

ANEXA 1

A 1.1. Soluțiile WKB unidimensionale

Pentru a determina soluțiile staționare ale ecuației Schrödinger independente de timp prin *metoda WKB* se consideră o funcție de undă $y(x)$ care satisface ecuația:

$$y'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] y = 0. \quad (\text{A } 1.1)$$

Notând

$$y = e^{iw/\hbar}, \text{ cu } w = S + \frac{\hbar}{i} \ln A \quad (\text{A } 1.2)$$

(unde S și A sunt funcții pare de $\hbar$), se obține sistemul de ecuații echivalente

$$S'^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{A''}{A} \quad (\text{A } 1.3)$$

$$2A'S' + AS'' = 0. \quad (\text{A } 1.4)$$

Relația (A 1.4) reprezintă ecuația de continuitate și prin integrarea acesteia rezultă:

$$A = \text{const} \cdot (S')^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{A } 1.5)$$

Înlocuind expresia A în ecuația (A 1.3), se obține ecuația:

$$S'^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \left[\frac{3}{4} \left(\frac{S''}{S'} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S'''}{S'} \right]. \quad (\text{A } 1.6)$$

Relația (A 1.6) reprezintă o ecuație diferențială de ordinul al treilea în S și este riguros echivalentă cu ecuația Schrödinger de la care am plecat.

Aproximația WKB constă în a dezvolta pe S în serie după puterile lui $\hbar^2$:

$$S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \dots, \quad (\text{A } 1.7)$$

apoi în a substitui această dezvoltare în ecuația (A 1.6) și a reține numai termenii de ordinul zero:

$$S'^2 \approx S_0'^2 = 2m[E - V(x)]. \quad (\text{A } 1.8)$$

Această ecuație aproximativă poate fi ușor integrată.

După cum $E > V(x)$, sau $E < V(x)$, în ecuația (A 1.8) se pot distinge două cazuri.

Cazul 1: $E > V(x)$. Definind lungimea de undă cu ajutorul relației:

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}. \quad (\text{A } 1.9)$$

rezultă că ecuația (A 1.10) este satisfăcută numai dacă $S' \approx \pm \hbar / \lambda$. În acest caz soluția WKB este o combinație liniară de funcții oscilante de forma:

$$y(x) = \alpha \sqrt{\lambda} \cos\left(\int_x \frac{dx}{\lambda} + \varphi\right), \quad (\text{A } 1.10)$$

în care: α și φ sunt două constante arbitrare.

Cazul 2: $E < V(x)$. În acest caz

$$l(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}, \quad (\text{A } 1.11)$$

iar ecuația (A 1.8) este satisfăcută dacă $S' \approx \pm \hbar / \lambda$. Soluția WKB este o combinație liniară de exponențiale reale,

$$y(x) = \sqrt{l} \left[\gamma \exp\left(\int_x \frac{dx}{l}\right) + \delta \exp\left(-\int_x \frac{dx}{l}\right) \right]. \quad (\text{A } 1.12)$$

A 1.2. Condițiile de valabilitate a aproximației WKB

Teoria aproximației WKB este destul de complexă. În cazul general dezvoltarea (A 1.7) după puterile lui $\hbar^2$ nu este convergentă, aceasta fiind o dezvoltare asimptotică care, întreruptă după un număr finit de termeni, dă posibilitatea evaluării lui S cu o aproximație bună dacă $\hbar$ este destul de mic.

Pentru a găsi un criteriu de valabilitate a aproximației WKB, putem calcula cel de al doilea termen de dezvoltării (A 1.7), $\hbar^2 S_1$. Corecția de ordinul $\hbar^2$ constă în a înmulți soluția WKB prin factorul $e^{i\hbar S_1}$. Efectul este neglijabil dacă $\hbar S_1 \ll 1$.

