

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w|) ; \quad \frac{1}{\sqrt{p}} \sin(|w|) , \quad (6.14)$$

con

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V)} ; \quad w = \frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(E - V)} dx ,$$

mentre per $x > a$

$$\frac{1}{\sqrt{|\tilde{p}|}} e^{-\tilde{w}} ; \quad \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{\tilde{w}} , \quad (6.15)$$

con

$$\tilde{p} = \sqrt{2m(V - E)} ; \quad \tilde{w} = \frac{1}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(V - E)} dx .$$

L'idea è quella di risolvere *esattamente* l'equazione di Schrödinger con il potenziale lineare in un intorno di $x = a$ e quindi connettere lo sviluppo asintotico di questa soluzione alla soluzione WKB, (6.3), valida per $|x - a| \gg 0$.

Nell'intorno di a possiamo scrivere $2m\hbar^{-2}(E - V(x)) = \beta^2(a - x)$, e riscrivere la (6.1) nella forma

$$\psi'' + \beta^2(a - x)\psi = 0.$$

Posto $(x - a) = \beta^{-2/3}z$

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi - z\psi = 0. \quad (6.16)$$

Le soluzioni indipendenti dell'equazione (6.16) si chiamano funzioni di Airy: $\text{Ai}(z)$, $\text{Bi}(z)$. Il lettore può trovare un breve riassunto delle loro proprietà nel capitolo 10. Per grandi valori di z si ha:

$$\frac{|z|^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \xrightarrow[z \rightarrow -\infty]{} \text{Ai}(z) \xrightarrow[z \rightarrow \infty]{} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} z^{-1/4} e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}}; \quad (6.17a)$$

$$-\frac{|z|^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \xrightarrow[z \rightarrow -\infty]{} \text{Bi}(z) \xrightarrow[z \rightarrow \infty]{} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{-\frac{1}{4}} e^{+\frac{2}{3}|z|^{3/2}}. \quad (6.17b)$$

Scriviamo ora l'impulso e la variabile di fase w in termini di z :

$$p = \hbar\beta(a - x)^{\frac{1}{2}} = \hbar\beta^{\frac{1}{3}}\sqrt{-z}; \quad w(a, x) = -\frac{2}{3}\beta(a - x)^{\frac{3}{2}} = -\frac{2}{3}|z|^{\frac{3}{2}};$$

$$\tilde{p} = \hbar\beta(x - a)^{\frac{1}{2}} = \hbar\beta^{\frac{1}{3}}\sqrt{z}; \quad \tilde{w}(a, x) = \frac{2}{3}\beta(x - a)^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}|z|^{\frac{3}{2}}.$$

Dalle (6.17) segue allora, per le due soluzioni indipendenti

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4}\right) \xrightarrow[x \rightarrow -\infty]{} \psi \xrightarrow[x \rightarrow \infty]{} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{-|\tilde{w}|}; \quad (6.18a)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4}\right) \xrightarrow[x \rightarrow -\infty]{} \psi \xrightarrow[x \rightarrow \infty]{} \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{+|\tilde{w}|}. \quad (6.18b)$$

Una combinazione lineare generica delle due soluzioni, a meno di una costante di normalizzazione, si ottiene combinando le (6.18):

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4} + \alpha\right) \leftarrow \psi(x) \rightarrow \frac{\sin \alpha}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{|\tilde{w}|} + \frac{1}{2} \frac{\cos \alpha}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{-|\tilde{w}|}. \quad (6.19)$$

Le formule precedenti restano invariate nel caso in cui la zona classicamente accessibile sia $x > a$. Le (6.18), (6.19) saranno sufficienti a coprire tutte le applicazioni elementari del metodo WKB che vedremo in questo capitolo. Come è evidente dalla (6.19) queste formule vanno applicate "cum grano salis": una piccola variazione della fase α nella zona classicamente permessa induce una variazione esponenziale nella zona proibita, viceversa occorre conoscere con precisione esponenziale la funzione d'onda nella zona proibita per determinare la fase α . In teoria le relazioni (6.19) sono espressioni asintotiche esatte, nel caso di un solo punto di inversione, ma le instabilità ora esposte rendono delicata la loro applicazione.

In molti problemi si è interessati non alla soluzione generale dell'equazione di Schrödinger ma solo alla soluzione relativa a determinate condizioni al contorno, questo spesso permette l'uso non ambiguo delle (6.18). Il caso più notevole è senza dubbio quello in cui tutta la zona

$x > a$ è classicamente proibita e si estende fino a $+\infty$. In questo caso le funzioni ψ accettabili come stati sono a variazione limitata e questo esclude i termini esponenziali crescenti. Si ha quindi $\alpha = 0$ e

$$\left[\frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4}\right) \leftarrow \psi(x) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-|\tilde{w}|} \right]. \quad (6.20)$$

Un caso importante descritto dalle (6.18) è quello di due punti di inversione *distanti*: in questo caso se a priori è noto che la soluzione è combinazione lineare delle (6.18) con coefficienti dello stesso ordine, la parte esponenzialmente depressa può essere trascurata e questo permette di risolvere il problema con una precisione dell'ordine di $\mathcal{O}(e^{-\tilde{w}})$, alcuni esempi saranno presentati più avanti.

Le principali applicazioni della (6.18) sono: la derivazione della regola di quantizzazione di Bohr Sommerfeld per gli stati legati, la spiegazione semiclassica dell'effetto tunnel, la teoria del dedadimento α . Queste, ed altre, sono le applicazioni che saranno analizzate nel seguito del capitolo.

6.2.1 Interpolazione parabolica

Le formule di connessione (6.19) sono state ricavate approssimando la zona attorno al punto di inversione con un potenziale lineare. Spesso, nel seguito, useremo queste formule in successione, per descrivere il passaggio attraverso più punti di inversione, disaccoppiando in questo modo le diverse zone di transizione. Ovviamente si guadagnerebbe in accuratezza se si potessero scrivere delle formule di connessione direttamente per 2, 3... punti di connessione successivi. È possibile scrivere delle formule di questo tipo per due punti di inversione approssimando il potenziale con un polinomio quadratico. In questo caso l'equazione di Schrödinger ha una forma del tipo

$$\psi'' + (b - ax^2)\psi = 0;$$

le cui soluzioni si chiamano funzioni del cilindro parabolico e, in questo contesto, giocano un ruolo analogo alle funzioni di Airy per il polinomio lineare. Questa descrizione è utile, ad esempio, in situazioni come quelle riportate in figura 6.2 in cui una zona classicamente accessibile è abbastanza ben separata dalle altre.

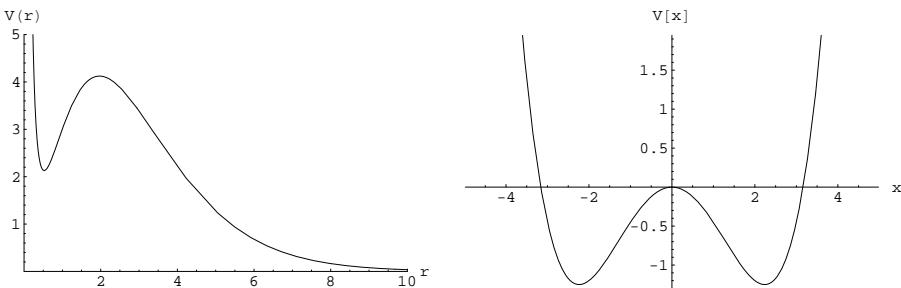


Figura 6.2: Un potenziale con tre punti di inversione ed uno con 4 punti di inversione.

Diamo la formula di connessione per il caso in cui da una delle due parti, ad esempio a sinistra, ci sia una zona con decrescita esponenziale, cioè diamo la formula che connette la prima zona classicamente proibita con la seconda²

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-|w(a_L, x)|) \xleftarrow[x \rightarrow -\infty]{} \psi \xrightarrow[x \rightarrow +\infty]{} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left\{ \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{e}{\tilde{J}} \right)^{\tilde{J}} \Gamma(\tilde{J} + \frac{1}{2}) \cos(\pi \tilde{J}) \exp(|w(a_R, x)|) + \sin(\pi \tilde{J}) \exp(-|w(a_R, x)|) \right\}. \quad (6.21)$$

a_L, a_R sono i due punti di inversione che delimitano la zona classicamente accessibile, in cui è possibile un moto di oscillazione classica. \tilde{J} indica la variabile d'azione in unità di \hbar :

$$\tilde{J} = \frac{J}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\pi} \int_{a_L}^{a_R} p(x) dx. \quad (6.22)$$

Nella (6.21) il termine in coseno è esponenzialmente crescente nella zona proibita, il termine in seno è quello decrescente. Notiamo, come è facile ricavare, che

$$\lim_{\tilde{J} \rightarrow \infty} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{e}{\tilde{J}} \right)^{\tilde{J}} \Gamma(\tilde{J} + \frac{1}{2}) = 2. \quad (6.23)$$

6.3 Stati legati e condizione di Bohr-Sommerfeld

Consideriamo un potenziale unidimensionale con un solo minimo, del tipo indicato in figura 6.3. Ci aspettiamo che l'equazione di Schrödinger fornisca una serie di autovalori E_n e di autofunzioni ψ_n corrispondenti a stati legati, cioè con $\psi_n \in \mathbb{L}^2$.

La trattazione semiclassica del problema parte dalla individuazione dei punti di inversione, soluzioni dell'equazione

$$p(x) = 0, \quad \text{cioè: } E = U(x).$$

Siano a , e b , questi punti. In questo paragrafo useremo le notazioni

$$w(c, x) = \frac{1}{\hbar} \int_c^x \sqrt{2m(E - V)} dx \quad \sigma(c, x) = \frac{1}{\hbar} \int_c^x \sqrt{2m(V - E)} dx, \quad (6.24)$$

che permettono di scrivere facilmente ed intuitivamente le condizioni di raccordo ai punti di inversione.

Nelle regioni classicamente inaccessibili $x < a, x > b$ lo sviluppo asintotico della soluzione dell'equazione di Schrödinger deve essere

$$\psi \sim \exp(\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx).$$

Il requisito $\psi \in \mathbb{L}^2$ impone che solo la soluzione decrescente all'infinito sia presente, quindi nella zona $x > b$ la soluzione accettabile è della forma

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(b, x)). \quad (6.25)$$

²Per la derivazione della (6.21) rimandiamo all'articolo [BerMou72] ed alle referenze ivi citate.

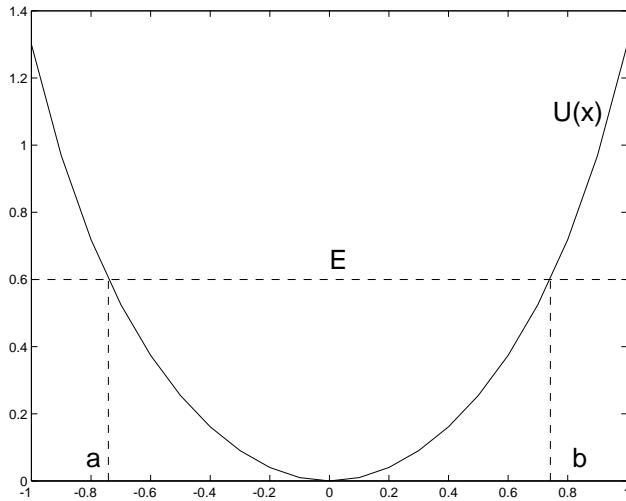


Figura 6.3: Potenziale unidimensionale. a, b sono i punti di inversione.

La formula di connessione (6.18) indica che per $x < b$ la funzione d'onda semiclassica è

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(b, x)) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos(w(x, b) - \frac{\pi}{4}). \quad (6.26)$$

Notiamo che questa formula di connessione fissa la fase della funzione d'onda ma, di per sé, non seleziona alcun valore dell'energia.

Lo stesso ragionamento, applicato al punto di inversione $x = a$ impone la connessione

$$\frac{D}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(x, a)) \rightarrow \frac{D}{\sqrt{|p|}} \cos(w(a, x) - \frac{\pi}{4}). \quad (6.27)$$

La condizione di quantizzazione nasce dall'imporre che le due determinazioni della funzione d'onda coincidano nella zona classicamente permessa $a \leq x \leq b$. Le ampiezze devono essere uguali, e questo implica $|C| = |D|$. Possiamo sempre scegliere funzioni d'onda reali, in questo modo $D = \pm C$. Per confrontare le fasi riscriviamo la (6.27) nella forma:

$$\cos(w(a, x) - \frac{\pi}{4}) = \cos(w(a, b) - w(x, b) - \frac{\pi}{4}) = \cos(w(x, b) - w(a, b) + \frac{\pi}{4}).$$

Questa determinazione deve differire dalla (6.26) per un fattore $n\pi$, con n pari o dispari a seconda del segno fra C e D . Quindi

$$-\frac{\pi}{4} = n\pi + \left(-w(a, b) + \frac{\pi}{4} \right) \Rightarrow w(a, b) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (6.28)$$

In corrispondenza del valore di n , pari o dispari, si ha $D = (-1)^n C$. Usando la definizione classica di variabile d'azione, J , definita come l'integrale di $p(x)$ su tutto il periodo del moto,

in questo caso lungo la traiettoria $a \rightarrow b \rightarrow a$, si può riscrivere la (6.28) nella forma

$$J \equiv \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar. \quad (6.29)$$

Questa è la condizione di Bohr-Sommerfeld della vecchia teoria dei quanti a meno di un (importante) fattore additivo $1/2$. La (6.29) è un'equazione per E , risolvendola al variare di n si hanno le stime semiclassiche dei livelli energetici.

Al crescere di x da a a b la fase del coseno nella funzione d'onda semiclassica

$$\frac{C}{\sqrt{p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right), \quad (6.30)$$

varia fra $-\pi/4$ e $n\pi - \pi/4$, cioè cambia di $n\pi$, quindi il coseno ha n zeri. La funzione d'onda ψ_n ha quindi n nodi e corrisponde all' n -esimo stato eccitato, cioè la sequenza $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ corrisponde a $E_0 \leq E_1 \dots E_0$ è l'energia dello stato fondamentale, E_1 quella del primo eccitato e via di seguito.

