

# Indice

<b>11 Approssimazione semiclassica.</b>	<b>3</b>
11.1 Introduzione . . . . .	3
11.2 Approssimazione WKB . . . . .	4
11.3 Formule di connessione. . . . .	7
11.4 Stati legati e condizione di Bohr-Sommerfeld. . . . .	9
11.4.1 Potenziale definito per $x > 0$ . . . . .	11
11.4.2 Problema radiale e singolarità. . . . .	12
11.4.3 Variabili angolari. . . . .	14
11.4.4 Esempi. . . . .	15
11.5 Effetto tunnel. . . . .	17
11.5.1 Esempio. . . . .	20
11.6 Conteggio degli stati. . . . .	20
11.7 Doppia buca . . . . .	22
11.8 Decadimento $\alpha$ . . . . .	29
11.9 Teoria di Gamow - Siegert . . . . .	32
<b>Appendici e Complementi</b>	<b>39</b>
11.A Normalizzazione della funzione d'onda. . . . .	39
11.B Correzioni all'approssimazione semiclassica. . . . .	40
11.C $\text{Im}(E)$ per un potenziale quartico. . . . .	44
11.D Potenziale anarmonico e WKB. . . . .	47
11.D.1 Caso stabile: $\mu = 1, g > 0$ . . . . .	48
11.D.2 Caso metastabile: $\mu = 1, g < 0$ . . . . .	50
11.D.3 Caso bi-stabile: $\mu = -1, g > 0$ . . . . .	53
11.E Effetto Tunnel: calcolo esatto . . . . .	54
11.E.1 Caso lineare. . . . .	54
11.E.2 Barriera parabolica. . . . .	57
11.F Sviluppi asintotici. . . . .	61
11.G Teorema del confronto. . . . .	71
11.H Scaling complesso e autovalori. * . . . .	75
11.I Approssimazione di Langer. * . . . .	75
11.J Quantizzazione EKB * . . . . .	75
11.K Il propagatore: approssimazione di Van Vleck * . . . . .	75
11.L Propagatore e densità degli stati. * . . . .	75
11.M Considerazioni sui sistemi non integrabili * . . . . .	75



# Capitolo 11

## Approssimazione semiclassica.

### Avvertenze.

Queste note sono molto incomplete. Si presuppone che lo studente abbia familiarità con il contenuto, ad esempio, del cap.7 del testo di Landau-Lifchitz.

### 11.1 Introduzione

Il problema che affronteremo in questo capitolo è lo studio del limite  $\hbar \rightarrow 0$  in meccanica quantistica. L'interesse di questo studio è ovvio: è sicuramente un gradino necessario per comprendere come si possa passare da una descrizione quantistica ad una trattazione classica dei fenomeni. Com'è facilmente intuibile l'argomento può diventare estremamente complicato, ed in effetti lo diventa appena si cominciano a considerare sistemi con molti gradi di libertà, anche se bisogna sottolineare che non tutte le difficoltà si trovano sul lato "quantistico" del problema, spesso la stessa descrizione classica è altamente non banale. Come esempio possiamo pensare alla quantizzazione di un sistema che presenti a livello classico un regime caotico, o, più semplicemente, un sistema non integrabile. Già in sistemi semplici l'interpretazione quantistica dei fenomeni spesso contraddice le aspettative "ingenua" basate su pregiudizi interpretativi basati sull'esperienza quotidiana macroscopica, e di questo aspetto tratteremo più diffusamente in un capitolo alla fine del testo. In sistemi complicati la situazione è naturalmente aggravata e capire almeno qualitativamente come alcune caratteristiche tipicamente quantistiche, come gli spettri discreti, la distribuzione degli autovalori e la definizione di densità di probabilità tramite la funzione d'onda, si manifestino a livello classico è un compito non facile ma di indubbia importanza in linea di principio.

Un altro aspetto della questione è da non sottovalutare: lo studio del limite  $\hbar \rightarrow 0$  è in grado di fornire stime su alcuni problemi che difficilmente possono essere ottenuti in maniera diretta dalla soluzione, anche numerica, dell'equazione di Schrödinger.

A tutto questo si aggiunga che lo studio dell'approssimazione semiclassica costituisce una base naturale per collegare la formulazione "canonica" della meccanica quantistica presentata in questo testo, con una formulazione alternativa, e per alcuni versi più moderna, come quella del path-integral.

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 appena elencati 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 generale saranno esposti nell'appendice al capitolo.

## 11.2 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 Maxwell, 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,  $\psi$ , in termini dell'analogo dell'iconale. Originariamente lo scopo era sicuramente quello di dare un'interpretazione "corpuscolare" alle onde descritte da  $\psi$ , ma occorre ricordare che la  $\psi$  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,  $\psi(\mathbf{x}, t)$  e quella di un campo elettromagnetico, ad esempio un potenziale scalare  $\varphi(\mathbf{x}, t)$ , 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 perchè è complicato, e singolare, il limite  $\hbar \rightarrow 0$ .

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi \quad (11.1)$$

Dalla (11.1) 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 (11.1) 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  $\hbar \rightarrow 0$  la funzione ha delle oscillazioni sempre più rapide in un tratto finito dell'asse reale, la lunghezza d'onda va a zero con  $\lambda = h/p$ , ma è proprio questa rapida oscillazione che permette l'eliminazione del fattore  $\hbar^2$  davanti alla derivata seconda nella (11.1): 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 (11.1). È naturale quindi cercare un'approssimazione scrivendo

$$\psi(x) = \exp(i\frac{\sigma}{\hbar}) \quad (11.2)$$

e assumere che  $\sigma$ , non  $\psi$ , sia una funzione sviluppabile in  $\hbar$ :

$$\sigma(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k \sigma_k = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots \quad (11.3)$$

I fattori  $1/i$  nella (11.3) sono introdotti convenzionalmente per semplificare le formule seguenti. Sostituendo la (11.2) nella (11.1) si ottiene

$$(\sigma')^2 - i\hbar\sigma'' = p^2(x) \quad (11.4)$$

Abbiamo introdotto la notazione

$$p^2(x) = 2m(E - V(x)) \quad (11.5)$$

che rappresenta, per  $E > V(x)$ , l'impulso classico. L'equazione (11.3) è equivalente all'equazione originaria (11.1). ed è un'equazione<sup>1</sup> del *primo ordine*, non lineare, nella variabile  $y = \sigma'$ . Una delle due costanti arbitrarie della soluzione generale della (11.1) è semplicemente la costante d'integrazione per passare da  $y$  a  $\sigma$ . Sostituendo l'ò sviluppo (11.3) nella (11.4) si ottiene, all'ordine 0

$$(\sigma'_0)^2 = p^2 \quad \sigma_0 = \pm \int p(x) dx \quad p(x) = +\sqrt{2m(E - V(x))} \quad (11.6)$$

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

$$\sum_{k=0}^n \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} = 0 \quad (11.7)$$

La (11.7) fornisce un'espressione ricorsiva per  $\sigma_n$ , infatti  $\sigma'_n$  compare solo in due addendi, quelli che moltiplicano  $\sigma'_0$ :

$$\sigma'_1 = -\frac{1}{2\sigma'_0} \sigma''_0 \quad \Rightarrow \quad \sigma_1 = -\frac{1}{2} \log(p) \quad (11.8a)$$

$$\sigma'_n = -\frac{1}{2\sigma'_0} \left( \sum_{k=1}^{n-1} \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} \right) \quad n \geq 2 \quad (11.8b)$$

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

$$\sigma'_2 = -\frac{1}{2p} [\sigma_1'^2 + \sigma_1''] = \frac{1}{4} \frac{p''}{p^2} - \frac{3}{8} \frac{p'^2}{p^3} = -\frac{1}{2p^{1/2}} \frac{d^2}{dx^2} p^{-1/2} \quad (11.9a)$$

$$\sigma'_3 = -\frac{1}{2p} (2\sigma_1' \sigma_2' + \sigma_2'') = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{\sigma_2'}{p} \quad (11.9b)$$

<sup>1</sup>Questo procedimento, la sostituzione della variabile  $\psi$  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.

All'ordine  $\hbar^2$  si ha perciò:

$$e^{i\frac{\sigma}{\hbar}} \simeq \frac{1}{\sqrt{p(x)}e^{-\hbar^2\frac{\sigma'_2}{p}}} \exp\left(i\int_{x_0}^x \left[\frac{1}{\hbar}p(x) + \hbar\frac{1}{2p^{1/2}}\frac{d^2}{dx^2}p^{-1/2}\right] dx\right) \quad (11.10)$$

Dalla relazione (11.8b) discendono due cose:

- 1) I termini  $\sigma_n$  con  $n$  pari sono dispari in  $p$ , e, ricordando la (11.3), per  $p(x)$  reale contribuiscono alla *fase* della funzione d'onda  $\psi$ .
- 2) I termini  $\sigma_n$  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  $\psi$ .

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

$$\psi(x) = b_1 \frac{1}{\sqrt{p}} e^{i\hbar\int_{x_0}^x p(x) dx} + b_2 \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-i\hbar\int_{x_0}^x p(x) dx} \quad (11.11)$$

$x_0$  è un punto di riferimento, il valore delle costanti  $b_1$  e  $b_2$  cambia al variare di  $x_0$ .

Se l'approssimazione (11.11) fosse *uniforme*, cioè valesse 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 disuguaglianze

$$\hbar^2 \frac{|\sigma'_2|}{|\sigma'_0|} \ll \hbar \frac{|\sigma'_1|}{|\sigma'_0|} \ll 1 \quad (11.12)$$

La seconda disuguaglianza, usando l'espressione (11.8) si scrive (assumiamo  $p$  reale)

$$\frac{1}{2}\hbar\frac{p'}{p^2} \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{4\pi}\frac{d\lambda}{dx} \ll 1 \quad \lambda = \frac{\hbar}{p} \quad (11.13)$$

$\lambda$  è la lunghezza d'onda di de Broglie. La (11.13) 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 (11.13) 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 disuguaglianza (11.13). Notiamo che le disuguaglianze (11.13) impongono dei vincoli locali, ma la limitazione su  $\sigma_2$  può non essere sufficiente. Nelle zone classicamente permesse  $\sigma_0$  e  $\sigma_2$  formano ambidue la fase della funzione  $\psi$ , che è definita naturalmente modulo  $2\pi$ . Potrebbe allora accadere che  $\sigma'_2 \ll \sigma'_0$ , ma ciò nonostante la *fase* complessiva dovuta a  $\sigma'_2$  potrebbe essere rilevante,

visto che in ogni caso la fase dovuta a  $\sigma_0$  è considerata modulo  $2\pi$ . 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 (11.3). La particolare soluzione dell'equazione di Schrödinger che soddisfa date condizioni al contorno richiede di determinare queste costanti. Questo problema richiede di stabilire delle *formule di connessione* fra i vari intervalli.

### 11.3 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 in appendice al capitolo.

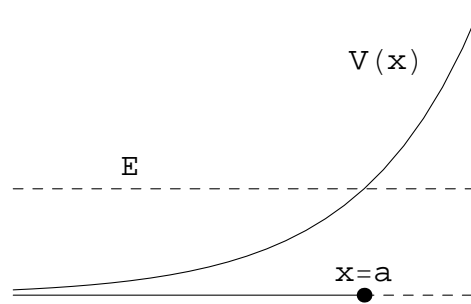


Figura 11.1: Schema per un singolo punto di inversione.  $x < a$  è la zona permessa classicamente,  $x > a$  quella proibita.

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 11.1. 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

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w|) \quad \frac{1}{\sqrt{p}} \sin(|w|) \quad (11.14)$$

con

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

mentre per  $x > a$

$$\frac{1}{\sqrt{|\tilde{p}|}} e^{-\tilde{w}} \quad \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{\tilde{w}} \quad (11.15)$$

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 in un intorno di  $x = a$  e quindi connettere lo sviluppo asintotico di questa soluzione alla soluzione WKB,

(11.3), 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 (11.1) nella forma

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

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

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi - z\psi = 0 \quad (11.16)$$

Le soluzioni indipendenti dell'equazione (11.16) si chiamano funzioni di Airy:  $\text{Ai}(z)$ ,  $\text{Bi}(z)$ . Il lettore può trovare un breve riassunto delle loro proprietà nel capitolo ???. Per grandi valori di  $z$  si ha:

$$\frac{|z|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \xleftarrow{z \rightarrow -\infty} \text{Ai}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} z^{-1/4} e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}} \quad (11.17a)$$

$$-\frac{|z|^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \xleftarrow{z \rightarrow -\infty} \text{Bi}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{-1/4} e^{+\frac{2}{3}|z|^{3/2}} \quad (11.17b)$$

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

$$\begin{aligned} p &= \hbar\beta(a - x)^{1/2} = \hbar\beta^{1/3}\sqrt{-z} & w(a, x) &= -\frac{2}{3}\beta(a - x)^{3/2} = -\frac{2}{3}|z|^{3/2} \\ \tilde{p} &= \hbar\beta(x - a)^{1/2} = \hbar\beta^{1/3}\sqrt{z} & \tilde{w}(a, x) &= \frac{2}{3}\beta(x - a)^{3/2} = \frac{2}{3}|z|^{3/2} \end{aligned}$$

Dalle (11.17) segue allora

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4}) \xleftarrow{x \rightarrow -\infty} \psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-|\tilde{w}|} \quad (11.18a)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{p}} \sin(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4}) \xleftarrow{x \rightarrow -\infty} \psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{+|\tilde{w}|} \quad (11.18b)$$

Le due formule (11.18) possono essere inglobate in

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4} + \alpha) \leftarrow \psi(x) \rightarrow \frac{\sin \alpha}{\sqrt{p}} e^{|\tilde{w}|} + \frac{1}{2} \frac{\cos \alpha}{\sqrt{p}} e^{-|\tilde{w}|}} \quad (11.19)$$

Le formule precedenti restano invariate nel caso in cui la zona classicamente accessibile sia  $x > a$ . Le (11.18), (11.19) saranno sufficienti a coprire tutte le applicazioni elementari del metodo WKB che vedremo nella parte principale di questo capitolo. Come è evidente dalla (11.19) queste formule vanno applicate "cum grano salis": una piccola variazione della fase  $\alpha$  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  $\alpha$ . In teoria le relazioni (11.19) 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 nonambiguo delle (11.18).

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  $\psi$  accettabili come stati sono a variazione limitata e questo esclude i termini esponenziali crescenti. Si ha quindi  $\alpha = 0$  e

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w(a, x)| - \frac{\pi}{4}) \leftarrow \psi(x) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-|\tilde{w}|}} \quad (11.20)$$

Un caso importante descritto dalle (11.18) è quello di due punti di inversione *distanti*: in questo caso se a priori è noto che la soluzione è combinazione lineare delle (11.18) 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 (11.18) sono: la derivazione della regola di quantizzazione di Bohr Sommerfeld per gli stati legati, la spiegazione semiclassica dell'effetto tunnel, la teoria del decadimento  $\alpha$ . Queste, ed altre, sono le applicazioni che saranno analizzate nel seguito del capitolo.

## 11.4 Stati legati e condizione di Bohr-Sommerfeld.

In questo paragrafo presentiamo una trattazione elementare dell'analisi semiclassica degli stati legati, in un paragrafo successivo esporremo alcuni risultati complementari.

Consideriamo un potenziale unidimensionale con un solo minimo, del tipo indicato in figura 11.2

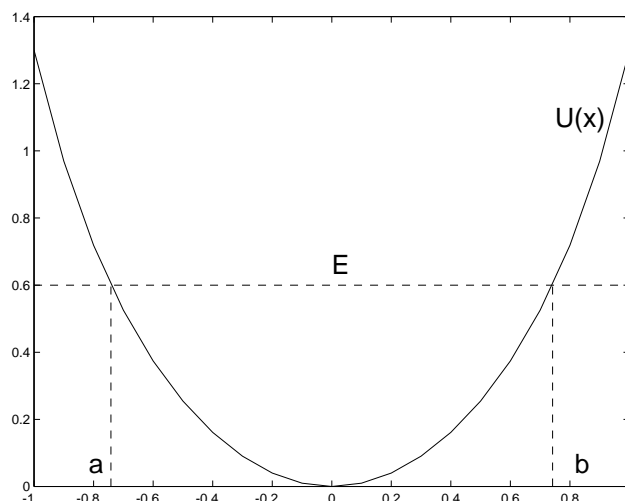


Figura 11.2: Potenziale unidimensionale.  $a, b$  sono i punti di inversione.

Ci aspettiamo che l'equazione di Schrödinger fornisca una serie di autovalori  $E_n$  e di autofunzioni  $\psi_n$  corrispondenti a stati legati, cioè con  $\psi_n \in L^2$ .

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

$$p(x) = 0 \quad E = U(x)$$

siano  $a, b$ , questi punti. In questo paragrafo useremo le notazioni

$$w(c, x) = \frac{1}{\hbar} \int_c^x \sqrt{2m(E - V)} dx \quad \sigma(c, x) = \frac{1}{\hbar} \int_c^x \sqrt{2m(V - E)} dx \quad (11.21)$$

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

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

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

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(b, x)) \quad (11.22)$$

La formula di connessione (11.18) indica che per  $x < b$  la funzione d'onda semiclassica è

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(b, x)) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos(w(x, b) - \frac{\pi}{4}) \quad (11.23)$$

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

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

$$\frac{D}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(x, a)) \rightarrow \frac{D}{\sqrt{|p|}} \cos(w(a, x) - \frac{\pi}{4}) \quad (11.24)$$

La condizione di quantizzazione nasce dall'imporre che e 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 riportiamo le nella stessa notazione:

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

Questa determinazione deve differire dalla (11.23) per un fattore  $n\pi$ , con  $n$  pari o dispari a seconda del segno fra  $C$  e  $D$ . Quindi

$$-w(a, b) + \frac{\pi}{4} = n\pi - \frac{\pi}{4} \Rightarrow w(a, b) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (11.25)$$

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 (11.25) nella forma

$$J \equiv \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \quad (11.26)$$

Questa è la condizione di Bohr-Sommerfeld della vecchia teoria dei quanti a meno di un, importante, fattore additivo  $1/2$ .

La (11.26) 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

$$\frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) \quad (11.27)$$

varia fra  $-\pi/4$  e  $n\pi - \pi/4$ , cioè cambia di  $n\pi$ , quindi il coseno ha  $n$  zeri. La funzione d'onda  $\psi_n$  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  $L^2$  sia 1. La funzione d'onda è esponenzialmente depressa nella zona esterna all'intervallo  $[a, b]$  quindi con buona approssimazione si può scrivere

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \simeq \int_a^b |\psi|^2 dx = C^2 \int_a^b \frac{dx}{p} \cos^2 \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (11.28)$$

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

$$\frac{C^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{p} \simeq 1 \quad (11.29)$$

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

$$\frac{C^2}{2} \frac{T}{2m} = 1 \quad C = 2\sqrt{\frac{m}{T}} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}} \quad \omega = \frac{2\pi}{T} \quad (11.30)$$

Abbiamo ottenuto la stima (11.29) 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 11.A il lettore può trovare una dimostrazione della stima (11.30) che non fa uso della condizione  $n \gg 1$ .

### 11.4.1 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 in per un potenziale  $V(r)$ , in onda  $s$ . La situazione è illustrata in figura 11.3. In questo caso la funzione d'onda deve soddisfare 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

$$w(-a, a) = 2w(0, a) = \left[ (2n+1) + \frac{1}{2} \right] \pi = (2n + \frac{3}{2})\pi \Rightarrow w(0, a) = \left( n + \frac{3}{4} \right) \pi \quad (11.31)$$

Ovvero, in termini di integrale di azione  $J$ :

$$\boxed{J = \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx \equiv \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^a p(x) dx = \left( n + \frac{3}{4} \right) \hbar} \quad (11.32)$$

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 (11.31).

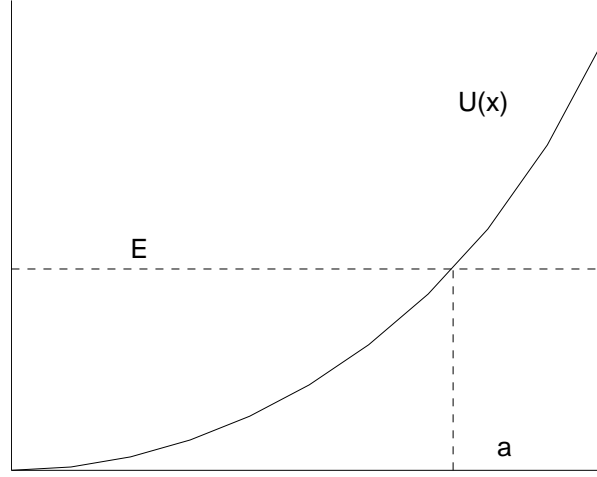


Figura 11.3: Potenziale unidimensionale limitato a  $x > 0$ .  $0, a$  sono i punti di inversione.

### 11.4.2 Problema radiale e singolarità.

Quanto abbiamo visto finora si applica a potenziali regolari. Se i punti di inversione coincidono o sono vicini a punti singolari l'approssimazione WKB deve essere modificata. 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 (11.26) alla forma (11.32). 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:

$$\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] \varphi = 0 \quad (11.33)$$

Discuteremo in particolare il caso coulombiano, in cui  $U = -e^2/r$ .

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

$$\frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar}{|p|} \right) \ll 1 \quad (11.34)$$

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

$$\frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar}{|p|} \right) \sim \frac{\alpha \hbar}{2\sqrt{2mC}} r^{\alpha/2-1} \ll 1 \quad (11.35)$$

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.

Per convincersi del problema basta considerare il potenziale coulombiano in onda  $s$ . L'impulso radiale in coordinate coulombiane si scrive  $p_r = \sqrt{2(E + \frac{1}{r})}$ . I punti di inversione (formali) sono  $r = 0, r = 1/|E|$  e la condizione di quantizzazione (11.32) ha la forma

$$J = \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^{1/|E|} \sqrt{2(E + \frac{1}{r})} = \frac{1}{\sqrt{2|E|}} = n + \frac{3}{4}$$

Questa non riproduce i livelli corretti,  $E = -1/(2n^2)$ , ma soprattutto è inapplicabile di principio, visto la singolarità.

La situazione in onda  $\ell$  è più problematica. Il potenziale centrifugo è della forma  $\hbar^2/(2mr^2)$  e la condizione (11.35) diventa  $1/\sqrt{\ell(\ell+1)} \ll 1$ , che è soddisfatta per grandi valori di  $\ell$  ma non per piccoli  $\ell$ . Nel caso coulombiano

$$p_r = \sqrt{2\left(E + \frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2}\right)} = \frac{1}{r} \sqrt{2|E|} \sqrt{-r^2 + \frac{r}{|E|} - \frac{\ell(\ell+1)}{2|E|}}$$

I punti di inversione  $r_0, r_1$  sono

$$r_0 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2\ell(\ell+1)|E|}}{2|E|} \quad r_1 = \frac{1 + \sqrt{1 - 2\ell(\ell+1)|E|}}{2|E|}$$

La condizione di quantizzazione si scrive, con  $n_k = 0, 1, \dots$ :

$$\begin{aligned} n_k + \frac{1}{2} &= \frac{1}{\pi} \int_{r_0}^{r_1} p_r dr = \frac{1}{\pi} \sqrt{2|E|} \int_{r_0}^{r_1} \frac{dr}{r} \sqrt{(r_1 - r)(r - r_0)} \\ &= \frac{1}{\pi} \sqrt{2|E|} \frac{\pi}{2} (r_0 + r_1 - 2\sqrt{r_0 r_1}) = \frac{1}{2} \sqrt{2|E|} \left( \frac{1}{|E|} - 2 \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{\sqrt{2|E|}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2|E|}} - \sqrt{\ell(\ell+1)} \end{aligned}$$

Da cui<sup>2</sup>

$$E = -\frac{1}{2} \left[ n_k + \frac{1}{2} + \sqrt{\ell(\ell+1)} \right]^{-2} \quad (11.36)$$

Come si vede i livelli non coincidono con quelli esatti (il che non è necessario) ma hanno il corretto andamento  $-1/(2n^2)$  per  $\ell \gg 1$ .

Notiamo però che se operiamo la sostituzione

$$\ell(\ell+1) \rightarrow \left( \ell + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (11.37)$$

e definiamo  $n_r = n_k + 1 = 1, 2, \dots$  otteniamo i livelli corretti:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{1}{(n_r + \ell)^2} \quad n = n_r = \ell \quad (11.38)$$

$n$  è il numero quantico principale e  $n_r \geq 1$  è il numero quantico radiale della vecchia teoria dei quanti. La sostituzione (11.37) è stata proposta da Langer[?] ed ha dei buoni motivi per essere adottata. Consideriamo un potenziale qualunque che sia dominato dal termine centrifugo per  $r \rightarrow 0$ , cioè con

$$\lim_{r \rightarrow 0} (r^2 U(r)) = 0$$

In questo caso l'equazione d'onda radiale, per piccoli  $r$ , è della forma

$$-\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \varphi = 0$$

che ha come soluzioni esatte

$$\varphi \sim r^{\ell+1} \quad \varphi \sim r^{-\ell}$$

<sup>2</sup>Per il lettore che volesse rifare il calcolo possiamo rimandare al capitolo introduttivo, ???. Se si usa un programma simbolico per il calcolo si tenga conto del fatto che l'integrale si annulla per  $r_0 = r_1$ .

In approssimazione semiclassica invece

$$\hbar^{-1}|p(r)| \sim \sqrt{\ell(\ell+1)/r^2}$$

Quindi, per  $r \rightarrow 0$ , le due possibili soluzioni semiclassiche si comportano come:

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

Vediamo perciò che la sostituzione di Langer riproduce il corretto comportamento asintotico per  $r \rightarrow 0$ . Nel seguito adotteremo la sostituzione (11.37). Una discussione più approfondita sull'argomento può essere trovata nella referenza[BerMou72].

### 11.4.3 Variabili angolari.

Consideriamo il caso in cui l'equazione di Schrödinger, o in generale l'equazione agli autovalori, si riferisca a variabili angolari. Il caso più semplice è quello di  $L_z$ . In questo caso l'equazione agli autovalori prende la forma

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = \hbar^2 m^2 f \quad (11.39)$$

$\varphi$  indica l'angolo azimutale,  $f$  la funzione d'onda,  $m$  l'autovalore. La (11.39) 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  $m^2$ . Il momento coniugato a  $\varphi$  è

$$|p_\varphi| = \sqrt{m^2} = |m| \quad (11.40)$$

Le due determinazioni possibili per  $p_\varphi$ ,  $p_\varphi = \pm m$ , corrispondono alle due possibili soluzioni semiclassiche

$$f = C \exp\left[\pm i \int_0^\varphi p d\varphi\right] = C \exp(\pm im\varphi) \quad (11.41)$$

Il punto interessante è che, essendo  $\varphi$  periodico e  $p_\varphi$  costante, e non nullo, **non si hanno punti di inversione**, quindi la soluzione semiclassica (11.41) è sempre valida. La condizione di quantizzazione nasce dall'imporre la periodicità in  $\varphi$ :

$$f(\varphi + 2\pi) = f(\varphi) \quad m \in \mathbb{Z} \quad (11.42)$$

che è la soluzione *esatta* del sistema.