Înlocuind dezvoltarea (A 1.7) în ecuația (A 1.6) și egalând între ei termenii în $\hbar^2$, se obține pentru S_1 ecuația diferențială

$$2S_0' S_1' = \frac{\left[\left(S_0' \right)^{-\frac{1}{2}} \right]''}{\left(S_0' \right)^{-\frac{1}{2}}} \equiv \frac{3}{4} \left(\frac{S_0''}{S_0'} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S_0'''}{S_0'}. \quad (\text{A } 1.13)$$

În cazul când $E > V(x)$ rezultă $S_0' = \pm \hbar / \lambda$. După efectuarea calculelor se obține:

$$\hbar S_1' = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\lambda} (\sqrt{\lambda})' = \pm \left(\frac{1}{4} \lambda'' - \frac{1}{8} \frac{\lambda'^2}{\lambda} \right), \quad (\text{A } 1.14)$$

iar în final

$$\hbar S_1 = \pm \left(\frac{1}{4} \lambda' - \frac{1}{8} \int_x \frac{\lambda'^2}{\lambda} dx \right). \quad (\text{A } 1.15)$$

Dacă $E < V(x)$ se obține o expresie identică, cu $l(x)$ în loc de $\lambda(x)$.

Condiția $\hbar S_1 \ll 1$ este îndeplinită dacă

$$\begin{aligned} \lambda'(x) &\ll 1 \text{ când } E > V(x) \\ l'(x) &\ll 1 \text{ când } E < V(x). \end{aligned} \quad (\text{A } 1.16)$$

Criteriul (A 1.16) poate fi comparat cu condiția de valabilitate a aproximației clasice în general. Acest criteriu mai poate fi exprimat și prin inegalitatea următoare, în care intervin potențialul $V(x)$ și prima sa derivată:

$$\frac{|m\hbar V'|}{|2m(E - V)|^2} \ll 1. \quad (\text{A } 1.17)$$

A 1.3. Puncte de întoarcere și formule de racordare

În cele mai multe dintre cazurile în care se folosește aproximația WKB, condiția (A 1.17) este îndeplinită peste tot în afară de vecinătatea punctelor

$$E = V(x). \quad (\text{A } 1.18)$$

Acestea sunt punctele de întoarcere ale mișcării clasice, puncte în care viteza particulei se anulează și își schimbă semnul.

Din punct de vedere matematic, aproximația WKB constă în a înlocui ecuația Schrödinger

$$y'' + \frac{y}{\lambda^2} = 0 \quad (\text{A } 1.19)$$

prin ecuația

$$y'' + \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{(\sqrt{\lambda})''}{\sqrt{\lambda}} \right) y = 0, \quad (\text{A } 1.20)$$

atât în regiunea $E > V$, cât și în regiunea $E < V(x)$, regiune în care $\lambda = i l$. Se verifică ușor, într-adevăr că expresiile (A 1.15) și (A 1.17) sunt tocmai cele ale soluțiilor generale ale ecuației (A 1.20). Această ecuație are un punct singular (o singularitate de tip $(x-a)^{-2}$) în orice punct a în care lungimea de undă devine infinită, adică în fiecare din punctele de întoarcere. În vecinătatea acestor puncte, înlocuirea ecuației Schrödinger cu ecuația (A 1.20) nu este justificată. Pentru a obține soluția completă, trebuie ca ecuația Schrödinger să fie rezolvată într-un domeniu de întindere convenabilă din jurul punctului de întoarcere și să fie racordată această soluție cu soluțiile (A 1.15) sau (A 1.17) care reprezintă bine funcția de undă în domeniile vecine, în care aproximația WKB este valabilă.

În practică, nu este prea important să se cunoască forma particulară a soluției în regiunea punctului de întoarcere, atâta vreme cât se știe să se racordeze soluțiile WKB de o parte și de alta a acestui punct.

Pentru a obține formulele de racordare dintre soluția WKB exponențială și soluția WKB oscilatorie, de o parte și de alta a unui punct de întoarcere, se presupune că $E > V(x)$ sau $E < V(x)$ după cum $x > a$ sau $x < a$ (barieră la stânga).