Come detto in un paragrafo precedente l'approssimazione semiclassica corrisponde al limite dell'ottica geometrica in elettromagnetismo, cioè al limite di piccole lunghezze d'onda rispetto alle lunghezze caratteristiche del problema. Nel nostro caso la lunghezza tipica è la grandezza della zona classicamente accessibile: $L = b - a$, quindi ci aspettiamo che l'approssimazione semiclassica sia tanto migliore quanto più $\lambda \ll L$, dove $\lambda = h/p$ è la lunghezza d'onda di de Broglie. Nello stato n -esimo la funzione d'onda compie $n/2$ oscillazioni, avendo n nodi, quindi come ordine di grandezza si ha $\lambda \sim L/n$: ci aspettiamo allora che l'approssimazione semiclassica sia tanto più precisa quanto più n è grande. Si deve recuperare il limite classico nel limite $n \rightarrow \infty$.

Per la determinazione completa della funzione d'onda semiclassica occorre fissare la costante C . Normalmente la funzione d'onda di uno stato legato viene fissata dalla condizione che la norma \mathbb{L}^2 sia 1. La funzione d'onda è esponenzialmente depressa nella zona esterna all'intervallo $[a, b]$ quindi con buona approssimazione si può scrivere

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \simeq \int_a^b |\psi|^2 dx = C^2 \int_a^b \frac{dx}{p} \cos^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.31)$$

Quando l'approssimazione semiclassica è buona il coseno compie molte oscillazioni quindi in prima approssimazione possiamo sostituire $\cos^2(\varphi)$ col suo valor medio, $1/2$, ottenendo

$$\frac{C^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{p} \simeq 1. \quad (6.32)$$

Il periodo di oscillazione classico del sistema è definito da

$$T = 2 \int_a^b \frac{dx}{v} = 2m \int_a^b \frac{dx}{p},$$

quindi

$$\frac{C^2}{2} \frac{T}{2m} = 1 \quad \Rightarrow \quad C = 2 \sqrt{\frac{m}{T}} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}; \quad \omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (6.33)$$

Abbiamo ottenuto la stima (6.32) per C^2 supponendo $n \gg 1$, in realtà spesso questa formula viene usata anche per piccoli n , in particolare per lo stato fondamentale. Nel paragrafo 6.A il lettore può trovare una dimostrazione della stima (6.33) che non fa uso della condizione $n \gg 1$.

Nota

Notiamo che se si fosse usata l'interpolazione parabolica attraverso i due punti di inversione, eq.(6.21), la richiesta di avere una funzione decrescente da entrambi i lati del potenziale avrebbe imposto $\cos(\pi\tilde{J}) = 0$ e quindi

$$\frac{1}{\hbar}J = n + \frac{1}{2} .$$

cioè di nuovo la condizione (6.29).

Continuazione analitica

È utile avere un'idea geometrica del significato delle formule di connessione (6.20) e della regola di quantizzazione (6.29). Consideriamo il caso di un singolo punto di inversione in $x = a$ con una zona classicamente accessibile in $x < a$. La forma (6.11) della soluzione è dovuta al fatto che l'azione classica, integrale di p , è una funzione a più valori per $x < a$, schematicamente si può scrivere :

$$p(x) = \pm\sqrt{a - x} .$$

Per questa situazione

$$|w(a, x)| = \int_x^a \sqrt{a - x} = \frac{2}{3} (a - x)^{3/2} ,$$

e la funzione d'onda WKB ha la forma

$$\psi = \frac{1}{(a - x)^{1/4}} \cos \left(\frac{2}{3} (a - x)^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) ; \quad x < a . \quad (6.34)$$

Possiamo considerare i due valori di p come due determinazioni diverse della stessa funzione promuovendo x a variabile complessa, questo significa considerare la superficie di Riemann della funzione $\sqrt{a - z}$.

Supponiamo ora che per $x > a$ la funzione d'onda sia un esponenziale decrescente, cioè della forma³

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x - a}} \exp \left(- \int_a^x (x - a)^{1/2} dx \right) = \frac{1}{\sqrt{x - a}} \exp \left(- \frac{2}{3}(x - a)^{3/2} \right) . \quad (6.35)$$

Se risolviamo l'equazione di Schrödinger nel campo complesso possiamo pensare di ottenere la ψ nella zona $x < a$ prolungando analiticamente la (6.35). L'idea è che nella continuazione nel piano complesso possiamo percorrere un cammino che eviti il punto di diramazione, restando quindi sempre in una zona in cui l'approssimazione WKB è lecita. Effettuando una continuazione in senso antiorario nel semipiano complesso superiore

$$x - a \rightarrow |x - a|e^{+i\pi} ,$$

mentre per una continuazione, in senso orario, attraverso il semipiano inferiore

$$x - a \rightarrow |x - a|e^{-i\pi} .$$

³Trascuriamo tutti i fattori numerici inessenziali al ragionamento.

In questo modo raggiungiamo, rispettivamente, il bordo superiore ed inferiore del taglio, ottenendo, nei due casi

$$x > a : \quad \frac{1}{(x-a)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(x-a)^{3/2}} \rightarrow \begin{cases} \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{|x-a|^{1/4}} e^{i\frac{2}{3}|x-a|^{3/2}} ; \\ \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{|x-a|^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3}|x-a|^{3/2}} . \end{cases} \quad (6.36)$$

Questo significa che i due prolungamenti analitici selezionano le due componenti, verso destra e verso sinistra, dell'onda stazionaria (6.34). Il fatto che nei due prolungamenti si raggiunga solo una delle due componenti si capisce se si opera al contrario. Se da $x < a$ si opera una rotazione *oraria* di un angolo φ nel semipiano superiore (siamo cioè sulla parte superiore del taglio) le due possibili fasi si trasformano come

$$\Phi_+ = i\rho e^{-i\varphi} = i\rho \cos \varphi + \rho \sin \varphi ; \quad \Phi_- = -i\rho e^{-i\varphi} = -i\rho \cos \varphi - \rho \sin \varphi .$$

Quindi la fase negativa è esponenzialmente depressa rispetto a quella positiva e si perde nell'approssimazione WKB in questo prolungamento. Il contrario succede per una continuazione nel semipiano inferiore. I due risultati (6.36) ottenuti sono quindi in effetti i due addendi di una stessa funzione e, mettendoli assieme

$$\frac{1}{(x-a)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(x-a)^{3/2}} \rightarrow 2 \frac{1}{|x-a|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|x-a|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) ,$$

che riproduce la (6.34) ed è in accordo con le formule di connessione.

Questa descrizione mette in luce che il fattore $\pi/4$ nella fase è dovuto semplicemente al fattore $1/\sqrt{p}$ nell'espressione della funzione d'onda e che si ha un'unica funzione con due determinazioni diverse su una superficie di Riemann. In questo linguaggio la condizione di monodromia per ψ assume un significato geometrico: in presenza di un taglio fra due punti di inversione a, b la (6.29) è la condizione di monodromia della ψ nel piano complesso:

$$\oint p(z) dz - \frac{\pi}{2} = 2n\pi .$$

Il primo termine è la variazione di fase dovuta all'integrale di p , il termine $-\pi/2$ è l'effetto delle due fasi $\pi/4$ acquistate dal prefattore $1/\sqrt{p}$ aggirando i due punti di inversione.

Il punto geometrico che vogliamo sottolineare è che in quest'ottica la formula (6.29) è un'espressione della topologia dello spazio in cui è definita ψ , in questo caso un piano complesso con un taglio, mentre è poco sensibile ai dettagli sulla determinazione di ψ o a quanto sia corretta l'approssimazione WKB nell'intorno dei punti di inversione (il cammino nel piano complesso può essere effettuato lontano da questi punti).

Purtroppo questa descrizione non può essere presa alla lettera, e questo è il motivo per cui abbiamo usato l'approssimazione con le funzioni di Airy per ricavare le formule di connessione. In effetti l'espressione $\exp(-w(a, x))$ è, nello spirito del WKB, uno sviluppo asintotico, molto al di là del punto di inversione, della soluzione esatta. In generale *non è vero* che la continuazione analitica dello sviluppo asintotico dà lo sviluppo asintotico della continuazione analitica, quindi, in generale, la continuazione analitica di $\exp(-w(a, x))$ non dà lo sviluppo WKB alla sinistra del punto di inversione. Questo problema è stato trovato da Stokes proprio analizzando lo sviluppo asintotico delle funzioni di Airy che compaiono in ottica nello studio dei fenomeni diffrattivi. Un breve cenno a questa questione è dato nel paragrafo 6.F.

Il punto che qui vogliamo sottolineare è però il seguente: se si può considerare la funzione d'onda semiclassica come definita su uno spazio più ampio in cui le varie espressioni dell'azione appaiono come determinazioni diverse di una stessa funzione, la condizione di quantizzazione (6.29) deve apparire come

una condizione di monodromia su questo spazio e non deve dipendere dal dettaglio del comportamento della ψ . È proprio quello che succede: lo spazio in questione è lo spazio delle fasi classico del sistema, questa questione è affrontata nel paragrafo 6.13 e seguenti.

6.3.1 Potenziale definito per $x > 0$

In diverse applicazioni è utile estendere l'analisi precedente al caso in cui la particella è vincolata in un semispazio, il caso tipico è quello della coordinata radiale per un potenziale $V(r)$, in onda s . La situazione è illustrata in figura 6.4. In questo caso la funzione d'onda deve soddisfa-

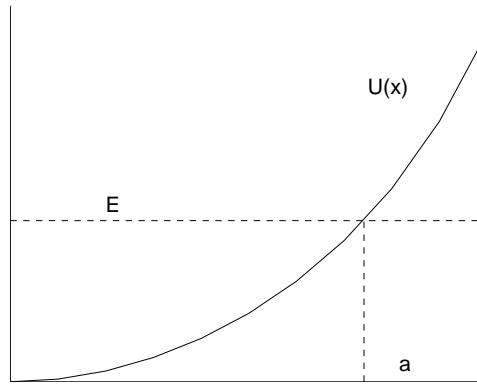


Figura 6.4: Potenziale unidimensionale limitato a $x > 0$. 0, a sono i punti di inversione.

re il vincolo $\psi(0) = 0$. È facile ricavare la condizione di quantizzazione dalle considerazioni svolte nel paragrafo precedente: possiamo immaginare di estendere in modo pari il potenziale nella zona $x < 0$. In questo potenziale esteso i punti di inversione sono $\pm a$. La condizione al contorno è soddisfatta per gli stati *dispari* di questo potenziale esteso, quindi deve valere

$$w(-a, a) = 2w(0, a) = \left[(2n + 1) + \frac{1}{2} \right] \pi = (2n + \frac{3}{2}) \pi \Rightarrow w(0, a) = \left(n + \frac{3}{4} \right) \pi . \quad (6.37)$$

Ovvero, in termini di integrale di azione J :

$$\boxed{J = \frac{1}{2\pi} \oint p(x)dx \equiv \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^a p(x)dx = \left(n + \frac{3}{4} \right) \hbar .} \quad (6.38)$$

È istruttivo comunque ricavare la stessa condizione direttamente. La condizione di raccordo ed il requisito $\psi \in L^2$ in questo caso si riducono a

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(a, x)) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos(w(x, a) - \frac{\pi}{4}) .$$

L'annullarsi della funzione in $x = 0$ impone

$$w(0, a) - \frac{\pi}{4} = n\pi + \frac{\pi}{2} \rightarrow w(0, a) = n\pi + \frac{3\pi}{4} .$$

che è ancora la condizione (6.37).

6.3.2 Sulla definizione del limite $\hbar \rightarrow 0$

È opportuno che il lettore consideri il limite $\hbar \rightarrow 0$ dal punto di vista fisico e non soltanto come una approssimazione matematica. \hbar ha le dimensioni di un'azione, quindi per affermare in quale limite possa o no valere l'approssimazione WKB occorre confrontare questo parametro con un parametro caratteristico del problema avente le stesse dimensioni. Nel caso di procedure di quantizzazione come quella contenuta nella (6.29) l'approssimazione sarà buona se $\hbar/J \ll 1$, cioè per grandi valori di n , come affermato precedentemente sulla base dell'analogia con l'ottica geometrica. Formalmente il limite semiclassico è quindi definito dalla procedura $\hbar \rightarrow 0$ a J costante, ovvero come uno sviluppo in potenze di n . Ci aspettiamo che le correzioni al limite WKB siano quindi scrivibili nella forma adimensionale

$$\frac{J}{\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = n + \frac{1}{2} + \frac{c_1}{n} + \dots$$

La (6.29) va quindi interpretata come un'affermazione sul termine principale e sul primo termine subdominante nello sviluppo in $1/n$. Qualunque affermazione che si basi su termini depressi rispetto a quelli scritti nella (6.29) richiede un'analisi degli ordini successivi dello sviluppo. Ad esempio vedremo fra poco che l'approssimazione WKB riproduce esattamente lo spettro dell'oscillatore armonico, e quello dell'atomo di idrogeno. Queste affermazioni, di per sé, non hanno molto significato a meno che non si dimostri che le correzioni al risultato sono nulle.

Un altro punto da tenere presente è il seguente. Può accadere che \hbar compaia nella forma dell'Hamiltoniana non solo a moltiplicare termini derivativi, come $\hbar^2 d^2/dx^2$ nell'energia cinetica, ma anche termini di potenziale. Nello spirito dell'approssimazione semiclassica, un'approssimazione di piccole lunghezze d'onda, i termini di potenziale vanno trascurati, nel senso che nella regione di validità dell'approssimazione questi termini non devono dare alcun contributo. Questo tipo di approccio emergerà in modo naturale nella trattazione dei sistemi a molti gradi di libertà effettuata nel paragrafo 6.13. L'eccezione a questo schema si presenta nel caso in cui siano presenti delle singolarità nel potenziale. Ad esempio un fattore del tipo \hbar/x sarà sempre trascurabile eccetto un intorno di $x = 0$. In tale intorno normalmente l'approssimazione semiclassica viene a cadere e la struttura particolare della funzione d'onda dipende dalla forma della singolarità: è l'analogo del fatto che la fase α nella formula generale (6.19) varrà determinata esaminando il comportamento della funzione d'onda nell'intorno del punto di connessione in cui l'approssimazione WKB viene a cadere.