Notiamo che in questo moto periodico la condizione di quantizzazione non ha correzioni seminteri, come nel caso oscillatorio. Questi due tipi di moto corrispondono a ciò che nella vecchia teoria dei quanti erano i moti periodici 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

$$f = \frac{C}{\sqrt{|p_\varphi|}} \exp(im\varphi) \quad (11.43)$$

La costante di normalizzazione qui differisce dalla (11.30) perchè stiamo considerando funzioni d'onda complesse, stiamo cioè usando gli esponenziali invece di seni e coseni. Ovviamente normalizzando la funzione (11.43) si ottiene l'espressione esatta

$$f(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$$

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

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \psi = \hbar^2 K \psi \quad (11.44)$$

Sappiamo dalla teoria del momento angolare che la soluzione esatta del sistema ha come autovalori  $K = \ell(\ell + 1)$ .

-=-= Da finire. -=-=

### 11.4.4 Esempi.

#### Oscillatore armonico.

L'equazione di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi \quad p^2 = 2m(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2) \quad (11.45)$$

I punti di inversione classici sono perciò

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

La condizione di quantizzazione semiclassica si scrive

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-a}^a dx \sqrt{2mE \left( 1 - \frac{x^2}{a^2} \right)} = \frac{1}{\pi} \sqrt{2mE} \int_0^a dx \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.46)$$

ovvero, ponendo  $x = a z$ :

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

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.

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

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

La figura 11.4 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.

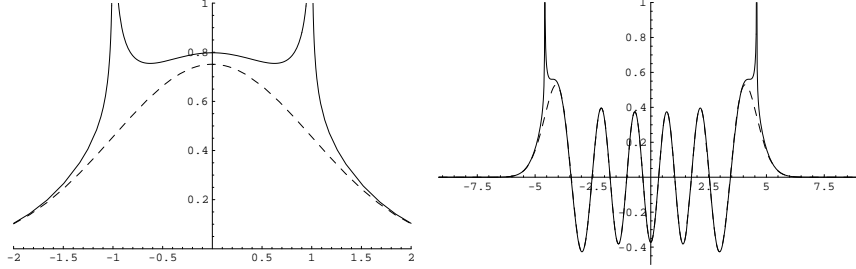


Figura 11.4: Funzione d'onda WKB (linea intera) e funzione d'onda esatta (linea tratteggiata) per gli stati  $n = 0$  e  $n = 10$  di un oscillatore armonico.

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

$$|\psi_{2n}(0)| = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} |H_{2n}(0)| = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{2n}(2n)!}} \frac{(2n)!}{n!} \quad (11.47)$$

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 (11.47) 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  $U = g/2x^4$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\psi = E\psi \quad (11.48)$$

Operando la trasformazione  $x = \lambda z$ , con  $\lambda = (mg/\hbar^2)^{1/6}$  la (11.48) si trasforma in

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2} z^4 \psi = \frac{\epsilon}{2} \psi \quad \frac{\epsilon}{2} = E \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{4/3} g^{1/3} \quad (11.49)$$

Gli autovalori della (11.49) chiaramente non dipendono da nessun parametro, quindi basta studiare questa equazione, se si vogliono ottenere le energie nelle unità solite basterà porre

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{4/3} g^{-1/3} \frac{\epsilon}{2}$$

A questo punto ricominciamo a chiamare  $x, E$  etc. le nostre variabili e studiamo l'equazione

$$\psi'' + (E - x^4)\psi = 0 \quad (11.50)$$

I punti di inversione sono  $x = \pm a = \pm E^{1/4}$  e la condizione di quantizzazione si scrive

$$n + \frac{1}{2} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{E} 2 \int_{-a}^a \sqrt{1 - (x/a)^4} dx = \frac{2}{\pi} a \sqrt{E} J \quad J = 0.8740191847640399368$$

da cui

$$E_n = \left[ \frac{\pi}{2J} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3} \quad (11.51)$$

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

$n$	$E_n$	$E_n^{WKB}$	$\delta E/E$
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.

## 11.5 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 11.5: 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.

Il processo è stato formalmente trattato nel capitolo ?? qui vogliamo darne una descrizione semiclassica.

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

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k}} [e^{ikx} + r e^{-ikx}] & x \rightarrow -\infty \\ \frac{1}{\sqrt{k'}} t e^{ik'x} & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (11.52)$$

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

$$p = \hbar k \quad p' = \hbar k' \quad (11.53)$$

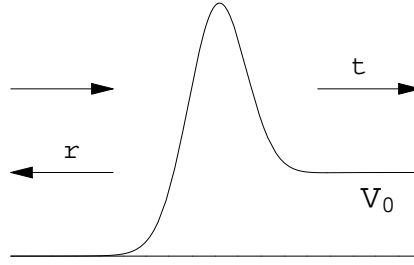


Figura 11.5: Illustrazione schematica dell'effetto tunnel: un'onda incidente dà luogo ad un'onda trasmessa ed una riflessa di ampiezze  $t, r$  rispettivamente.

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

$$p = \sqrt{2mE} \quad p' = \sqrt{2m(E - V_0)} \quad (11.54)$$

Scrivendo la corrente

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

il lettore si convince facilmente che la funzione d'onda (11.52) corrisponde ad un flusso di una particella al secondo incidente, 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 (11.52) 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, o almeno alla situazione in cui  $V(+\infty) = V(-\infty)$ .

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

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} e^{iw(a,x)} + R(E) \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-iw(a,x)} \quad \psi(x) = T(E) \frac{1}{\sqrt{p}} e^{iw(b,x)} \quad (11.55)$$

La fase dei coefficienti  $R, T$  è riferita ai punti di inversione, questa scelta differisce da quella indicata nella (11.52) 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:

$$T(E) = \frac{e^{-\tilde{w}(a,b)}}{(1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)})^{1/2}} e^{-i\delta(E)} \quad R(E) = \frac{1}{(1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)})^{1/2}} e^{-i\delta(E)} \quad (11.56)$$

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

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

$$|T|^2 = \frac{e^{-2\tilde{w}(a,b)}}{1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)}} \simeq e^{-2\tilde{w}(a,b)} \quad (11.57)$$

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

$$\delta(E) = \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar} \log \left| \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar e} \right| + \arg \Gamma \left( \frac{1}{2} - i \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar} \right) \quad (11.58)$$

$\Gamma$  è la funzione gamma di Eulero. Nel testo non faremo uso del risultato (11.58). Notiamo comunque che il valore di questa fase è sempre piuttosto piccolo, come si vede dalla figura 11.6

In questo paragrafo dimostreremo la (11.56) nel caso di piccoli valori del fattore di penetrazione, cioè per  $\tilde{w} \gg 1$ . Il calcolo completo della (11.56) è dato in appendice.

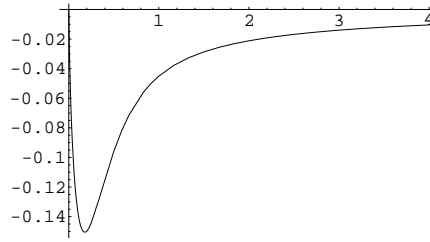


Figura 11.6: Variazione di  $\delta(E)$  in funzione di  $\tilde{w}/\pi$ .

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 perchè 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 (11.18):

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

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

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

che coincide con il limite del risultato (11.57). 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:

$$T = \frac{1}{e^{\tilde{w}} + \frac{1}{4} e^{-\tilde{w}}} \quad R = -i \frac{e^{\tilde{w}} - \frac{1}{4} e^{-\tilde{w}}}{e^{\tilde{w}} + \frac{1}{4} e^{-\tilde{w}}} \quad (11.59)$$

Le correzioni così ottenute sono *sbagliate*, come si vede dal fatto che il risultato non ha la forma (11.57). Nell'appendice effettueremo il calcolo esatto per un potenziale parabolico in cui si verificherà quest'affermazione.

### 11.5.1 Esempio.

## 11.6 Conteggio degli stati.

La condizione di quantizzazione (11.26)

$$\frac{1}{2\pi} \oint pdq = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.60)$$

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 (11.60) è l'area racchiusa da questa curva. La relazione (11.60) 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

$$n = \frac{\Delta p\Delta q}{2\pi\hbar} \quad (11.61)$$

Come è noto l'applicazione forse più importante di relazioni come la (11.61) è in fisica statistica, per contare appunto gli stati possibili. Per il caso di una particella in una scatola la relazione (11.61) 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 (11.61). 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 (11.61).

Notiamo per completezza che la generalizzazione della (11.60) o meglio ancora della analoga regola di Bohr-Sommerfeld, a sistemi con più gradi di libertà non è ovvia. Nel caso di sistemi separabili ovviamente si ha la relazione (11.60) per ogni grado di libertà. Una analoga relazione è scrivibile in generale per sistemi integrabili,

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{\gamma_i} \omega = n_i$$

dove  $\omega = \sum_{k=1}^n p_k dq_k$  è la 1-forma di Poincarè-Cartan e  $\gamma_i$  sono cicli invarianti. Per sistemi non integrabili la questione è molto più complicata e questa è una delle ragioni per cui il controllo del limite fra descrizione classica e quantistica è problematico.

La (11.60) 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, sfruttando  $p = \sqrt{2m(E - U)}$ :

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

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

$$\Delta E \simeq \hbar\omega \quad (11.62)$$

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

$$\psi(x, t) \sim \sum_k \psi_k(x) e^{-ik\omega t} \quad (11.63)$$

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 dobbiamo avere

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

dove 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 avrà<sup>3</sup>

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

per tutti i livelli che compaiono nella somma possiamo applicare la (11.62) e quindi  $E_m - E_n \simeq (m - n)\hbar\omega$ . Quindi cambiando variabili e scrivendo  $m = n + k$

$$\bar{f}(t) = \sum_n \sum_k c_{n+k}^* c_n f_{n+k,n} e^{ik\omega t} \quad (11.64)$$

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

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

avendo indicato con  $\varphi_n$  i fattori di fase semiclassici. Le due fasi  $\varphi_n, \varphi_m$  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 (11.64) 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

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

quindi 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

<sup>3</sup>Seguiamo in questa esposizione il classico testo di Landau-Lifchitz.

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.

## 11.7 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 a due minimi, come quello indicato in figura.

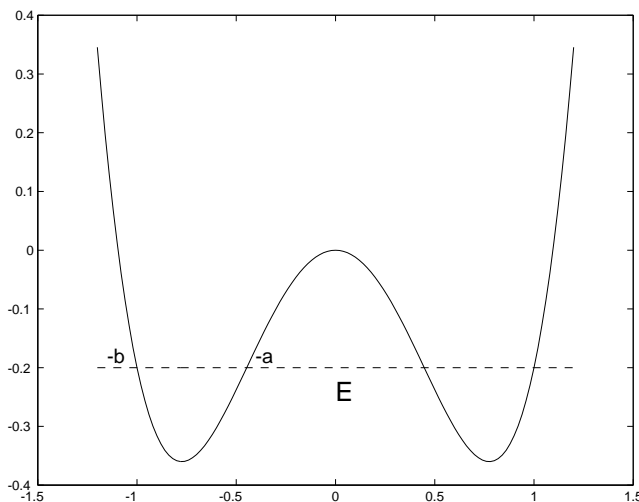


Figura 11.7: Potenziale per una doppia buca di potenziale. I punti di inversione del moto classico sono  $x = \pm a$ , e  $x = \pm b$ .

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

Vedremo in seguito alcune applicazioni fisiche, in particolare alla molecola di ammoniaca, ora vogliamo concentrarci sulla soluzione semiclassica del problema.

Daremo tre metodi di soluzione leggermente diversi fra loro per mettere in evidenza aspetti diversi del problema. Lo studente troverà più avanti nel suo studio metodi ancora diversi, basati sul path-integral, questo a testimoniare l'importanza metodologica della questione.

## Discussione

L'approccio semiclassico è interessante perchè 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  $x_-$ . 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, etc.

In Meccanica Quantistica la situazione è completamente diversa. L'Hamiltoniana del sistema

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x) \quad (11.65)$$

commuta con l'operazione di parità  $P : x \rightarrow -x$ , quindi possiamo classificare gli stati con gli autostati di  $P$ , che in rappresentazione di Schrödinger sono le funzioni pari, con autovalore  $+1$ , e dispari, con autovalore  $-1$ . L'equazione agli autovalori corrispondente alla Hamiltoniana (11.65) 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 fare 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.

Una 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 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 presenta 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  $\varphi_+, \varphi_-$  sono i due stati quasistazionari corrispondenti alle due localizzazioni della particella, lo stato fondamentale ed il primo stato eccitato saranno della forma approssimativa

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_+ + \varphi_-) \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_+ - \varphi_-) \quad (11.66)$$

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

$$\varphi_+(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_1(0)e^{-E_1 t/\hbar} + \psi_2(0)e^{-E_2 t/\hbar} \right) \quad (11.67)$$

da cui

$$|\langle \varphi_- | \varphi_+(t) \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\Delta E t}{2\hbar} \quad (11.68)$$

quindi dopo un tempo  $T \sim \pi\hbar/\Delta E$  la particella si trova 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  $\Delta x$  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.

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

Siano  $\psi_1, \psi_2$  due autostati dell’Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (11.69)$$

dove  $U(x)$  è un potenziale simmetrico,  $U(x) = U(-x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 + U(x)\psi_1 = E_1 \psi_1 \quad (11.70a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2 + U(x)\psi_2 = E_2 \psi_2 \quad (11.70b)$$

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  $\psi_1, \psi_2$  sono ortogonali. Consideriamo la combinazione

$$A(\psi_1, \psi_2) = \psi_1 \psi_2'' - \psi_2 \psi_1''$$

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 (11.70) 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

$$E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{S_{12}} (\psi_1(0) \psi_2'(0) - \psi_2(0) \psi_1'(0)) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{S_{12}} \psi_1(0) \psi_2'(0) \quad (11.71a)$$

$$S_{12} = \int_0^\infty dx \psi_1 \psi_2 \quad (11.71b)$$

Si è usato il fatto che  $\psi_2(0) = 0$ , essendo  $\psi_2$  una funzione dispari. Applichiamo la (11.71) al caso che ci interessa.  $\psi_1$  è la funzione d’onda, simmetrica, dello stato fondamentale e  $\psi_2$  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  $\psi_1$  e  $\psi_2$  saranno descritti dalle combinazioni simmetrica e antisimmetrica

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) + \varphi(-x)) \quad (11.72a)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi(x) - \varphi(-x)) \quad (11.72b)$$

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

$$\varphi_+(x) = \varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x)) \quad (11.73a)$$

$$\varphi_-(x) = \varphi(-x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) - \psi_2(x)) \quad (11.73b)$$

corrisponderanno a stati localizzati nella buca di destra e di sinistra rispettivamente. Notiamo che con questa definizione di  $\varphi$  le (11.72) sono delle identità.

Per funzioni localizzate la sovrapposizione è trascurabile:

$$\int dx \varphi_+(x) \varphi_-(x) \simeq 0 \quad (11.74)$$

quindi possiamo scrivere

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

dove abbiamo usato il fatto che la funzione  $\varphi_-$  è localizzata nel semispazio di sinistra, quindi è trascurabile per  $x > 0$ .

Dal fatto che  $\psi_1$  è pari e  $\psi_2$  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 (11.71)

$$\Delta E = E_2 - E_1 \simeq \frac{1}{\int_0^\infty dx \varphi_+^2} \frac{2\hbar^2}{m} \varphi_+(0) \varphi'_+(0) \quad (11.75)$$

Come si vede l'espressione non dipende dalla normalizzazione assoluta di  $\varphi_+$  e possiamo convenientemente normalizzare la funzione in modo che l'integrale che compare nella (11.75) sia 1:

$$\boxed{\Delta E = E_2 - E_1 \simeq \frac{2\hbar^2}{m} \varphi_+(0) \varphi'_+(0)} \quad (11.76)$$

La forma della funzione  $\varphi_+$ , 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  $\varphi_+$  per  $\hbar \rightarrow 0$ . In questa approssimazione  $\varphi_+$  deve soddisfare l'equazione di Schrödinger nella parte destra del potenziale, il problema si riduce quindi al calcolo effettuato precedentemente. In

particolare ricordiamo che:

$$H\varphi_+ = E_0\varphi_+ \quad x > 0 \quad (11.77a)$$

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b p(x) dx = \frac{1}{2} \quad \text{Equazione per } E_0 \quad (11.77b)$$

$$\varphi(x) \simeq \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) \quad a \leq x \leq b \quad (11.77c)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \quad T = 2 \int_a^b \frac{dx}{v} = 2m \int_a^b \frac{dx}{p(x)} \quad (11.77d)$$

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi v}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx |p(x)|} \quad 0 < x < a \quad (11.77e)$$

da cui

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

e quindi

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a dx |p(x)|\right] \equiv \frac{\hbar\omega}{\pi} K \quad (11.78)$$

## Metodo 2.

È naturale interpretare le (11.72) come le equazioni che diagonalizzano una matrice  $2 \times 2$ , 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  $2 \times 2$ . 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  $\varphi_+, \varphi_-$  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  $\varphi_+, \varphi_-$  soluzioni semiclassiche nei due semispazi  $x > 0, x < 0$  rispettivamente:

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

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  $\varphi$  con un esponenziale a partire da questo valore. Indichiamo la soluzione semiclassica del paragrafo precedente con  $\varphi_c(x)$ , si ha allora

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  $\varphi_+$ ,  $\varphi_-$  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

$$\det(H_{ij} - EN_{ij}) = 0 \quad (11.79)$$

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

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

abbiamo

$$N_{11} = N_{22} = 1 + o(\sqrt{K}) \quad N_{12} = N_{21} = o(\sqrt{K}) \quad (11.80)$$

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  $\varphi_+$  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  $H_{-+}$ .

$$H_{-+} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_- H \varphi_+ = \int_{-\infty}^0 dx \varphi_- H \varphi_+ + \int_0^{\infty} dx \varphi_- H \varphi_+ \quad (11.81)$$

Come già detto  $\varphi_+$  soddisfa, approssimativamente, l'equazione di Schrödinger solo nella zona  $x > 0$ . Per valutare il primo termine della (11.81) 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  $o(K)$

$$N^{-1}H = \begin{pmatrix} E_0 & -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) \\ -\frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) & E_0 \end{pmatrix} \quad (11.82)$$

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 (11.82) sono

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_c(x) + \varphi_c(-x)) \quad E_1 = E_0 - \frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) \quad (11.83a)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_c(x) - \varphi_c(-x)) \quad E_2 = E_0 + \frac{\hbar^2}{m}\varphi_c(0)\varphi'_c(0) \quad (11.83b)$$

Notiamo che, come già osservato  $\varphi_c(0)\varphi'_c(0) > 0$ , quindi effettivamente lo stato simmetrico è lo stato fondamentale. Il risultato (11.83) 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.

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

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

$$\frac{\cos(w(a,b))}{\sin(w(a,b))} = \frac{1}{2} e^{-2w(0,a)} \equiv \frac{1}{2} K \quad (11.84)$$

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

$$\sin \mu \simeq \mu = \frac{1}{2}K \quad (11.85)$$

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

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

dove  $T$  è il periodo classico di oscillazione. Quindi

$$\delta E = -\frac{\hbar\omega}{2\pi}K \quad E_1 = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2\pi}K \quad (11.86)$$

allo stesso modo

$$E_2 = E_0 + \frac{\hbar\omega}{2\pi}K \quad (11.87)$$

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

## 11.8 Decadimento $\alpha$ .

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 disintegrare producendo particelle di vario tipo, ad esempio particelle  $\alpha$  (nuclei di elio) o particelle  $\beta^-$ ,  $\beta^+$  (elettroni e positroni), raggi  $\gamma$  etc.

Una teoria completa di questo tipo di processi richiede un formalismo in cui il numero di particelle non è conservato, e questa situazione è meglio descritta in ambito relativistico. In questo capitolo ci occuperemo di un problema più limitato: un sistema quantistico descritto, approssimativamente, da uno stato legato non relativistico che nel corso dell'evoluzione temporale si disgrega.

Il parametro rilevante per descrivere questo tipo di situazioni è *la vita media* del sistema. Consideriamo  $N$  sistemi, indipendenti fra di loro, che possono decadere. Se indichiamo con  $\gamma$  la probabilità di decadimento per unità di tempo per il singolo sistema avremo

$$\frac{dN}{dt} = -\gamma N \quad \Rightarrow \quad N(t) = N(0) e^{-\gamma t} \quad (11.88)$$

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

Benchè la (11.88) possa apparire naturale nella scrittura abbiamo implicitamente assunto diverse cose, in particolare si è assunto che il sistema non abbia memoria, cioè che il numero di decadimenti al tempo  $t$  dipenda *solo* da  $N(t)$  e non dalla storia passata del sistema<sup>4</sup>. In meccanica quantistica la situazione è anche più delicata: si pretende di dare

<sup>4</sup>Non è difficile immaginare sistemi in cui la (11.88) non vale: si pensi ad una popolazione, assediata per semplicità, la velocità di riproduzione,  $dN/dt$ , dipende non solo dal numero di individui presenti,  $N$ , ma anche dal loro stato di salute, cioè dalla storia passata.

una descrizione dei fenomeni quindi non è lecito “ipotizzare” una legge del tipo (11.88): la dinamica evolutiva è data dall’equazione di Schrödinger quindi la (11.88) deve essere una *conseguenza* di tale equazione.

Abbiamo già incontrato questo tipo di problema nella discussione dei processi di decadimento qui vogliamo impostare il problema da un punto di vista relativamente più semplice, usando l’equazione di Schrödinger indipendente dal tempo, ed in particolare nell’approssimazione semiclassica.

Per essere concreti consideriamo il caso del decadimento  $\alpha$ . Una particella  $\alpha$  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

$$m(\alpha) c^2 - 2(m_p + m_n) c^2 \simeq -26.06 \text{ MeV} \quad (11.89)$$

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 *alpha* 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  $\alpha$ , di carica 2, e il resto del nucleo, di carica  $Z-2$ . La situazione è quella schematizzata in figura 11.8. Se la particella  $\alpha$  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 11.8 suggerisce immediatamente la possibilità di un decadimento per effetto tunnel: la particella  $\alpha$  può “attraversare” la barriera coulombiana e provocare la disintegrazione del nucleo.

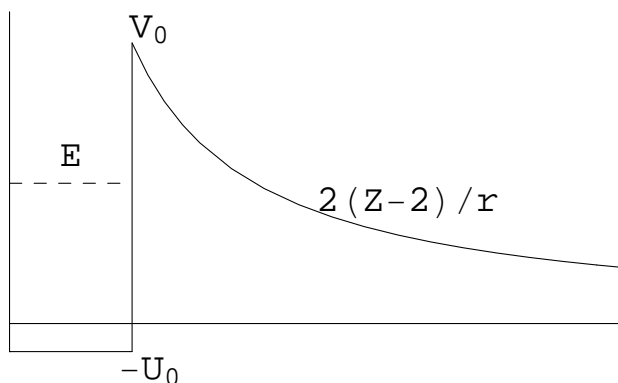


Figura 11.8: Potenziale per una particella  $\alpha$  schematizzato come una buca di potenziale ed una repulsione coulombiana all’esterno del nucleo.

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

$$\Gamma = \hbar \gamma = \xi \frac{\hbar}{T} P \quad (11.90)$$

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

Una dimostrazione piú formale, ma equivalente, della (11.90) 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

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

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

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{A}{r} \sin(kr) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{A}{2i r} [e^{ikr} - e^{-ikr}] \quad (11.91)$$

La soluzione (11.91) 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 (11.91) 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 (11.90).

Z(A)	Z(A)	$T_{1/2}$	$E(\text{MeV})$
Po(212)	Pb(208)	$3.0 \times 10^{-7}\text{s}$	8.95
Po(214)	Pb(210)	$1.5 \times 10^{-4}\text{s}$	7.83
Po(215)	Pb(211)	$1.8 \times 10^{-3}\text{s}$	7.50
Po(216)	Pb(212)	0.158s	6.89
At(215)	Bi(211)	$10^{-4}\text{s}$	8.15
Em(219)	Po(215)	4.7s	6.94
Th(227)	Ra(223)	93d	6.16
Th(228)	Ra(224)	2.64y	5.52
Th(230)	Ra(226)	$1. \times 10^5\text{y}$	4.76
Th(232)	Ra(228)	$1.39 \times 10^{10}\text{y}$	4.05

Tabella 11.1: esempi di decadimento  $\alpha$ . È elencato il nucleo padre, il nucleo figlio, il tempo di dimezzamento (s=secondi, d = giorni, y = anni), e l'energia della particella  $\alpha$ , in MeV.

Il fattore di penetrazione  $P$  nella (11.90) 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

$$\frac{2(Z-2)e^2}{r_1} = E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{E} \quad (11.92)$$

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  $r = r_1 x$  e notando che  $\sqrt{2mC r_1} = 2C/v$ , l'integrale diventa

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

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

$$P = \exp \left[ -\frac{2\pi C}{\hbar v} + 4\frac{\sqrt{2Cmr_0}}{\hbar} \right] \quad (11.93)$$

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:

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

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 11.1.

Nella figura 11.9 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.

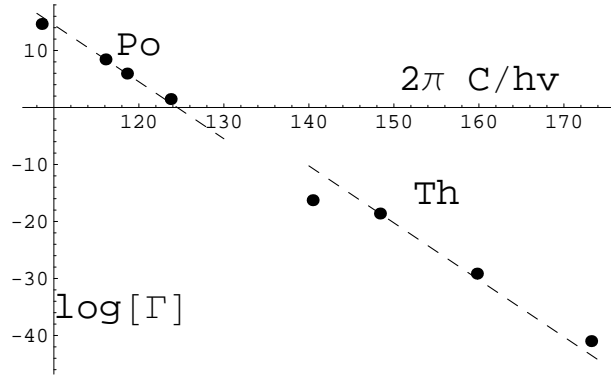


Figura 11.9:  $\log(\Gamma)$  in funzione di  $2\pi C/\hbar v$  per il Po ed il Th.

Elaborando un modello nucleare si hanno dei parametri  $r_0$  e  $U_0$  che permettono di effettuare un confronto quantitativo con la (11.93). 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 (11.90) usando il metodo WKB.

