WKB 近似

1 次元での時間独立なシュレーディンガー方程式の近似解を求める方法である WKB 近似を見ていきます。

　時間独立なポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ を含むシュレーディンガー方程式

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

を近似的な式に変更します。まず、解の形を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = A(\boldsymbol{r})e^{iS(\boldsymbol{r})/\hbar}$$

と仮定します。$\nabla^2\psi$ は

$$\begin{aligned}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) &= \nabla\cdot(e^{iS(\boldsymbol{r})/\hbar}\nabla A(\boldsymbol{r}) + \frac{i}{\hbar}A(\boldsymbol{r})e^{iS(\boldsymbol{r})/\hbar}\nabla S(\boldsymbol{r})) \\ &= e^{iS/\hbar}(\nabla^2 A + \frac{i}{\hbar}\nabla S\cdot\nabla A + \frac{i}{\hbar}\nabla A\cdot\nabla S - \frac{1}{\hbar^2}A\nabla S\cdot\nabla S + \frac{i}{\hbar}A\nabla^2 S)\end{aligned}$$

なので、シュレーディンガー方程式は

$$\hbar^2\nabla^2 A - A\nabla S\cdot\nabla S + i\hbar(2\nabla S\cdot\nabla A + A\nabla^2 S) = -2m(E-V)A(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

実部と虚部に分ければ

$$\hbar^2\nabla^2 A - A\nabla S\cdot\nabla S = -2m(E-V)A(\boldsymbol{r})\ ,\ 2\nabla S\cdot\nabla A + A\nabla^2 S = 0 \tag{2}$$

となります。
　これらは別の見方ができます。解の形を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{iw(\boldsymbol{r})/\hbar}$$

とし

$$w = w_0 + \hbar w_1 + \hbar^2 w_2 + \cdots$$

と展開したとします。そうすると

$$\psi(\boldsymbol{r}) = A(\boldsymbol{r})e^{iS(\boldsymbol{r})/\hbar} = \exp[\frac{i}{\hbar}(S + \hbar S_1)] \quad (A(\boldsymbol{r}) = e^{iS_1})$$

と書き換えたとき、$\hbar$ を係数にして展開した形の 1 次までに見えます。この見方に従うなら、(2) での $\hbar^2$ の項は無視することになり

$$(\nabla S)^2 = 2m(E - V) \tag{3a}$$

$$2\nabla S \cdot \nabla A + A\nabla^2 S = 0 \tag{3b}$$

このように $\hbar$ の 1 次までを考え（下の補足参照)、1 次元に適用したものを WKB(Wentzel-Kramers-Brillouin) 近似と呼びます。「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」の補足で触れたように、$\hbar$ が 0 のときのシュレーディンガー方程式はハミルトン・ヤコビ方程式の形と一致します。なので、$\hbar$ の 0 次の項である S は古典的な作用に対応し、それに $\hbar$ の 1 次の項を加える近似です。

ここからは 1 次元として WKB 近似での波動関数を求めていきます。$E > V$ とすれば、(3a) は

$$\begin{aligned}
\frac{dS(x)}{dx} &= \pm\sqrt{2m(E - V(x))} \\
S(x) &= \pm\int dx\sqrt{2m(E - V(x))} + c_1 \\
&= \pm\int dx\ F(x) + c_1
\end{aligned}$$

c_1 は定数、$F(x)$ は実数です。積分範囲を x_0 から x とすれば

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x} dx' \frac{dS(x')}{dx'} &= \pm\int_{x_0}^{x} dx'\ F(x') \\
S(x) &= \pm\int_{x_0}^{x} dx'\ F(x') + S(x_0)
\end{aligned}$$

となります。(3b) に (3a) を使うと

$$\begin{aligned}
0 &= 2\frac{dS}{dx}\frac{dA}{dx} + A\frac{d^2S}{dx^2} \\
&= \pm 2F(x)\frac{dA}{dx} \pm 2A\frac{d}{dx}F(x) \\
&= 2\frac{1}{A}\frac{dA}{dx} + \frac{1}{F}\frac{dF}{dx} \\
&= \frac{d}{dx}(2\log A + \log F) \\
\log[A^2F] &= c_2 \\
A^2 &= \frac{e^{c_2}}{F} \\
A(x) &= \frac{c_2}{\sqrt{F(x)}}
\end{aligned}$$

c_2 は定数です。よって、$E > V$ での波動関数は C を定数として

$$\psi_w(x) \simeq \frac{C}{\sqrt{F(x)}}\exp[\pm\frac{i}{\hbar}\int dx\ F(x)]$$

と求まります。

古典的なエネルギーは、運動量を p として

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

なので、$F(x)$ は運動量 $p(x)$ です。このため x から $x + dx$ の間に粒子が見つかる確率は

$$|\psi_w(x)|^2 = \frac{C^2}{p(x)}$$

として、古典的な運動量 (速度) の逆に比例します。これは古典論に $\hbar$ の 1 次の寄与だけを加えたことから予想できる結果で、早く動いていればその場所に粒子がいる確率は減っていくという古典的な感覚そのものです。