Esempi di queste problematiche si incontrano, ad esempio, nella trattazione delle variabili angolari che faremo nel prossimo paragrafo.

6.4 Variabili angolari

Consideriamo il caso in cui l'equazione di Schrödinger, o in generale l'equazione agli autovectori, si riferisca a variabili angolari. Il caso più semplice è quello di L_z . Per il moto azimutale

l'equazione di Schrödinger ha la forma

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = \lambda f. \quad (6.39)$$

φ indica l'angolo azimutale, f la funzione d'onda, λ l'autovalore. La (6.39) è chiaramente risolubile esattamente, comunque nello spirito dell'approssimazione WKB possiamo trattarla come un'equazione di Schrödinger unidimensionale per una particella libera, con massa $1/2$ ed energia λ . Il momento (classico) coniugato a φ è $p_\varphi = \pm\sqrt{\lambda}$. Le due determinazioni possibili per p_φ corrispondono alle due possibili soluzioni semiclassiche

$$f = C \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^\varphi p_\varphi d\varphi\right] = C \exp(\pm \frac{i}{\hbar} p_\varphi \varphi). \quad (6.40)$$

Il punto interessante è che, essendo φ periodico e p_φ costante, e non nullo, *non si hanno punti di inversione*, quindi la soluzione semiclassica (6.40) è sempre valida. La condizione di quantizzazione nasce dall'imporre la periodicità in φ :

$$f(\varphi + 2\pi) = f(\varphi); \Rightarrow p_\varphi = \hbar m; \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (6.41)$$

che è la soluzione *esatta* del sistema.

Notiamo che in questo moto periodico la condizione di quantizzazione non ha correzioni semintere, come nel caso oscillatorio. Questi due tipi di moto corrispondono a ciò che nella vecchia teoria dei quanti erano i moti rotatori ed i moti di *librazione* (oscillazione) e chiarisce come mai in alcune applicazioni della vecchia teoria dei quanti alcune volte occorresse quantizzare con multipli interi di \hbar , come in questo caso, altre volte con numeri seminteri, come nel caso dell'oscillatore armonico. L'espressione normalizzata della funzione d'onda WKB è

$$f(\varphi) = \frac{C}{\sqrt{|p_\varphi|}} \exp(im\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi). \quad (6.42)$$

La costante di normalizzazione qui differisce dalla (6.33) perché stiamo considerando funzioni d'onda complesse, stiamo cioè usando gli esponenziali invece di seni e coseni.

Il caso immediatamente più complicato è quello delle variabili angolari nello spazio, cioè la risoluzione dell'equazione per la parte angolare del laplaciano

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \psi = \Lambda \psi. \quad (6.43)$$

Sappiamo dalla teoria del momento angolare che la soluzione esatta del sistema ha come autovalori $\Lambda = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$. Vediamo come la questione viene affrontata in approssimazione semiclassica. Per semplicità trattiamo il caso $m = 0$, cioè eliminiamo la derivata rispetto a φ . Le soluzioni esatte della (6.43) sono

$$\psi(\theta) = P_\ell(\cos \theta); \quad \ell \in \mathbb{N}; \quad \psi(0) = 1. \quad (6.44)$$

Effettuando il cambiamento di variabili $\psi(\theta) = f(\theta)/\sqrt{\sin \theta}$ possiamo portare la (6.43) alla forma "canonica"

$$\hbar^2 \left(\frac{d^2 f}{d\theta^2} + \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4 \sin^2 \theta} \right) f \right) + \Lambda f = 0; \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (6.45)$$

L'impulso "classico" è

$$p_\theta = \sqrt{\Lambda + \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{4 \sin^2 \theta}} . \quad (6.46)$$

La condizione di semiclassicità nella (6.45) viene violata nell'intorno dei due estremi del dominio. In effetti la lunghezza d'onda di de Broglie per $\theta \sim 0$ è dell'ordine di $\lambda_\theta = \hbar/p_\theta \sim \theta$ e quindi $d\lambda_\theta/d\theta \sim 1$, lo stesso ragionamento vale per $\theta \sim \pi$. Lontano da questi intorni, per Λ finito e $\hbar \rightarrow 0$ possiamo trascurare il termine in $1/\sin^2 \theta$ e posto $\lambda = \sqrt{\Lambda + \hbar^2/4}$ scrivere immediatamente la soluzione semiclassica nella forma

$$f(\theta) = A \cos(\lambda\theta - \alpha) ; \quad \text{con} \quad \frac{\hbar}{\sin \theta} \ll \lambda; \quad \text{cioè} \quad \theta \gg \frac{\hbar}{\lambda}; \quad \text{e} \quad \theta \ll \pi - \frac{\hbar}{\lambda} . \quad (6.47)$$

La fase α normalmente viene determinata dalle condizioni di raccordo ma in questo caso non possiamo usare direttamente le (6.20) perché siamo in presenza di una singolarità nell'equazione, non semplicemente dello sviluppo WKB: il raccordo va effettuato trovando una soluzione esatta nella vicinanza della singolarità e raccordandola alla (6.47). Per $\theta \ll 1$ la (6.45) diventa

$$\frac{d^2 f}{d\theta^2} + \left(\frac{\lambda^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4\theta^2} \right) f = 0 , \quad (6.48)$$

che ha come soluzione *regolare*

$$f(\theta) \sim \sqrt{\theta} J_0\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta\right); \quad \theta \ll 1 . \quad (6.49)$$

J_0 è la funzione di Bessel di ordine 0. La normalizzazione nella (6.49) è stata scelta in modo da soddisfare la (6.44), in quanto $J_0(0) = 1$. Per $\lambda \gg 1$ la (6.49) ha una zona di sovrapposizione con la (6.47) nella zona $\hbar/\lambda \ll \theta \ll 1$. In questa zona possiamo usare lo sviluppo asintotico⁴

$$J_0\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta\right) \sim \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta - \frac{\pi}{4}\right) , \quad (6.50)$$

e questo fissa le due costanti A, α nella (6.47):

$$f(\theta) \simeq \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta - \frac{\pi}{4}\right) . \quad (6.51)$$

Notiamo che, in accordo con i casi visti in precedenza, la procedura *non fissa* il valore di λ , che deve discendere dalla condizione di monodromia per $f(\theta)$. La stima fatta per piccoli θ può essere ripetuta in modo letterale attorno al secondo punto singolare, $\theta = \pi$, basta cambiare variabile e porre $x = \pi - \theta$. In questo modo otteniamo una seconda espressione per f :

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}(\pi - \theta) - \frac{\pi}{4}\right) = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}(\theta - \pi) + \frac{\pi}{4}\right) . \quad (6.52)$$

⁴Questo sviluppo si ricava usando il metodo del punto sella nella rappresentazione integrale

$$J_0(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(z \cos \theta) .$$

Le due determinazioni devono coincidere a meno di un segno e quindi per le fasi deve valere

$$\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta - \frac{\pi}{4}\right) - \left(\frac{\lambda}{\hbar}(\theta - \pi) + \frac{\pi}{4}\right) = \pi\ell \quad \Rightarrow \quad \lambda = \hbar(\ell + \frac{1}{2}) ; \quad \ell \in \mathbb{N} ,$$

da cui $\Lambda = \lambda^2 - \hbar^2/4 = \hbar^2\ell(\ell + 1)$ e, per la funzione d'onda:

$$P_\ell(\cos\theta) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi\ell\theta}} \cos((\ell + \frac{1}{2})\theta - \frac{\pi}{4}) . \quad (6.53)$$

Notiamo esplicitamente che la condizione $\lambda/\hbar \gg 1$ si scrive, in termini di ℓ , $\ell \gg 1$.

Il fatto di avere ottenuto l'autovalore esatto per l'operatore L^2 è frutto di un piccolo “imbroglio”: è dovuto all'avere trattenuto il termine $\hbar^2/4$ nell'espressione (6.46). Nel limite $\hbar \rightarrow 0$ a Λ fisso, che è il limite semiclassico, questo è arbitrario, ed in effetti abbiamo già detto che l'approssimazione semiclassica “canonica” consiste nel trascurare i termini in \hbar che non moltiplicano derivate. Il seguito del ragionamento non cambia, in particolare il valore di λ , ma semplicemente Λ diventa $\Lambda = \hbar^2\ell + 1/2)^2$ che coincide con l'espressione precedente a meno di termini piccoli per $\lambda \gg 1$. Un altro modo di vedere la cosa è notare che

$$\sqrt{\ell(\ell + 1)} = \ell + \frac{1}{2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\ell}\right) .$$

Nel limite di validità dell'approssimazione semiclassica usare l'uno o l'altro valore di Λ è irrilevante⁵, vista la condizione $\ell \gg 1$.

La questione si pone nel caso si vogliano estrapolare le formule semiclassiche a piccoli valori di ℓ , in particolare in onda s , per $\ell = 0$. In questo caso la bontà dell'approssimazione dipende dal sistema. Un esempio particolare è quello del campo coulombiano in tre dimensioni, in cui la sostituzione $\Lambda \rightarrow \hbar^2(\ell + 1/2)^2$ dà la migliore approssimazione.

6.5 Problemi radiali e singolarità

Considerazioni simili a quelle viste nel paragrafo precedente si applicano, in generale, in presenza di singolarità del potenziale. Se i punti di inversione coincidono o sono vicini a punti singolari, l'approssimazione WKB, e le formule di connessione, devono essere modificate. Un caso limite è proprio quello di potenziali definiti su una semiretta, in cui abbiamo già visto come la condizione di quantizzazione cambi dalla forma (6.29) alla forma (6.38). Il problema diventa rilevante per potenziali singolari in $r = 0$ come il potenziale coulombiano, e, in generale, in presenza di una barriera centrifuga, in cui il potenziale effettivo radiale si comporta come $1/r^2$.

Consideriamo una particella in un campo centrale $U(r)$. L'equazione di Schrödinger per la funzione d'onda radiale ridotta, $\varphi = R(r)/r$ si scrive:

$$\hbar^2 \frac{d^2\varphi}{dr^2} + \left[2m(E - U) - \frac{L^2}{r^2}\right] \varphi = 0 ; \quad L^2 = \hbar^2\ell(\ell + 1) . \quad (6.54)$$

⁵Il lettore noti come le ultime considerazioni sono una esplicitazione nel caso in esame delle considerazioni fatte nel paragrafo 6.3.2.

La condizione di validità dell'approssimazione semiclassica in generale è (per la coordinata radiale):

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{\hbar}{|p|} \right) \ll 1 ; \quad p = \sqrt{2m \left((E - U) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \ell(\ell + 1) \right)} . \quad (6.55)$$

Per un potenziale singolare della forma $V \sim Cr^{-\alpha}$, per $r \rightarrow 0$ si ha $|p| \sim \sqrt{2mV} \sim r^{-\alpha/2}$, quindi

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{\hbar}{|p|} \right) \sim \frac{\alpha\hbar}{2\sqrt{2mC}} r^{\alpha/2-1} \ll 1 . \quad (6.56)$$

La condizione semiclassica è sicuramente violata per $\alpha < 2$, in particolare quindi per il potenziale coulombiano in onda s , mentre il caso $\alpha = 2$ che corrisponde ad esempio al caso di un potenziale coulombiano in onda $\ell \neq 0$, si è al bordo della zona di validità. Questo è il caso generale per potenziali in cui la parte di potenziale centrifugo è dominante, in cui si ha, per $r \rightarrow 0$:

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{\hbar}{|p|} \right) \sim \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell + 1)}} . \quad (6.57)$$

L'approssimazione è buona, come ci si aspetta, solo per $\ell \gg 1$.

Analizziamo la situazione per il caso particolarmente importante di un potenziale coulombiano $U = -Ze^2/r$. Conviene distinguere due tipi di problemi:

- a) Si è interessati all'approssimazione semiclassica dello spettro. In questo caso si adoperano consistentemente le regole semiclassiche di Bohr Sommefeld. La parte angolare, secondo questa procedura, ha una quantizzazione del tipo $L = \hbar(\ell + 1/2)$. Si usa quest'espressione per calcolare l'impulso radiale classico⁶ p_r :

$$p_r(r) = \sqrt{2m \left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 \right)} , \quad (6.58)$$

e si usa la regola di quantizzazione (6.29). L'equazione $p_r = 0$ ha due radici per $E < 0$, dando luogo a due punti di inversione r_1, r_2 :

$$\frac{1}{r_{1,2}} = \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2}{a_0} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{2|E|}{\varepsilon_0} (\ell + \frac{1}{2})^2} \right) , \quad (6.59)$$

con

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{Zme^2} ; \quad \varepsilon_0 = \frac{Ze^2}{a_0} .$$

La condizione (6.29) si scrive

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint p_r(r) dr = \frac{1}{\pi} \int_{r_1}^{r_2} p_r(r) dr = \hbar(n_r + \frac{1}{2}) , \quad (6.60)$$

⁶Notiamo che questa espressione è diversa dalla (6.55).

ed effettuando l'integrale⁷

$$J_r = \hbar \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2|E|}} - \hbar(\ell + \frac{1}{2}) = \hbar(n_r + \frac{1}{2}) \quad ; n_r = 0, 1, \dots$$

da cui discendono i livelli:

$$E_n = -|E| = -\frac{\varepsilon_0}{2n^2}; \quad n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, \dots$$

coincidenti con quelli esatti.