## 11.9 Teoria di Gamow - Siegert

La (11.88) sarebbe soddisfatta se potessimo trovare degli stati  $\psi$  autostati dell'Hamiltoniana con autovalori complessi  $E - i\Gamma/2$ . In questo caso si avrebbe per la probabilità di

sopravvivenza dello stato:

$$P(t) = |\langle \psi | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \langle \psi | e^{-iEt/\hbar - \Gamma t/2\hbar} | \psi \rangle \right|^2 = e^{-\Gamma t/\hbar} \quad (11.94)$$

che riproduce esattamente la (11.88).

$H$  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, ragionevole per gli stati "normali",  $H$  può avere autovalori complessi. Vedremo nei complementi 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. Nei complementi verrà discusso ancora un altro metodo, più rigoroso per certi aspetti e più aderente alla fisica degli stati metastabili, elaborato da vari autori fra cui Fermi[Fermi].

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

$$H \psi = E \psi \quad (11.95)$$

con le condizioni al contorno di regolarità nell'origine e di 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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \varphi + V(r) \varphi = E \varphi \quad \varphi(0) = 0 \quad ; \quad \varphi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp(ikr) \quad (11.96)$$

$k = \sqrt{2mE}$ . La (11.96) non ammette in generale soluzioni per  $E$  reale. Infatti essendo  $V(r)$  reale la (11.96) ha due soluzioni indipendenti reali, una combinazione di queste soluzioni, chiamamola  $\varphi_a$  soddisfa alla prima condizione al contorno ( $\varphi = 0$ ). In generale la combinazione linearmente indipendente,  $\varphi_b$ , non soddisfa a questa condizione. Possiamo sempre scegliere  $\varphi_a$  reale con una scelta di fase. Supponiamo  $V(r)$  a raggio limitato, in questo caso la soluzione per grandi  $r$  della (11.96) 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  $\varphi_a, \varphi_b$ , 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 (11.96) può ammettere soluzioni. Per capire il meccanismo che determina l'autovalore (complesso)  $E$  si immagini di risolvere l'equazione (11.96) 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  $\varphi_L$ . 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  $\varphi_R$ . 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 (11.96) può essere risolta numericamente secondo la procedura delineata ottenendo l'autovalore cercato.

Un esempio di tale procedura si può trovare nel programma `r2exp.nb` per il potenziale  $V(r) = 7.5 r^2 e^{-r}$ . Si trova una risonanza per  $E = 3.42339, \Gamma = 0.0255$ .

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

Innanzitutto osserviamo che moltiplicando la (11.96) per  $\varphi^*$  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  $\varphi(0) = 0$ :

$$2 \operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \varphi^* \frac{d}{dr} \varphi - \varphi \frac{d}{dr} \varphi^* \right) \quad (11.97)$$

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 (11.96).

Scrivendo  $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2$ ,  $E = E_1 + iE_2$ , l'equazione differenziale (11.96) ha la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_1'' + V(r) \varphi_1 = E_1 \varphi_1 - E_2 \varphi_2 \quad (11.98a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_2'' + V(r) \varphi_2 = E_2 \varphi_1 + E_1 \varphi_2 \quad (11.98b)$$

Se non ci fosse effetto tunnel si avrebbe  $E_2 = 0$  e  $\varphi_2 = 0$ . La funzione  $\varphi_1$  sarebbe concentrata in una zona attorno all'origine e avrebbe un andamento decrescente nella zona classicamente proibita. L'idea per approssimare le (11.98) è che per  $E_2 \ll E_1$  questa situazione cambi di poco. Possiamo allora scegliere le fasi in modo che la parte reale della funzione d'onda sia decrescente nella zona classicamente proibita mentre la parte immaginaria sia crescente. La situazione per un potenziale generico è quella rappresentata in figura 11.10. La funzione  $\varphi_2$  comincia a diventare dello stesso ordine di  $\varphi_1$  nella zona attorno al secondo punto di inversione,  $r = b$ .

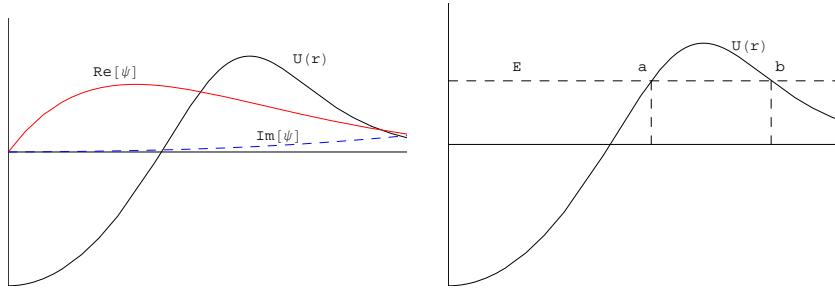


Figura 11.10: Potenziale unidimensionale.  $a, b$  sono i punti di inversione.

In assenza di effetto tunnel la soluzione WKB della (11.96) nella zona  $a < r, b$  avrebbe la forma<sup>5</sup>

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(a, r)) \equiv \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(a, b) + \sigma(r, b)) \quad (11.99)$$

Nella normalizzazione usuale  $C \sim \mathcal{O}(1)$  è determinato dalla normalizzazione dello stato legato. In presenza di una (piccola) parte immaginaria, crescente in  $r$ , si avrà:

$$\varphi = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(a, b) + \sigma(r, b)) + i \frac{D}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(r, b)) \quad (11.100)$$

<sup>5</sup>Usiamo la notazione  $\sigma$  per definire l'azione semiclassica nella regione classicamente proibita.

La continuazione analitica per  $r > b$  si ottiene dalle formule generali (11.18):

$$r > b: \quad \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ -\frac{C}{2} e^{-\sigma(a,b)} \sin(w(b,r) - \frac{\pi}{4}) + i 2D \cos(w(b,r) - \frac{\pi}{4}) \right] = \\ i 2D \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ \cos(w(b,r) - \frac{\pi}{4}) + i \frac{C}{4D} e^{-\sigma(a,b)} \sin(w(b,r) - \frac{\pi}{4}) \right] \quad (11.101)$$

Richiedendo una soluzione semiclassica  $\exp(+iw(b,r))$  corrispondente ad una *fase crescente* si ha la condizione

$$4D = C \exp(-\sigma(a,b)) \quad (11.102)$$

e per  $r \geq b$  la soluzione (11.101) si scrive

$$\varphi = i \frac{C}{2\sqrt{|p|}} e^{-\sigma(a,b)} e^{i(w(b,r) - \frac{\pi}{4})} \quad (11.103)$$

Usando la (11.97) per  $r \geq b$  ed ricordando che  $w' = p/\hbar$  si ha

$$2 \operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m i} \frac{C^2}{4p} e^{-2\sigma(a,b)} 2 i w' = -\frac{\hbar}{4m} C^2 e^{-2\sigma(a,b)} \quad (11.104)$$

A meno di termini esponenzialmente depressi la funzione  $\varphi$  è concentrata nella zona classicamente accessibile, per  $r < b$ , quindi l'integrale a primo membro della (11.104) può estendersi fino a  $r = \infty$  pur di sostituire  $\varphi$  con la soluzione semiclassica senza effetto tunnel, quindi in pratica si ha la normalizzazione dello stato. L'unico problema è la determinazione della costante  $C$ , questo può essere fatto connettendo la funzione semiclassica con la soluzione nella zona  $r < a$ . Per  $r \sim a$  la parte immaginaria di  $\varphi$  è trascurabile e la funzione si riduce alla forma (11.99). Se trattiamo anche la zona  $r < a$  in modo semiclassico la soluzione è ovvia, la prosecuzione analitica della (11.99) è

$$r < a: \quad \varphi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos(w(r,a) - \frac{\pi}{4}) \quad (11.105)$$

Già sappiamo che una tale forma della soluzione porta alla determinazione semiclassica dei livelli energetici

$$\frac{1}{2\pi} J = \frac{1}{2\pi} \oint p(r) dr = \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right) \quad n = 0, 1, \dots \quad (11.106)$$

Normalizzando  $\varphi$  nella zona classicamente accessibile si ha, come nel paragrafo 11.4:

$$1 = \int_0^a \frac{C^2}{p} \cos^2(w) dx \simeq \frac{C^2}{2} \int_0^a \frac{dx}{p} = \frac{C^2}{4m} T \quad \Rightarrow \quad C^2 = \frac{4m}{T} \quad (11.107)$$

dove  $T$  è il periodo classico del moto. Dalla (11.104) segue allora:

$$\boxed{2 \operatorname{Im}(E) \equiv -\Gamma = -\frac{\hbar}{T} \exp(-2\sigma(a,b))} \quad (11.108)$$

Questa formula è *identica* a quella ricavata precedentemente con considerazioni qualitative.

Può essere utile ricavare la (11.108) in modo diverso, illustrando nel contempo il senso della posizione (11.100). Consideriamo la zona classicamente permessa, e supponiamo tanto per fissare le notazioni che i punti di inversione siano 0 ed  $a$ , come in figura 11.10. Assumiamo in generale un'energia complessa, nella forma  $E - i\Gamma/2$ . Sappiamo che  $\Gamma = 0$  per  $\hbar = 0$ , quindi in ogni caso la presenza di  $\Gamma$  dà una correzione al limite classico. Questo significa che la funzione d'onda semiclassica in questa regione è scrivibile nella forma

$$\varphi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin[\tilde{w}(0,r)] \quad (11.109)$$

Il prefattore  $p^{-1/2}$  è già una correzione al limite  $\hbar \rightarrow 0$ , quindi nell'approssimazione considerata va calcolato per valori reali dell'energia.  $\tilde{w}$  indica la fase calcolata per valori complessi di  $E$ . Per estendere la soluzione (11.109) dobbiamo riscriverla in termini degli sfasamenti rispetto al punto  $r = a$ :

$$\begin{aligned} \sin(\tilde{w}(0, r)) &= \sin[\tilde{w}(0, a) - \tilde{w}(r, a)] \equiv \sin\left[\tilde{w}(0, a) - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{4} - \tilde{w}(r, a)\right] = \\ &= \sin\left[\frac{\pi\tilde{J}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right] \cos\left[\frac{\pi}{4} - \tilde{w}(r, a)\right] + \cos\left[\frac{\pi\tilde{J}}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right] \sin\left[\frac{\pi}{4} - \tilde{w}(r, a)\right] \end{aligned} \quad (11.110)$$

Abbiamo introdotto l'integrale di azione

$$\tilde{J} = \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \frac{1}{\pi} \int_0^a p(x) dx$$

Consideriamo per fissare le idee lo stato fondamentale. Se  $\Gamma$  fosse nullo

$$\tilde{J} = J = \hbar\left(n + \frac{3}{4}\right) \rightarrow \frac{3}{4}\hbar$$

e si avrebbe

$$\sin[\tilde{w}(0, r)] = \sin[w(0, r)] = \cos\left[w(r, a) - \frac{\pi}{4}\right] \quad (11.111)$$

che dà luogo per continuazione analitica ad una funzione esponenzialmente decrescente. In presenza di una piccola parte immaginaria,  $\delta E$  scriviamo

$$\tilde{J} = \frac{3}{4}\hbar + \delta J \quad \tilde{w}(r, a) = w(r, a) + \delta w$$

Inserendo queste espressioni nella (11.110):

$$\sin[\tilde{w}(0, r)] = \cos\left[w(r, a) - \frac{\pi}{4} + \delta w\right] \cos\left[\frac{\pi\delta J}{\hbar}\right] + \sin\left[w(r, a) - \frac{\pi}{4} + \delta w\right] \sin\left[\frac{\pi\delta J}{\hbar}\right] \quad (11.112)$$

Il coefficiente del secondo termine è già di ordine  $\delta E$ , quindi possiamo trascurare la variazione di fase  $\delta w$ . Nel primo termine questa variazione di fase darebbe luogo, espandendo il coseno, ad un altro termine in  $\sin(w - \pi/4)$ . Ora, tenendo conto che  $p(a) = 0$ :

$$\delta w = \frac{1}{\hbar} \delta E \frac{\partial}{\partial E} \int_r^a p(x) dx = \frac{1}{\hbar} \delta E \int_r^a \frac{dx}{v} = \frac{\delta E \tau}{\hbar} \quad (11.113)$$

$\tau$  è il tempo di volo (classico) dal punto  $r$  al punto  $a$ . Se il punto di inversione è uno zero semplice per  $p(x)$ ,  $\tau \rightarrow 0$  per  $r \rightarrow a$ . Siccome siamo interessati alla funzione d'onda nell'intorno di  $r \sim a$ , questo termine, oltre ad essere depresso per il fattore  $\delta E$ , è ulteriormente depresso per questo tempo  $\tau$ , quindi possiamo senz'altro trascurare  $\delta w$ . Questo raginamento viene meno per punti di inversione di ordine superiore, in tal caso la teoria è più complicata; si tratta di stati classici con periodo infinito, e i corrispondenti stati quantistici hanno un'energia vicino alla soglia, cioè al massimo del potenziale: trascureremo questa eventualità. L'unico termine correttivo è allora

$$\sin\left(\frac{\pi\delta J}{\hbar}\right) \simeq \frac{\pi\delta J}{\hbar} = \frac{\pi}{\hbar} \frac{\partial J}{\partial E} \delta E = \frac{\pi}{\hbar} \frac{T}{2\pi} \delta E = \frac{T}{2\hbar} \delta E = -i \frac{T}{4\hbar} \Gamma \quad (11.114)$$

Quindi per la funzione d'onda si ha

$$\varphi = \frac{C}{\sqrt{p}} \left[ \cos\left[w(r, a) - \frac{\pi}{4}\right] - i \frac{T}{4\hbar} \Gamma \sin\left[w(r, a) - \frac{\pi}{4}\right] \right] \quad (11.115)$$

È questa la funzione che viene continuata analiticamente per  $r > a$ , dando luogo a

$$\frac{C}{\sqrt{p}} \left[ \frac{1}{2} e^{-\sigma(a, r)} + i \frac{T}{4\hbar} \Gamma e^{\sigma(a, r)} \right] = \frac{C}{\sqrt{p}} \left[ \frac{1}{2} e^{-\sigma(a, b) + \sigma(r, b)} + i \frac{T}{4\hbar} \Gamma e^{\sigma(a, b) - \sigma(r, b)} \right] \quad (11.116)$$

Confrontando con la (11.100) si ha

$$D = \frac{CT\Gamma}{4\hbar} e^{+\sigma(a, b)}$$

e usando la (11.102)  $4D = C e^{-\sigma(a, b)}$ , si ottiene

$$\Gamma = \frac{\hbar}{T} \frac{4D}{C} e^{-\sigma(a, b)} = \frac{\hbar}{T} e^{-2\sigma(a, b)}$$

cioè la formula (11.108).

**NOTA 1.** Il punto in cui possono inserirsi delle correzioni di tipo non esponenziale alla formula (11.108) è nella determinazione della costante  $C$ . Se nella zona  $r \lesssim a$  si ha una determinazione più precisa della funzione d'onda il coefficiente  $C$  è diverso da (11.107): questa è la causa del prefattore  $\xi$  cui si accennava nel paragrafo precedente.

A titolo di esempio consideriamo il caso del decadimento  $\alpha$  in cui si ipotizza che l'interazione forte sia una buca di potenziale  $V(r) = -V_0$  per  $r < R$ . In questo caso la soluzione *esatta* nella zona  $r < a$  è

$$\varphi = A \sin(qr) \quad q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (11.117)$$

$R$ , il raggio nucleare, è il punto di raccordo con la soluzione semiclassica. Nello scrivere la (11.117) abbiamo trascurato il potenziale coulombiano all'interno del nucleo. La normalizzazione della soluzione nella buca di potenziale fissa il valore di  $A$ :

$$1 = A^2 \int_0^R \sin^2(qr) dr \Rightarrow \frac{A^2}{2} \left( R - \frac{\sin(qR)}{2q} \right) = 1$$

Come riverificheremo fra poco la condizione di quantizzazione è approssimabile con quella di buca infinita, per cui  $\sin(qR) \sim 0$  e quindi  $A^2 = 2/R$ . Posto per brevità

$$\kappa(r) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \left( \frac{2(Z-2)e^2}{r^2} - E \right)} \equiv \frac{|p(r)|}{\hbar} \quad (11.118)$$

il raccordo fra la funzione d'onda (11.117) e quella semiclassica per  $r \rightarrow R^+$  si scrive

$$A \sin(qR) = \frac{C}{\sqrt{\hbar \kappa(R)}} \Rightarrow \frac{2}{R} \sin^2(qR) \simeq \frac{C^2}{\hbar \kappa(R)} \quad (11.119)$$

Il raccordo della derivata logaritmica,  $\varphi'/\varphi$ , impone

$$q \frac{\cos(qR)}{\sin(qR)} = \sqrt{\kappa} \left[ -\frac{\kappa}{\sqrt{\kappa}} - \frac{1}{2} \frac{\kappa'}{\kappa^{3/2}} \right]_{r=R} = - \left[ \kappa + \frac{1}{2} \frac{\kappa'}{\kappa} \right]_{r=R}$$

Effettuando la derivata si ha

$$\frac{\kappa'}{\kappa} = - \frac{2(Z-2)}{\kappa^2 r^2 a_B} \Big|_{r=R}$$

verificheremo che per lo stato risonante  $\kappa R \sim \mathcal{O}(1)$  quindi questo termine è completamente trascurabile rispetto a  $\kappa$ . Resta dunque la condizione

$$q \frac{\cos(qR)}{\sin(qR)} = -\kappa(R) \quad (11.120)$$

che determina il valore dell'energia dello stato metastabile. Come si evince dalla figura 11.8 si ha  $\kappa(R) \sim q$  e per buche molto profonde  $\kappa(R) \ll q$ , nel qual caso la condizione (11.120) fornisce il risultato elementare  $q = \pi/R$  (per lo stato fondamentale), che è di solito una buona approssimazione. In generale  $\tan(qR) = q/\kappa(R)$  e per buche profonde  $\tan(qR) \sim \sin(qR)$  per cui la condizione (11.119) diventa

$$C^2 = \frac{2}{R} \frac{q^2}{\kappa^2} \hbar \kappa = \frac{4m}{T} \frac{q}{\kappa(R)}$$

sostituendo nella (11.104) si ottiene, in questo caso,

$$\Gamma = \frac{q}{\kappa(R)} \frac{\hbar}{T} e^{-2\sigma(a,b)} \quad (11.121)$$

che determina il fattore correttivo pre-esponenziale alla (11.108).

**NOTA 2.** Il ragionamento che abbiamo seguito può essere effettuato direttamente sul sistema (11.98), distinguendo nella varie zone il contributo dominante, ma l'analisi è piuttosto macchinosa ed abbiamo preferito presentare direttamente la soluzione (11.100). Per completezza notiamo che questa è una soluzione del sistema (11.98) nella zona  $r \lesssim b$ , trascurando il termine  $E_2 \varphi_2$  nella prima equazione ed il secondo membro nella seconda. Questo è giustificato "a posteriori" dalla nostra analisi: in questa zona, come si vede dalla (11.100),  $\varphi_1$  e  $\varphi_2$  sono dello stesso ordine, quindi  $E_2 \varphi_1$  è trascurabile, e  $\varphi_2$  è soluzione dell'equazione omogenea, cioè è della forma (11.100). Un'analisi diretta del sistema (11.98) in un caso particolare unidimensionale si trova nella referenza [?], al cui spirito ci siamo ispirati nella stesura di questo paragrafo.

**NOTA 3.** L'analisi svolta può essere facilmente estesa al caso di un potenziale definito sull'intera retta reale, caso tipico nei sistemi unidimensionali. Consideriamo per semplicità un potenziale pari, la zona classicamente accessibile è delimitata dalla disuguaglianza  $-a \leq x \leq +a$ . A seconda che lo stato sia pari o dispari si ha la condizione  $\varphi'(0) = 0$  oppure  $\varphi(0) = 0$ . In entrambi i casi il termine di bordo nello scrivere la (11.97) si annulla e si continua ad avere

$$2 \operatorname{Im}(E) \int_0^x |\varphi|^2 dx = -\frac{\hbar^2}{2m i} \left( \varphi^* \frac{d}{dx} \varphi - \varphi \frac{d}{dx} \varphi^* \right) \quad (11.122)$$

A differenza del caso tridimensionale l'integrale a primo membro della (11.122), esteso a tutta la zona classica, rappresenta ora la metà della normalizzazione dello stato, manca l'integrale nella parte  $x < 0$ . Il calcolo della costante  $C$  in approssimazione semiclassica resta invariato:

$$1 = \int_{-a}^a \frac{C^2}{p} \cos^2(w) dx \simeq \frac{C^2}{2} \int_{-a}^a \frac{dx}{p} = \frac{C^2}{4m} T \quad \Rightarrow \quad C^2 = \frac{4m}{T}$$

quindi dalla (11.122)

$$2 \operatorname{Im}(E) \frac{1}{2} = -\frac{\hbar}{T} e^{-2\sigma(a,b)} \quad \Rightarrow \quad \Gamma = \hbar \frac{2}{T} e^{-2\sigma(a,b)} \quad (11.123)$$

di nuovo in accordo col ragionamento intuitivo del paragrafo precedente.

**NOTA 4.** Il requisito di fase *crescente* nella condizione al contorno degli stati di Gamow - Siegert è ciò che determina il segno di  $\operatorname{Im}(E)$ . In questa situazione la funzione d'onda asintotica è

$$\exp(ikr) \sim e^{ir\sqrt{2m(E-i\Gamma/2)}} \Rightarrow |\psi| \sim e^{+r\sqrt{2mE} \frac{\Gamma}{4E}}$$

quindi la soluzione non è normalizzabile. In alcune situazioni ha interesse calcolare gli autovalori complessi dell'hamiltoniana per estensioni analitiche corrispondenti a stati normalizzabili, è ad esempio il caso del calcolo di  $\operatorname{Im}(E)$  per la relazione di dispersione della serie perturbativa. Nelle formule precedenti occorrerà semplicemente rendere la soluzione complessa coniugata e questo corrisponde al cambiamento di segno di  $\operatorname{Im}(E)$ . Sottolineiamo quindi che in questo caso la condizione al contorno corrisponde a soluzioni con fase *decescente* per  $x \rightarrow \infty$ .

# Appendici e Complementi

## 11.A Normalizzazione della funzione d'onda.

Mostriamo come la condizione di normalizzazione (11.30) possa essere ricavata senza far uso dell'ipotesi  $n \gg 1$ .

Scegliamo le coordinate in modo che  $x = 0$  sia il minimo del potenziale  $V$ , in questo modo  $a < 0 < b$  è la zona classicamente accessibile, dove  $a, b$  sono i punti di inversione.

Sia  $\psi$  la funzione d'onda semiclassica normalizzata ad 1.

Consideriamo per  $x > 0$  una funzione  $u$  che soddisfa l'equazione di Schrödinger in questo semispazio

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u'' + U(x) u = E u$$

ma con  $E \neq E_0$ . Evidentemente per  $x \rightarrow -\infty$  la soluzione non sarà integrabile. Scegliamo la soluzione in modo che per  $E \rightarrow E_0$ ,  $u(E, x) \rightarrow \psi(x)$ . Date due di queste soluzioni si ricava immediatamente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (u_1 u_2'' - u_2 u_1'') = (E_2 - E_1) u_2 u_1$$

Il membro a sinistra di questa equazione è una derivata totale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} (u_1 u_2' - u_2 u_1')$$

quindi integrando da 0 a  $\infty$

$$\frac{\hbar^2}{2m} [u_1 u_2' - u_2 u_1']_{x=0} = (E_2 - E_1) \int_0^\infty dx u_2 u_1 \quad (11.124)$$

poniamo ora  $E_2 = E_1 + \delta E$ . Uguagliando i termini al primo ordine in  $\delta E$  otteniamo

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ u \frac{\partial u'}{\partial E} - \frac{\partial u}{\partial E} u' \right]_{x=0} = \int_0^\infty dx u^2 \quad (11.125)$$

La stessa cosa può essere fatta nell'intervallo  $-\infty, 0$  e indicando con  $v$  le funzioni corrispondenti:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ v \frac{\partial v'}{\partial E} - \frac{\partial v}{\partial E} v' \right]_{x=0} = \int_{-\infty}^0 dx v^2 \quad (11.126)$$

Se ora facciamo il limite  $E \rightarrow E_0$  la somma dei membri destri delle (11.125), (11.126) è  $\int \psi^2 dx = 1$ . Valutiamo ora i termini in parentesi quadra. Ricordiamo che 0 è il minimo di  $V$ , quindi  $p'(0) \propto V'(0) = 0$  perciò tutti i termini proporzionali a  $p'(0)$  possono essere trascurati nel fare le derivate.

Posto  $p(0) = p_0$  si ha, con la solita notazione

$$\begin{aligned} v(0) &= \frac{C}{\sqrt{p_0}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^0 p dx - \frac{\pi}{4}\right) & v'(0) &= -\frac{C}{\hbar} \sqrt{p_0} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^0 p dx - \frac{\pi}{4}\right) \\ u(0) &= \frac{C}{\sqrt{p_0}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^b p dx - \frac{\pi}{4}\right) & u'(0) &= \frac{C}{\hbar} \sqrt{p_0} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^b p dx - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned}$$

il segno dell'ultimo termine deriva dal fatto che l'integrale nel fattore di fase va da  $x$  a  $b$ . Effettuando le derivate si noti che l'eventuale derivata di  $C(E)$  si cancella. Il risultato è

$$\begin{aligned} \left[ v \frac{\partial v'}{\partial E} - \frac{\partial v}{\partial E} v' \right]_{x=0} &= -\frac{C^2}{2\hbar p_0} \frac{\partial p_0}{\partial E} \sin \left[ 2 \int_a^0 p(x) dx \right] - \frac{C^2}{\hbar^2} \int_a^0 dx \frac{\partial}{\partial E} p \\ \left[ u \frac{\partial u'}{\partial E} - \frac{\partial u}{\partial E} u' \right]_{x=0} &= \frac{C^2}{2\hbar p_0} \frac{\partial p_0}{\partial E} \sin \left[ 2 \int_0^b p(x) dx \right] + \frac{C^2}{\hbar^2} \int_0^b dx \frac{\partial}{\partial E} p \end{aligned}$$

Quindi dalle (11.125), (11.126), nel limite  $E \rightarrow E_0$

$$\frac{2m}{\hbar^2} = \frac{C^2}{2\hbar p_0} \frac{\partial p_0}{\partial E} \sin \left[ 2 \int_a^b p(x) dx \right] + \frac{C^2}{\hbar^2} \int_a^b \frac{\partial}{\partial E} p dx \quad (11.127)$$

Il primo termine nella (11.127) si annulla perchè l'integrale è una fase  $(n + 1/2)\pi$ , per la condizione di quantizzazione, quindi resta, usando  $\partial p / \partial E = m/p = v$

$$2m = C^2 \int_a^b \frac{dx}{v} \quad (11.128)$$

che coincide con la (11.29).