一般解は、係数を定数 $C_\pm$ として $\pm$ の両方を足して

$$\psi_w(x) \simeq \frac{C_+}{\sqrt{F(x)}}\exp[\frac{i}{\hbar}\int dx\ F(x)] + \frac{C_-}{\sqrt{F(x)}}\exp[-\frac{i}{\hbar}\int dx\ F(x)] \tag{4}$$

これは任意定数に三角関数を使えば (a_1, a_2 は複素数、b, α は実数)

$$\begin{aligned}
a_1e^{i\theta} + a_2e^{-i\theta} &= a_1(\cos\theta + i\sin\theta) + a_2(\cos\theta - i\sin\theta)\\
&= (a_1 + a_2)\cos\theta + i(a_1 - a_2)\sin\theta\\
&= b\sin\alpha\cos\theta + b\cos\alpha\sin\theta\\
&= b\sin(\theta + \alpha)
\end{aligned}$$

から

$$\psi_w(x) = C_2\sin(\frac{1}{\hbar}\int dx\ F(x) + \alpha) \tag{5}$$

と書けます。C_2, α は定数です。

$E < V$ では $F(x)$ が虚数になるために古典的には不可能な領域で、$E = V$ となる x は古典的な転回点 (classical turning point) と呼ばれます。WKB 近似は分母に $F(x)$ が出てくるために、転回点で破綻しています。$E < V$ での $F(x)$ は

$$F(x) = \pm\sqrt{2m(E - V)} = \pm i\sqrt{2m|E - V|} = \pm i|F(x)| \quad (E < V)$$

これによって $S(x)$ は

$$
\begin{aligned}
\frac{dS}{dx} =&\ \pm i|F(x)| \\
S(x) =&\ \pm t\int dx'|F(x')| + c_1'
\end{aligned}
$$

$A(x)$ は

$$
\begin{aligned}
0 &= 2\frac{dS}{dx}\frac{dA}{dx} + A\frac{d^2S}{dx^2} \\
&=\ \pm 2i|F|\frac{dA}{dx} \pm 2iA\frac{d}{dx}|F| \\
&= 2\frac{1}{A}\frac{dA}{dx} + \frac{1}{|F|}\frac{d|F|}{dx} \\
A(x) =&\ \frac{c_2'}{\sqrt{|F|}}
\end{aligned}
$$

よって、$E < V$ での波動関数は $C'_\pm$ を定数として

$$
\psi_w(x) \simeq \frac{C'_-}{\sqrt{|F(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int dx\ |F(x)|] + \frac{C'_+}{\sqrt{|F(x)|}}\exp[\frac{1}{\hbar}\int dx\ |F(x)|] \tag{6}
$$

となります。(4),(6) が WKB 近似での結果です。しかし、転回点で破綻しているので、それをどうにかします。

ポテンシャル $V(x)$ の形として、U 字型を仮定します。このとき、$E = V$ となる地点が 2 個あるとし、それらを x_1, x_2 $(x_1 < x_2)$ として、$E > V$ は x_1 と x_2 の間 $(x_1 < x < x_2)$、$E < V$ は x_1, x_2 の外側 $(x < x_1, x > x_2)$ とします。U 字型としていますが、転回点 x_1, x_2 での V の傾きが正負で区別できる形であればいいです (傾きが正だけ、負だけのポテンシャルとして別々に求めても同じ)。

x_1 と x_2 の間 $(E > V)$ での WKB 近似での一般解は (5)、$x < x_1, x > x_2$ $(E < V)$ では (6) です。波動関数は $\pm\infty$ で消える必要があるので、$x \to \pm\infty$ が取れる $E < V$ では指数関数部分が減少する項だけを残すことにして

$$
\begin{aligned}
\psi_1(x) &\simeq \frac{C_1}{\sqrt{|F(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int dx|F(x)|] \quad (x < x_1) \\
\psi_2(x) &\simeq C_2\sin(\frac{1}{\hbar}\int dx\ F(x) + \alpha) \quad (x_1 < x < x_2) \\
\psi_3(x) &\simeq \frac{C_3}{\sqrt{|F(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int dx|F(x)|] \quad (x_2 < x)
\end{aligned}
$$