- b) Si è interessati a scrivere un'approssimazione per la funzione d'onda WKB e, da questa, ricavare la regola di quantizzazione per p_r ed i livelli energetici. In questo caso si pone il problema di avere una buona approssimazione per la funzione d'onda, e, come evidente dalle eq.(6.56,6.57), si hanno problemi in onda s e in onda $\ell > 0$ con la procedura standard, ottenendo una stima ragionevole solo per $\ell \gg 1$. A titolo di esempio facciamo notare che per $\ell > 0$ la regione $r \sim 0$ è classicamente proibita e la prescrizione WKB predice un comportamento esponenziale nell'azione:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-\int |p(r)| dr} \sim \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\pm \sqrt{\ell(\ell+1)} \int r \frac{dr}{r}} = r^{1/2} r^{\pm \sqrt{\ell(\ell+1)}}$$

mentre il comportamento regolare è $\varphi \sim r^{\ell+1}$, come si ricava immediatamente dalla (6.54). Lasciamo anche al lettore la semplice verifica che per $L^2 \rightarrow \hbar^2 \ell(\ell+1)$ la regola di quantizzazione (6.29) non riproduce lo spettro esatto.

Un metodo per trattare consistentemente il limite $\hbar \rightarrow 0$ nell'equazione (6.54) è stato proposto da Langer[Langer] e si basa essenzialmente su un cambiamento di variabili fatto in modo tale da mandare all'infinito il punto singolare e rendere così l'approssimazione WKB valida sull'intero asse reale. Il risultato sarà ancora una volta la sostituzione $\ell(\ell+1) \rightarrow (\ell + \frac{1}{2})^2$, che in questo contesto prende il nome di *correzione di Langer*.

6.5.1 Correzione di Langer

Poniamo

$$r = e^x; \quad \varphi = e^{x/2} u(x), \quad (6.61)$$

sostituendo nella (6.54) si ottiene

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\ell(\ell+1) + \frac{1}{4} \right) u + (Ee^{2x} + Ze^2 e^x) u = 0. \quad (6.62)$$

L'impulso effettivo, per $E < 0$ vale

$$p(x) = e^x \sqrt{2m \left(Ze^2 e^{-x} - |E| - \frac{\hbar^2(\ell + \frac{1}{2})^2}{2m} e^{-2x} \right)}.$$

⁷Per i dettagli si vedano gli esercizi 6.1,6.3.

Con questa sostituzione l'approssimazione WKB vale su tutto l'asse reale, al di fuori dei punti di inversione del moto, in quanto il punto singolare del potenziale è stato spostato all'infinito. I punti di inversione sono identici a quelli precedenti, con e^{-x} al posto di $1/r$ e la condizione di Bohr - Sommerfeld si scrive

$$\hbar(n_r + \frac{1}{2}) = J_x = \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \hbar(\ell + \frac{1}{2}) \int_{x_1}^{x_2} e^x \sqrt{(e^{-x} - \frac{1}{r_2})(\frac{1}{r_1} - e^{-x})} dx ,$$

che è identica alla (6.60) dopo il cambiamento di variabile $r = e^x$, dà quindi il corretto spettro idrogenoide.

Per $x \rightarrow -\infty$ si ha $|p(x)| \rightarrow \hbar(\ell + \frac{1}{2})$ quindi per piccoli r :

$$u \sim \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\int \frac{|p|}{\hbar} dx} \rightarrow e^{(\ell + \frac{1}{2})x} ,$$

e per la funzione d'onda radiale ridotta:

$$\varphi = e^{x/2} u \rightarrow e^{(\ell+1)x} = r^{\ell+1} ,$$

che è il corretto comportamento asintotico.

La correzione di Langer può essere adottata per analizzare l'approssimazione WKB in qualsiasi potenziale centrale. Per ulteriori approfondimenti della questione il lettore può consultare [Langer, BerMou72].

6.6 Esempi

Oscillatore armonico

L'equazione di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \psi = E\psi ; \quad p^2 = 2m(E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2) . \quad (6.63)$$

I punti di inversione classici sono:

$$x = \pm a = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} .$$

La condizione di quantizzazione semiclassica si scrive

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-a}^a dx \sqrt{2mE \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)} = \frac{1}{\pi} \sqrt{2mE} \int_0^a dx \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} = \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) , \quad (6.64)$$

ovvero, ponendo $x = az$:

$$\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2mE} a \int_0^1 \sqrt{1 - z^2} dz = \frac{2E}{\omega\pi} \frac{\pi}{2} = \frac{E}{\omega} .$$

Quindi i livelli energetici in approssimazione semiclassica sono *esatti*.

La funzione $p(x)$ corrispondente all' n -esimo livello eccitato è

$$p_n(x) = \sqrt{2mE_n} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a_n^2}} ; \quad a_n = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}} ,$$

ed il corrispondente periodo di oscillazione classico è dato da

$$T_n = 2\sqrt{\frac{m}{2E_n}} \int_{-a_n}^{a_n} \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{x^2}{a_n^2}}} = 2\frac{2}{\omega} \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1 - z^2}} = \frac{2\pi}{\omega} ;$$

uguale per tutti i livelli, è la ben nota proprietà di isocronismo delle piccole oscillazioni.

Le funzioni d'onda semiclassiche, al contrario dei livelli energetici, non sono riprodotte esattamente dall'approssimazione WKB.

La figura 6.5 presenta un confronto fra la funzione d'onda esatta e quella in approssimazione WKB per lo stato fondamentale e per lo stato con $n = 10$: è evidente che per lo stato eccitato l'approssimazione è buona al di fuori di un piccolo intorno dei punti di inversione.

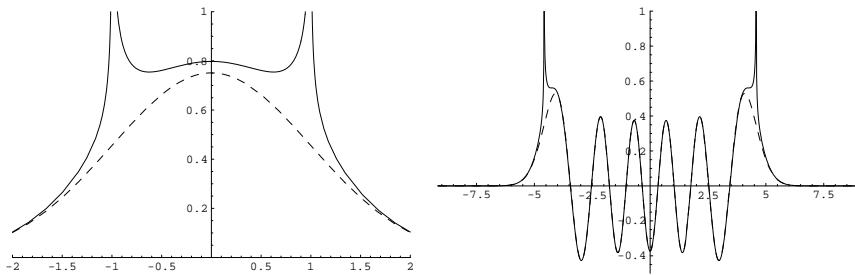


Figura 6.5: Funzione d'onda WKB (linea intera) e funzione d'onda esatta (linea tratteggiata) per gli stati $n = 0$ e $n = 10$ di un oscillatore armonico.

Per referenza riportiamo le espressioni esplicite delle funzioni d'onda. Con i valori di $C, a, p(x)$ precedentemente calcolati:

$$C = \sqrt{\frac{4m}{T}} ; \quad a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} ; \quad E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) ; \quad p(x) = \sqrt{2mE} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} ,$$

si ha

$$\begin{aligned} 0 < x < a : \quad \psi(x) &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{2\pi}{4}(n + \frac{1}{2}) - \frac{\pi}{4} + \int_0^x \frac{p(x)}{\hbar} dx\right) = \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{n\pi}{2} + \frac{E}{\hbar\omega} \left[\arcsin\left(\frac{x}{a}\right) + \frac{x}{a} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}\right]\right) ; \\ a < x : \quad \psi(x) &= \frac{C}{2\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{E}{\hbar\omega} \left[\frac{x}{a} \sqrt{\frac{x^2}{a^2} - 1} - \operatorname{argcosh}\left(\frac{x}{a}\right)\right]\right) . \end{aligned}$$

Una misura quantitativa dell'approssimazione si ha, ad esempio, confrontando il valore della funzione d'onda nell'origine con la soluzione esatta, per gli stati pari ovviamente. In approssimazione semiclassica

$$\begin{aligned} |\psi_{2n}(0)| &= C \frac{1}{\sqrt{p(0)}} \cos \left(\int_{-a}^0 p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}} \frac{1}{(2m\hbar\omega(2n + \frac{1}{2}))^{1/4}} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} (2n + \frac{1}{2})^{-1/4}. \end{aligned}$$

Per la soluzione esatta

$$|\psi_{2n}(0)| = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} |H_{2n}(0)| = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{(2n)!}{n!}. \quad (6.65)$$

Per grandi n usando la formula di Stirling

$$k! \simeq k^k e^{-k} \sqrt{2\pi k},$$

si ha

$$\frac{1}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{(2n)!}{n!} = \frac{\sqrt{(2n)!}}{2^n n!} \rightarrow (\pi n)^{-1/4}.$$

Sostituendo nella (6.65) si verifica la consistenza con il risultato semiclassico. Per lo stato fondamentale

$$\psi_0(0) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4}; \quad \psi_0^{sc}(0) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \sqrt{2 \cdot \pi^{-1/4}} = \psi_0(0) \cdot 1.0623;$$

quindi l'approssimazione è ragionevolmente buona anche per il fondamentale.

Potenziale quartico.

Come esercizio non banale proviamo il potenziale $U = \frac{g}{2}x^4$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} g x^4 \psi = E\psi. \quad (6.66)$$

Operando la trasformazione $x = \lambda z$, con $\lambda = (\hbar^2/mg)^{1/6}$ la (6.66) si trasforma in

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2} z^4 \psi = \frac{\epsilon}{2} \psi; \quad \frac{\epsilon}{2} = E \left(\frac{m}{\hbar^2} \right)^{2/3} g^{-1/3}. \quad (6.67)$$

Gli autovalori della (6.67) chiaramente non dipendono da nessun parametro, quindi basta studiare questa equazione, se si vogliono ottenere le energie nelle unità solite basterà porre

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{2/3} g^{1/3} \frac{\epsilon}{2}. \quad (6.68)$$

Per l'equazione (6.67) i punti di inversione sono $z = \pm a = \pm \varepsilon^{1/4}$ e la condizione di quantizzazione si scrive⁸

$$\begin{aligned} n + \frac{1}{2} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\varepsilon} 2 \int_{-a}^a \sqrt{1 - \left(\frac{z}{a} \right)^4} dx = \frac{2}{\pi} a \sqrt{\varepsilon} I \\ I &= \frac{1}{4} B\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{1}{4})}{8 \Gamma(\frac{7}{4})} = 0.8740192\dots, \end{aligned}$$

⁸ $B(p, q)$ è la funzione beta di Eulero.

da cui

$$\varepsilon_n = \left[\frac{\pi}{2I} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3}. \quad (6.69)$$

Possiamo ricavare gli autovalori con il metodo variazionale illustrato nel capitolo precedente, i raffronti sono:

n	ε_n	ε_n^{WKB}	$\delta\varepsilon/\varepsilon$
0	1.06036	0.86715	0.18222
1	3.79967	3.75192	0.01257
2	7.45570	7.41399	0.00559
3	11.64475	11.61153	0.00285
4	16.26183	16.23361	0.00173
5	21.23837	21.21365	0.00116

Come si vede l'approssimazione migliora al crescere di n ma è ragionevole anche per lo stato fondamentale.

6.7 Effetto tunnel

Uno dei fenomeni più caratteristici della meccanica quantistica è l'effetto tunnel: in linguaggio classico corrisponde alla transizione di una particella fra due zone dello spazio delle fasi separate fra loro da una zona classicamente inaccessibile. Il tipico esempio è quello di un urto contro una barriera, esemplificato in figura 6.6: una particella proveniente da sinistra, urta contro una "barriera di potenziale", se l'energia della particella è minore dell'altezza V_0 della barriera, l'unico processo possibile classicamente è una riflessione, quantisticamente invece la funzione d'onda può "penetrare" attraverso la barriera e dar luogo ad una certa probabilità di attraversamento della stessa.

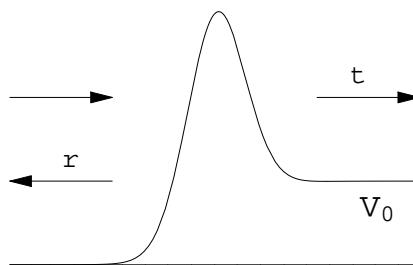


Figura 6.6: Illustrazione schematica dell'effetto tunnel: un'onda incidente dà luogo ad un'onda trasmessa ed una riflessa di ampiezze t, r rispettivamente.

Il processo è stato trattato nel volume 1, qui vogliamo darne una descrizione semiclassica.

La funzione d'onda che descrive a livello stazionario il processo è, asintoticamente:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k}} [e^{ikx} + r e^{-ikx}] & x \rightarrow -\infty \\ \frac{1}{\sqrt{k'}} t e^{ik' x} & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (6.70)$$

k e k' sono i numeri d'onda della particella entrante ed uscente:

$$p = \hbar k ; \quad p' = \hbar k' ; \quad (6.71)$$

supporremo che i limiti per $x \rightarrow \pm\infty$ del potenziale siano rispettivamente 0 e V_0 , quindi gli impulsi sono legati all'energia da

$$p = \sqrt{2mE} ; \quad p' = \sqrt{2m(E - V_0)} . \quad (6.72)$$

Scrivendo la corrente

$$j = \frac{\hbar}{2m i} \left(\psi^* \frac{d}{dx} \psi - \psi \frac{d}{dx} \psi^* \right) ,$$

il lettore si convince facilmente che la funzione d'onda (6.70) corrisponde ad un flusso incidente di una particella al secondo, ad un flusso $|r|^2$ riflesso e ad un flusso $|t|^2$ che attraversa la barriera, in altre parole $|t|^2$ è la probabilità di attraversamento ed $|r|^2$ la probabilità di riflessione. Le probabilità sono definite naturalmente solo dalle normalizzazioni *relative* dei vari termini della funzione d'onda, quindi moltiplicando per uno stesso fattore tutte le componenti della (6.70) le quantità fisiche restano invariate.

Consideriamo il caso in cui $V_0 \leq E \leq V_{\max}$ che corrisponde classicamente ad una riflessione completa, ma nello stesso tempo permette una propagazione dell'onda al di là della barriera. Il caso più semplice, e frequente, è quello in cui $V_0 = 0$ e nel seguito ci riferiremo a questo caso.