## 11.B Correzioni all'approssimazione semiclassica.

Lo scopo di questo paragrafo è di fornire degli strumenti per il calcolo delle correzioni alle espressioni delle funzioni d'onda e dei livelli energetici ottenute nel testo. Allo stesso tempo viene fornita una interpretazione più "geometrica" del tipo di approssimazione usata nel fare lo sviluppo in  $\hbar$ , questo fornisce una visione interessante del metodo. Il contenuto di questo paragrafo non è strettamente necessario per l'uso dell'approssimazione semiclassica che si farà nelle applicazioni elementari del testo e può essere omesso in prima lettura.

Consideriamo l'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (11.129a)$$

$$\hbar^2 \psi'' + p^2(x)\psi = 0 \quad p^2 = 2m(E - V(x)) \quad (11.129b)$$

L'approssimazione semiclassica consiste nel cercare una soluzione di tipo  $\psi \sim \exp(i\sigma/\hbar)$  e nello sviluppare  $\sigma$  in potenze di  $\hbar$ . Nel paragrafo 11.2 abbiamo già ottenuto i primi ordini dell'approssimazione:

$$\sigma(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{\hbar}{i} \right)^k \sigma_k \quad (11.130a)$$

$$\sigma'_1 = -\frac{1}{2\sigma'_0} \sigma''_0 \quad \Rightarrow \quad \sigma_1 = -\frac{1}{2} \log(p) \quad (11.130b)$$

$$\sigma'_2 = -\frac{1}{2p} \left[ \sigma'^2_1 + \sigma''_1 \right] = \frac{1}{4} \frac{p''}{p^2} - \frac{3}{8} \frac{p'^2}{p^3} = -\frac{1}{2p^{1/2}} \frac{d^2}{dx^2} p^{-1/2} \quad (11.130c)$$

$$\sigma'_n = -\frac{1}{2\sigma'_0} \left( \sum_{k=1}^{n-1} \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} \right) \quad (11.130d)$$

A parte la difficoltà di fare gli integrali non ci sono ostacoli a portare avanti lo schema.

Un pò meno ovvio è come si debba procedere per la determinazione delle correzioni agli autovalori.

Una possibilità sarebbe quella di rifare il calcolo delle condizioni di connessione tenendo conto dei termini correttivi in  $\hbar$ , ma le condizioni di raccordo per la fase non sono

facilmente implementabili per termini come  $\sigma_2$ , se, come succede sempre,  $p(x)$  ha uno zero nel punto di inversione classico:  $\sigma_2$  diverge, indicando appunto che l'approssimazione semiclassica cessa di valere in prossimità del punto di inversione. Sarebbe quindi complicato o impossibile implementare una ricetta tipo  $\sigma(b) - \sigma(a) = n\pi$  fra i due punti di inversione  $a, b$ .

Un'idea per risolvere elegantemente il problema è la seguente. Se estendiamo al campo complesso l'equazione di Schrödinger la condizione di quantizzazione non è altro che la condizione di monodromia della funzione  $\psi$ . L'equazione di Schrödinger non fornisce  $\sigma$ , cioè la fase della funzione d'onda, ma piuttosto la sua derivata, da cui  $\sigma$  si ottiene per integrazione, cioè

$$\sigma = \int^x \sigma' dx \quad (11.131)$$

$\sigma'$  è una espressione ottenuta algebricamente a partire da  $E$  e dal potenziale  $V$ . Se interpretiamo  $x$  come una variabile complessa la (11.131) definisce  $\sigma$  come un integrale lungo un cammino nel piano complesso  $x$ . Se  $\sigma'$  non avesse singolarità l'integrale sarebbe sempre indipendente dal cammino, per ogni valore di  $E$ . Ma in presenza di punti di inversione sicuramente ci sono delle singolarità come si vede dall'espressione, ad esempio, di  $\sigma_1$ .

Supponiamo di avere due punti di inversione,  $a, b$  e che questi siano zeri semplici di  $E - V(x)$ . In questo caso la funzione  $p(x)$  ha un comportamento del tipo

$$p(x) = \sqrt{(x-a)(b-x)}R(x)$$

dove  $R$  è regolare, siamo in presenza di un taglio nel piano complesso che va da  $a$  a  $b$ . Questo taglio è il motivo per cui la funzione di fase cambia da  $i \int p$  a  $-\int |p|$  passando dalla zona classicamente permessa a quella proibita, ma al di fuori di questo taglio la funzione deve essere ben definita, e in particolare al di fuori del taglio deve essere monodroma<sup>6</sup>. Quindi se si percorre un percorso chiuso che circonda il taglio si **deve** ritornare alla stessa determinazione di  $\psi$ . In termini espliciti deve valere la regola di quantizzazione

$$\frac{1}{\hbar} \oint_{\gamma} \sigma'(z) dz = \frac{1}{\hbar} \oint_{\gamma} \left( p(x) + \frac{\hbar}{i} \sigma'_1 - \hbar^2 \sigma'_2 + \dots \right) = 2n\pi \quad (11.132)$$

dove  $\gamma$  è un cammino nel piano complesso che racchiude il taglio, e quindi i due punti di inversione. La (11.132), intesa come sviluppo in serie di  $\hbar$  è un'equazione per  $E$ , è questa la condizione di quantizzazione. Il lettore riconosce sicuramente nella procedura lo stesso ragionamento che, ad esempio, porta alla quantizzazione di  $L_z$ .

Vediamo ora come funziona in pratica la cosa. Se ci si limita all'ordine più basso in  $\hbar$  si ha, usando  $\sigma'_0 = p$

$$\oint_{\gamma} p dz = 2n\pi\hbar \quad (11.133)$$

Possiamo pensare  $\gamma$  come fatto dal percorso  $a \rightarrow b$  sotto il taglio e  $b \rightarrow a$  sopra. Passando da sotto a sopra il taglio la funzione  $\sqrt{(z-a)(b-z)}$  cambia segno: immaginiamo di prendere un punto  $z$  fra  $a$  e  $b$  e seguiamo la fase di  $z-a, b-z$  quando si aggira ad esempio il punto  $b$  in senso antiorario. La fase di  $z-a$  resta sempre attorno a zero, quella di  $z-b$  passa da  $-\pi$  a  $+\pi$ , quindi estraendo la radice quadrata si ha un fattore  $e^{i\pi} = -1$  in altre parole

$$p|_{\gamma_+} = -p|_{\gamma_-}$$

Il cammino a questo punto si può "schiacciare" sul segmento  $a, b$  e resta

$$\oint_{\gamma} p dz = \int_a^b p_{\gamma_-} dz + \int_b^a p_{\gamma_+} dz = 2 \int_a^b p dx$$

<sup>6</sup>Per evitare malintesi: la funzione d'onda deve essere ben definita dappertutto ed in particolare deve essere monodroma. L'apparente non monodromia nasce dall'introduzione della funzione  $p(x)$ . Per gli stati fisici questa apparente non monodromia deve sparire, è questo il significato della (11.132).

Quindi a quest'ordine la condizione (11.132) diventa

$$2 \int_a^b p(x) dx = 2n\pi\hbar \quad (11.134)$$

Che è la condizione di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, senza il fattore aggiuntivo 1/2.

Consideriamo ora il contributo di  $\sigma_1$ . Poichè  $p = \sqrt{(x-a)(b-x)R(x)}$  si ha

$$\sigma'_1 = -\frac{1}{2} \frac{d}{dz} \log(p) = -\frac{1}{4} \left[ \frac{1}{z-a} + \frac{1}{z-b} + \frac{R'}{R} \right]$$

$R'/R$  è una funzione olomorfa attorno al taglio, perchè  $R$  non ha zeri, e quindi il suo integrale è nullo per il teorema di Cauchy, gli altri due termini danno il residuo di due poli e quindi:

$$\sigma'_1 \rightarrow -\frac{1}{4} 2\pi i \cdot 2 = -i\pi$$

mettendo assieme i due contributi:

$$2 \int_a^b p(x) dx + \frac{\hbar}{i} (-i\pi) = 2\pi n\hbar$$

cioè

$$2 \int_a^b p(x) dx = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.135)$$

che è esattamente la condizione di quantizzazione semiclassica. In questo contesto il fattore 1/2 aggiuntivo si chiama indice di Maslov.

Consideriamo ora la prima correzione a questo risultato,  $\sigma'_2$  è dato dalla (11.130). I calcoli seguenti si semplificano se usiamo come variabile  $Q = p^2$ , in modo da esplicitare le radici quadrate. Si ha

$$p' = \frac{Q'}{2Q^{1/2}} \quad p'' = \frac{1}{2Q^{1/2}} (Q'' - \frac{Q'^2}{2Q})$$

e la (11.130) si può riscrivere nella forma

$$\sigma'_2 = \frac{1}{8} \frac{Q''}{Q^{3/2}} - \frac{5}{32} \frac{Q'^2}{Q^{5/2}}$$

Questa relazione si può ulteriormente semplificare usando

$$\frac{d}{dx} \frac{Q'}{Q^{3/2}} = \frac{Q''}{Q^{3/2}} - \frac{3}{2} \frac{Q'^2}{Q^{5/2}}$$

eliminando  $Q'^2$  si arriva a

$$\sigma'_2 = \frac{1}{48} \frac{Q''}{Q^{3/2}} + \frac{5}{48} \frac{d}{dx} \frac{Q'^2}{Q^{3/2}} \quad (11.136)$$

Il secondo termine è una derivata totale di una funzione monodroma nel piano complesso con taglio  $a, b$ , quindi non contribuisce all'integrale lungo il cammino chiuso che dobbiamo calcolare. Notiamo che questo ragionamento non si poteva fare per  $\sigma'_1 = d/dx \log(p)$  perchè il logaritmo non è monodromo sulla superficie di Riemann che stiamo considerando.

Usando

$$Q^{-3/2} \equiv (2m(E-V))^{-3/2} = -2 \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial E} Q^{-1/2}$$

possiamo scrivere

$$\oint \sigma'_2 dz = \oint \frac{1}{48} \frac{Q''}{Q^{3/2}} dz = \frac{1}{24} \frac{\partial}{\partial E} \oint dz \frac{V''}{(2m(E-V))^{1/2}}$$

e quindi a quest'ordine la condizione di quantizzazione (11.132) diventa, tenendo conto dei contributi di  $\sigma_0, \sigma_1$ :

$$2 \int_a^b p(x) dx - \hbar^2 \frac{1}{24} \frac{\partial}{\partial E} \oint dz \frac{V''}{(2m(E-V))^{1/2}} = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.137)$$

Ovvero, in termini di integrale d'azione

$$\boxed{J + \delta J = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar} \quad (11.138)$$

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p dx \quad \delta J = -\hbar^2 \frac{1}{48\pi} \frac{\partial}{\partial E} \oint dx \frac{V''}{(2m(E-V))^{1/2}} \quad (11.139)$$

Il primo risultato non banale si ha proprio per l'oscillatore armonico. Se  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$  ponendo  $x = \sqrt{E}\xi$  l'integrale per  $\sigma_2$  diventa

$$\frac{\partial}{\partial E} \oint d\xi \frac{k}{(2m(1 - \frac{1}{2}k\xi^2))^{1/2}} = 0$$

Cioè la correzione in  $\sigma_2$  si annulla.

Una dimostrazione a tutti gli ordini può essere la seguente. Consideriamo un generico potenziale  $x^N$ . Si verifica facilmente che la relazione di ricorrenza (11.130) è verificata da

$$\sigma'_n = x^{-n} P_n(x^N) Q^{-3/2n+1/2} \quad Q = p^2 \quad (11.140)$$

dove  $P_n$  è un polinomio di grado  $n$ . Innanzitutto si vede che per  $n > 1$  dispari non si hanno contributi a  $E$ : la funzione (11.140) non ha tagli e non ha poli semplici nei punti di inversione, quindi l'integrale lungo il cammino chiuso è nullo. Questo è corretto perchè i termini dispari darebbero un contributo immaginario ad  $E$ . Il contributo di  $\sigma_1$  era non nullo perchè la funzione aveva poli semplici ed il teorema di Cauchy aveva fornito il fattore  $i$  necessario.

Per  $n$  pari, cambiando variabili a  $x^N = z$ , per le funzioni (11.140) si hanno integrali del tipo

$$\int_0^1 z^{-n/N} z^{1/N-1} z^{sN} (1-z)^{-\frac{3}{2}(n-1)-1} = \frac{\Gamma(\frac{1-n}{N} + s) \Gamma(\frac{3}{2}(1-n))}{\Gamma(\frac{1-n}{N} + s + \frac{3}{2}(1-n))}$$

Per  $n$  pari il numeratore non ha mai poli. Per  $N = 2$  l'argomento della funzione  $\Gamma$  a denominatore diventa

$$2 - 2n + s \leq 2 - n \quad \text{perchè } s \leq n$$

quindi per  $n \geq 2$  la funzione ha un polo ed il corrispondente integrale è nullo. Quindi tutte le correzioni a  $E$  per un oscillatore armonico si annullano: questo è il motivo per cui la quantizzazione delle energie per l'oscillatore armonico è esatta, anche se le correzioni alla funzione d'onda, le funzioni  $\sigma_i$ , sono non nulle.

Applichiamo ora le formule ottenute al caso dell'oscillatore quartico

$$\psi'' + (E - x^4)\psi = 0$$

Nelle notazioni di questo paragrafo,  $m = 1/2, \hbar = 1, Q = E - x^4$ .

Si ha per la condizione di quantizzazione, facendo il cambiamento di variabili  $x = E^{1/4}z$

$$\begin{aligned} 2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right) &= \oint \sqrt{E - x^4} dx - \frac{1}{24} \frac{\partial}{\partial E} \oint \frac{dx 12x^2}{(E - x^4)^{1/2}} = \\ &= E^{3/4} \oint (1 - z^4)^{1/2} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial E} E^{1/4} \oint \frac{dz z^2}{(1 - z^4)^{1/2}} = \\ &= 4E^{3/4} \int_0^1 dz (1 - z^4)^{1/2} - \frac{1}{8} E^{-3/4} 4 \int_0^1 \frac{dz z^2}{(1 - z^4)^{1/2}} \end{aligned}$$

I due integrali,  $J, J_1$  si possono esprimere in termini di funzioni  $B$  di Eulero, comunque ora ci interessa il loro valore numerico

$$J = 0.87401918476404 \quad J_1 = 0.599070117$$

quindi

$$\frac{\pi}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right) = E^{3/4}J - \frac{1}{8}J_1E^{-3/4}$$

La soluzione  $E$  è espressa come serie in  $\hbar$ ,  $E = E_0 + E_1 + \dots$  e usando

$$E^{3/4} \simeq E_0^{3/4} + \frac{3}{4} \frac{E_1}{E_0^{1/4}}$$

si ricava

$$E_0 = \left[ \frac{\pi}{2J} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3} \quad E_1 = \frac{1}{6} \frac{J_1}{J} E_0^{-1/2} \quad (11.141)$$

Inserendo i valori numerici si ottiene un netto miglioramento rispetto all'ordine 0.

$n$	$E_n$	$WKB(0)$	$WKB(0+1)$
0	1.060362090484547	0.86715	0.98982
1	3.799673029801470	3.75192	3.81090
2	7.455697937987020	7.41399	7.45594
3	11.644745511378039	11.61153	11.64505
4	16.261826018850243	16.23361	16.26197
5	21.238372918236099	21.21365	21.23846

Proseguendo su questa strada ci si accorgerebbe che lo sviluppo in  $\hbar$  è comunque uno sviluppo asintotico, non convergente, quindi, come nel caso della serie perturbativa, occorre far uso di metodi di risommazione della serie per estrapolare il risultato.

## 11.C $\text{Im}(E)$ per un potenziale quartico.

La procedura sviluppata nel paragrafo 11.9 permette di calcolare in modo abbastanza semplice la parte immaginaria dell'autovalore  $E(g)$  dell'Hamiltoniana usata nello studio della serie perturbativa nel capitolo ??.

Richiamiamo brevemente il problema. Consideriamo un sistema unidimensionale con Hamiltoniana<sup>7</sup>

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{2}x^4 \quad (11.142)$$

l'energia dello stato fondamentale,  $E(g)$  è una funzione analitica di  $g$  con un taglio lungo l'asse reale negativo,  $g < 0$ . Un punto delicato è la definizione di continuazione analitica. La continuazione analitica è definita dalla continuazione analitica, per  $g$  complesso, dell'autostato normalizzabile. La funzione d'onda, semiclassica, per  $g > 0$ , si comporta come

$$\psi \sim \exp(-\sqrt{gx^4 + x^2 - 2E}) \sim \exp(-g^{1/2}x^2)$$

e per  $g \rightarrow ge^{i\pi}$  si trasforma in

$$\psi \sim \exp(-i|g|^{1/2}x^2)$$

quindi una funzione d'onda con fase *decreasing*: esattamente il contrario del caso riso- nante nella teoria di Gamow-Siegert, avremo quindi una parte immaginaria *positiva* per l'energia.

<sup>7</sup>In tutto questo paragrafo useremo le unità di misura  $m = 1, \hbar = 1$ .

Vogliamo quindi calcolare  $\text{Im}(E)$  per il sistema

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}x^2 - \frac{g}{2}x^4 \quad (11.143)$$

La formula generale (11.104) ha la forma

$$2 \text{Im}(E) \int_0^x |\varphi|^2 dx = + \frac{\hbar}{4m} C^2 e^{-2\sigma(a,b)} \quad (11.144)$$

Dove  $C$  è definito dall'espansione WKB nella zona classicamente proibita:

$$\varphi \simeq \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(a, x)) \quad (11.145)$$

Approssimando la funzione d'onda con il metodo WKB nella zona permessa si ha il risultato generale (11.123):

$$\text{Im}(E) = \frac{\Gamma}{2} = \frac{1}{T} e^{-2\sigma(a,b)} \quad (11.146)$$

vediamo ora come si modifica questo risultato accordando in modo più preciso le funzioni d'onda. Studiamo il caso di piccoli  $g$ . i punti di inversione sono

$$a = \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - 8Eg}}{2g}} \simeq \sqrt{2E} (1 + Eg + \mathcal{O}(g^2)) \quad (11.147a)$$

$$b = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - 8Eg}}{2g}} \simeq \frac{1}{\sqrt{g}} (1 - Eg + \mathcal{O}(g^2)) \quad (11.147b)$$

Dalla Hamiltoniana (11.143) discende subito:

$$\sigma(a, x) = \sqrt{g} \int_a^x \sqrt{(x^2 - a^2)(b^2 - x^2)} dx = \sqrt{g} a^{3/2} \int_1^{x/a} \sqrt{(z^2 - 1)(\frac{b^2}{a^2} - z^2)}$$

Quindi nella regione a destra del punto di inversione  $a$ , per  $b \gg x \gg a$  si ha, usando  $b^2/a^2 \sim 1/(2Eg)$

$$\begin{aligned} \sigma(a, x) &\simeq 2E \int_0^{x/\sqrt{2E}} \sqrt{z^2 - 1} dz = 2E \frac{1}{2} \left[ z\sqrt{z^2 - 1} - \log(z + \sqrt{z^2 - 1}) \right]_1^{x/a} \\ &\simeq E \left[ z^2 - \frac{1}{2} - \log(2z) \right]_{z=x/a} = E \left[ \frac{x^2}{2E} - \frac{1}{2} - \log\left(2\frac{x}{\sqrt{2E}}\right) \right] \end{aligned} \quad (11.148)$$

Per l'impulso si ha:

$$p(x) \sim \sqrt{g} \sqrt{(x^2 - a^2)(b^2 - x^2)} \sim x \quad (11.149)$$

Per la funzione d'onda quindi

$$\varphi \simeq \frac{C}{2} \left(\frac{1}{x}\right)^{1/2} e^{-x^2/2} e^{E/2} \left(\frac{2x}{\sqrt{2E}}\right)^E$$

ed usando  $E = (n + \frac{1}{2})$ :

$$\varphi_n \simeq \frac{C}{\sqrt{2}} (2E)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{2x}{\sqrt{2E}}\right)^n e^{-x^2/2} e^{\frac{1}{4} + \frac{n}{2}} \quad \varphi_0 \simeq \frac{C}{\sqrt{2}} e^{-x^2/2} \cdot e^{1/4} \quad (11.150)$$

Per un oscillatore armonico con  $\omega = 1$ :

$$\psi_n(x) = \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-x^2/2} H_n(x) \quad \psi_0 = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2} \quad (11.151)$$

raccordando lo sviluppo (11.150) con la (11.151) si ha, per lo stato fondamentale:

$$\frac{e^{1/4}C}{\sqrt{2}} = \pi^{-1/4} \Rightarrow C^2 = \frac{2}{\sqrt{e\pi}} \quad (11.152)$$

Dalla (11.144) si ha quindi

$$\text{Im}(E) = \frac{C^2}{4} e^{-2\sigma} = \frac{1}{2\sqrt{e\pi}} e^{-2\sigma} = \sqrt{\frac{\pi}{e}} \frac{1}{2\pi} e^{-2\sigma} \quad (11.153)$$

in questo sistema il periodo è  $T = 2\pi$ , quindi il risultato (11.153) differisce da quello "naive" per un prefattore  $\sqrt{\pi/e} \simeq 1.07$ .

Per quanto riguarda il fattore di penetrazione la cosa più semplice è scrivere la sua espressione esatta ((v. Gradshteyn - Ryzhik 3.155.9)

$$\begin{aligned} 2\sigma(a, b) &= 2 \int_a^b |p(x)| dx = 2\sqrt{|g|} \int_a^b \sqrt{(x^2 - a^2)(b^2 - x^2)} dx = \\ &= 2\sqrt{|g|} \frac{b}{3} \left[ (a^2 + b^2) E\left(\frac{b^2 - a^2}{b^2}\right) - 2a^2 K\left(\frac{b^2 - a^2}{b^2}\right) \right] \end{aligned} \quad (11.154)$$

E, K sono integrali ellittici di prima e seconda specie rispettivamente. Per lo stato fondamentale, sviluppando in serie

$$2\sigma(a, b) \simeq \frac{2}{3g} - \frac{1}{2}(1 + 4 \log(2)) + \frac{1}{2} \log(g) \quad (11.155)$$

e sostituendo nella (11.153):

$$\boxed{\text{Im}(E) = \frac{2}{4\sqrt{\pi e}} e^{-\frac{2}{3g}} e^{1/2} 2^2 g^{-1/2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{g}} e^{-2/3g}} \quad (11.156)$$

che coincide con il risultato utilizzato nel capitolo sulla teoria delle perturbazioni.

Per grandi valori di  $n$ , pari, si ha, dalla (11.150)

$$\begin{aligned} \varphi_n &\simeq \frac{C}{\sqrt{2}} (2n)^{-\frac{1}{4}} x^n 2^{n/2} \left(\frac{1}{2} + n\right)^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{\frac{1}{4} + \frac{n}{2}} \simeq \\ &\simeq (2n)^{-\frac{1}{4}} \frac{C}{\sqrt{2}} x^n \left(\frac{2}{n}\right)^{\frac{n}{2}} \left(1 + \frac{1}{2n}\right)^{-\frac{2n}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{\frac{1}{4} + \frac{n}{2}} = \frac{C}{\sqrt{2}} (2n)^{-\frac{1}{4}} x^n \left(\frac{2e}{n}\right)^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} \end{aligned}$$

Dalla definizione di polinomi di Hermite, segue:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \rightarrow 2^n x^n$$

Usando l'approssimazione di Stirling

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

l'espressione asintotica della funzione d'onda esatta,  $\psi_n$  diventa

$$\psi_n \simeq \pi^{-1/4} \frac{2^{\frac{n}{2}}}{n^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{n}{2}} (2\pi n)^{\frac{1}{4}}} x^n e^{-\frac{x^2}{2}} = \pi^{-\frac{1}{2}} (2n)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{2e}{n}\right)^{\frac{n}{2}} x^n e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Confrontando le due espressioni si ha

$$C_n^2 = \frac{2}{\pi} \Rightarrow \text{Im}(E_n) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \exp(-2\sigma)$$

Abbiamo così mostrato esplicitamente come si recupera, per grandi  $n$ , l'espressione semiclassica.

## 11.D Potenziale anarmonico e WKB.

Consideriamo un oscillatore quartico con Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\lambda_2 x^2 + \frac{1}{2}\lambda_4 x^4 \quad (11.157)$$

e la corrispondente equazione agli autovalori

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2}\lambda_2 x^2 \psi + \frac{1}{2}\lambda_4 x^4 \psi = E\psi \quad (11.158)$$

Supporremo nel seguito  $\lambda_2 \neq 0$ . Gli autovalori sono genericamente funzioni dei vari parametri:  $E = E(m, \lambda_2, \lambda_4)$ . Effettuando il cambiamento di variabili

$$x = (|\lambda_2| m)^{-1/4} z$$

L'equazione agli autovalori si scrive

$$\frac{1}{2} \left( \frac{|\lambda_2|}{m} \right)^{1/2} \left( -\hbar^2 \frac{d^2}{dz^2} \pm z^2 + g z^4 \right) \psi = E\psi \quad g = \frac{\lambda_4}{\sqrt{|\lambda_2|^3 m}} \quad (11.159)$$

Il segno  $\pm$  è quello di  $\lambda_2$ . Col che si vede che vale la relazione

$$E(m, \lambda_2, \lambda_4) = \left( \frac{|\lambda_2|}{m} \right)^{1/2} E(1, \text{sign}(\lambda_2), g) \quad (11.160)$$

e quindi ci si può limitare a studiare i sistemi del tipo

$$H = \frac{1}{2} p^2 + \mu \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{2} g x^4 \quad \mu = \pm 1 \quad (11.161)$$

I casi interessanti sono i seguenti:

- 1)  $\mu = 1, g > 0$ . Il potenziale classico ha un solo minimo, in  $x = 0$ . Il sistema ha solo stati legati.
- 2)  $\mu = 1, g < 0$ . Il potenziale classico è mostrato in figura 11.11. Presenta un minimo

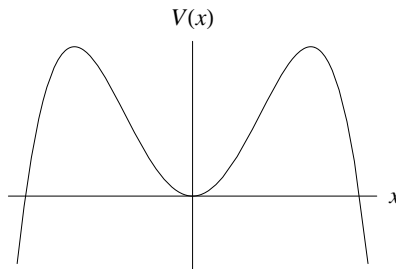


Figura 11.11: Potenziale per  $\mu = 1, g < 0$ .

in  $x = 0$  e due massimi per  $x^2 = 1/2|g|$ ,  $V_{max} = \frac{1}{8g}$ .