C_1, C_2, C_3 は定数です。$x = x_1, x_2$ での問題を解決させるために、別の情報を使って x_1, x_2 で接続させます。

というわけで、シュレーディンガー方程式に戻り、$x = x_1, x_2$ 付近での近似解を求めます。$x = x_2$ を含む解から求めます。$x = x_2$ でポテンシャルを展開し、1 次までを残せば

$$
V(x) = V(x_2) + \frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_2}(x - x_2) + \cdots \simeq E + V'(x_2)(x - x_2) \quad (V'(x_2) = \frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_2})
$$

このように $V(x)$ は x による 1 次関数となり、U 字型で $x_1 < x_2$ としているので $V'(x_2) > 0$ です。これをシュレーディンガー方程式に入れると

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V'(x_2)(x - x_2))\psi(x) = 0$$

ここで

$$g_2 = (\frac{2m}{\hbar^2}V'(x_2))^{1/3}\ ,\ z = g_2(x - x_2)$$

とすれば

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = g_2^3(x - x_2)\psi$$
$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = z\psi \qquad (\frac{d}{dx} = \frac{dz}{dx}\frac{d}{dz} = g_2\frac{d}{dz})$$

これはエアリー (Airy) 方程式と呼ばれ、その解 ψ はエアリー関数と呼ばれます。エアリー関数 $\mathrm{Ai}(z),\ \mathrm{Bi}(z)$ は

$$\mathrm{Ai}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty ds\ \cos(\frac{s^3}{3} + zs)$$
$$\mathrm{Bi}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty ds\ (\exp[-\frac{s^3}{3} + zs] + \sin(\frac{s^3}{3} + zs))$$

と与えられており、エアリー方程式の一般解は a_1, a_2 を定数として

$$\psi(z) = a_1\mathrm{Ai}(z) + a_2\mathrm{Bi}(z)$$

となります (2 階微分方程式なので、一般解は 2 つの線形独立な解の重ね合わせ)。これが $x = x_2$ 付近での近似解です。さらに、$z \gg 0$ での漸近形

$$\mathrm{Ai}(z) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}\exp[-\frac{2}{3}z^{3/2}]$$
$$\mathrm{Bi}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}\exp[\frac{2}{3}z^{3/2}]$$

$z \ll 0$ での漸近形

$$\mathrm{Ai}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\sin[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}]$$
$$\mathrm{Bi}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\cos[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}]$$

を使うことにします。また、三角関数の関係

$$\sin(z-\frac{\pi}{4}) = -\cos(z+\frac{\pi}{4})\ ,\ \sin(z+\frac{\pi}{4}) = \cos(z-\frac{\pi}{4})$$

から、$\sin, \cos, \pm\pi/4$ の現れ方がこことは異なっている場合もあります。

今は $z = g_2(x-x_2)$ $(g_2>0)$ なので、$z \gg 0$ は $x \gg x_2$、$z \ll 0$ は $x \ll x_2$ です。$z \simeq 0$ 付近なので漸近形は使えないように思えますが、ポテンシャルを 1 次関数として近似していることに対する近似形としては十分になっています。

x_2 付近の近似解が求まったので、WKB 近似に対応させます。$x<x_2$ での $F^2(x)$ は $x=x_2$ 周りで

$$F^2(x) = 2m(E-V(x)) \simeq -2mV'(x_2)(x-x_2) = -2m\frac{\hbar^2}{2m}g_2^3(x-x_2) = \hbar^2 g_2^2(-z)$$
$$\sqrt{F(x)} = \sqrt{\hbar g_2}(-z)^{1/4}$$

これの積分は、$x<x_2$ では $z<0$ なので

$$\begin{aligned}\int_x^{x_2} dx'\ F(x') = \hbar g_2\int_x^{x_2} dx'\sqrt{-z'} = \hbar\int_z^0 dz'\sqrt{-z'} \quad (z'=g_2(x'-x_2),\ dz'=gdx')\\ = -\hbar\int_{-z}^0 dz'\sqrt{z'} = \frac{2\hbar}{3}(-z)^{3/2}\end{aligned}$$