Soluția generală este o combinație liniară a două soluții y_1 și y_2 , ale căror forme asimptotice sunt:

- a) pentru $x \ll a$;

$$y_1 \approx \sqrt{l} \exp\left(+\int_a^x \frac{dx}{l}\right), y_2 \approx \frac{\sqrt{l}}{2} \exp\left(-\int_a^x \frac{dx}{l}\right) \quad (\text{A } 1.21)$$

- b) pentru $x \gg a$;

$$y_1 \approx -\frac{1}{\lambda^2} \sin\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right), y_2 \approx \frac{1}{\lambda^2} \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (\text{A } 1.22)$$

Definind numărul de lungimi de undă conținute într-un interval dat (x_1, x_2)

prin integrala $(1/2\pi) \int_{x_1}^{x_2} (dx/\lambda)$ sau $(1/2\pi) \int_{x_1}^{x_2} (dx/l)$, după cum ne aflăm la

dreapta sau la stânga punctului de întoarcere condițiile de valabilitate a acestor formule de racordare sunt următoarele:

- a) în punctul de întoarcere, energia cinetică $E - V$ tinde către zero ca $(x - a)$ și rămâne, cu o aproximație, proporțională cu $(x - a)$ într-o regiune care se întinde peste cel puțin una, dar de preferință peste mai multe lungimi de undă, de o parte și de alta;

- b) fiecare dintre aceste regiuni de întoarcere se racordează de o parte și de alta a punctului său de întoarcere cu o regiune asimptotică care se întinde pe mai multe lungimi de undă și în care aproximația WKB propriu-zisă este justificată.

În cazul folosirii formulelor (A 1.21) și (A 1.22) trebuie luate anumite precauții. Dificultățile provin din faptul că soluția $Ay_{1+} + By_2$ are, în afara cazului particular când $A = 0$, o aceeași formă asimptotică ca Ay_1 în regiunea $x \ll a$; termenul exponențial crescător Ay_1 predomină întotdeauna față de termenul exponențial descrescător By_2 , oricât de mic ar fi A față de B , atâta vreme cât A nu este riguros nul. Prin urmare, cunoașterea formei asimptotice nu este suficientă pentru determinarea soluției decât dacă această formă este de tipul exponențial descrescător (tipul y_2); reciproc, dacă coeficienții A sau B nu sunt cunoscuți decât aproximativ și dacă $|A| \ll |B|$, orice determinare, chiar și aproximativă, a formei asimptotice este imposibilă.

Presupunând că soluția WKB în regiunea asimptotică ($x \ll a$) este cunoscută, soluția WKB oscilatorie cu care aceasta se racordează este de tipul exponențial descrescător $\frac{1}{2}Bl^{\frac{1}{2}}\left(-\int_x^a (dx/l)\right)$; în acest caz, soluția este de forma

By_2 în regiunea punctului de întoarcere și comportarea sa în regiunea $x \gg a$ este dată formula (A 1.22). Rezultatul se poate scrie

$$\frac{1}{2}\sqrt{l}\exp\left(-\int_a^x \frac{dx}{l}\right) \rightarrow \sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{A } 1.23)$$

săgeata indicând sensul în care se face racordarea.

Pe de altă parte, presupunând că soluția WKB în regiunea oscilatorie ($x \gg a$) este cea cunoscută aceasta este de forma (A 1.10), adică:

$$C\sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right) \quad (\text{A } 1.24)$$

în care: C și φ sunt constante complexe. Conform formulelor (A 1.21) și (A 1.22), aceasta este forma asimptotică a soluției definite prin

$$A \approx C \sin \varphi, B \approx C \cos \varphi. \quad (\text{A } 1.25)$$

Constantele A și B nu sunt definite decât aproximativ, prin forma asimptotică amintită. Din această cauză, dacă $|\operatorname{tg} \varphi| \ll 1$, determinarea formei asimptotice a acestei soluții în regiunea $x \ll a$ este imposibilă; în caz contrar, aceasta este dată de formula (A 1.21). Rezultatul se poate scrie sub forma:

$$\sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right) \rightarrow \sin \varphi \sqrt{l}\exp\left(\int_a^x \frac{dx}{l}\right), \quad (\text{A } 1.26)$$

săgeata indicând sensul în care se face racordarea.