Il sistema ha uno spettro continuo, ma possono essere presenti stati metastabili, confinati nella buca di potenziale, che decadono in stati del continuo.

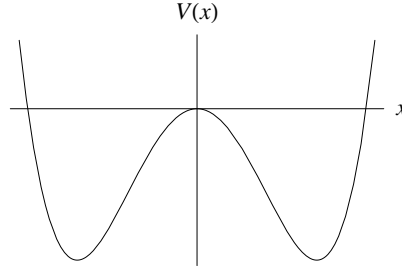


Figura 11.12: Potenziale per  $\mu = -1, g > 0$ .

- 3)  $\mu = -1, g > 0$ . Il potenziale classico è mostrato in figura 11.12. Presenta un massimo in  $x = 0$  e due minimi per  $x^2 = 1/2|g|$ ,  $V_{min} = -\frac{1}{8g}$ . Classicamente si hanno due punti di equilibrio stabile che si trasformano uno nell'altro con l'operazione di inversione spaziale  $x \rightarrow -x$ . Quantisticamente ci si aspetta un unico stato fondamentale, invariante per parità. Questo sistema è normalmente chiamato “doppia buca”.

Daremo nel seguito una trattazione elementare dei primi ordini dell'approssimazione semiclassica per questi sistemi.

### 11.D.1 Caso stabile: $\mu = 1, g > 0$ .

All'ordine più basso in  $\hbar$  la regola di quantizzazione semiclassica si scrive

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar = \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx \equiv J(\mathcal{E}) \quad (11.162)$$

L'integrale è effettuato su un periodo classico e  $J$  è la variabile di azione classica. Per il sistema (11.161), detta  $\mathcal{E}$  l'energia,

$$p(x) = \sqrt{2\mathcal{E} - x^2 - gx^4} \quad (11.163)$$

Posto

$$a^2 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 8\mathcal{E}g}}{2g} \quad b^2 = \frac{1 + \sqrt{1 + 8\mathcal{E}g}}{2g} \quad (11.164)$$

$$p(x) = \sqrt{g} \sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 + b^2)} \quad (11.165)$$

I punti di inversione del moto sono  $x = \pm a$  quindi la condizione (11.162) si scrive (ricordiamo che un periodo corrisponde, ad esempio, al tragitto  $-a \rightarrow a \rightarrow -a$ ):

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar = \frac{1}{2\pi} 2 \int_{-a}^a p(x) dx = \frac{2}{\pi} \int_0^a p(x) dx \quad (11.166)$$

È possibile risolvere numericamente il vincolo (11.166) e trovare i livelli. In questo caso comunque è anche possibile effettuare esplicitamente l'integrale usando<sup>8</sup>

$$\int_0^a \sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 + b^2)} dx = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{3} \left[ b^2 \text{K}\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) - (b^2 - a^2) \text{E}\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) \right]$$

<sup>8</sup>Vedi ad esempio le tavole di Gradshteyn e Ryzhik, formula 3.155.4. Notiamo, anche per il seguito, che la notazione usata in questo testo per gli integrali ellittici completi E, K differisce da quella delle tavole per la sostituzione  $\text{E}(k) \rightarrow \text{E}(k^2)$ , usata in altri testi e nel programma Mathematica.

E, K sono gli integrali ellittici completi, definiti anche attraverso la funzione ipergeometrica:

$$E(m) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - m \sin^2 \varphi} d\varphi = \frac{\pi}{2} F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; m\right) \quad (11.167a)$$

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - m \sin^2 \varphi}} = \frac{\pi}{2} F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1; m\right) \quad (11.167b)$$

Notiamo che sono funzioni reali per  $m < 1$ .

Si ha allora

$$J(\mathcal{E}) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar = \frac{2}{\pi} \sqrt{g} \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{3} \left[ b^2 K\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) - (b^2 - a^2) E\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) \right] \quad (11.168)$$

È possibile effettuare lo sviluppo in serie di  $g$ , o di  $1/g$  della (11.168) ottenendo

$$J(\mathcal{E}) \underset{g \rightarrow 0}{\rightarrow} \mathcal{E} - \frac{3}{4} g \mathcal{E}^2 \quad J(\mathcal{E}) \underset{g \rightarrow \infty}{\rightarrow} \frac{4}{3\pi} \left(\frac{2}{g}\right)^{1/4} K\left(\frac{1}{2}\right) \mathcal{E}^{3/4} \quad (11.169)$$

Quindi per  $g \rightarrow 0$  si hanno correttamente i livelli dell'oscillatore armonico, mentre per grandi  $g$ ,  $\mathcal{E} \sim n^{4/3} g^{1/3}$ .

Per referenza scriviamo<sup>9</sup> anche l'espressione per il periodo, classico, del moto:

$$T(\mathcal{E}) = \oint \frac{dx}{p(x)} = \frac{4}{\sqrt{g}} \int_0^a \frac{dx}{\sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 + b^2)}} = \frac{4}{\sqrt{g}} \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}} K\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) \quad (11.170)$$

I limiti in  $g$  sono:

$$\frac{1}{2\pi} T(\mathcal{E}) \underset{g \rightarrow 0}{\rightarrow} 1 - \frac{3}{2} g \mathcal{E} \quad \frac{1}{2\pi} T(\mathcal{E}) \underset{g \rightarrow \infty}{\rightarrow} \frac{1}{\pi} \left(\frac{2}{g}\right)^{1/4} K\left(\frac{1}{2}\right) \mathcal{E}^{-1/4} \quad (11.171)$$

A livello semiclassico vale la relazione (*principio di corrispondenza*)

$$\frac{dn}{d\mathcal{E}} = \frac{T}{2\pi} \quad (11.172)$$

che si può verificare nelle espressioni asintotiche (11.169),(11.171).

Possiamo controllare l'accuratezza delle previsioni semiclassiche con il calcolo numerico degli autovalori dell'Hamiltoniana (11.161). L'approssimazione semiclassica funziona per  $n \gg 1$  quindi il caso peggiore è lo stato fondamentale. In figura 11.13 sono riportati i confronti per lo stato fondamentale e per lo stato  $n = 10$ . Come si vede l'accordo è ottimo nel secondo caso, abbastanza buono per il primo, con differenze dell'ordine del 10-20% per alti valori di  $g$ . L'accordo migliora significativamente se si tiene conto della prima correzione al WKB.

**Correzione  $\hbar^2$ .** Abbiamo visto nel testo che la prima correzione alla condizione di quantizzazione WKB ha la forma

$$J + \delta J \equiv \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx - \frac{\hbar^2}{48\pi} \frac{\partial}{\partial E} \oint \frac{V''}{p(x)} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \quad (11.173)$$

Ponendo  $\hbar = 1$ , nel caso in esame il termine correttivo ha la forma

$$\begin{aligned} \delta J &= -\frac{1}{12\pi} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial E} \int_0^a \frac{1 + 6g^2 x^2}{\sqrt{(a^2 - x^2)(x^2 + b^2)}} dx = \\ &= -\frac{1}{12\pi} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial E} \left[ \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}} (1 - 6gb^2) K\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) + 6g\sqrt{a^2 + b^2} E\left(\frac{a^2}{a^2 + b^2}\right) \right] = \\ &= \frac{-2 \left(1 + 24g\mathcal{E}\right) E\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{1+8g\mathcal{E}}}\right) + \left(1 + 24g\mathcal{E} + \sqrt{1+8g\mathcal{E}}\right) K\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{1+8g\mathcal{E}}}\right)}{48\pi\mathcal{E}(1+8g\mathcal{E})^{3/4}} \end{aligned}$$

<sup>9</sup>Vedi G.R. 3.152.3

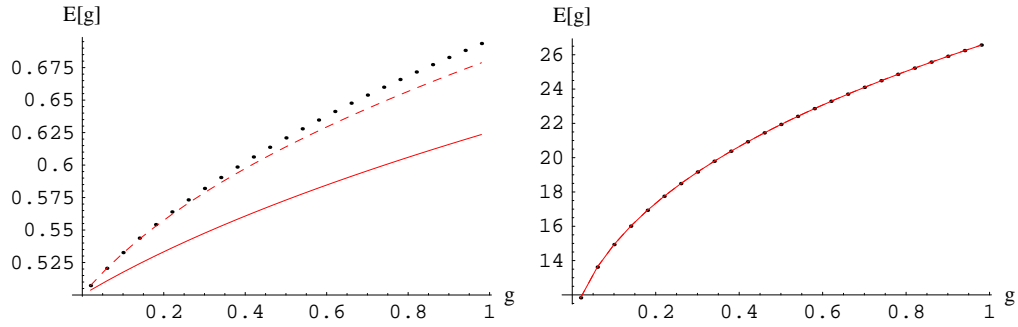


Figura 11.13: Energia dello stato fondamentale calcolata (punti) ed in approssimazione WKB (linea continua). La linea tratteggiata è il calcolo WKB all'ordine  $\hbar^2$ . La seconda figura riporta le stesse quantità per lo stato  $n = 10$ .

Questo fattore può essere inserito nella (11.173) per calcolare il valore dell'energia: è quanto è stato fatto nel fare il grafico della fig.11.13.

È interessante notare l'ottimo accordo della legge di corrispondenza semiclassica, eq.(11.172), con i dati: il confronto è riportato in figura 11.14.

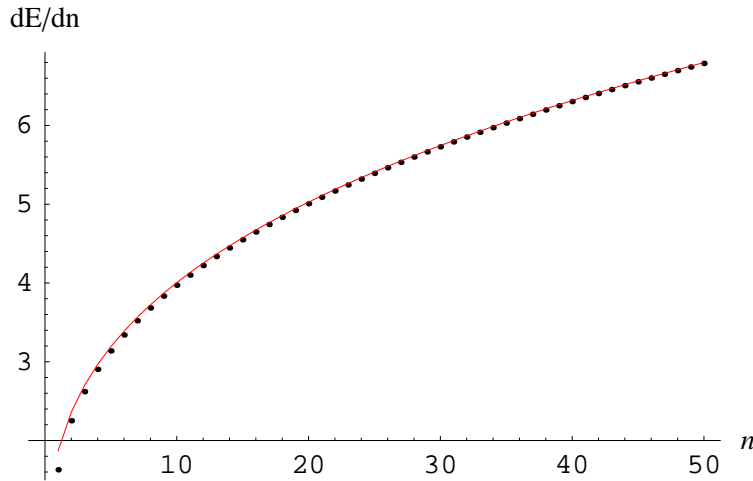


Figura 11.14: Confronto fra i valori calcolati di  $dE/dn$  (punti) ed il valore  $2\pi/T$  (linea continua). I dati sono stati calcolati per  $g = 1$ .

### 11.D.2 Caso metastabile: $\mu = 1$ , $g < 0$ .

Scriviamo per chiarezza l'Hamiltoniana nella forma

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} - |g| \frac{x^4}{2} \quad (11.174)$$

Il potenziale è quello mostrato in figura 11.11. L'Hamiltoniana non è limitata inferiormente ed il suo spettro è continuo. Classicamente una particella confinata all'interno della buca di potenziale, con energia totale  $\mathcal{E} < V_{max} = 1/8|g|$  rimane indefinitamente in questa zona. Quantisticamente la situazione è diversa: se all'istante  $t = 0$  una particella è confi-

nata<sup>10</sup> nella zona  $x \sim 0$ , all'interno della buca di potenziale, dopo un certo lasso di tempo l'attraversamento della barriera di potenziale provocherà un allontanamento dalla zona in questione, possiamo dire che il sistema "decade". Ci si aspetta tuttavia, come indicato nel testo, che in corrispondenza di alcuni particolari valori dell'energia il tempo di permanenza sia molto lungo e si possa parlare di stati *metastabili* del sistema, descritti da un valore  $\mathcal{E}$  dell'energia e da una *larghezza di decadimento*,  $\Gamma$ , che definisce la vita media dello stato

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \quad (11.175)$$

I valori  $\mathcal{E}$  corrispondono, semiclassicamente, a stati legati in cui è possibile trascurare gli effetti di attraversamento della barriera. Questo è tipico di una situazione semiclassica, l'effetto tunnel è tipicamente dell'ordine di  $\exp - \int p/\hbar$ , e quindi è esponenzialmente soppresso per  $\hbar \rightarrow 0$ .

È facile scrivere un'espressione esplicita, semiclassica, per  $\Gamma$ :

$$\Gamma = \frac{2}{T} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} 2 \int_{a_L}^{a_R} |p(x)| dx \right] \equiv \frac{2}{T} \exp(-D) \quad (11.176)$$

$T$  è il periodo classico del moto.  $2/T$  è la frequenza di collisione con le pareti (il fattore 2 è dovuto al fatto che la particella può uscire sia a destra che a sinistra).  $a_L, a_R$  indicano i punti di attraversamento della barriera, in cui  $p(x) = 0$ . Nel caso in esame

$$a_L^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - 8\mathcal{E}|g|}}{2|g|} \quad a_R^2 = \frac{1 + \sqrt{1 - 8\mathcal{E}|g|}}{2|g|} \quad (11.177)$$

Per la quantizzazione del sistema seguiamo esattamente lo schema visto nel paragrafo precedente. Nella zona classicamente permessa:

$$p(x) = \sqrt{|g|} \sqrt{(a_L^2 - x^2)(a_R^2 - x^2)} \quad (11.178)$$

La condizione di quantizzazione si scrive

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \frac{2}{\pi} \sqrt{|g|} \int_0^{a_L} \sqrt{(a_L^2 - x^2)(a_R^2 - x^2)} dx = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad (11.179)$$

Come nel paragrafo precedente questi integrali possono essere trattati numericamente, ma anche in questo caso è semplice dare l'espressione analitica (v. G.R. 3.155.7):

$$J(\mathcal{E}) = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar = \frac{2}{\pi} \sqrt{|g|} \frac{a_R}{3} \left[ (a_R^2 + a_L^2) \mathbf{E} \left( \frac{a_L^2}{a_R^2} \right) - (a_R^2 - a_L^2) \mathbf{K} \left( \frac{a_L^2}{a_R^2} \right) \right] \quad (11.180)$$

Allo stesso modo si può calcolare il periodo classico del moto (poniamo  $\hbar = 1, m = 1$ ) (v. G.R. 3.152.7)

$$T = \oint \frac{dx}{p(x)} = \frac{4}{\sqrt{|g|}} \int_0^{a_L} \frac{dx}{\sqrt{(a_L^2 - x^2)(a_R^2 - x^2)}} = \frac{4}{\sqrt{|g|}} \frac{1}{a_R} \mathbf{K} \left( \frac{a_L^2}{a_R^2} \right) \quad (11.181)$$

Per piccoli  $g$

$$T = 2\pi \left( 1 + \frac{3}{2} g\mathcal{E} \right) \quad (11.182)$$

Per piccoli  $g$  è possibile calcolare facilmente la correzione a  $J$ .

$$\delta J = -\frac{\hbar^2}{48\pi} \frac{\partial}{\partial E} \oint \frac{V''}{p(x)} dx = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar = -\frac{\hbar^2}{48\pi} \frac{\partial}{\partial E} T(\mathcal{E}) + \frac{1}{8\pi} |g| \frac{\partial}{\partial E} \oint \frac{V''}{p(x)} dx$$

<sup>10</sup>Questo si può realizzare immaginando di considerare un pacchetto d'onda con supporto compreso fra le posizioni  $x = \pm x_{max}$ .

Il primo termine si ricava dalla (11.182) e dà un contributo  $-\frac{1}{16}|g|$ . Nel secondo integrale possiamo ignorare la dipendenza da  $g$ , essendo già fattorizzato un termine  $|g|$  esplicito. L'integrale diventa elementare e dà un contributo  $\frac{1}{4}|g|$ . In totale perciò:

$$\delta J \xrightarrow{g \rightarrow 0} \frac{3}{16}|g|$$

Per referenza comunque diamo anche l'espressione esatta:

$$\begin{aligned} \delta J &= -\frac{1}{12\pi} \frac{1}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \left[ \left( \frac{1}{a_R} - 6|g|a_R \right) \mathbb{K}\left(\frac{a_L^2}{a_R^2}\right) + 6|g|a_R \mathbb{E}\left(\frac{a_L^2}{a_R^2}\right) \right] \\ &= \frac{\sqrt{2}g(-1+24g\mathcal{E})(1-4g\mathcal{E}+\sqrt{1-8g\mathcal{E}})}{3\pi(-1+8g\mathcal{E})(-1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}})(1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}})^{\frac{5}{2}}} \mathbb{E}\left(\frac{1-\sqrt{1-8g\mathcal{E}}}{1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}}}\right) + \\ &+ \frac{\sqrt{2}g(1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}}+4g\mathcal{E}(-5+24g\mathcal{E}-4\sqrt{1-8g\mathcal{E}}))}{3\pi(-1+8g\mathcal{E})(-1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}})(1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}})^{\frac{5}{2}}} \mathbb{K}\left(\frac{1-\sqrt{1-8g\mathcal{E}}}{1+\sqrt{1-8g\mathcal{E}}}\right) \end{aligned}$$

Passiamo ora alla larghezza  $\Gamma$ . I punti di inversione sono ora  $a_L, a_R$  e si ha, usando la notazione (11.176) ((v. G.R. 3.155.9)

$$\begin{aligned} D &= 2 \int_{a_L}^{a_R} |p(x)| dx = 2\sqrt{|g|} \int_{a_L}^{a_R} \sqrt{(x^2 - a_L^2)(a_R^2 - x^2)} dx = \\ &= 2\sqrt{|g|} \frac{a_R}{3} \left[ (a_L^2 + a_R^2) \mathbb{E}\left(\frac{a_R^2 - a_L^2}{a_R^2}\right) - 2a_L^2 \mathbb{K}\left(\frac{a_R^2 - a_L^2}{a_R^2}\right) \right] \end{aligned} \quad (11.183)$$

Vogliamo ora capire quanto questa descrizione semiclassica corrisponda alla fisica del sistema.

Il primo problema è capire a cosa ci si deve confrontare, cioè come sono definiti, esattamente,  $\mathcal{E}$  e  $\Gamma$ ?. Come discusso nel testo una risposta a questa domanda è data dall'uso della *trasformazione complessa di scala*.

Riassumiamo brevemente la procedura. Effettuando una trasformazione di scala

$$x \rightarrow e^{i\theta} x \quad p \rightarrow e^{-i\theta} p \quad (11.184)$$

si ottiene una Hamiltoniana non hermitiana,  $H(\theta)$ :

$$H(\theta) = -e^{-2i\theta} \frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + e^{2i\theta} \frac{x^2}{2} - e^{4i\theta} |g| \frac{x^4}{2} \quad (11.185)$$

Gli autovalori di questa Hamiltoniana, se esistono, sono complessi:  $\lambda(\theta)$ . Sottolineiamo, come abbiamo fatto nel testo, la somiglianza fra questa trasformazione ed il parametro di scala  $\alpha$  che si introduce nella trattazione variazionale della teoria. Quello che si dimostra è che esiste un intervallo finito di valori di  $\theta$  per cui gli autovalori  $\lambda(\theta)$  *non dipendono* da  $\theta$  e la loro parte immaginaria, eventuale, è legata proprio alla quantità  $\Gamma/2$ . Cioè

$$\lambda(\theta) = \mathcal{E} - i \frac{\Gamma}{2} \quad (11.186)$$

In linea di principio l'intervallo in questione può essere dedotto dalle proprietà spettrali di  $H$ , ma un modo più semplice dal punto di vista numerico è il seguente: si provano diversi valori di  $\theta$  e si trova numericamente la zona di stabilità.

Diagonalizzando la Hamiltoniana (11.185) su una base finita si trova al variare di  $\theta$  la situazione riportata in figura 11.15. È evidente la stabilità nella regione

$$\frac{\pi}{8} \leq \theta \leq \frac{\pi}{4} \quad \Rightarrow \quad \bar{\theta} = \frac{3}{16}\pi \quad (11.187)$$

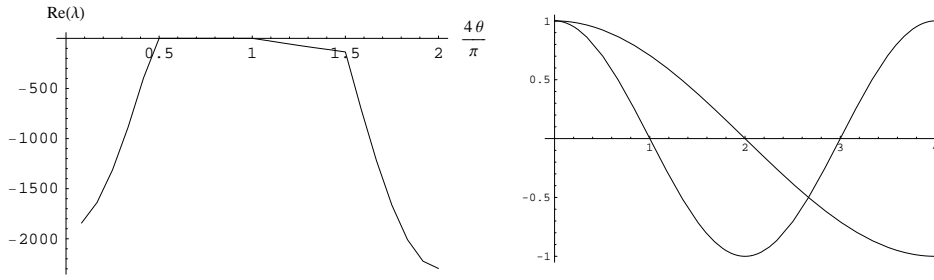


Figura 11.15: Parte reale del primo autovalore di  $H$  in funzione di  $4\pi/\theta$ . il comportamento della parte immaginaria è simile. La seconda figura è il grafico delle funzioni  $\cos(2x\frac{\pi}{8})$  e  $\cos(4x\frac{\pi}{8})$ .

Dalla seconda parte della figura 11.15 si possono capire i limiti ottenuti: nell'intervallo (11.187) si ha contemporaneamente  $\cos(2\theta) > 0$  e  $\cos(4\theta) < 0$ . In questo modo la parte cinetica e la parte in  $x^4$  dell'Hamiltoniana  $H(\theta)$  sono entrambe positive, dando luogo ad un problema stabile. Il lettore può verificare che nello stesso intervallo i termini  $p^2$  e  $x^4$  acquistano una parte immaginaria negativa, e questo corrisponde ad avere autovalori  $E - i\Gamma/2$  con  $\Gamma > 0$ . Il valore centrale  $\bar{\theta}$  è quello scelto nei calcoli seguenti.

Fissato il valore di  $\theta$  l'Hamiltoniana  $H(\theta)$  può essere diagonalizzata per vari valori della costante di accoppiamento ed i valori ottenuti possono essere confrontate con le predizioni semiclassiche. Nella figura 11.16 sono riportati i confronti, usando l'approssimazione al secondo ordine per il WKB. Come si vede l'accordo è buono.

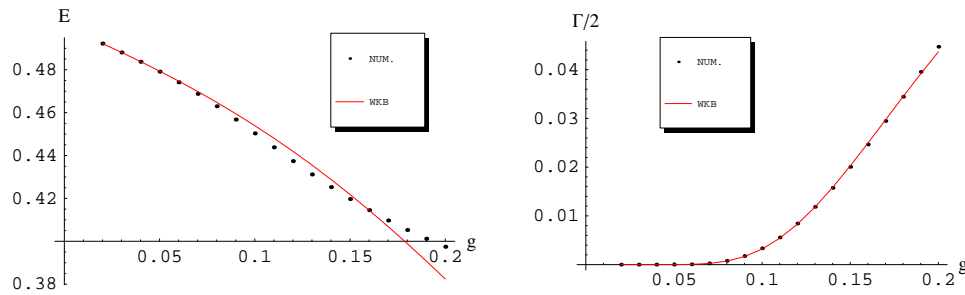


Figura 11.16: Energia dello stato fondamentale calcolata (punti) ed in approssimazione WKB (linea continua). La seconda figura riporta le stesse quantità per la semi larghezza  $\Gamma/2$ .

### 11.D.3 Caso bi-stabile: $\mu = -1, g > 0$ .

Il potenziale è quello mostrato in figura 11.12. Chiamiamo  $\pm a_L, \pm a_R$  i punti di inversione nel caso di energie al di sotto del massimo locale:

$$a_L^2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 8\mathcal{E}g}}{2g} \quad a_R^2 = \frac{1 + \sqrt{1 + 8\mathcal{E}g}}{2g}$$

L'integrale di azione,  $J(\mathcal{E})$  è una funzione crescente dell'energia. La massima energia (classica) compatibile con uno stato legato all'interno di una delle due buche di potenziale è  $\mathcal{E} = 0$  quindi per avere uno stato legato quantistico corrispondente a questa situazione

classica deve essere

$$J(0) = \frac{2}{2\pi} \int_{a_L}^{a_R} p(x) dx = \frac{1}{3\pi\sqrt{g}} = n + \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{1}{3\pi\sqrt{g}} \geq \frac{1}{2} \Rightarrow g \leq 0.2$$

Studieremo questo intervallo di valori per  $g$ . Nel paragrafo 11.7 abbiamo visto che in questa situazione si hanno due livelli quasi degeneri e abbiamo calcolato la separazione in energia

## 11.E Effetto Tunnel: calcolo esatto

### 11.E.1 Caso lineare.

In questo e nel prossimo paragrafo presenteremo due esempi espliciti di calcolo esatto del coefficiente di trasmissione attraverso una barriera. Non ci sarà niente di particolarmente nuovo rispetto alla fisica già studiata, presentiamo i calcoli allo scopo di illustrare esplicitamente dove e come intervengono alcune approssimazioni usate nel testo.

Il primo caso che studiamo è quello di una barriera a cuneo lineare. Normalizziamo lo zero dell'energia in modo che

$$U(x) = -F|x| \quad (11.188)$$

Energie  $E < 0$  corrispondono a urti contro la barriera, energie  $E > 0$  a diffusioni sopra la barriera. Per ora consideriamo il caso  $E < 0$  e poniamo  $E = -\epsilon$ . L'equazione di Schrödinger si scrive

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(F|x| - \epsilon)\psi = 0 \quad (11.189)$$

I punti di inversione sono

$$x = \pm a = \pm \frac{\epsilon}{F} \quad (11.190)$$

Posto  $\lambda = (2mF/\hbar^2)^{1/3}$  l'equazione (11.189) si può riscrivere

$$\frac{1}{\lambda^2} \frac{d^2}{dx^2}\psi - \lambda(-x + a)\psi = 0 \quad x > 0 \quad (11.191a)$$

$$\frac{1}{\lambda^2} \frac{d^2}{dx^2}\psi - \lambda(x - a)\psi = 0 \quad x > 0 \quad (11.191b)$$

In termini della notazione usuale:

$$\frac{|p|^2}{\hbar^2} = \lambda^3|x - a|$$

Quindi nelle zone classicamente permesse il comportamento asintotico aspettato è

$$\frac{1}{|x - a|^{1/4}} \exp\left\{\pm i\frac{2}{3}\lambda^{3/2}|x - a|^{3/2}\right\}$$

La direzione dell'onda è determinata dalla direzione di crescita della fase, quindi  $e^{+ic|x|^{3/2}}$  rappresenta un'onda divergente, cioè progressiva per  $x > 0$ , regressiva verso sinistra per  $x < 0$ , al contrario  $e^{-i|x|^{3/2}}$  è un'onda convergente.