Si hanno in questo caso due punti di inversione classici, che indicheremo con a, b ($a < b$) soluzioni delle equazioni $p(x) = 0$. La soluzione semiclassica per $x < a$ e $x > b$ ha rispettivamente la forma

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} e^{iw(a,x)} + R(E) \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-iw(a,x)} ; \quad \psi(x) = T(E) \frac{1}{\sqrt{p}} e^{iw(b,x)} . \quad (6.73)$$

La fase dei coefficienti R, T è riferita ai punti di inversione, questa scelta differisce da quella indicata nella (6.70) per un fattore di fase ma è più comoda per i nostri scopi. Determinare i coefficienti R, T è un problema di formule di connessione.

Il risultato generale valido in approssimazione semiclassica è:

$$T(E) = \frac{e^{-\tilde{w}(a,b)}}{(1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)})^{1/2}} e^{-i\delta(E)} ; \quad R(E) = \frac{1}{(1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)})^{1/2}} e^{-i\delta(E)} . \quad (6.74)$$

$$\tilde{w}(a, b) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx .$$

$|T|^2$ dà la probabilità di attraversamento della barriera e prende anche il nome di *fattore di penetrazione della barriera*:

$$\boxed{|T|^2 = \frac{e^{-2\tilde{w}(a,b)}}{1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)}} \simeq e^{-2\tilde{w}(a,b)}} \quad (6.75)$$

La fase $\delta(E)$ può essere calcolata:

$$\delta(E) = \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar} \log \left| \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar e} \right| + \arg \Gamma \left(\frac{1}{2} - i \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar} \right) . \quad (6.76)$$

Γ è la funzione gamma di Eulero. Nel testo non faremo uso del risultato (6.76). Notiamo comunque che il valore di questa fase è sempre piuttosto piccolo, come si vede dalla figura 6.7.

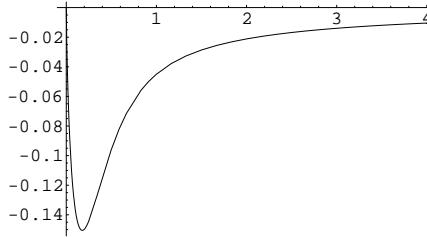


Figura 6.7: Variazione di $\delta(E)$ in funzione di \tilde{w}/π .

In questo paragrafo dimostreremo⁹ la (6.74) nel caso di piccoli valori del fattore di penetrazione, cioè per $\tilde{w} \gg 1$. In questa approssimazione possiamo considerare i punti a, b ben separati e possiamo risolvere il problema applicando due volte le formule di connessione per un *singolo* punto di inversione. Bisogna ricordare che in questa approssimazione non ha senso considerare i termini esponenzialmente depressi rispetto a quelli principali, appunto perché stiamo considerando il limite di grande separazione e quindi grande $\tilde{w}(a, b)$. Aggiungendo una fase globale di $\pi/4$ per facilitare le cose si ha, direttamente dalle equazioni (6.18):

$$\begin{aligned} e^{i(w(b,x)-\frac{\pi}{4})} &= \left[\cos(w(b,x) - \frac{\pi}{4}) + i \sin(w(b,x) - \frac{\pi}{4}) \right] \rightarrow \left[\frac{1}{2} e^{-\tilde{w}(x,b)} - ie^{\tilde{w}(x,b)} \right] \\ &\simeq -ie^{\tilde{w}(x,b)} = -ie^{\tilde{w}(a,b)} e^{-\tilde{w}(a,x)} \rightarrow -ie^{\tilde{w}(a,b)} 2 \cos(w(x,a) - \frac{\pi}{4}) = \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} \left[e^{i(w(x,a)-\frac{\pi}{4})} + e^{-i(w(x,a)-\frac{\pi}{4})} \right] = e^{-i\frac{\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} \left[e^{i(-w(a,x)-\frac{\pi}{4})} + e^{i(w(a,x)+\frac{\pi}{4})} \right] . \end{aligned}$$

Dal rapporto fra l'onda trasmessa e le due onde a sinistra del potenziale si ricava

$$T = \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{e^{-i\frac{\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} e^{i\frac{\pi}{4}}} = e^{-\tilde{w}(a,b)} ; \quad \frac{R}{T} = \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} e^{-i\frac{\pi}{4}}}{e^{-i\frac{\pi}{4}}} = -ie^{\tilde{w}(a,b)} \Rightarrow R = -i ,$$

⁹Il calcolo completo della (6.74) è delineato nei complementi.

che coincide con il limite del risultato (6.75). Notiamo che in questo limite $\delta(E) = 0$.

Se avessimo considerato anche il termine sub-dominante nella formula di connessione avremmo ottenuto, come si verifica facilmente:

$$T = \frac{1}{e^{\tilde{w}} + \frac{1}{4}e^{-\tilde{w}}} ; \quad R = -i \frac{e^{\tilde{w}} - \frac{1}{4}e^{-\tilde{w}}}{e^{\tilde{w}} + \frac{1}{4}e^{-\tilde{w}}} . \quad (6.77)$$

Le correzioni così ottenute sono *sbagliate*, come si vede dal fatto che il risultato non ha la forma (6.75). Nei complementi viene effettuato il calcolo esatto per un potenziale parabolico in cui si verificherà quest'affermazione.

A titolo di esempio riportiamo nella figura 6.8 il raffronto fra risultati numerici e approssimazione WKB per un potenziale¹⁰ di forma gaussiana.

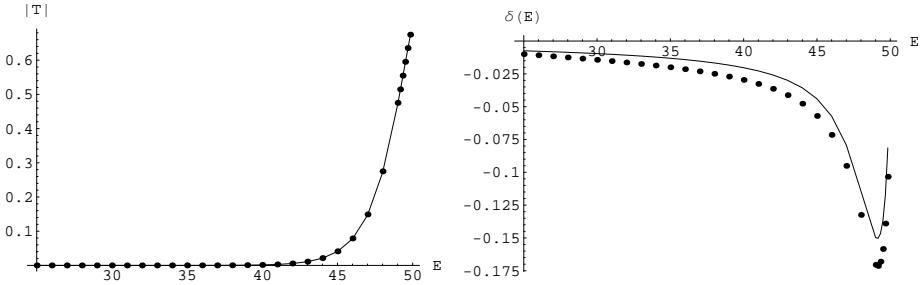


Figura 6.8: $|T|$ e $\delta(E)$ in funzione dell'energia per un potenziale $V_0 e^{-x^2/\Delta^2}$. La curva continua è l'approssimazione WKB, i punti sono risultati numerici.

6.8 Conteggio degli stati

La condizione di quantizzazione (6.29)

$$\frac{1}{2\pi} \oint pdq = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) , \quad (6.78)$$

ha un chiaro significato geometrico: se consideriamo un moto periodico la traiettoria nello spazio delle fasi percorrerà una linea chiusa, l'integrale a sinistra della (6.78) è l'area racchiusa da questa curva. La relazione (6.78) asserisce che ad ogni grado di libertà è associata un'area $2\pi\hbar$ nello spazio delle fasi. Equivalentemente se consideriamo una porzione "macroscopica" dello spazio delle fasi, di area $\Delta p \Delta q$, il numero di stati quantistici associati è

$$n = \frac{\Delta p \Delta q}{2\pi\hbar} . \quad (6.79)$$

Come è noto l'applicazione forse più importante di relazioni come la (6.79) è in fisica statistica, per contare appunto gli stati possibili. Per il caso di una particella in una scatola la relazione

¹⁰Il calcolo è proposto come esercizio alla fine del capitolo.

(6.79) si riduce al classico conteggio dei modi di vibrazione di una cavità: $p/\hbar = k = 2\pi/\lambda$ è il numero d'onda e la condizione di quantizzazione si riduce a dire che la larghezza della scatola deve essere un multiplo della semilunghezza d'onda, quindi in questo caso non c'è bisogno di scomodare l'approssimazione semiclassica per stabilire la (6.79). Tuttavia la formulazione presente ha il vantaggio di non dipendere dai dettagli del potenziale: mettere una scatola non significa altro che introdurre un campo esterno capace di confinare il sistema. Normalmente nel limite termodinamico le grandezze fisiche non devono dipendere dal tipo di contenitore usato quindi è opportuno che il conteggio degli stati sia fatto, nel limite di grandi n che è quello che ci interessa, indipendentemente dal potenziale, questo è appunto quello che assicura la derivazione semiclassica della (6.79).

La (6.78) fornisce un'altra relazione interessante che aiuta a capire la connessione fra l'evoluzione temporale quantistica e quella classica.

Se consideriamo un sistema con $n \gg 1$ possiamo valutare qual'è la differenza in energia fra un livello e l'altro. Posto $\Delta E = E_{n+1} - E_n$ si ha approssimativamente, usando $p = \sqrt{2m(E - U)}$:

$$\Delta n = 1 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta E \frac{\partial}{\partial E} \oint pdx = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta E \oint \frac{m dx}{p} = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta E T ,$$

dove T è il periodo classico del sistema. Indicando con $\omega = 2\pi/T$ la frequenza propria di oscillazione

$$\Delta E \simeq \hbar\omega . \quad (6.80)$$

Questo significa che per grandi valori di n i livelli sono equispaziati e la differenza di energia, corrispondente alla frequenza di transizione fra livelli diversi, è un multiplo della frequenza fondamentale di oscillazione classica. In approssimazione semiclassica l'evoluzione di uno stato è perciò del tipo

$$\psi(x, t) \sim \sum_k \psi_k(x) e^{-ik\omega t} , \quad (6.81)$$

che è proprio la forma aspettata per una funzione periodica di periodo T , in pratica lo sviluppo in serie di Fourier.

Ci si aspetta che la descrizione classica di un sistema corrisponda ad una localizzazione precisa nello spazio delle fasi, in altre parole i numeri quantici caratteristici, n , devono essere grandi per avere il limite classico, ma la distribuzione dei valori deve essere abbastanza stretta in modo che il "volume" $\Delta p \Delta q$ sia ben definito classicamente ma grande rispetto alla "granularità quantistica", cioè il volume elementare $2\pi\hbar$. In altre parole uno stato classico deve corrispondere alla situazione

$$1 \ll \Delta n \ll n .$$

Se sviluppiamo uno stato di questo tipo in termini di autofunzioni semiclassiche avremo

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n ,$$

con i coefficienti c_n sono diversi da 0 solo in un piccolo intervallo attorno ad un certo $\bar{n} \gg 1$.

Consideriamo ora l'evoluzione temporale di una osservabile f , si avrà¹¹

$$\bar{f}(t) = \langle \Psi(t) | f | \Psi(t) \rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n f_{mn} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} .$$

¹¹Seguiamo in questa esposizione il classico testo di Landau-Lifchitz.

Per tutti i livelli che compaiono nella somma possiamo applicare la (6.80) e quindi $E_m - E_n \simeq (m - n)\hbar\omega$. Cambiando variabili e scrivendo $m = n + k$

$$\bar{f}(t) = \sum_n \sum_k c_{n+k}^* c_n f_{n+k,n} e^{ik\omega}. \quad (6.82)$$

Le funzioni semiclassiche sono funzioni rapidamente oscillanti per grandi numeri quantici, quindi gli elementi di matrice fra f_{n_1, n_2} sono, trascurando la funzione d'onda nella zona classicamente inaccessibile, quantità del tipo

$$f_{mn} \sim \int_a^b f(x) \frac{1}{p(x)} \cos(\varphi_n) \cos(\varphi_m).$$

Abbiamo indicato con φ_n i fattori di fase semiclassici. Le due fasi φ_n, φ_m hanno rispettivamente n, m oscillazioni, quindi l'elemento di matrice f_{nm} tende a zero rapidamente col crescere di $n - m$, è lo stesso motivo per cui nell'usuale trasformata di Fourier di una funzione $F(x)$ poco variabile le sue componenti di Fourier F_k vanno a zero rapidamente con k . In prima approssimazione possiamo perciò trascurare nella (6.82) i termini con $k \neq 0$ nei prodotti $c_{n+k}^* c_n$. D'altronde il numero n , sempre negli elementi di matrice, è centrato attorno a \bar{n} , il numero "tipico" dello stato, quindi gli elementi $f_{n+k,n}$ dipendono solo da k . Usando $\sum_n |c_n|^2 = 1$ si ha allora, approssimativamente

$$\bar{f}(t) \simeq \sum_n |c_n|^2 \sum_k f_k e^{ik\omega t} = \sum_k f_k e^{ik\omega t}.$$

L'evoluzione temporale è esattamente quella aspettata: una evoluzione in termini di armoniche di un sistema con periodicità $T = 2\pi/\omega$. In questo modo vediamo che le componenti di Fourier delle osservabili classiche sono in corrispondenza con gli elementi di matrice delle osservabili quantistiche.

Notiamo che quanto qui tratteggiato è esattamente l'opposto di quanto è avvenuto storicamente: la costruzione della meccanica delle matrici di Heisenberg si basa appunto sulla considerazione che nel limite classico le componenti di Fourier di una osservabile si devono riferire a "salti quantici", cioè ci deve essere una corrispondenza fra f_k^{cl} e $F(n+k, n)$ dove F , per Heisenberg, rappresentava l'oggetto da studiare. L'analogia con le regole di ricombinazione degli spettri ha portato alla formulazione di "regole di moltiplicazione" per questi oggetti $F(n+k, n)$ che infine sono state riconosciute come le regole di moltiplicazione per matrici.

6.9 Doppia buca

Uno dei problemi più interessanti ed istruttivi fra quelli "elementari" in meccanica quantistica è la determinazione dei livelli energetici, in particolare dello stato fondamentale, in un sistema con un potenziale con due minimi uguali, come quello indicato in figura 6.9.