Il problema fisico è il seguente: un'onda incidente da  $-\infty$  urta contro la barriera, in regime stazionario avremo un'onda progressiva dopo la barriera, mentre prima della barriera la soluzione sarà una sovrapposizione fra l'onda incidente e l'onda riflessa. Quindi per  $x \rightarrow -\infty$  la soluzione cercata è della forma

$$A \frac{1}{|x - a|^{1/4}} e^{-i\frac{2}{3}\lambda^{3/2}|x - a|^{3/2}} + B \frac{1}{|x - a|^{1/4}} e^{+i\frac{2}{3}\lambda^{3/2}|x - a|^{3/2}} \quad x \rightarrow -\infty \quad (11.192a)$$

$$C \frac{1}{|x - a|^{1/4}} e^{+i\frac{2}{3}\lambda^{3/2}|x - a|^{3/2}} \quad x \rightarrow +\infty \quad (11.192b)$$

La normalizzazione assoluta della  $\psi$  dipende dall'intensità dell'onda incidente, i coefficienti di trasmissione e riflessione sono

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (11.193)$$

La soluzione generale della (11.191) è

$$b_1 \text{Ai}(-(x-a)\lambda) + b_2 \text{Bi}(-(x-a)\lambda) \quad x > 0 \quad (11.194a)$$

$$c_1 \text{Ai}((x+a)\lambda) + c_2 \text{Bi}((x+a)\lambda) \quad x < 0 \quad (11.194b)$$

Ricordiamo il comportamento asintotico delle funzioni di Airy (vedi cap. sulle funzioni di Airy):

$$\text{Ai}(|x|) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} e^{-2/3|x|^{3/2}} \quad (11.195a)$$

$$\text{Ai}(-|x|) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\text{Bi}(|x|) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} e^{2/3|x|^{3/2}} \quad (11.195b)$$

$$\text{Bi}(-|x|) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

Visto il comportamento asintotico cercato conviene introdurre le due combinazioni

$$E_{\pm}(x) = \text{Bi}(x) \pm \text{Ai}(x) \quad (11.196)$$

Dalle (11.195) si ha immediatamente

$$E_{\pm}(-|x|) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}} |x|^{-1/4} \exp\left[\pm i\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)\right] \quad |x| \rightarrow \infty \quad (11.197)$$

Confrontando con la (11.194b) abbiamo che la soluzione generale del tipo (11.194), soddisfacente alla condizione di avere solo un'onda progressiva per  $x \rightarrow \infty$  è

$$E_+(-\lambda(x-a)) \quad x > 0 \quad (11.198a)$$

$$AE_- (\lambda(x+a)) + BE_+ (\lambda(x+a)) \quad x < 0 \quad (11.198b)$$

Abbiamo, arbitrariamente, scelto la normalizzazione globale ponendo a 1 il coefficiente della (11.198a).

I coefficienti  $A, B$  si determinano imponendo la continuità di  $\psi, \psi'$  per  $x = 0$

$$AE_-(\lambda a) + BE_+(\lambda a) = E_+(\lambda a) \quad (11.199a)$$

$$AE'_-(\lambda a) + BE'_+(\lambda a) = -E'_+(\lambda a) \quad (11.199b)$$

il sistema si risolve con la regola di Cramer. Notiamo che il determinante dei coefficienti è proprio il Wronskiano, il cui valore si ricava dalla espressione delle funzioni di Airy per  $x \rightarrow 0$ , vedi cap. sulle funzioni di Airy:

$$W(E_-, E_+) = -2iW(\text{Ai}, \text{Bi}) = -\frac{2i}{\pi} \quad (11.200)$$

Si ha

$$A = i\frac{\pi}{2} (2E_+ E'_+)_{x=\lambda a} \quad (11.201a)$$

$$B = -i\frac{\pi}{2} (E_- E'_+ + E_+ E'_-)_{x=\lambda a} \quad (11.201b)$$

Usando il fatto che  $E_+ = E_-^*$  si ha

$$|A|^2 = \frac{\pi^2}{4} [4E_+E'_+E_-E'_-]_{x=\lambda a} \quad (11.202a)$$

$$|B|^2 = \frac{\pi^2}{4} [2E_-E_+E'_+E'_- + E_-^2(E'_+)^2 + E_+^2(E'_-)^2]_{x=\lambda a} \quad (11.202b)$$

e ricordando la (11.200)

$$|B|^2 - |A|^2 = \frac{\pi^2}{4} (E_-^2(E'_+)^2 + E_+^2(E'_-)^2 - 2E_-E_+E'_+E'_-) = \frac{\pi^2}{4} W^2 = -1$$

cioè

$$\frac{1}{|A|^2} + \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (11.203)$$

che è l'attesa relazione fra i coefficienti di trasmissione e riflessione.

In approssimazione WKB il coefficiente di trasmissione è dato da

$$T = \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{-a}^a dx |p(x)| \right] = \exp \left[ -4\lambda^{3/2} \int_0^a |x-a|^{1/2} \right] = e^{-\frac{8}{3}(\lambda a)^{3/2}} \quad (11.204)$$

Dalla (11.202a) segue

$$|A|^2 = \frac{\pi^2}{4} |2E_+E'_+|^2 = \pi^2 [(Bi^2 + Ai^2)((Bi')^2 + (Ai')^2)]_{x=\lambda a}$$

Se i punti di inversione sono abbastanza distanti, cioè se il parametro adimensionale  $\lambda a \gg 1$  possiamo usare lo sviluppo asintotico delle funzioni di Airy, ottenendo

$$\begin{aligned} Ai^2 &\sim \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{\lambda a}} e^{-4/3(\lambda a)^{3/2}} & (Ai')^2 &\sim \frac{1}{4\pi} \sqrt{\lambda a} e^{-4/3(\lambda a)^{3/2}} \\ Bi^2 &\sim \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\lambda a}} e^{4/3(\lambda a)^{3/2}} & (Bi')^2 &\sim \frac{1}{\pi} \sqrt{\lambda a} e^{4/3(\lambda a)^{3/2}} \end{aligned}$$

da cui, tenendo conto delle approssimazioni dello sviluppo asintotico

$$|A|^2 \simeq \left[ e^{8/3(\lambda a)^{3/2}} + 2\frac{1}{4} + \frac{1}{16} e^{-8/3(\lambda a)^{3/2}} \right] (1 + \mathcal{O}((\lambda a)^{-3/2})) \quad (11.205)$$

È chiaro che solo l'ordine principale è significativo, viste le correzioni.

Vediamo per confronto cosa avremmo ottenuto applicando "ciecamente" le formule di connessione. Usiamo la solita notazione

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

e ricaviamo la funzione d'onda da destra a sinistra, sottintendiamo il fattore comune  $1/\sqrt{p}$  che compare sempre:

$$\begin{aligned} \cos(w(a, x) + \frac{\pi}{4}) + i \sin(w(a, x) + \frac{\pi}{4}) &\rightarrow e^{w(x, a)} + \frac{i}{2} e^{-w(x, a)} = \\ e^{w(-a, a) - w(-a, x)} + \frac{i}{2} e^{-w(a, a) + w(-a, x)} &\rightarrow \\ e^{w(-a, a)} 2 \sin(w(x, -a) + \frac{\pi}{4}) + \frac{i}{2} e^{-w(-a, a)} \cos(w(x, -a) + \frac{\pi}{4}) & \end{aligned}$$

Posto  $K = e^{-2w(-a, a)}$  per il fattore di penetrazione in approssimazione WKB ed indicando con  $\phi = w(x, -a) + \frac{\pi}{4}$  la fase, l'espressione precedente si scrive

$$ie^{-i\phi} \left[ \frac{1}{\sqrt{K}} + \frac{\sqrt{K}}{4} \right] - ie^{-i\phi} \left[ \frac{1}{\sqrt{K}} - \frac{\sqrt{K}}{4} \right]$$

$e^{i\phi}$  è l'onda divergente. Identifichiamo allora

$$|A|^2 = \left[ \frac{1}{\sqrt{K}} + \frac{\sqrt{K}}{4} \right]^2 = \left( \frac{1}{K} + \frac{K}{16} + \frac{1}{2} \right)$$

Dal confronto con la (11.205) è chiaro che applicare tutta la formula di connessione, compresi i termini esponenzialmente depressi, significa seguire la continuazione analitica separatamente delle funzioni  $A_i, B_i$ . In questo caso le correzioni al risultato sono correzioni a potenza per i singoli termini proprio perchè la soluzione esatta del problema è ottenuta tramite funzioni di Airy, che sono le stesse usate per ricavare le formule di connessione. Nel caso generale anche i coefficienti dei fattori esponenziali sono sbagliati, un esempio sarà fornito nel prossimo paragrafo.

Notiamo che nella derivazione tramite le formule di connessione non abbiamo mai fatto uso della forma esplicita del potenziale, quindi se applicassimo la formula di connessione completa il coefficiente di trasmissione sarebbe sempre dato da

$$T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{1}{\frac{1}{K} + \frac{K}{16} + \frac{1}{2}} = \frac{K}{1 + \frac{K}{2} + \frac{K^2}{16}} \quad (11.206)$$

L'espressione (11.205) è valida solo per  $\lambda a \gg 1$ . Per  $a \rightarrow 0$ , cioè per energie  $\epsilon \rightarrow 0$  si ha, usando le espressioni (??)

$$|A|^2 = \pi^2(4c_1^2 \cdot 4c_2^2) = \frac{4}{3} \quad T \rightarrow \frac{3}{4}$$

Per ricavare l'ultima espressione si possono usare delle identità sulla funzione  $\Gamma$  oppure notare che il Wronskiano calcolato nell'origine vale  $2c_1c_2\sqrt{3}$ .

Una situazione interessante si ha per  $\epsilon < 0$  che nelle nostre notazioni corrisponde a  $E > 0$ , cioè a diffusione al di sopra della barriera. nel caso quantistico sappiamo che ci deve essere una riflessione anche in questo caso, cioè  $|T| \neq 1$ .

Lasciamo al lettore lo studio del caso  $E > 0$ , come anche una analisi degli stati legati presenti nel caso  $U = +F|x|$ .

## 11.E.2 Barriera parabolica.

Consideriamo ora il caso di una barriera del tipo

$$U(x) = -\frac{1}{2}kx^2 \quad (11.207)$$

Ponendo, come nel caso precedente  $E = -\epsilon$ , l'equazione di Schrödinger si scrive

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left( \frac{1}{2}kx^2 - \epsilon \right) \psi = 0 \quad (11.208)$$

I punti di inversione, reali per  $\epsilon > 0$  sono

$$x = \pm \sqrt{\frac{2\epsilon}{k}} \quad (11.209)$$

È abbastanza semplice ricavare l'approssimazione WKB per il coefficiente di trasmissione con la barriera (11.207). Facciamo un cambiamento di variabili per semplificare il termine in  $x^2$

$$x = \lambda \xi \quad \lambda = \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right)^{-1/4} \quad \alpha = \frac{m\epsilon}{\hbar^2} \lambda^2 = \frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}}$$

L'equazione diventa

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\xi^2 - 2\alpha)\psi = 0 \quad (11.210)$$

Il fattore di fase che determina l'approssimazione semiclassica si calcola facilmente per grandi  $x$

$$\int d\xi \sqrt{\xi^2 - 2\alpha} \sim \int d\xi \left( \xi - \alpha \frac{1}{\xi} \right) = \frac{\xi^2}{2} - \alpha \log \xi$$

quindi

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) \sim \frac{1}{\sqrt{\xi}} e^{i \frac{\xi^2}{2}} \xi^{-i\alpha} \quad \frac{1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right) \sim \frac{1}{\xi^{1/2-i\alpha}} e^{-i \frac{\xi^2}{2}}$$

Il termine con l'esponenziale positivo come nel paragrafo precedente è un'onda divergente, l'altro un'onda convergente. La soluzione che corrisponde ad un'onda incidente da sinistra che supera la barriera è perciò, asintoticamente

$$\psi \sim B \frac{1}{\xi^{1/2+i\alpha}} \exp\left(i \frac{\xi^2}{2}\right) \quad x \rightarrow +\infty \quad (11.211a)$$

$$\psi \sim \frac{1}{|\xi|^{1/2-i\alpha}} \exp\left(-i \frac{\xi^2}{2}\right) + A \frac{1}{|\xi|^{1/2+i\alpha}} \exp\left(i \frac{\xi^2}{2}\right) \quad x \rightarrow -\infty \quad (11.211b)$$

Vogliamo determinare la relazione fra  $B$  ed  $A$ . Posto  $\xi = \rho e^{i\varphi}$  abbiamo

$$\exp(i\xi^2) = \exp(i\rho^2 \cos 2\varphi - \rho^2 \sin 2\varphi)$$

se effettuiamo una continuazione analitica nel semipiano superiore, per angoli  $\varphi \sim \pi - \delta$  otteniamo

$$|\exp(i\xi^2)| \sim \exp(+\rho^2 \sin \delta)$$

mentre se effettuiamo una continuazione analitica nel semipiano inferiore, per angoli  $\varphi = -\pi + \delta$

$$|\exp(i\xi^2)| \sim \exp(-\rho^2 \sin \delta)$$

i ruoli dei comportamenti limite si scambiano per  $e^{-i\xi^2}$ . Questo significa che se effettuassimo la continuazione analitica nel semipiano inferiore il termine proporzionale ad  $A$ , che è quello che ci interessa sarebbe esponenzialmente piccolo rispetto all'onda incidente, quindi non possiamo determinarlo dalla formula asintotica. Viceversa, effettuando la continuazione analitica nel semipiano superiore perdiamo il termine di onda incidente, che tanto non ci interessa, ma determiniamo  $A$ . Nella continuazione analitica nel semipiano superiore

$$\xi \rightarrow |\xi| e^{i\pi}$$

e quindi dalla (11.211) segue

$$A = B \exp\left(-i\pi\left(\frac{1}{2} + i\alpha\right)\right) = -iB e^{\pi\alpha} \quad (11.212)$$

Avendo "perso per strada" l'onda incidente non abbiamo abbastanza relazioni per determinare  $A$  e  $B$  separatamente, in effetti la stessa relazione (11.212) si sarebbe ottenuta con un qualunque coefficiente davanti al termine  $e^{-i\xi^2/2}$ .

Possiamo far rientrare la scelta assoluta della normalizzazione imponendo la condizione di unitarietà:

$$|A|^2 + |B|^2 = 1 \quad (11.213)$$

questo equivale ad imporre che il modulo del coefficiente dell'onda incidente è 1. In questo modo, dalle (11.212), (11.213) si ottiene

$$R = |A|^2 = \frac{1}{1 + e^{-2\pi\alpha}} \quad T = |B|^2 = 1 - |A|^2 = \frac{e^{-2\pi\alpha}}{1 + e^{-2\pi\alpha}} \quad (11.214)$$

Notiamo due cose

- 1) la derivazione non sfrutta in nessun punto la condizione  $\alpha > 0$ , quindi vale anche per  $\alpha < 0$ , cioè fornisce il coefficiente di trasmissione e riflessione anche per energie superiori al massimo della barriera.
- 2) Per grandi barriere,  $R \rightarrow 1$  e  $T \sim \exp(-2\pi\alpha)$  che come vedremo subito è l'atteso comportamento esponenziale del fattore di penetrazione

L'integrale che compare nel calcolo di  $T$  è

$$T \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx\right) \quad (11.215)$$

Si ha

$$w(-a, a) = \int_{-a}^a \frac{1}{\hbar} |p| dx = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} 2a^2 \int_0^1 \sqrt{1-z^2} dz = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} a^2 \frac{\pi}{2} = \pi \sqrt{\frac{m}{k}} \frac{\epsilon}{\hbar} \equiv \pi\alpha$$

Quindi

$$T \simeq e^{-2\pi\alpha}$$

come deve essere.

Se ricordiamo la (11.206), ponendo  $K = e^{-2\pi\alpha}$  per il fattore di penetrazione

$$T = \frac{K}{1 + \frac{K}{2} + \frac{K^2}{16}}$$

e la confrontiamo con la (11.214) vediamo che questa formula è sbagliata, anche la prima correzione  $\mathcal{O}(K^2)$  è sottostimata: come anticipato nel paragrafo precedente l'uso non oculato della formula di connessione completa porta a degli errori nei termini subdominanti.

Come nel paragrafo precedente vediamo ora brevemente come si scrive la soluzione esatta del problema di Schrödinger e controlliamo l'esattezza della (11.214).

Per uniformarci alle notazioni della referenza [AbSt] effettuiamo il cambiamento di variabili:

$$x = \lambda z \quad \lambda = \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \alpha = \frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}}$$

in queste variabili l'equazione di Schrödinger prende la forma

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left(\frac{1}{4}z^2 - \alpha\right)\psi = 0 \quad (11.216)$$

Le soluzioni di questa equazione si chiamano *Funzioni del Cilindro Parabolico*, perchè intervengono nella separazione di variabili di equazioni tipo Schrödinger in coordinate paraboliche, e sono un caso particolare delle funzioni ipergeometriche confluenti. L'equazione (11.216) è pari per  $z \rightarrow -z$ , quindi abbiamo una soluzione non a parità definita,  $W(\alpha, z)$ , anche  $W(\alpha, -z)$  è una soluzione. Per  $z$  reale la funzione  $W(\alpha, z)$  è reale. È abbastanza semplice costruire delle soluzioni per serie in  $z$  e dimostrare la loro convergenza, per i dettagli il lettore consulti la ref. [AbSt]. La cosa che interessa per il problema in esame è che a partire dalle  $W(\alpha, x)$  è possibile formare delle combinazioni complesse che hanno un "semplice" comportamento asintotico

$$E(\alpha, x) = \frac{1}{\sqrt{k}} W(\alpha, x) + i\sqrt{k} W(\alpha, -x) \quad (11.217a)$$

$$E^*(\alpha, x) = \frac{1}{\sqrt{k}} W(\alpha, x) - i\sqrt{k} W(\alpha, -x) \quad (11.217b)$$

dove

$$k = \sqrt{1 + e^{2\pi\alpha}} - e^{\pi\alpha} \quad \frac{1}{k} = \sqrt{1 + e^{2\pi\alpha}} + e^{\pi\alpha}$$

Il comportamento asintotico della (11.217) è

$$E(\alpha, z) = \sqrt{\frac{2}{z}} \exp \left[ i \left( \frac{z^2}{4} - \alpha \log z + \frac{1}{2} \phi + \frac{\pi}{4} \right) \right] (1 + \mathcal{O}(1/z^2)) \quad z \rightarrow +\infty \quad (11.218)$$

dove  $\phi = \arg \Gamma(\frac{1}{2} + i\alpha)$ . Poichè il comportamento asintotico della eq.(11.216) è fissato dalla fase

$$\int \sqrt{\frac{z^2}{4} - \alpha} dz \sim \int dz \left[ \frac{z}{2} - \frac{\alpha}{z} \right] = \frac{z^2}{4} - \alpha \log z$$

lo sviluppo (11.218) dice che la soluzione  $E(\alpha, z)$  è proprio la soluzione cercata, descrive un'onda divergente per  $z \rightarrow \infty$  corrispondente all'onda trasmessa.

Per trovare il coefficiente di trasmissione e quello di riflessione dobbiamo scrivere il comportamento asintotico della  $E(\alpha, z)$  per  $z \rightarrow -\infty$ .

Questo è un caso in cui si vede con estrema chiarezza come il comportamento asintotico della prolungamento analitico della soluzione **non è dato** in modo banale dal prolungamento analitico del comportamento asintotico.

Per essere espliciti: la soluzione  $E(\alpha, z)$  è una soluzione analitica in tutto il piano complesso, non c'è bisogno di fare nessun raccordo come nel caso del paragrafo precedente, a sinistra della barriera **ci deve essere** un termine che descrive l'onda convergente, quindi con un comportamento  $e^{-iz^2/4}$ , ma questo è il comportamento tipico di  $E^*$ , da dove viene fuori? Se facessimo il prolungamento dell'espressione (11.218),  $z \rightarrow -z$  non ci sarebbe modo di cambiare il segno del termine in  $z^2$ .

Quello che dobbiamo fare è ricavare lo sviluppo asintotico di  $E(\alpha, -|z|)$  a partire da quella di  $E(\alpha, +|z|)$ . Torniamo alla definizione  $E(\alpha, z)$ . Dalle (11.217) possiamo ricavare  $W(\alpha, \pm z)$ :

$$\begin{aligned} W(\alpha, z) &= \frac{\sqrt{k}}{2} (E(\alpha, z) + E^*(\alpha, z)) \\ W(\alpha, -z) &= \frac{1}{2i\sqrt{k}} (E(\alpha, z) - E^*(\alpha, z)) \end{aligned}$$

Da cui

$$\begin{aligned} E(\alpha, -z) &\equiv \frac{1}{\sqrt{k}} W(\alpha, -z) + i\sqrt{k} W(\alpha, z) = \\ &= \frac{i}{2} E(\alpha, z) \left( k - \frac{1}{k} \right) + \frac{i}{2} E^*(\alpha, z) \left( k + \frac{1}{k} \right) = \\ &= -ie^{\pi\alpha} E(\alpha, z) + i\sqrt{1 + e^{2\pi\alpha}} E^*(\alpha, z) \end{aligned} \quad (11.219)$$

La (11.219) ci permette ora di scrivere il limite per valori grandi e negativi dell'argomento  $z$  in termini del comportamento per valori grandi e positivi. L'espressione (11.219) è esattamente della forma voluta

$$E(\alpha, -|z|) = AE^*(\alpha, |z|) + BE(\alpha, |z|)$$

a cui possiamo applicare lo sviluppo asintotico noto, (11.218), che ora fornisce un'onda convergente,  $E^*$  ed un'onda divergente,  $E$ . Quindi

$$A = i\sqrt{1 + e^{2\pi\alpha}} \quad B = -ie^{\pi\alpha} \quad (11.220)$$

per i coefficienti di trasmissione e riflessione si ha allora

$$T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{1}{1 + e^{2\pi\alpha}} \quad (11.221a)$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{e^{2\pi\alpha}}{1 + e^{2\pi\alpha}} \quad (11.221b)$$

che soddisfano alla relazione di unitarietà  $R + T = 1$  e coincidono col risultato precedente (11.214).

Notiamo che esprimendo  $\alpha$  in funzione dell'energia

$$\alpha = -\frac{E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}}$$

l'espressione di  $T$ , (11.221) presenta dei poli in

$$\alpha = \left(n + \frac{1}{2}\right)i \quad E = -i\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Con la continuazione analitica  $k \rightarrow e^{i\pi}k$  che corrisponde a passare da una barriera ad un potenziale attrattivo, i poli di  $T$  vanno a finire nelle energie degli stati legati, in caso di un potenziale parabolico negli stati dell'oscillatore armonico.

## 11.F Sviluppi asintotici.

In questa appendice presenteremo alcuni aspetti elementari relativi allo studio del comportamento asintotico delle soluzioni di un'equazione differenziale del tipo:

$$\hbar^2 \psi''(x) + p^2(x) \psi(x) = 0 \quad (11.222)$$

ed in particolare analizzeremo il problema delle formule di connessione. Il lettore può trovare una trattazione più approfondita ed un'ampia bibliografia nelle referenze [BerMou72, FrFr65]. Nella (11.222)  $p^2 = \sqrt{2m(E - V(x))}$ . Per  $\hbar \rightarrow 0$ , come discusso nel testo, aspettiamo che la soluzione sia rappresentata, asintoticamente, da una combinazione lineare delle due funzioni:

$$E_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(\xi) d\xi\right) \equiv \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\pm i w} \quad (11.223)$$

$x_0$  è un punto di riferimento, che supponiamo assegnato.

Le funzioni  $E_{\pm}$  non soddisfano l'equazione di Schrödinger (11.222) a meno che  $p$  non sia costante. Si ha invece

$$\left(\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + p^2(x)\right)E_{\pm} = \hbar^2 \left(\frac{3}{4} \frac{p'^2}{p^2} - \frac{1}{2} \frac{p''}{p}\right)E_{\pm} \equiv \epsilon(x)E_{\pm} \quad (11.224)$$

La funzione  $\epsilon(x)$  esprime di quanto le funzioni si scostano dalla soluzione della (11.222).

Rappresentiamo la soluzione nella forma

$$\psi(x) = b_+(x) E_+ + b_-(x) E_- \quad (11.225)$$

Il comportamento asintotico, e le formule di connessione, saranno determinati dal comportamento delle funzioni  $b_{\pm}(x)$ . Ci sono infiniti modi di rappresentare una funzione,  $\psi(x)$ , in termini di due funzioni,  $b_{\pm}$ . Un vincolo è fornito dall'equazione (11.222), l'altro può essere scelto cercando di semplificare le equazioni differenziali a cui devono soddisfare le  $b_{\pm}$ .

Diamo direttamente una delle soluzioni possibili:

$$b'_{\pm}(x) = \frac{p'}{2p} \exp\left(\mp 2 \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(\xi) d\xi\right) b_{\mp}(x) \equiv \frac{p'}{2p} e^{\mp 2i w} b_{\mp}(x) \quad (11.226)$$

Il lettore può facilmente verificare che con questa scelta la corrente associata all'equazione di Schrödinger ha la stessa forma del caso  $p = \text{cost.}$ :

$$j = \frac{\hbar}{2i} \left(\psi^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \psi^*\right) = \left(|b_+|^2 - |b_-|^2\right) \quad (11.227)$$

permettendo quindi una semplice identificazione fra i valori asintotici delle  $b_{\pm}$  ed i coefficienti di trasmissione e riflessione. Naturalmente occorre verificare che la (11.226) sia equivalente all'equazione (11.222), è quello che in effetti accade.

Dalle (11.226) segue

$$b_+''(x) = e^{-2iw} \left( -i \frac{p'}{\hbar} b_- - \frac{p'^2}{2p^2} b_- + \frac{p''}{2p} b_- \right) + \frac{p'^2}{4p^2} b_+$$

$$b_-''(x) = e^{2iw} \left( i \frac{p'}{\hbar} b_+ - \frac{p'^2}{2p^2} b_+ + \frac{p''}{2p} b_+ \right) + \frac{p'^2}{4p^2} b_-$$

Da queste equazioni e dalla (11.224) si ricava:

$$\left( \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + p^2(x) \right) (b_+ E_+ + b_- E_-) = \hbar E_+ \frac{1}{4p^2} \left( 8ip^3 b_+' + 3\hbar p^2 b_+ + 4\hbar p^2 b_+'' - 2\hbar p(2b_+' p' + b_+ p'') \right)$$

$$+ \hbar E_- \frac{1}{4p^2} \left( -8ip^3 b_-' + 3\hbar p^2 b_- + 4\hbar p^2 b_-'' - 2\hbar p(2b_-' p' + b_- p'') \right)$$

Usando nuovamente le (11.226) si ha che la funzione  $b_+ E_+ + b_- E_-$  soddisfa l'equazione di partenza (11.222).

La (11.226) dà quindi un significato preciso ai coefficienti dei termini esponenziali ed in linea di principio permette di determinare, in quest'ambito, sia i termini dominanti che quelli subdominanti nello sviluppo asintotico.

Naturalmente le (11.226) in generale non sono esattamente risolubili. Supponiamo di conoscere la forma asintotica in una certa regione, ad esempio a destra di un punto di inversione. La possibilità più semplice sarebbe quella di utilizzare i valori noti come valori d'ingresso per una soluzione iterativa delle (11.226) ma questo approccio non funziona perchè le equazioni sviluppano una instabilità in vicinanza del punto di inversione. Questa instabilità è all'origine di un effetto scoperto da Stokes (*fenomeno di Stockes*), che si comprende meglio generalizzando l'equazione (11.226) al piano complesso. Supporremo quindi d'ora in avanti che  $V(x)$  sia una funzione analitica. La teoria delle equazioni differenziali ci assicura allora che  $\psi(x)$  è una funzione analitica.

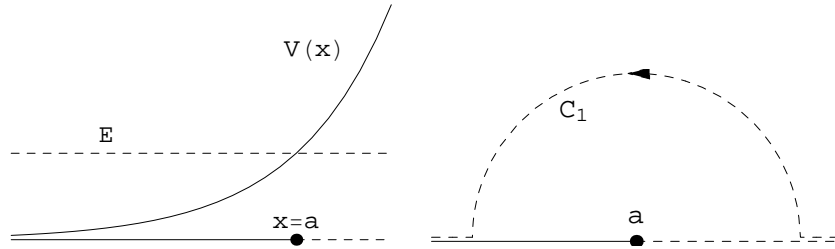


Figura 11.17: Schema per un singolo punto di inversione.  $x < a$  è la zona permessa classicamente,  $x > a$  quella proibita.  $C_1$  è un cammino nel piano complesso distante dai punti di inversione.

Consideriamo una situazione come quella rappresentata in figura 11.17.  $E$  indica l'energia. Sia  $x = a$  la coordinata del punto di inversione. Per  $|x - a| \gg 1$ , nel piano complesso, deve valere una espressione come la (11.226) con  $b_{\pm}$  costanti. Se continuiamo analiticamente la soluzione lungo un cammino che è sempre molto distante dal punto  $x = a$ , come quello indicato con  $C_1$ , dovremmo poter connettere i coefficienti asintotici da entrambi i lati del punto  $x = a$ , rimanendo sempre in regime asintotico. Essendo la continuazione analitica di una costante la stessa costante, i coefficienti dovrebbero essere uguali da entrambi i lati. Questo non succede *lo sviluppo asintotico della continuazione analitica non è la continuazione analitica dello sviluppo*. Un altro modo di dire la stessa cosa è affermare che i valori asintotici, costanti, delle funzioni  $b_{\pm}$  hanno delle discontinuità nel piano complesso: i luoghi dei punti in cui le funzioni  $b_{\pm}$  cambiano bruscamente,

e che corrispondono asintoticamente a discontinuità dei coefficienti, si chiamano *linee di (anti)Stokes*.<sup>11</sup> Il motivo per cui le funzioni  $b_{\pm}$  non sono analitiche risiede nel fatto che le stesse funzioni  $E_{\pm}$  non sono analitiche, solo la combinazione (11.225) è analitica. La non analiticità delle  $E_{\pm}$  è dovuta alla presenza di un taglio nella funzione  $p(x)$  in presenza di punti di inversione. Per punti di inversione semplici, che è l'unico caso che analizzeremo, la funzione  $E - V(x)$  ha uno zero semplice e quindi  $p(x)$  si comporta come  $\sqrt{x - a}$ .

Occorre fissare quale ramo della funzione radice quadrata si intende con  $p(x)$ . Noi adotteremo sistematicamente questa scelta:

- 1)  $p(x)$  è scelto *reale* nelle zone classicamente permesse.
- 2) Il taglio della funzione radice quadrata è considerato nella zona classicamente permessa.
- 3) In caso di più punti di inversione sceglieremo la determinazione *positiva* della radice sulla parte superiore del taglio nella zona più a destra fra quelle classicamente permesse. Quest'ultima scelta è fatta solo per fissare le convenzioni.

Le specifiche appena elencate indicano semplicemente come scegliere le coordinate locali attorno ai punti di diramazione della funzione  $p(x)$ . Ad esempio nel caso di un punto di inversione come in figura 11.17, posto:

$$x - a = \rho e^{i\theta} \quad (11.228)$$

porremo

$$\boxed{p(x) = \beta \rho^{\frac{1}{2}} e^{i(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{2})} \quad \Rightarrow \quad p(x) = -i \beta (x - a)^{\frac{1}{2}}} \quad (11.229)$$

$\beta$  è una costante positiva. In questo modo nella zona classicamente permessa,  $\theta = \pi$ ,  $p(x)$  è reale e positivo sulla parte superiore del taglio. Ovviamente è negativo nella parte inferiore,  $\theta = -\pi$ .

Scegliamo ora il punto di diramazione  $x = a$  come riferimento  $x_0$  per la definizione della fase  $w$ . Si ha

$$w(a, x) = \int_a^x p(x) dx = -i \frac{2}{3} \beta (x - a)^{3/2} = -i \frac{2}{3} \beta \rho^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{3}{2}\theta} \quad (11.230)$$

Notiamo in particolare che per  $x < a$ , cioè  $\theta = \pi$  si ha

$$w(a, x) = -\frac{2}{3} \beta \rho^{\frac{3}{2}} = -|w| \quad (11.231)$$

come deve essere, ricordiamo infatti che  $p > 0$  e  $x < a$ , quindi l'integrale nella (11.230) è negativo. È semplice seguire il cambiamento di fase di  $p(x)$  e  $w$ . Poichè  $dw/dx = p$  le proprietà di trasformazione di  $w$  sono uguali a quelle di  $(x - a)p(x)$ . Se si passa da sinistra a destra di un punto di diramazione, in senso orario, nel semipiano superiore,  $p(x)$ , proporzionale a  $(x - a)^{1/2}$  perde una fase di  $\pi/2$  mentre  $w$  una fase di  $3\pi/2$ . Succede il contrario per il passaggio da destra a sinistra in senso antiorario. Indicando con  $L, R$  i punti a sinistra e destra del punto di diramazione lo schema è il seguente:

$$p_L \rightarrow p_R = e^{-i\frac{\pi}{2}} p_L \quad w_L \rightarrow w_R = e^{-i\frac{3\pi}{2}} w_L \quad (11.232a)$$

$$p_R \rightarrow p_L = e^{i\frac{\pi}{2}} p_R \quad w_R \rightarrow w_L = e^{i\frac{3\pi}{2}} w_R \quad (11.232b)$$

Torniamo ora all'equazione (11.226). È evidente che la variazione delle grandezze  $b_{\pm}$  cambia drasticamente a seconda che la parte reale di  $i w$  sia positiva o negativa. Il

<sup>11</sup>La terminologia non è universale: talvolta la denominazione di linee di Stokes e anti-Stokes, specificata più avanti, è invertita. Noi seguiremo la terminologia usata, ad esempio, in [BerMou72].

comportamento cambia per  $\operatorname{Re}(iw) = 0$ , ovvero per  $\operatorname{Im}(w) = 0$ . Le linee  $\operatorname{Im}(w) = 0$  vengono dette *linee di anti-Stokes*, le linee in cui  $\operatorname{Re}(w) = 0$  linee di Stokes. Le linee di Stokes individuano i luoghi dei punti in cui uno dei due esponenziali  $E_{\pm}$  è dominante, le linee di anti-Stokes le linee in cui il ruolo cambia. In corrispondenza cambia il modo in cui variano i coefficienti  $b_{\pm}$ . Notiamo che in questa nomenclatura le zone classicamente permesse sono linee di anti-Stokes.

Nel caso della figura 11.17 si ha

$$\operatorname{Re}(w) = \sin \frac{3}{2}\theta$$

le linee di Stokes sono allora

$$\text{Linee di Stokes : } \quad \theta = 0 \quad \theta = \frac{2}{3}\pi \quad \theta = \frac{4}{3}\pi \quad (11.233)$$

Le linee di anti-Stokes, con  $\cos(3\theta/2) = 0$ :

$$\text{Linee di anti-Stokes : } \quad \theta = \frac{1}{3}\pi \quad \theta = \pi \quad \theta = \frac{5}{3}\pi \quad (11.234)$$

In pratica le linee di Stokes e di anti-Stokes dividono, alternativamente, il piano complesso, o meglio la superficie di Riemann, in raggianti, di ampiezza 60 gradi<sup>12</sup>. La disposizione è quella mostrata in figura 11.18. Bisogna pensare alla stessa figura replicata nel secondo foglio di Riemann, questo dà l'alternanza corretta fra le linee di Stokes e di anti-Stokes. Naturalmente le espressioni (11.233) e seguenti sono esatte solo in prossimità del punto di inversione, generalmente le linee non sono rette. La cosa non ha molta importanza in quanto saremo interessati solo alla disposizione delle linee, non alla loro espressione analitica.

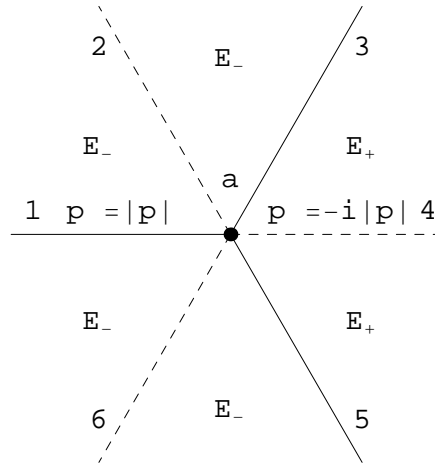


Figura 11.18: Linee di Stokes, continue, e linee di anti-Stokes, tratteggiate, nel caso di un singolo punto di inversione.

Consideriamo le varie linee di Stokes. Sulla linea 4,  $\theta = 0$ , e dalle (11.229), (11.230) discende

$$\text{Linea 4: } \quad p(x) = -i|p(x)| \quad iw = |w| \quad (11.235)$$

<sup>12</sup>Il lettore che ha consultato l'appendice dedicata alle funzioni di Airy riconoscerà la stessa partizione del piano complesso. Il motivo non è casuale: il fenomeno di Stokes che stiamo analizzando è stato scoperto studiando il comportamento asintotico delle funzioni di Airy.

Nella zona attorno a questa linea dunque la funzione  $E_+$  è esponenzialmente grande, mentre  $E_-$  è esponenzialmente piccola. Diremo che  $E_+$  è *dominante*.

Le equazioni (11.235) sono in accordo con la (11.232a). Per  $p$  si ha:  $p_L = |p| \rightarrow p_R = e^{-i\frac{\pi}{2}}|p|$ .

Per  $w$  si ha:  $w_L = -|w| \rightarrow w_R = e^{-i\frac{3}{2}\pi}w_L = iw_L = -i|w|$  e quindi  $iw_R = |w|$ .

Lungo la linea 2,  $\theta = 2\pi/3$ , si ha  $iw = -|w|$ , quindi è dominante la funzione  $E_-$ . Lungo la linea 6,  $\theta = -2\pi/3$ , si ha  $iw = -|w|$ , cioè è dominante ancora  $E_-$ . Notiamo che nell'ultima determinazione abbiamo considerato  $\theta = -2\pi/3$  e non  $\theta = 4\pi/3$ : in presenza del taglio questo punto sta nel secondo foglio di Riemann e darebbe luogo ad una dominanza di  $E_+$ , in accordo con l'alternanza dei ruoli fra le due funzioni.

Veniamo ora alla variazione delle funzioni  $b_{\pm}$ :

$$b'_+ = \frac{p'}{2p} e^{-2iw} b_-(x) \quad b'_- = \frac{p'}{2p} e^{+2iw} b_+(x) \quad (11.236)$$

Nella zona in cui è dominante  $E_+$ , cioè  $\text{Re}(iw) > 0$ , la *variazione* di  $b_+$  è esponenzialmente depressa, mentre la variazione di  $b_-$  è esponenzialmente grande, viceversa nel caso di dominanza di  $E_-$ . È questa l'instabilità a cui si era fatto cenno: se, ad esempio, il coefficiente  $b_-$  è piccolo nella zona  $x > a$ , nella continuazione analitica lungo il cammino  $C_1$  della figura 11.17 può diventare grande, quindi mentre è trascurabile nella zona  $x > a$ , non lo è più nella zona  $x < a$ . La conclusione che si trae quindi dalla forma delle (11.236) è la seguente: in prima approssimazione i coefficienti dei termini *dominanti* sono costanti, mentre i coefficienti dei termini *subdominanti* variano, questa variazione, come segue dalla (11.236), è proporzionale al valore del termine dominante.

Noi non siamo interessati alla espressione analitica delle funzioni  $b_{\pm}$  ma solo al loro valore asintotico. Possiamo associare un valore asintotico ad ognuna delle linee, il problema è la connessione fra questi valori. definendo un vettore colonna a due componenti,  $B = (b_+, b_-)$ , il passaggio da una linea all'altra è un'applicazione lineare del tipo

$$B' = F \cdot B \quad (11.237)$$

$F$  è una matrice  $2 \times 2$ . La trasformazione è lineare perchè le equazioni (11.236) sono lineari. La matrice  $F$  non può essere arbitraria. In queste notazioni la corrente (11.227) si scrive

$$j = B^\dagger J B \quad J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11.238)$$

L'invarianza in forma della corrente si esprime allora nella forma

$$B^\dagger J B = B'^\dagger J B' = B^\dagger F^\dagger J F B \quad \Rightarrow \quad J = F^\dagger J F$$

deve quindi essere

$$|\det(F)| = 1 \quad (11.239)$$

La discussione precedente sulla variabilità delle funzioni  $b_{\pm}$  detta immediatamente la *forma* della matrice. Al passaggio da una linea di anti-Stokes all'altra i coefficienti dominanti restano invariati, quelli *subdominanti* cambiano, quindi le due forme possibili sono

$$E_+ \text{ dominante} : F = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} \quad E_- \text{ dominante} : F = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11.240)$$

La variazione totale dei coefficienti si ottiene naturalmente effettuando il prodotto delle matrici  $F$ , questo corrisponde a prendere come dato iniziale per ogni variazione il risultato finale della variazione precedente. Il risultato finale sarà quindi ancora della forma (11.237):

$$B' = \Omega B \quad (11.241)$$

con  $\Omega$  prodotto di matrici del tipo  $F$ , eq.(11.240).

La matrice  $\Omega$  ha ancora un vincolo. Stiamo assumendo che  $V(x)$  sia una funzione reale per  $x \in \mathbb{R}$ , quindi è possibile scegliere funzioni reali come soluzioni dell'equazione di Schrödinger. Questo significa che se  $\psi$  è reale su una parte dell'asse reale lo deve essere anche nelle zone raggiunte per continuazione analitica, questo, come vedremo imporrà dei vincoli alle costanti  $\alpha$  che compaiono nella (11.240). Un modo equivalente di affermare la stessa cosa è dire che la funzione  $\psi$  deve essere *monodroma*, infatti se  $\psi$  è analitica e reale su un segmento di  $\mathbb{R}$  l'estensione analitica dal piano superiore a quello inferiore si compie col principio di riflessione di Schwartz che impone  $\psi \in \mathbb{R}$  su tutto l'asse reale. Alla fase della funzione  $\psi$  contribuisce non solo la matrice  $\Omega$  ma anche la fase della funzione  $\sqrt{p(x)}$  che compare nella definizione di  $E_{\pm}$ , è più semplice quindi analizzare caso per caso il vincolo piuttosto che scrivere una formula generale. Nel seguito del paragrafo applicheremo le idee esposte al trattamento dei casi analizzati nel testo: un punto di inversione e due punti di inversione.

### Formule di connessione per un punto di inversione.

Usiamo le notazioni di figura 11.17. Il cammino  $C_1$  è un cammino "buono" in quanto si mantiene sempre lontano dal punto di inversione. Con riferimento alla numerazione di figura 11.18 questo cammino comprende due zone diverse

$$4 \rightarrow 3 \text{ dominante } E_+ \quad 3 \rightarrow 1 \text{ dominante } E_-$$

Le due matrici  $F$  sono allora

$$F_{4 \rightarrow 3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} \quad F_{3 \rightarrow 1} = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11.242)$$

Si ha dunque

$$\Omega = F_{3 \rightarrow 1} \cdot F_{4 \rightarrow 3} = \begin{pmatrix} 1 + \alpha\beta & \beta \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} \quad B(1) = \Omega B(4) \quad (11.243)$$

$B(n)$  indica il valore dei coefficienti sulla linea  $n$ , una analoga notazione sarà usata per le componenti  $b_{\pm}$  del vettore. Sulla linee 1 e 4 si ha, vedi eq.(11.235)

$$\text{L. 1: } p(x) = |p(x)| \quad w(x) = |w(x)| \quad \text{L. 4: } p(x) = -i|p(x)| \quad iw = |w| \quad (11.244)$$

Si ha quindi

$$\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|p|}} \left[ b_+(4) e^{|w|} + b_-(4) e^{-|w|} \right] \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left( \left[ (1 + \alpha\beta)b_+(4) + \beta b_-(4) \right] e^{-i|w|} + \left[ \alpha b_+(4) + b_-(4) \right] e^{i|w|} \right) \quad (11.245)$$

Nello scrivere questa relazione abbiamo tenuto conto del fatto che sulla linea 1 vale  $w = -|w|$ , vedi eq.(11.231). Moltiplicando la relazione precedente per  $e^{-i\frac{\pi}{4}}$  e considerando  $b_{\pm}(4)$  reali, la condizione  $b_{\pm}(1) \in \mathbb{R}$  impone:

$$(1 + \alpha\beta)e^{-i\frac{\pi}{4}} = (\alpha e^{-i\frac{\pi}{4}})^* \quad \beta e^{-i\frac{\pi}{4}} = (e^{-i\frac{\pi}{4}})^* \quad (11.246)$$

Dalla seconda equazione segue  $\beta = i$ , la prima diventa allora  $1 + i\alpha = i\alpha^*$ . Ponendo  $\alpha = |\alpha|e^{i\gamma}$  si ha

$$|\alpha| = \frac{1}{2 \sin \gamma} \quad \alpha = \frac{i}{2} + \frac{\cos \gamma}{2 \sin \gamma}$$

Dalla (11.245) si ha allora per i singoli termini:

$$\begin{aligned} \frac{e^{-|w|}}{\sqrt{|p|}} &\leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ i e^{-i|w| - i\frac{\pi}{4}} + e^{i|w| - i\frac{\pi}{4}} \right] = 2 \cos \left( |w| - \frac{\pi}{4} \right) \\ \frac{e^{|w|}}{\sqrt{|p|}} &\leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ (1 + i\alpha) e^{-i|w| - i\frac{\pi}{4}} + \alpha e^{i|w| - i\frac{\pi}{4}} \right] = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ (\alpha - i) e^{-i(|w| - \frac{\pi}{4})} + \alpha e^{i(|w| - \frac{\pi}{4})} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ \frac{\cos \gamma}{\sin \gamma} \cos(|w| - \frac{\pi}{4}) - \sin(|w| - \frac{\pi}{4}) \right] = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \frac{1}{\sin \gamma} \cos(|w| - \frac{\pi}{4} + \gamma) \end{aligned} \quad (11.247)$$

Le (11.247) sono le formule di connessione cercate. Il metodo adottato non è sufficiente a determinare completamente il problema, la fase  $\gamma$  resta arbitraria. Il calcolo con le funzioni di Airy, eq.(11.18), portava a  $\gamma = \pi/2$ , ed il risultato coincide allora con quello ottenuto nel testo. Nella applicazione reversibile delle (11.247) vanno applicate tutte le cautele esposte nel paragrafo 11.2.

---

È istruttivo verificare la monodromia della funzione  $\psi$ . Se avessimo effettuato la continuazione analitica nel semipiano inferiore, col percorso  $4 \rightarrow 5 \rightarrow 1$  avremmo la seguente matrice  $\Omega$ :

$$\Omega = F_{5 \rightarrow 1} F_{4 \rightarrow 5} = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \alpha\beta & \beta \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}$$

Identica in forma alla precedente, eq.(11.243) (naturalmente  $\alpha, \beta$  sono in generale diversi da quelli precedenti). In questa continuazione analitica si arriva alla parte *inferiore* del taglio della funzione  $p(x)$ , cioè si ha  $\theta = -\pi$  nella notazione delle (11.229) e seguenti. Sulla linea 1 si ha in questo caso

$$p(x) = e^{-i\pi} |p| \quad w = +|w| \quad (11.248)$$

e la (11.245) ha la forma

$$\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|p|}} \left[ b_+(4) e^{|w|} + b_-(4) e^{-|w|} \right] \leftrightarrow \frac{e^{i\frac{\pi}{2}}}{\sqrt{|p|}} \left( \left[ (1 + \alpha\beta) b_+(4) + \beta b_-(4) \right] e^{i|w|} + \left[ \alpha b_+(4) + b_-(4) \right] e^{-i|w|} \right)$$

La condizione di realtà impone ora

$$\beta = -i \quad \alpha = |\alpha| e^{i\gamma} \quad |\alpha| = -\frac{1}{2 \sin \gamma}$$

Se consideriamo allora, ad esempio, il termine  $e^{-|w|}$  si ha

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-|w|} \leftrightarrow \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|p|}} \left[ -i e^{i|w|} + e^{-i|w|} \right] = \frac{2}{\sqrt{|p|}} \cos(|w| - \frac{\pi}{4})$$

Il risultato coincide con la (11.247) verificando così la monodromia.

---

## Formule di connessione per due punti di inversione.

Possiamo distinguere due casi fondamentali che presentano due punti di inversione sull'asse reale: un problema di tunneling ed uno di stato legato, illustrati in figura 11.19. Consideriamo il primo. La struttura delle linee di Stokes è illustrata in figura 11.20.  $a_L, a_R$  sono i due punti di inversione, soluzioni dell'equazione  $p(x) = 0$ .

La superficie di Riemann ha due tagli:  $-(\infty, a_L]$  e  $[a_R, +\infty)$ . Scegliamo la determinazione delle radici in modo che  $p(x)$  sia positivo per  $x > a_R$ , sulla parte superiore del secondo taglio. Sulla linea 1, al di sopra del taglio, si ha

$$w_1 = \int_{a_R}^x p(x) dx > 0 \quad w_1 \in \mathbb{R}$$

Per determinare le formule di connessione un cammino "buono" è quello indicato con  $C$  in figura 11.20, che comprende quindi i percorsi  $1 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 6$ . Notiamo che le linee 3,4 si

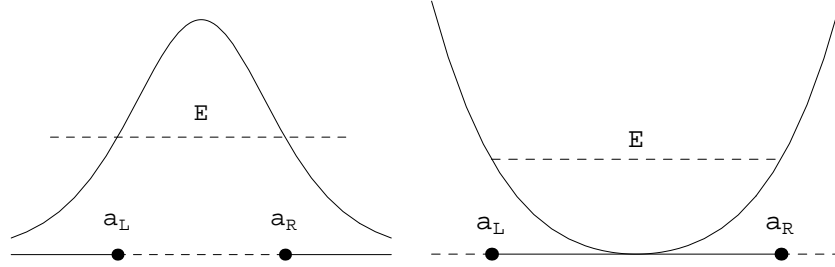


Figura 11.19: Schemi possibili per due punti di inversione. Nel primo caso si ha un processo d'urto, nel secondo uno stato legato.

congiungono a  $+\infty$  quindi dal punto di vista dei cambiamenti di fase all'infinito possono essere identificate.

Sulla linea 1  $w_1 \in \mathbb{R}$ , percorrendo il cammino  $C$  in senso antiorario la fase di  $w_1$  cresce, quindi  $\text{Im}(w_1) > 0$ , cioè significa che la soluzione  $E_+$  è depressa esponenzialmente mentre la soluzione  $E_-$  è quella dominante, come indicato in figura. Attraversando le linee di anti-Stokes 3, 4 la soluzione dominante diventa  $E_+$ . Analogamente al caso precedente si ha:

$$F_{3 \rightarrow 6} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} \quad F_{1 \rightarrow 3} = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Omega = F_{3 \rightarrow 6} F_{1 \rightarrow 3} = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ \alpha & 1 + \alpha\beta \end{pmatrix} \quad (11.249)$$

Dalla (11.249) segue la formula di connessione:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \begin{pmatrix} b_+ e^{iw(a_R, x)} + b_- e^{-iw(a_R, x)} \end{pmatrix} \xleftarrow{x > a_R} \psi(x) \xrightarrow{x < a_L} \quad (11.250)$$

$$\frac{-i}{\sqrt{|p|}} \begin{pmatrix} (b_+ + \beta b_-) e^{iw(a_R, x)} + (\alpha b_+ + (1 + \alpha\beta) b_-) e^{-iw(a_R, x)} \end{pmatrix}$$

I coefficienti  $b_{\pm}$  si riferiscono alla linea 1. Nello scrivere la (11.250) abbiamo tenuto conto del fatto che sulla linea 6  $p(x) = e^{i\pi} |p(x)|$  in quanto si contornano due punti di diramazione, vedi eq.(11.232a).

Nella espressione (11.250) compare  $w(a_R, x)$  per  $x < a_L$ , prima di applicare il criterio di realtà ai coefficienti, separiamo in questa quantità la parte reale dalla parte immaginaria, allo stesso tempo esprimeremo i coefficienti tramite le funzioni semiclassiche relative al punto di diramazione  $a_L$ , più comode per descrivere la funzione d'onda per  $x < a_L$ . Possiamo scrivere

$$w(a_R, x) = -w(a_L, a_R) + w(a_L, x) = w(a_L, x) + w(a_R, a_L)$$

La funzione  $w(a_R, x)$  acquista una fase di  $3/2\pi$  contornando il punto  $x = a_R$ , quindi per  $a_L \leq x \leq a_R$ :

$$w(a_R, x) = e^{i\frac{3}{2}\pi} |w(a_R, x)| = -i |w(a_R, x)|$$

segue

$$w(a_R, a_L) = -i |w(a_R, a_L)| \equiv -i\sigma \quad \sigma = \frac{1}{\hbar} \int_{a_L}^{a_R} \sqrt{2m |E - V(x)|} dx$$

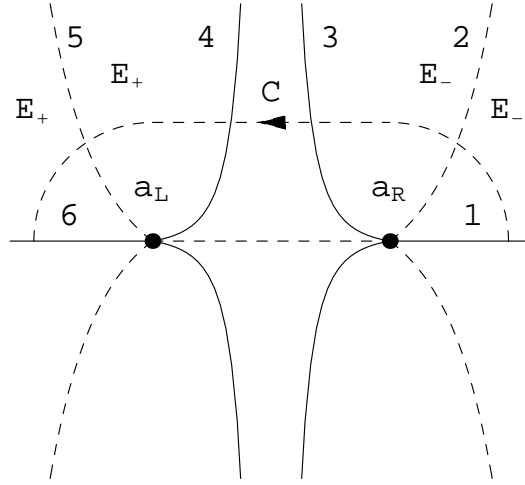


Figura 11.20: Disposizione delle linee di Stokes (tratteggiate) e di anti-Stokes (continue) nel caso dell'effetto tunnel.