Dallo studio dell'analogo problema con buche di potenziale unidimensionali abbiamo imparato che lo stato fondamentale è uno stato simmetrico e la funzione d'onda associata è "distribuita" fra le due buche di potenziale. Vogliamo studiare lo stesso meccanismo in un potenziale generico in approssimazione semiclassica, in particolare per un potenziale descritto da

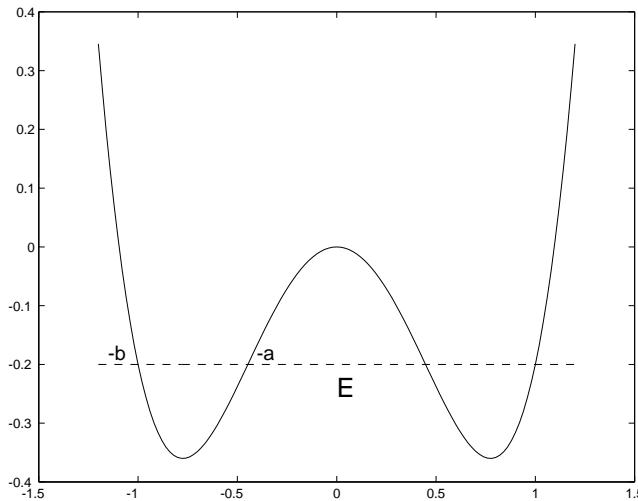


Figura 6.9: Potenziale per una doppia buca di potenziale. I punti di inversione del moto classico sono $x = \pm a$, e $x = \pm b$.

un polinomio di grado 4. Questo potenziale si ottiene da quello di un oscillatore anarmonico invertendo il segno del termine quadratico.

Daremo tre metodi di soluzione leggermente diversi fra loro per mettere in evidenza aspetti diversi del problema. Il lettore incontrerà più avanti nei suoi studi metodi ancora diversi, basati sul path-integral, questo a testimoniare l'importanza metodologica della questione.

Discussione

L'approccio semiclassico è interessante perché focalizza in maniera emblematica il modo diverso in cui le simmetrie agiscono in meccanica quantistica rispetto alla meccanica classica. In meccanica classica il sistema ammette due stati di minima energia, corrispondenti ai minimi x_{\pm} del potenziale. Questi minimi sono equivalenti ma, una volta scelto un minimo, la descrizione fisica non è più invariante sotto l'operazione di parità. Se ad esempio consideriamo delle piccole oscillazioni possiamo distinguere oscillazioni attorno a x_+ da oscillazioni attorno a x_- . Ad esempio se la particella che stiamo studiando è carica, la posizione stazionaria corrisponde ad un dipolo elettrico $\pm ex_{\pm}$ che cambia segno a seconda di scegliere un minimo o l'altro. In meccanica quantistica la situazione è completamente diversa. L'Hamiltoniana del sistema

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x), \quad (6.83)$$

commuta con l'operazione di parità $P : x \rightarrow -x$, quindi possiamo classificare gli stati con gli autovalori di P , che in rappresentazione di Schrödinger corrispondono a funzioni pari, con autovalore +1, e dispari, con autovalore -1. L'equazione agli autovalori corrispondente alla Hamiltoniana (6.83) è un problema di Sturm-Liouville e sappiamo che l'autovalore più

basso corrisponde ad una funzione senza nodi, quindi lo stato fondamentale del sistema deve corrispondere ad una autofunzione *pari*. In altre parole per lo stato fondamentale del sistema quantistico le due posizioni x_{\pm} sono completamente equivalenti.

D'altra parte se immaginiamo di effettuare il limite classico $\hbar \rightarrow 0$ vorremmo recuperare la situazione “asimmetrica”: si tratta perciò di capire qual'è il meccanismo fisico che rende equivalenti i due minimi classici e in che senso si recupera il limite classico.

La localizzazione della particella in una valle, ad esempio attorno a x_+ , corrisponde ad una funzione d'onda concentrata in questa zona. Classicamente se l'energia è minore del massimo locale del potenziale, $U(0)$, la particella resta confinata in questa zona, quantisticamente sappiamo invece che per effetto tunnel la particella può passare nell'altra valle, questo è dunque il meccanismo in gioco. La probabilità di questa transizione deve essere quindi proporzionale al fattore di penetrazione della barriera, e^{-A} , dove A è proporzionale all'area del grafico $U(x)$ compreso fra l'energia E del sistema ed il massimo del potenziale, $U(0)$. Nel limite in cui il fattore di penetrazione è trascurabile il sistema quindi deve presentare due stati quasi stazionari equivalenti, corrispondenti alla due localizzazioni possibili della particella, cioè l'Hamiltoniana deve essere approssimativamente degenere. La possibilità di effettuare il tunneling risolve la degenerazione e, con un meccanismo già visto, provoca una separazione dei livelli: è il classico meccanismo di un sistema a due stati. Se φ_+, φ_- sono i due stati quasi stazionari corrispondenti alle due localizzazioni della particella, lo stato fondamentale ed il primo stato eccitato saranno della forma approssimativa

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_+ + \varphi_-) ; \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_+ - \varphi_-) . \quad (6.84)$$

La separazione dei livelli $\Delta E = E_2 - E_1$ sarà proporzionale al fattore di penetrazione della barriera. L'energia ΔE corrisponde alla frequenza caratteristica di transizione fra le due buche, infatti partendo da uno stato φ_+ , ad esempio, si avrà:

$$\varphi_+(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(0)e^{-E_1 t/\hbar} + \psi_2(0)e^{-E_2 t/\hbar} \right) , \quad (6.85)$$

da cui

$$|\langle \varphi_- | \varphi_+(t) \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\Delta E t}{2\hbar} . \quad (6.86)$$

Dopo un tempo $T \sim \pi\hbar/\Delta E$ la particella si troverà dall'altra parte della barriera.

Questo semplice calcolo chiarisce che il sistema, per tempi $t \ll T$ può considerarsi “localizzato” mentre per tempi maggiori l'effetto tunnel non è più trascurabile. Uno stato stazionario è necessariamente considerato tale per tempi infinitamente lunghi, quindi gli stati stazionari sono simmetrici. Sappiamo però che il fattore di penetrazione è proporzionale a $\exp(-S/\hbar)$ dove S ha le dimensioni di un'azione classica, dell'ordine di $p\Delta x$ dove $p = \sqrt{2m|E - V|}$ e Δx dell'ordine della distanza dei punti di inversione a, b in figura. Quindi se $\hbar \ll S$ i tempi di “tunneling” possono essere astronomicamente lunghi $T \propto \hbar e^{S/\hbar}$. Veniamo ora alla stima semiclassica dei livelli energetici.

Metodo 1

Consideriamo un potenziale simmetrico, $U(-x) = U(x)$, e siano ψ_1, ψ_2 due autostati¹² dell'Hamiltoniana, con ψ_1 pari e ψ_2 dispari:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 + U(x)\psi_1 = E_1\psi_1; \quad (6.87a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2 + U(x)\psi_2 = E_2\psi_2. \quad (6.87b)$$

Possiamo trovare un'espressione per la differenza dei livelli $\Delta E = E_2 - E_1$ utilizzando una tecnica simile a quella che si usa per dimostrare che le autofunzioni ψ_1, ψ_2 sono ortogonali. Consideriamo la combinazione

$$A(\psi_1, \psi_2) = \psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1''. \quad (6.88)$$

Integriamo questa quantità nell'intervallo $0, \infty$. Usando $\psi_1, \psi_2 \rightarrow 0$ per $x \rightarrow \infty$ si ha

$$\int_0^\infty (\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'') dx = \int_0^\infty dx \frac{d}{dx} (\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1') = \psi_2(0)\psi_1'(0) - \psi_1(0)\psi_2'(0).$$

D'altra parte usando le (6.87) si ha

$$\int_0^\infty (\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'') dx = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \int_0^\infty dx \psi_1(x)\psi_2(x).$$

Quindi

$$E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{S_{12}} (\psi_1(0)\psi_2'(0) - \psi_2(0)\psi_1'(0)) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{S_{12}} \psi_1(0)\psi_2'(0); \quad (6.88a)$$

$$\text{con: } S_{12} = \int_0^\infty dx \psi_1\psi_2. \quad (6.88b)$$

Si è usato il fatto che $\psi_2(0) = 0$, essendo ψ_2 una funzione dispari. Applichiamo la (6.88) al caso che ci interessa. ψ_1 è la funzione d'onda, simmetrica, dello stato fondamentale e ψ_2 la funzione d'onda, antisimmetrica, del primo livello eccitato.

Come accenato nella discussione nel limite in cui si trascura l'effetto tunnel l'Hamiltoniana deve presentare due configurazioni degeneri, $\varphi(x), \varphi(-x)$ che corrispondono a particelle localizzate nelle due valli. Se pensiamo alla presenza dell'effetto tunnel come una piccola perturbazione rispetto a questa situazione i due stati ψ_1 e ψ_2 saranno descritti dalle combinazioni simmetrica e antisimmetrica

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) + \varphi(-x)), \quad (6.89a)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) - \varphi(-x)). \quad (6.89b)$$

¹²Questo metodo è sostanzialmente quello riportato nel testo [Landau3].

Viceversa, partendo dalle funzioni d'onda ψ_1 e ψ_2 e scegliendo le fasi in modo che, ad esempio, $\psi_1 > 0$ e $\psi_2 > 0$ per $x > 0$, le funzioni d'onda

$$\varphi_+(x) = \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x)) ; \quad (6.90a)$$

$$\varphi_-(x) = \varphi(-x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) - \psi_2(x)) , \quad (6.90b)$$

corrisponderanno a stati localizzati nella buca di destra e di sinistra rispettivamente. Notiamo che con questa definizione di φ le (6.89) sono delle identità.

Per funzioni localizzate la sovrapposizione è trascurabile:

$$\int dx \varphi_+(x) \varphi_-(x) \simeq 0 , \quad (6.91)$$

quindi possiamo scrivere

$$S_{12} = \int_0^\infty dx \psi_1 \psi_2 = \frac{1}{2} \int_0^\infty [\varphi_+^2 - 2\varphi_+ \varphi_- + \varphi_-^2] \simeq \frac{1}{2} \int_0^\infty dx \varphi_+^2 .$$

Abbiamo usato il fatto che la funzione φ_- è localizzata nel semispazio di sinistra, quindi è trascurabile per $x > 0$.

Dal fatto che ψ_1 è pari e ψ_2 è dispari discende poi

$$\varphi_+(0) = \varphi_-(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(0) \quad \varphi'_+(0) = -\varphi'_-(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi'_2(0) ,$$

quindi

$$\psi_1(0) \psi'_2(0) = 2\varphi_+(0) \varphi'_+(0) ,$$

ed infine, dalla (6.88)

$$\Delta E = E_2 - E_1 \simeq \frac{1}{\int_0^\infty dx \varphi_+^2} \frac{2\hbar^2}{m} \varphi_+(0) \varphi'_+(0) . \quad (6.92)$$

Come si vede l'espressione non dipende dalla normalizzazione assoluta di φ_+ e possiamo convenientemente normalizzare la funzione in modo che l'integrale che compare nella (6.92) sia 1:

$$\Delta E = E_2 - E_1 \simeq \frac{2\hbar^2}{m} \varphi_+(0) \varphi'_+(0) . \quad (6.93)$$

La forma della funzione φ_+ , senza nodi e esponenzialmente crescente nella zona $(0, a)$, assicura che $\varphi_+(0) \varphi'_+(0) > 0$, quindi lo stato simmetrico è effettivamente il fondamentale.

In approssimazione semiclassica dobbiamo stimare la funzione φ_+ per $\hbar \rightarrow 0$. In questa approssimazione φ_+ deve soddisfare l'equazione di Schrödinger nella parte destra del potenziale, il problema si riduce quindi al calcolo effettuato precedentemente. Nella zona classicamente permessa:

$$\varphi(x) \simeq \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) ; \quad (a \leq x \leq b) . \quad (6.94)$$

che si estende nella zona classicamente proibita in

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi v}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx |p(x)|} ; \quad (0 < x < a) ; \quad (6.95)$$

Effettuando la derivata:

$$\varphi'(0) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi v}} \left(\frac{p(0)}{\hbar} - \frac{1}{2v} \frac{dv}{dx} \Big|_{x=0} \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx |p(x)|} .$$

Per potenziali come quelli in figura 6.9

$$v'(0) = \frac{1}{m} p'(0) = \frac{1}{2mp} 2mV'(0) = 0 ,$$

quindi:

$$\varphi_+(0)\varphi'_+(0) = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^a dx |p(x)|} = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a dx |p(x)|} ,$$

e sostituendo nella (6.93):

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a dx |p(x)| \right] \equiv \frac{\hbar\omega}{\pi} K .$$

(6.96)

Metodo 2

È naturale interpretare le (6.89) come le equazioni che diagonalizzano una matrice 2×2 , facciamo vedere che è effettivamente così.

Sappiamo che nel limite in cui il fattore di penetrazione K è piccolo dobbiamo avere una hamiltoniana quasi degenere 2×2 . Individuato il sottospazio in esame basta scrivere gli elementi di matrice di H e diagonalizzare l'Hamiltoniana. Notiamo che il problema agli autovalori che stiamo ponendo non dipende dalla base scelta nel sottospazio in esame, basta prendere due qualsiasi vettori linearmente indipendenti φ_+, φ_- che appartengono a questo sottospazio e scrivere gli autostati cercati come

$$\psi = c_1 \varphi_+ + c_2 \varphi_- .$$

Visto il problema, e vista la soluzione precedente, è naturale prendere come sottospazio bidimensionale quello generato dalle funzioni φ_+, φ_- soluzioni semiclassiche nei due semispazi $x > 0, x < 0$ rispettivamente:

$$\begin{aligned} \varphi_+(x) &= \varphi_c(x) ; & \text{soluz. semiclassica } x \geq 0 , & \varphi_+(x) = o(\sqrt{K}) & \text{per } x < 0 ; \\ \varphi_-(x) &= \varphi_c(-x) ; & \text{soluz. semiclassica } x \leq 0 , & \varphi_-(x) = o(\sqrt{K}) & \text{per } x > 0 . \end{aligned}$$

In altre parole consideriamo una funzione che per $x < 0$ è prolungata con continuità dalla soluzione semiclassica in maniera tale che sia “piccola” nella regione $x < 0$. Poichè $\varphi(0) \sim \sqrt{K}$, possiamo pensare ad esempio di prolungare φ con un esponenziale a partire da questo valore. Indichiamo la soluzione semiclassica del paragrafo precedente con $\varphi_c(x)$. Notiamo alcune cose

- 1) La funzione $\varphi_+(x) = \varphi_c(x)$ soddisfa, nell'approssimazione semiclassica, l'equazione di Schrödinger

$$(H - E_0)\varphi_+(x) = 0,$$

per $x > 0$ ma *non soddisfa* questa equazione per $x < 0$.