La (11.250) si riscrive nella forma:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \left( b_+ e^{iw(a_R, x)} + b_- e^{-iw(a_R, x)} \right) \xleftarrow{x > a_R} \psi(x) \xrightarrow{x < a_L} \quad (11.251)$$

$$\frac{-i}{\sqrt{|p|}} \left( (b_+ + \beta b_-) e^\sigma e^{iw(a_L, x)} + (\alpha b_+ + (1 + \alpha\beta)b_-) e^{-\sigma} e^{-iw(a_L, x)} \right)$$

Prima di applicare il criterio di realtà vediamo il significato fisico dei vari coefficienti. Per  $b_- = 0$  si ha un'onda progressiva nella zona  $x > a_R$ : è il caso dell'effetto tunnel. Nelle notazioni che stiamo usando la funzione d'onda per  $x < a_L$  deve avere la forma

$$x < a_L : \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left( e^{-iw(a_L, x)} + R e^{iw(a_L, x)} \right) \quad (11.252a)$$

$$x > a_R : \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}} T e^{iw(a_R, x)} \quad (11.252b)$$

$R, T$  sono i coefficienti di riflessione e trasmissione. Notiamo che nella zona  $x < a_L$  si ha  $p(x) < 0$ , quindi la direzione di avanzamento dell'onda è determinata da  $dw/dx = p(x)$  quindi l'onda incidente è correttamente rappresentata dall'esponenziale  $\exp(-iw)$  nella (11.252). Dal rapporto dei coefficienti nella (11.251), per  $b_- = 0$ , si ha

$$T = i \frac{1}{\alpha} e^\sigma \quad \frac{R}{T} = -i e^\sigma \quad (11.253)$$

Passiamo ora ai vincoli. La funzione d'onda è reale nella zona  $x > a_R$  per  $b_\pm = \exp(\pm i\mu)$ . Imponendo  $\psi \in \mathbb{R}$  anche per  $x < a_L$  si ottiene

$$-i(e^{i\mu} + \beta e^{-i\mu})e^\sigma = (-i(e^{i\mu}\alpha + (1 + \alpha\beta)e^{-i\mu})e^{-\sigma})^*$$

e quindi i vincoli:

$$-\beta = \alpha^* e^{-2\sigma} \quad -1 = (1 + \alpha^* \beta^*) e^{-2\sigma}$$

Posto

$$\alpha = i|\alpha|e^{i\delta}$$

si ha:

$$\beta = -\alpha^* e^{-2\sigma} \quad |\alpha| = e^{2\sigma} (1 + e^{-2\sigma})^{\frac{1}{2}} \quad (11.254)$$

Sostituendo nella (11.253) si ha l'espressione generale per i coefficienti  $T$  e  $R$ :

$$T = \frac{e^{-i\delta} e^{-\sigma}}{(1 + e^{-2\sigma})^{\frac{1}{2}}} \quad R = -i \frac{e^{-i\delta}}{(1 + e^{-2\sigma})^{\frac{1}{2}}} \quad (11.255)$$

Anche in questo caso il metodo non fornisce una risposta completa, la fase  $\delta$  è indeterminata. I coefficienti  $T, R$  soddisfano al vincolo  $|T|^2 + |R|^2 = 1$ , e la probabilità di attraversamento della barriera,  $|T|^2$ , non dipende dalla fase.

Per punti di inversione distanti, o per piccole energie rispetto all'altezza della barriera, possiamo applicare due volte le formule di connessione lineari, come fatto nel testo, trovando

$$T \sim e^{-\sigma} \quad R \sim -i$$

quindi la fase  $\delta(E)$  va a zero per  $E \rightarrow 0$ . È possibile ottenere  $\delta(E)$  utilizzando il metodo<sup>13</sup> delle funzioni di confronto:

$$\delta(E) = \frac{\sigma}{\pi} \log \left| \frac{\sigma}{\pi e} \right| + \arg \left[ \Gamma \left( \frac{1}{2} - i \frac{\sigma}{\pi} \right) \right] \quad (11.256)$$

Per la deduzione del risultato (11.256) il lettore può consultare l'articolo di Berry e Mount e la letteratura ivi citata.

Nel caso generale, con  $b_{\pm} = \exp(\pm i\mu)$ , possiamo scrivere:

$$-i \left( (e^{i\mu} + \beta e^{-i\mu}) e^{\sigma} e^{iw(a_L, x)} \right) = e^{\sigma} e^{i(w(a_L, x) + \mu - \frac{\pi}{2})} + |\alpha| e^{-\sigma} e^{i(w(a_L, x) - \mu - \delta)}$$

Prendendo la parte reale della (11.251):

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \cos(w(a_R, x) + \mu) \leftarrow \psi \rightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left( e^{\sigma} \cos(w(a_L, x) + \mu - \frac{\pi}{2}) + |\alpha| e^{-\sigma} \cos(w(a_L, x) - \mu - \delta) \right) \quad (11.257)$$

Dalla (11.257) discende nuovamente che  $\delta \rightarrow 0$  per  $\sigma \rightarrow \infty$ . Infatti se la barriera è impenetrabile la fase  $\mu$  deve tendere a  $-\pi/4$ , come discende dalla formule di connessione per un singolo punto di inversione. Ponendo  $\delta = 0$  i termini a secondo membro della (11.257) in questo caso si elidono a vicenda.

---

Usando la (11.257) è possibile rianalizzare il problema della "doppia buca", vedi paragrafo 11.7. I punti di inversione sono  $a_L = -a, a_R = +a$ , ed i punti  $\pm b$ , vedi fig.11.7. Se consideriamo il potenziale abbastanza ampio possiamo trattare i punti di inversione  $\pm b$  tramite le formule di connessione lineari. Quindi per  $a_R \ll x \ll b$  deve essere

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos(w(x, b) - \frac{\pi}{4})$$

la fase è fissata dalla richiesta di una decrescita esponenziale per grandi  $x$ . Con la notazione precedente d'altronde

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos(w(a_R, x) + \mu)$$

La consistenza impone la condizione

$$n\pi = w(a_R, x) + \mu + w(x, b) - \frac{\pi}{4} = w(a_R, b) - \frac{\pi}{4} + \mu$$

---

<sup>13</sup>Per chiarezza sottolineiamo che le funzioni  $\mu(E)$  e  $\delta(E)$  dipendono dal tipo di problema in esame, cioè dalle condizioni al contorno. L'espressione (11.256) si riferisce al problema del tunneling.

Posto  $\mu = -\frac{\pi}{4} + \delta\mu$  ed usando l'integrale di azione

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \frac{\hbar}{\pi} w(a_R, b)$$

si ha

$$\frac{\pi}{\hbar} J + \delta\mu = (n + \frac{1}{2})\pi \quad (11.258)$$

Per  $\delta\mu = 0$  si ha l'usuale condizione di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld. In generale la (11.258) provoca una variazione dei livelli semiclassici. Se chiamiamo  $E_0$  il livello calcolato con  $\delta\mu = 0$  e poniamo  $E = E - 0 + \Delta E_0$ , si ha

$$\frac{\pi}{\hbar} \frac{\partial J}{\partial E} \Delta E + \delta\mu = 0$$

Ricordando la relazione

$$\frac{\partial J}{\partial E} = \frac{T}{2\pi} \quad T = \text{periodo}$$

otteniamo

$$\Delta E_0 = -\frac{2\hbar}{T} \delta\mu \quad (11.259)$$

Nel caso di un potenziale pari, come la doppia buca, e ricordando che nella convenzione usata  $p(x) < 0$  per  $x < a_L$ , si ha

$$w(a_L, x) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{-|x|} |p(x)| dx = \frac{1}{\hbar} \int_a^{|x|} |p(x)| dx = w \equiv w(a_R, |x|)$$

Poniamo  $\mu = -\frac{\pi}{4} + \delta\mu$  nella (11.257). Per stati pari deve valere

$$\cos(w - \frac{\pi}{4} + \delta\mu) = e^\sigma \cos(w - \frac{3}{4}\pi + \delta\mu) + |\alpha| e^{-\sigma} \cos(w + \frac{\pi}{4} - \delta\mu - \delta) \quad (11.260)$$

Sviluppando in  $\delta\mu$  e  $\delta$  e trascurando i termini superiori in  $e^{-\sigma}$  nella (11.260) si ottiene, per lo stato pari:

$$\cos(w - \frac{\pi}{4}) - \delta\mu \sin(w - \frac{\pi}{4}) = 2\delta\mu e^\sigma \cos(w - \frac{\pi}{4}) - \frac{1}{2} e^{-\sigma} \sin(w - \frac{\pi}{4}) + \delta e^\sigma \cos(w - \frac{\pi}{4})$$

che ha come soluzione

$$\delta\mu = \frac{1}{2} e^{-\sigma} \quad \delta = 0 \quad (11.261)$$

In questo problema quindi  $\delta = o(e^{-\sigma})$ . Il risultato (11.261) sostituito nella (11.259) riproduce il risultato noto (11.86):  $\Delta E_0 = -\hbar e^{-\sigma}/T$ . Allo stesso modo si può procedere per lo stato dispari.

## 11.G Teorema del confronto.

In Meccanica Quantistica, ed in altri campi, è spesso utile avere una stima del comportamento delle soluzioni di un'equazione differenziale del tipo

$$y'' + \lambda^2 F(x)y = 0 \quad (11.262)$$

per grandi valori del parametro  $\lambda$ . È ad esempio il caso del limite semiclassico in cui  $\lambda = 1/\hbar$ .

Come visto nel caso dell'equazioni di Schrödinger è opportuno avere un'approssimazione della soluzione *uniforme* in  $x$ , cioè se  $Y$  è un'approssimazione si vorrebbe che  $Y \sim y + \mathcal{O}(1/\lambda)$  in tutto un intervallo, comprendente possibilmente eventuali punti di inversione, in cui  $F(x) = 0$ .

L'idea semplice è la seguente: sostituire all'equazione (11.262) un'equazione più semplice, di cui l'approssimazione  $Y$  è soluzione, e trattare il resto come perturbazione.

I risultati fondamentali al riguardo risalgono ai lavori di Liouville e Steckloff, appunto sulla stima asintotica delle autofunzioni e degli autovalori di un'equazione lineare del secondo ordine. Il metodo è stato perfezionato da R.E. Langer negli anni attorno al 1930 ed importanti contributi sono dovuti alla scuola italiana, in particolare a G. Fubini e F. Tricomi. Nel libro di Tricomi citato in bibliografia si trova un'ampia discussione del metodo generale. Noi esporremo solo un risultato, che è quello che serve per lo studio dell'equazione di Schrödinger. Il metodo seguito è quello sviluppato da A. Erdelyi. Lo stesso metodo è

succintamente riportato nelle tavole di M. Abramowitz, I.A. Stegun. Una chiara e profonda discussione di tutta la materia si può trovare nell'articolo di M.V. Berry e K.E. Mount.

Il teorema fondamentale che serve per analizzare lo sviluppo asintotico è il seguente, v. Erdelyi, cap.4.

Consideriamo un'equazione differenziale della forma

$$y'' + (\lambda^2 P(x) + Q(x, \lambda))y = 0 \quad (11.263)$$

supponiamo che  $P$  abbia uno zero in un punto  $x = a$  e che  $Q$  sia analitica in un intervallo  $b_1 \leq a \leq b_2$ . Supponiamo di saper risolvere il problema con  $Q = 0$ , cioè di conoscere le due soluzioni linearmente indipendenti  $Y_1$  e  $Y_2$  dell'equazione

$$y'' + \lambda^2 P(x)y = 0 \quad (11.264)$$

allora la soluzione asintotica della (11.263) è data dalla soluzione dell'equazione "semplificata" (11.264) e l'approssimazione è uniforme in  $x$ , cioè per ogni  $x$  nell'intervallo considerato

$$y = Y + o(1/\lambda) \quad Y = C_1 Y_1 + C_2 Y_2$$

le costanti  $C_1, C_2$  dipendono logicamente dalle condizioni al contorno o dalle condizioni iniziali del problema (11.263).

Diamo un'idea della dimostrazione, che è molto simile alla usuale procedura perturbativa. Costruiamo una soluzione  $K(x, t)$  della (11.264) che soddisfi alle condizioni iniziali:

$$K(x, x) = 0 \quad \left. \frac{\partial}{\partial x} K(x, t) \right|_{x=t} = -1 \quad (11.265)$$

è quello che in fisica (e in matematica) si chiama una funzione di Green. ricordiamo che date due soluzioni linearmente indipendenti di un'equazione del secondo ordine del tipo (11.264) il loro wronskiano è costante:

$$W(x) = Y_1'(x)Y_2(x) - Y_1(x)Y_2'(x)$$

come si verifica immediatamente effettuando le derivate. Scegliamo allora la normalizzazione delle funzioni in modo che  $W = -1$ . La funzione di Green è semplicemente

$$K(x, t) = Y_1(x)Y_2(t) - Y_1(t)Y_2(x) \quad \partial_x^2 K + \lambda^2 P(x)K = 0 \quad (11.266)$$

Tramite la funzione di Green  $K(x, t)$  si può trasformare l'equazione differenziale (11.263) in un'equazione integrale:

$$y(x) = Y + \int dx K(x, t) Q(t) y(t) \quad (11.267)$$

Usando la (11.265) ed effettuando le derivate si verifica che in effetti  $y$  soddisfa formalmente all'equazione (11.263).

L'equazione integrale di Volterra (11.267) può essere risolta per iterazione e, sotto le proprietà di analiticità suddette, si può vedere che il kernel di questa equazione,  $K(x, t)Q(t)$  è limitato e l'iterazione fornisce una correzione uniformemente limitata a  $Y$ , e tendente a zero, per  $\lambda \rightarrow \infty$ .

Si tratta ora di trovare una "funzione di confronto" per l'equazione differenziale

$$\psi'' + F(x)\psi = 0 \quad (11.268)$$

abbiamo incluso il parametro  $\lambda$  nella definizione di  $F$ . Se  $F$  ha uno zero, come stiamo supponendo, è naturale provare a ridurci ad una equazione del tipo

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

cioè all'equazione che definisce le funzioni di Airy. Questa fra l'altro è la forma limite della (11.268) se si sviluppa attorno allo zero di  $F$ .

In generale supponiamo di volerci ridurre a

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi(z) + \Gamma(z) \phi(z) = 0 \quad (11.269)$$

La (11.269) sarebbe equivalente alla (11.268) se si potesse ottenere da quest'ultima per un puro cambiamento di variabili:

$$\psi(x) = f(x)\phi(z(x)) \quad (11.270)$$

proviamo quindi a vedere se effettivamente è possibile, cambiando variabili, connettere le due equazioni. Sostituendo la (11.270) nella (11.268) e usando la (11.269) si ottiene

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \phi + F f \phi - f \left( \frac{dz}{dx} \right)^2 \Gamma \phi + \frac{d\phi}{dz} \left( 2 \frac{df}{dx} \frac{dz}{dx} + f \frac{d^2 z}{dx^2} \right) = 0 \quad (11.271)$$

Possiamo fissare  $f(x)$  ponendo

$$f(x) = \left( \frac{dz}{dx} \right)^{-1/2} \quad (11.272)$$

In questo modo l'ultimo termine nella (11.272) si annulla. col che la trasformazione di variabili cercata  $z(x)$  deve soddisfare a

$$F(x) = \left( \frac{dz}{dx} \right)^2 \Gamma - \left( \frac{dz}{dx} \right)^{1/2} \frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{dz}{dx} \right)^{-1/2} \quad (11.273)$$

Se risolvessimo esattamente questa equazione le due equazioni (11.268) e (11.269) sarebbero equivalenti. Se in questa equazione trascuriamo il secondo termine avremo una approssimazione dell'equazione di partenza ed il termine trascurato induce una correzione alla (11.268) che è equivalente al termine in  $Q$  nel teorema del confronto. Il grado di approssimazione è misurato perciò dalla disuguaglianza

$$\epsilon = \left( \frac{dz}{dx} \right)^{1/2} \frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{dz}{dx} \right)^{-1/2} \ll 1 \quad (11.274)$$

Tenendo solo il primo termine della (11.273) si ha, per la (11.272)

$$\left( \frac{dz}{dx} \right)^2 = \frac{F}{\Gamma} \quad (11.275)$$

$$\psi(x) \simeq \left( \frac{\Gamma(z(x))}{F(x)} \right)^{1/4} \phi(z(x)) \quad (11.276)$$

Tutto ciò che abbiamo fatto finora è indipendente dalla scelta della funzione di confronto  $\Gamma$ , a seconda della sua scelta l'approssimazione sarà buona o meno e in particolare in caso di violazione della disuguaglianza (11.274) possono presentarsi delle singolarità per il termine  $Q(x)$  nella (11.263) che rendono poco efficace il teorema del confronto. Facciamo un paio di casi.

$$\Gamma = 1$$

Consideriamo l'equazione di Schrödinger

$$\psi'' + \frac{p^2}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (11.277)$$

sia  $a$  uno zero di  $p^2$  e consideriamo la zona in cui  $p^2 > 0$ , ad esempio supponiamo questa corrisponda a  $x > a$ . Dalle equazioni precedenti si ricava

$$\phi(z) = e^{\pm iz} \quad [ \text{dalla (11.269)}] \quad (11.278)$$

$$z' = p(x) \quad [ \text{dalla (11.275)}] \quad (11.279)$$

$$\psi \simeq \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\pm i \int_a^x p(\xi) d\xi} \quad [ \text{dalla (11.276)}] \quad (11.280)$$

questo è esattamente il modo in cui sono approssimate asintoticamente le soluzioni col metodo WKB, quindi abbiamo riottenuto il risultato noto. Supponiamo ora che  $p^2(x)$  abbia uno zero semplice, e per semplificare le formule supponiamo sia in 0, cioè:

$$p^2(x) = \alpha x + \beta x^2 + \dots$$

Si ha  $z' \sim x^{1/2}$  da cui, per la (11.274),

$$\epsilon \sim x^{-2}$$

vediamo quindi la presenza di una non analiticità attorno al punto di inversione, questo è il motivo per cui il teorema del confronto vale lontano dal punto di transizione ma viene a cadere attorno allo zero di  $p(x)$ . La zona in cui  $p^2 < 0$  può essere trattata con la funzione  $\Gamma = -1$ , ma si hanno, appunto, due approssimazioni distinte dalle due parti dello zero, l'approssimazione non è uniforme in  $x$  e da questo fatto derivano i problemi sul raccordo degli sviluppi asintotici dalle due parti dello zero.

### $\Gamma$ lineare.

In presenza di uno zero semplice, come già detto, è naturale riferirsi ad un'equazione tipo

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi(z) - z \phi(z) = 0 \quad \Gamma(z) = -z \quad (11.281)$$

Si trova, sempre usando le equazioni precedenti:

$$\phi(z) = C_1 \text{Ai}(z) + C_2 \text{Bi}(z) \quad \text{dalla (11.269) e dalla def. di Ai, Bi} \quad (11.282a)$$

$$(z')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2 z} \Rightarrow \frac{2}{3} z^{3/2} = \int_a^x \frac{1}{\hbar} \sqrt{-p^2} \equiv \tilde{w} \quad \text{dalla (11.275)} \quad (11.282b)$$

$$\psi(x) \simeq \left[ \frac{z(x)}{p^2(x)} \right]^{1/4} (\alpha \text{Ai}(z) + \beta \text{Bi}(z)) \quad (11.282c)$$

Il punto cruciale ora è che se  $p^2$  ha uno zero semplice, si ha, dalle (11.282),  $z \sim (x - a) = \mathcal{O}((x - a)^2)$ , e, sostituendo nella (11.274),  $\epsilon \rightarrow \text{const.}$ , quindi l'approssimazione è *uniforme*.

L'errore  $\epsilon$  dato dalla (11.274) chiaramente diverge in presenza di un secondo zero  $x = b$ . Quindi la zona in cui l'approssimazione (11.282) è valida è limitata dagli zeri *diversi* da  $x = a$  e dagli eventuali punti singolari di  $p(x)$ . Se ad esempio abbiamo due zeri,  $a, b$ , e sono abbastanza distanti fra loro è chiaro che basterà usare due approssimazioni lineari distinte, una attorno a  $x = a$  e l'altra attorno a  $x = b$  e connettere le due espressioni, quindi non ci sono particolari problemi. Se i due zeri sono vicini l'approssimazione sarà cattiva, in effetti nel caso di zeri coincidenti, ad esempio  $p^2(x) \sim x^2$  si ha  $z \sim x^{4/3}$  e ritroviamo  $\epsilon \sim x^{-2}$ . In questo caso, o per zeri molto vicini, converrà prendere logicamente come funzione di confronto una funzione quadratica, del tipo  $\Gamma = k - z^2$ . Rimandiamo alla letteratura per la trattazione di questo caso.

Per riportare le formule nella notazione usuale ricordiamo che nella zona classicamente proibita, supposta a destra del punto di inversione,  $w = e^{-i\frac{3}{2}\pi} |w|$ , vedi eq.(11.232a), quindi la relazione (11.282) si legge

$$\frac{2}{3} z^{3/2} = e^{i\frac{3}{2}\pi} w \quad z = e^{i\pi} \left( \frac{3}{2} w \right)^{2/3}$$

In pratica si può scrivere

$$\text{zona perm. : } z = - \left( \frac{3}{2} |w| \right)^{2/3} \quad \text{zona proib. : } z = \left( \frac{3}{2} |w| \right)^{2/3} \quad (11.283)$$

Ricordando ora l'espressione asintotica delle funzioni di Airy è immediato confrontare lo sviluppo asintotico a sinistra e a destra di uno zero. Dalle (11.282) è facile ricavare

$$\frac{\cos(|w| - \frac{\pi}{4} + \mu)}{|p(x)|^{1/2}} \leftarrow \cos \mu \text{Ai}(z) + \sin \mu \text{Bi}(z) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{\cos \mu e^{-|w|}}{|p(x)|^{1/2}} + \frac{\sin \mu e^{+|w|}}{|p(x)|^{1/2}} \quad (11.284)$$

che è la formula fondamentale per la connessione degli sviluppi asintotici. Per  $\mu = 0$  si riottiene quanto già noto, cioè che una fase di  $-\pi/4$  nella zona oscillante corrisponde ad un esponenziale decrescente nella zona classicamente proibita.

È utile mostrare la differenza fra l'approssimazione uniforme illustrata in questo paragrafo e l'approssimazione WKB in un caso concreto. Consideriamo l'oscillatore armonico. Per gli stati legati manca la parte Bi nella funzione d'onda (11.282). Per calcolare la variabile  $z$  ricordiamo che, vedi paragrafo 11.4.4

$$w(a, x) = \frac{E}{\hbar\omega} \left( \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) + \frac{x}{a} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} - \frac{\pi}{2} \right)$$

$$\tilde{w}(a, x) = \frac{E}{\hbar\omega} \left( \frac{x}{a} \sqrt{\frac{x^2}{a^2} - 1} - \text{argcosh}\left(\frac{x}{a}\right) \right)$$

Inserendo queste espressioni nelle (11.283) possiamo calcolare la funzione d'onda approssimata. La normalizzazione è effettuata numericamente. Il confronto fra la funzione d'onda esatta, quella data dalla (11.282) e l'approssimazione WKB è riportato in figura 11.21 per lo stato fondamentale e per il livello  $n = 10$ . Come si vede l'approssimazione uniforme è praticamente indistinguibile dalla soluzione esatta, anche nel caso dello stato fondamentale. Naturalmente le patologie nella zona dei punti di inversione sono sparite.

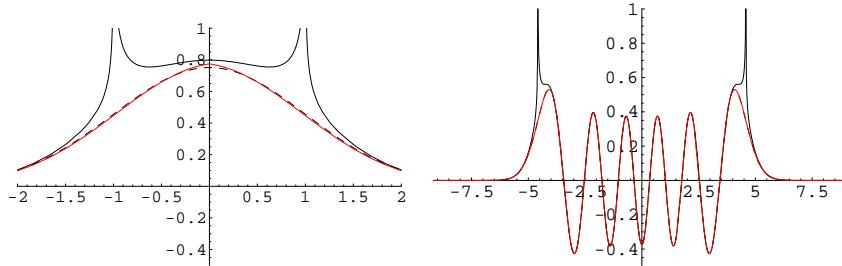


Figura 11.21: Sovrapposizione della funzione d'onda (11.282) alla funzione d'onda esatta (linea tratteggiata) e approssimazione WKB (linea continua).

## 11.H Scaling complesso e autovalori. \*

## 11.I Approssimazione di Langer. \*

## 11.J Quantizzazione EKB \*

## 11.K Il propagatore: approssimazione di Van Vleck \*

## 11.L Propagatore e densità degli stati. \*

## 11.M Considerazioni sui sistemi non integrabili \*



# Bibliografia

- [AbSt] M.Abramowitz, I.A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, 1965.
- [BerMou72] M.V. Berry, K.E. Mount: *Reps. Prog. Phys* **35**, 315, (1972).
- [Ein17b] A. Einstein: *Verh. d. Deutsch. Phys. Ges.* **19**, 82, (1917).
- [Erd] A. Erdély: *Asymptotic Expansions*, 1956, Dover.
- [Fermi] E.Fermi: *Nuclear Physics*, Un. Chicago Press, 1950.
- [FrFr65] N.Fröman, P.O. Fröman: *JWKB approximation, Contributions to the theory.*, Ed. North-Holland, (1965).
- [FrFr95] N.Fröman, P.O. Fröman: *Phase-Integral Method*. Ed. Springer, (1995).
- [GrRy] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik: *Table of Integrals Series and Products*, Academic Press, 1965.
- [Kel] J.R. Keller: *Ann. of Phys.* **4**, 180, (1958).
- [Landau1] L.D. Landau, E.M. Lifšits: *Meccanica*, Corso di Fisica Teorica, Vol.1, Ed. Riuniti.
- [Landau2] L.D. Landau, E.M. Lifšits: *Teoria dei Campi*, Corso di Fisica Teorica, Vol.2, Ed. Riuniti.
- [Landau3] L.D. Landau, E.M. Lifšits: *Meccanica Quantistica*, Corso di Fisica Teorica, Vol.3, Ed. Riuniti.
- [Tric] F.G. Tricomi: *Equazioni Differenziali*, 1967, Boringhieri.