- 2) Le due funzioni φ_+, φ_- non sono esattamente ortogonali, c'è una sovrapposizione descritta dalla matrice

$$N_{ij} = \int dx \varphi_i(x) \varphi_j(x) \quad i, j = +, -,$$

il problema agli autovalori nel sottospazio considerato si riduce perciò alla soluzione dell'equazione secolare

$$\det(H_{ij} - EN_{ij}) = 0. \quad (6.97)$$

Consideriamo ora i vari elementi di matrice. Normalizzando per semplicità le funzione φ_c nel solito modo

$$\int_a^b dx \varphi_c^2(x) = 1,$$

abbiamo

$$N_{11} = N_{22} = 1 + o(\sqrt{K}); \quad N_{12} = N_{21} = o(\sqrt{K}). \quad (6.98)$$

Consideriamo ora gli elementi di matrice di H .

$$\begin{aligned} H_{++} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_+ H \varphi_+ = \int_{-\infty}^0 dx \varphi_+ H \varphi_+ + \int_0^{\infty} dx \varphi_+ H \varphi_+ = \\ &= \int_{-\infty}^0 dx \varphi_+ H \varphi_+ + E_0 \int_0^{\infty} dx \varphi_+ \varphi_+ = N_{11} E_0 + \int_{-\infty}^0 dx \varphi_+ (H - E_0) \varphi_+ \\ &= N_{11} E_0 + o(K) \end{aligned}$$

L'ultima uguaglianza specifica in che senso scegliamo una estrapolazione "piccola" dello stato $\varphi_c(x)$. Notiamo per inciso che la funzione φ_+ non ha nessuno vincolo di normalizzazione assoluta nel sottospazio $x < 0$, quindi la forma quadratica $H - E_0$ può assumere, in modulo, valori piccoli a piacere.

L'elemento di matrice H_{--} è identico a H_{++} . Passiamo ora a H_{+-} .

$$H_{-+} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_- H \varphi_+ = \int_{-\infty}^0 dx \varphi_- H \varphi_+ + \int_0^{\infty} dx \varphi_- H \varphi_+. \quad (6.99)$$

Come già detto φ_+ soddisfa, approssimativamente, l'equazione di Schrödinger solo nella zona $x > 0$. Per valutare il primo termine della (6.99) integriamo per parti:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 dx \varphi_- \frac{d^2}{dx^2} \varphi_+ &= \frac{d}{dx} \varphi(x) \varphi'_+(x) \Big|_{-\infty}^0 - \int_{-\infty}^0 dx \frac{d\varphi_-}{dx} \frac{d\varphi_+}{dx} \\ &= \varphi_-(0) \varphi'_+(0) - \varphi'_-(x) \varphi_+(x) \Big|_{-\infty}^0 + \int_{-\infty}^0 dx \varphi''_- \varphi_+ = \\ &= \varphi_-(0) \varphi'_+(0) - \varphi'_-(0) \varphi_+(0) + \int_{-\infty}^0 dx \varphi''_- \varphi_+ = 2\varphi_c(0) \varphi'_c(0) + \int_{-\infty}^0 dx \varphi''_- \varphi_+; \end{aligned}$$

quindi

$$\begin{aligned} H_{+-} &= -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) + \int_{-\infty}^0 dx (H\varphi_-)\varphi_+ + \int_0^\infty dx \varphi_- H\varphi_+ = \\ &= -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) + E_0 \int_{-\infty}^0 dx \varphi_- \varphi_+ + E_0 \int_0^\infty dx \varphi_- \varphi_+ = -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) + N_{21}E_0. \end{aligned}$$

Quindi, trascurando i termini $o(K)$ si ha per gli elementi di matrice dell'Hamiltoniana:

$$H = E_0 N + \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) \\ -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) & 0 \end{pmatrix}; \quad N = \begin{pmatrix} 1 & \mathcal{O}(\sqrt{K}) \\ \mathcal{O}(\sqrt{K}) & 1 \end{pmatrix}.$$

Riscrivendo l'equazione agli autovalori come

$$\det(N^{-1}H - E) = 0,$$

si ha, trascurando termini $o(K)$

$$N^{-1}H = \begin{pmatrix} E_0 & -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) \\ -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) & E_0 \end{pmatrix}. \quad (6.100)$$

Osserviamo innanzitutto che effettivamente per $K \rightarrow 0$ l'Hamiltoniana è degenere, quindi abbiamo scelto correttamente il sottospazio in cui diagonalizzare H . Gli autovalori e gli autostati della (6.100) sono

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_c(x) + \varphi_c(-x)); \quad E_1 = E_0 - \frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0); \quad (6.101a)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_c(x) - \varphi_c(-x)); \quad E_2 = E_0 + \frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0). \quad (6.101b)$$

Notiamo che, come già osservato $\varphi_c(0)\varphi'_c(0) > 0$, quindi effettivamente lo stato simmetrico è lo stato fondamentale. Il risultato (6.101) coincide con quello ottenuto in precedenza.

Metodo 3

Ricaviamo ora di nuovo lo stesso risultato utilizzando solamente le formule di connessione. Poniamo per brevità

$$w(x_1, x_2) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx.$$

Per $x > b$ la funzione d'onda semiclassica deve essere un esponenziale decrescente, quindi

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)}.$$

Applichiamo ora in successione le formule di transizione, l'unica accortezza consiste nel variare di volta in volta il punto di inversione.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} 2 \sin(w(x,b) + \frac{\pi}{4}) = \frac{1}{\sqrt{|p|}} 2 \sin(w(a,b) - w(a,x) + \frac{\pi}{4}) = \\
 \frac{2}{\sqrt{|p|}} \{ \sin(w(a,b)) \cos(w(a,x) - \frac{\pi}{4}) &- \cos(w(a,b)) \sin(w(a,x) - \frac{\pi}{4}) \} = \\
 \frac{2}{\sqrt{|p|}} \{ \sin(w(a,b)) \cos(w(a,x) - \frac{\pi}{4}) &+ \cos(w(a,b)) \cos(w(a,x) + \frac{\pi}{4}) \} \rightarrow \\
 \frac{1}{\sqrt{|p|}} \{ \sin(w(a,b)) e^{-w(x,a)} &+ 2 \cos(w(a,b)) e^{w(x,a)} \} = \\
 \frac{1}{\sqrt{|p|}} \{ \sin(w(a,b)) e^{-w(0,a)+w(0,x)} &+ 2 \cos(w(a,b)) e^{w(0,a)-w(0,x)} \}. \tag{6.102}
 \end{aligned}$$

Questa deve essere una funzione pari per lo stato fondamentale e dispari per il primo eccitato, in pratica devono comparire $\cosh(w(0,x))$ e $\sinh(w(0,x))$ nei due casi.

Quindi per lo stato fondamentale deve essere

$$\frac{\cos(w(a,b))}{\sin(w(a,b))} = \frac{1}{2} e^{-2w(0,a)} \equiv \frac{1}{2} K. \tag{6.103}$$

Per $K \rightarrow 0$ deve essere quindi $w(a,b) \rightarrow \pi/2$. Scrivendo $w(a,b) = \pi/2 - \mu$ otteniamo

$$\sin \mu \simeq \mu = \frac{1}{2} K. \tag{6.104}$$

Abbiamo quindi la condizione di quantizzazione

$$w(a,b) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(E-U)} dx = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} K.$$

Per $K = 0$ abbiamo l'equazione per la determinazione dell'energia semiclassica E_0 , ponendo $E = E_0 + \delta E$ si ha, sviluppando in serie:

$$\frac{1}{2} 2m \delta E \frac{1}{\hbar} \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2m(E-U)}} dx = \delta E \frac{T}{2\hbar} = -\frac{1}{2} K;$$

dove T è il periodo classico di oscillazione. Quindi

$$\delta E = -\frac{\hbar\omega}{2\pi} K \quad E_1 = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2\pi} K. \tag{6.105}$$

allo stesso modo

$$E_2 = E_0 + \frac{\hbar\omega}{2\pi} K, \tag{6.106}$$

riottenendo così il risultato noto per $\Delta E = E_2 - E_1$.

Nota

In tutti i metodi proposti viene in qualche modo usata l'approssimazione semiclassica anche per fissare il prefattore del termine K . Come nel caso dell'effetto tunnel il risultato ottenuto è solo una *stima*, un calcolo più preciso richiede il trattamento delle condizioni di raccordo senza assumere la forma "instabile" (6.19). Nel caso usuale i due minimi sono ben separati quindi ha senso usare in ognuna delle due zone classicamente accessibili una forma più sofisticata di interpolazione, come la (6.21). Se confrontiamo la connessione fra le due zone classicamente proibite le due espressioni danno rispettivamente

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)} \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left\{ \sin(w(a,b)) e^{-w(x,a)} + 2 \cos(w(a,b)) e^{w(x,a)} \right\} . \quad (6.107a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)} \leftrightarrow \left\{ \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{e}{\tilde{J}} \right)^{\tilde{J}} \Gamma(\tilde{J} + \frac{1}{2}) \cos(\pi \tilde{J}) e^{w(x,a)} + \sin(\pi \tilde{J}) e^{-w(x,a)} \right\} . \quad (6.107b)$$

Per buche profonde si possono avere stati eccitati molto alti e quindi $J \rightarrow \infty$, in questo caso il limite (6.23) permette di riottenere il fattore 2 davanti a $\cos(\pi \tilde{J})$ e quindi recuperare l'espressione (6.96). Per lo stato fondamentale, e per piccoli valori di K , invece $w(a,b) = \pi \tilde{J} = \pi/2 - \mu$ e, al primo ordine in μ possiamo usare

$$\left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{e}{\tilde{J}} \right)^{\tilde{J}} \Gamma(\tilde{J} + \frac{1}{2}) \cos(\pi \tilde{J}) \rightarrow 2 \sqrt{\frac{e}{\pi}} \sin \mu$$

e questo porta a

$$\Delta E = \sqrt{\frac{\pi}{e} \frac{\hbar \omega}{\pi}} K \quad (6.108)$$

Poichè $\sqrt{\pi/e} \sim 1.075$ questo porta ad una correzione di circa il 7% nei risultati.

Se le buche non sono ben separate, ad esempio per stati quasi in soglia rispetto al potenziale di separazione fra i due minimi, l'approssimazione parabolica (6.21) non è giustificata, quindi in questo caso è più ragionevole usare la (6.96).

6.10 Decadimenti

In fisica spesso si incontrano sistemi metastabili: per un certo tempo il sistema si comporta in modo (quasi) stazionario, quindi si trasforma in un sistema con caratteristiche diverse. Il prototipo di questa situazione è un processo di decadimento: un atomo, un nucleo, o in generale una particella, decade, formando delle particelle figlie che prendono il nome di *prodotti di decadimento*. Così un atomo in uno stato eccitato può decadere in un atomo in uno stato di energia minore con emissione di uno o più fotoni, un nucleo si può disintegrale producendo particelle di vario tipo, ad esempio particelle α (nuclei di elio) o particelle β^- , β^+ (elettroni e positroni), raggi γ etc.

Questo problema è già stato affrontato in teoria perturbativa, vedi cap.4, e sarà approfondito nel cap.7: qui vogliamo presentare la questione dal punto di vista semiclassico.

Come visto nel cap.4 il parametro rilevante per descrivere questo tipo di situazioni è la *vita media*. Se il sistema è in uno stato metastabile $|i\rangle$ la probabilità di trovarlo ancora in questo stato dopo un tempo t è

$$P_i(t) = P_i(0) e^{-\gamma t} . \quad (6.109)$$

La quantità $\tau = 1/\gamma$ si chiama *vita media*. Spesso si usa la notazione $\Gamma = \hbar\gamma \equiv \hbar/\tau$, Γ prende il nome di *larghezza* del livello ed ha le dimensioni di un'energia.

Per essere concreti consideriamo il caso del decadimento α . Una particella α è un nucleo di elio, cioè è composta da due protoni e due neutroni. Questo composto è estremamente stabile, cioè ha una forte energia di legame, si ha infatti

$$m(\alpha) c^2 - 2(m_p + m_n) c^2 \simeq -26.06 \text{ MeV}. \quad (6.110)$$

In unità di massa atomica, $u \simeq 931.494 \text{ MeV}/c^2$:

$$m_p = 1.007276470 u; \quad m_n = 1.008664904 u; \quad m(\alpha) \simeq 4.00390 u;$$

ed in prima approssimazione si può pensare ad un modello di nucleo in cui una particella α si muove in un campo medio creato dagli altri nucleoni. Possiamo pensare ad una buca di potenziale sferica, di profondità $-U_0$ e raggio r_0 , dell'ordine del raggio nucleare. Oltre alle forze nucleari è presente un campo coulombiano repulsivo fra la particella α , di carica 2, ed il resto del nucleo, di carica $Z - 2$. La situazione è quella schematizzata in figura 6.10. Se la particella α fosse confinata nel nucleo, lo stato stazionario del sistema sarebbe descritto da autovalori dell'Hamiltoniana corrispondenti agli stati legati di una particella in una buca sferica di potenziale. Uno sguardo alla figura 6.10 suggerisce immediatamente la possibilità di un decadimento per effetto tunnel: la particella α può “attraversare” la barriera coulombiana e provocare la disintegrazione del nucleo.

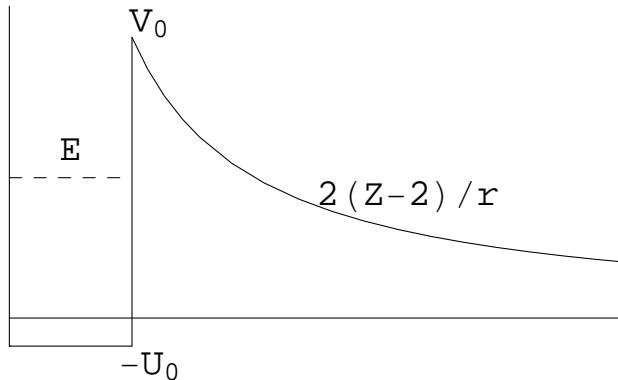


Figura 6.10: Potenziale per una particella α schematizzato come una buca di potenziale ed una repulsione coulombiana all'esterno del nucleo.

È estremamente semplice stimare la probabilità di decadimento in approssimazione semiclassica. Se P è la probabilità di attraversamento della barriera, data dal coefficiente di trasmissione, la probabilità di decadimento per unità di tempo sarà:

$$\gamma = \text{Numero di urti con la barriera al sec.} \times P.$$

Uno stato stazionario è associato classicamente ad un periodo del moto, T , ed evidentemente la particella raggiunge il raggio r_0 con frequenza $1/T$ quindi

$$\Gamma = \hbar\gamma = \xi \frac{\hbar}{T} P. \quad (6.111)$$

Abbiamo indicato con $\xi \sim 1$ un possibile fattore correttivo all'approssimazione semiclassica.

Una dimostrazione più formale, ma equivalente, della (6.111) è la seguente. Consideriamo uno stato legato in onda s . La funzione d'onda radiale ridotta ha la forma $\chi = A \sin(kr)$. Utilizzando la normalizzazione nell'approssimazione semiclassica possiamo fissare A :

$$1 = \int_0^{r_0} A^2 \sin^2(kr) \sim \frac{A^2}{2} r_0 \quad \Rightarrow \quad A^2 = \frac{2}{r_0}.$$

La soluzione completa, tenendo conto dell'armonica sferica Y_{00} è

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{A}{r} \sin(kr) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{A}{2i r} [e^{ikr} - e^{-ikr}] . \quad (6.112)$$

La soluzione (6.112) descrive un'onda sferica divergente ed una convergente. La densità di flusso (corrente) è

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2m i} [\psi^* \nabla \psi - \text{c.c.}] .$$

Usando la parte di onda divergente della soluzione (6.112) si ha per \mathbf{j} una componente puramente radiale ed un corrispondente flusso attraverso la superficie di raggio r_0 :

$$j_r = \frac{\hbar}{m} k \frac{1}{4\pi} \frac{A^2}{4r^2} \quad \Phi = 4\pi r^2 j_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{A^2}{4} = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{2r_0} ,$$

$\hbar k/m = p/m$ è la velocità della particella e $v/2r_0$ è l'inverso del periodo, per cui il flusso di particelle al secondo che urtano la superficie del nucleo è proprio $v/2r_0 = 1/T$, e si riottiene il risultato (6.111).

Il fattore di penetrazione P nella (6.111) è il coefficiente di trasmissione della barriera coulombiana. I punti di inversione che delimitano la zona classicamente inaccessibile sono r_0 ed r_1 con

$$\frac{2(Z-2)e^2}{r_1} = E = \frac{p^2}{2m} , \quad \Rightarrow \quad r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{E} , \quad (6.113)$$

ed il coefficiente P è dato da

$$P = \exp[-2\sigma(r_0, r_1)] = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m \left(\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E \right)} dr \right] .$$

Per generalità scriviamo l'interazione coulombiana nella forma C/r . Cambiando variabili a $r = r_1 x$ e notando che $\sqrt{2mC r_1} = 2C/v$, l'integrale diventa

$$I = \sqrt{r_1} \sqrt{2mC} \int_{r_0/r_1}^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx = \frac{2C}{v} \left[\arccos(\sqrt{r_0/r_1}) - \sqrt{\frac{r_0}{r_1}(1 - \frac{r_0}{r_1})} \right] .$$

Nella maggioranza delle applicazioni $r_0/r_1 \ll 1$, quindi sviluppando in serie

$$I \simeq \frac{2C}{v} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right) = \frac{\pi C}{v} - 2\sqrt{2Cmr_0} .$$

Si ricava quindi

$$P = \exp \left[-\frac{2\pi C}{\hbar v} + 4\frac{\sqrt{2Cmr_0}}{\hbar} \right] . \quad (6.114)$$

Z(A)	$T_{1/2}$	E(MeV)	Z(A)	$T_{1/2}$	E(MeV)
Po(212)	3.0×10^{-7} s	8.95	Th(219)	$0.11 \cdot 10^{-6}$ s	9.34
Po(214)	1.5×10^{-4} s	7.83	Th(220)	$10. \cdot 10^{-6}$ s	8.79
Po(215)	1.8×10^{-3} s	7.50	Th(221)	$2.8 \cdot 10^{-3}$ s	7.98
Po(216)	0.158s	6.89	Th(224)	1.05 s	7.085
Th(212)	0.03 s	7.92	Th(225)	8.72 m	6.47
Th(213)	0.14	7.69	Th(226)	30.6 m	6.28
Th(214)	0.10 s	7.68	Th(227)	18.72 d	5.92
Th(215)	1.2 s	7.46	Th(228)	1.91 y	5.38
Th(217)	$0.25 \cdot 10^{-3}$ s	9.25	Th(229)	7340 y	4.91
Th(218)	$0.11 \cdot 10^{-6}$ s	9.67	Th(230)	$77 \cdot 10^3$ y	4.65
			Th(232)	$14.1 \cdot 10^9$ y	3.98

Tabella 6.1: Esempi di decadimento α . È elencato il nucleo padre, il tempo di dimezzamento (s=secondi, m = minuti, d = giorni, y = anni), e l'energia della particella α , in MeV. Per alcuni multipletti nucleari è data l'energia media.

La dipendenza $1/v$ è caratteristica dell'interazione coulombiana. Indicando con q_1, q_2 le cariche in unità di e e introducendo la costante di struttura fine $\alpha = e^2/\hbar c$, la dipendenza è del tipo:

$$P \propto \exp \left[-\frac{2\pi\alpha q_1 q_2}{v/c} \right]. \quad (6.115)$$

La forte dipendenza (esponenziale) dalla velocità, quindi dall'energia, è una caratteristica di questo tipo di decadimento, significa che a piccole variazioni di energia possono corrispondere rilevanti variazioni di vita media. Questa osservazione è ampiamente giustificata dagli esempi riportati in tabella 6.1.

Nella figura 6.11 riportiamo a titolo di esempio le quantità $\log(\Gamma)$ in funzione di $2\pi C/\hbar v$ per le due famiglie del Polonio (Po) e del Torio (Th), l'accordo è abbastanza buono.

Elaborando un modello nucleare si hanno dei parametri r_0 e U_0 che permettono di effettuare un confronto quantitativo con la (6.114). Un'applicazione forse anche più interessante è di usare i dati sperimentali per ricavare il parametro r_0 . Il lettore interessato al problema può approfondire l'argomento consultando ad esempio il libro di Fermi[Fermi].

Nel prossimo paragrafo daremo un'esposizione dettagliata della (6.111) usando il metodo WKB.

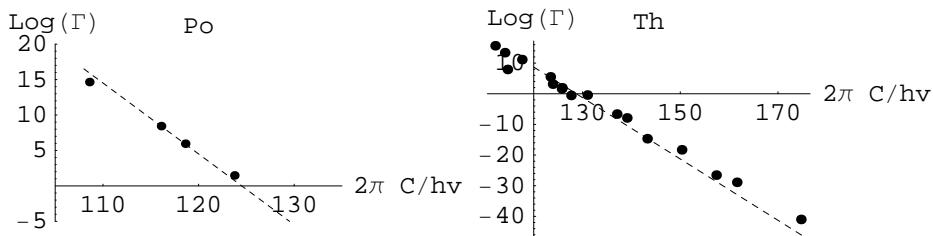


Figura 6.11: $\log(\Gamma)$ in funzione di $2\pi C/\hbar v$ per il Po ed il Th. La pendenza della curva tratteggiata è quella dedotta dalla (6.115)

6.11 Teoria di Gamow - Siegert

La (6.109) sarebbe soddisfatta se potessimo trovare degli stati ψ autostati dell'Hamiltoniana con autovalori complessi $E - i\Gamma/2$. In questo caso si avrebbe per la probabilità di sopravvivenza dello stato:

$$P(t) = |\langle \psi | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \langle \psi | e^{-iEt/\hbar - \Gamma t/2\hbar} | \psi \rangle \right|^2 = e^{-\Gamma t/\hbar}, \quad (6.116)$$

che riproduce esattamente la (6.109).

H è un operatore autoaggiunto e quindi non può avere autovalori immaginari, ma d'altronde gli stati metastabili che stiamo studiando non sono certo stati stazionari. Matematicamente H è autoaggiunto sullo spazio delle funzioni che si mantengono limitate per $r \rightarrow \infty$ se si lascia cadere questa richiesta H può avere, formalmente, autovalori complessi. Vedremo nel capitolo 7 qual'è il significato fisico che detta la scelta di questi stati, per ora seguiamo una via più intuitiva che è quella proposta inizialmente da Gamow, e poi rielaborata da Siegert.

Intuitivamente uno stato metastabile dovrebbe essere descritto da un'onda sferica uscente del tipo $\exp(ikr)/r$, si cercano allora le soluzioni dell'equazione di Schrödinger

$$H \psi = E \psi, \quad (6.117)$$

con le condizioni al contorno di regolarità nell'origine e con comportamento e^{ikr}/r all'infinito. Per semplicità limitiamoci al caso di un potenziale a simmetria sferica in onda s . Per la funzione d'onda ridotta $\varphi = r\psi$ bisogna allora considerare l'equazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \varphi + V(r) \varphi = E \varphi; \quad \varphi(0) = 0; \quad \varphi \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} \exp(ikr); \quad (6.118)$$

$k = \sqrt{2mE}$. La (6.118) non ammette in generale soluzioni per E reale. Infatti essendo $V(r)$ reale la (6.118) ha due soluzioni indipendenti reali, una combinazione di queste soluzioni, chiamiamola φ_a soddisfa alla prima condizione al contorno ($\varphi = 0$). In generale la combinazione linearmente indipendente, φ_b , non soddisfa a questa condizione. Possiamo sempre scegliere φ_a reale con una scelta di fase. Supponiamo $V(r)$ a raggio limitato, in questo caso

la soluzione per grandi r della (6.118) è del tipo $\cos(kr + \delta)$ e non può dar luogo ad un'onda sferica. Questa potrebbe essere ottenuta da una combinazione lineare a coefficienti complessi di φ_a, φ_b , ma allora non si avrebbe $\varphi(0) = 0$.

Se ammettiamo la possibilità di E complesso, del tipo $E = E_0 - i\Gamma/2$, non si hanno limitazioni e la (6.118) può ammettere soluzioni. Per capire il meccanismo che determina l'autovalore (complesso) E si immagini di risolvere l'equazione (6.118) a partire dal punto 0 con una normalizzazione arbitraria, ad esempio $\varphi(0) = 0, \varphi'(0) = 1$. Per ogni E si ha un problema di Cauchy ed un'unica soluzione φ_L . Si esegua ora lo stesso procedimento a partire da $r \rightarrow +\infty$, di nuovo con una scelta arbitraria della normalizzazione, ad esempio

$$\varphi - Ae^{ikr} \rightarrow 0 ; \quad \varphi' - ikAe^{ikr} \rightarrow 0 .$$

Si ottiene una soluzione φ_R . La compatibilità delle due soluzioni ad un r intermedio è data da

$$\frac{\varphi'_L}{\varphi_L} = \frac{\varphi'_R}{\varphi_R} .$$

Questa è l'equazione (complessa), indipendente dalla normalizzazione, che determina E .

L'equazione (6.118) può essere risolta numericamente secondo la procedura delineata ottenendo l'autovalore cercato. Gli stati così determinati prendono il nome di *stati risonanti* o risonanze. Un esempio di tale procedura si può trovare negli esercizi per il potenziale $V(r) = 7.5r^2 e^{-r}$, che presenta una risonanza con $E = 3.4264, \Gamma = 0.0255$.

In questo paragrafo troveremo la soluzione dei problemi di Gamow - Siegert nell'approssimazione WKB.

Innanzitutto osserviamo che moltiplicando la (6.118) per φ^* e sottraendo l'espressione complessa coniugata su ha

$$2i\operatorname{Im}(E)|\varphi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\varphi^* \frac{d^2}{dr^2} \varphi - \varphi \frac{d^2}{dr^2} \varphi^* \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(\varphi^* \frac{d}{dr} \varphi - \varphi \frac{d}{dr} \varphi^* \right) .$$

Integrando fra 0 ed r ed usando la condizione al contorno $\varphi(0) = 0$:

$$2\operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left(\varphi^* \frac{d}{dr} \varphi - \varphi \frac{d}{dr} \varphi^* \right) . \quad (6.119)$$

Se per grandi r scriviamo $\varphi \equiv |\varphi| \exp(i\theta)$ otteniamo

$$2\operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m} 2 \frac{d}{dr} \theta(r) .$$

Quindi per fasi crescenti si ha $\operatorname{Im}(E) < 0$, consistentemente con la prescrizione della condizione al contorno dell'equazione (6.118).

Scrivendo $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2, E = E_1 + iE_2$, l'equazione differenziale (6.118) ha la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_1'' + V(r) \varphi_1 = E_1 \varphi_1 - E_2 \varphi_2 ; \quad (6.120a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_2'' + V(r) \varphi_2 = E_2 \varphi_1 + E_1 \varphi_2 . \quad (6.120b)$$