よって、$z = x-x_2 \ll 0$ として

$$\mathrm{Ai}(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\sin[\frac{2}{3}(-z)^{3/2}+\frac{\pi}{4}] = \sqrt{\frac{\hbar g_2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{F(x)}}\sin[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} dx'\ F(x')+\frac{\pi}{4}]$$

これは ψ_2 と同じ形です。これに対して、ψ_2 の領域は $x<x_2$ なので ψ_2 の不定積分は x から x_2 の積分にします。このとき、x が下限なので符号が反転しますが (4) では影響しないので、そのまま使います。そうすると、$a_2=0$ とし

$$\psi_2(x) = C_2\sin(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} dx'\ F(x')+\alpha)\ \Leftrightarrow\ \sqrt{\frac{\hbar g_2}{\pi}}\frac{a}{\sqrt{F(x)}}\sin[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} dx'\ F(x')+\frac{\pi}{4}]$$

と対応させることで

$$C_2 = \sqrt{\frac{\hbar g_2}{\pi}}\frac{a}{\sqrt{F(x)}}\ ,\ \alpha = \frac{\pi}{4}$$

となり、x_2 に接続されます。a_2 は出てこないので a_1 を a としてます。また、積分範囲を x_2 から x にするなら

$$\begin{aligned}\psi_2(x) = C_2\sin(-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^x dx'\ F(x')+\frac{\pi}{4}) = -C_2\sin(\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^x dx'\ F(x')-\frac{\pi}{4})\\ = C_2\cos(\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^x dx'\ F(x')+\frac{\pi}{4})\end{aligned}$$

となります。

　x_2 にいる ψ_3 も同様に扱います。$x > x_2$ では $E < V$ なので、$F(x)$ は

$$F(x) = \pm i\sqrt{2m|E-V|} = \pm i|F(x)|$$

$|F(x)|$ を $x = x_2$ 周りで展開して

$$|F(x)|^2 = 2m|E-V(x)| \simeq \hbar^2 g_2^3 |x - x_2| = \hbar^2 g_2^2 z$$

これを積分すれば

$$\int_{x_2}^{x} dx'\ |F(x')| = \hbar g_2 \int_{x_2}^{x} dx'\ z^{1/2} = \hbar \int_0^z dz'\ z'^{1/2} = \frac{2\hbar}{3} z^{3/2}$$

なので

$$\mathrm{Ai}(z) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp[-\frac{2}{3} z^{3/2}] = \sqrt{\frac{\hbar g_2}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt{|F(x)|}} \exp[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x} dx' |F(x')|]$$

これを ψ_3 に対応させて

$$\psi_3(x) = \frac{C_3}{\sqrt{|F(x)|}} \exp[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x} dx' |F(x')|]\ \Leftrightarrow \sqrt{\frac{\hbar g_2}{\pi}} \frac{a}{2\sqrt{|F(x)|}} \exp[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x} dx' |F(x')|]$$

よって

$$C_3 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar g_2}{\pi}} = \frac{1}{2} C_2$$

となります。このように定数を与えて転回点の両側の解を繋ぐことを (転回点付近の解を利用して繋ぐ)、接続公式 (connection formula) と呼びます。

　同じことを x_1 でも行います。$x = x_1$ 周りで展開すると

$$V(x) = V(x_1) + \frac{dV}{dx}|_{x=x_2}(x - x_1) + \cdots \simeq E + V'(x_1)(x - x_1) \quad (V'(x_1) = \frac{dV}{dx}|_{x=x_1})$$

U 字型なので $V'(x_1) < 0$ です。これによるシュレーディンガー方程式は

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V'(x_1)(x - x_1))\psi(x) = 0$$

そして

$$g_1 = (-\frac{2m}{\hbar^2} V'(x_1))^{1/3} = (\frac{2m}{\hbar^2}|V'(x_1)|)^{1/3}\ ,\ z = g_1(x_1 - x)$$

として

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=g_1^3(x_1-x)\psi$$

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

$F(x)$ は

$$F^2(x)\simeq-2mV'(x_1)(x-x_1)=2m\frac{\hbar^2}{2m}g_1^3(x-x_1)=\hbar^2g_1^2(-z)\quad(x>x_1)$$

$$|F(x)|^2\simeq-2mV'(x_1)|x-x_1|=2m\frac{\hbar^2}{2m}g_1^3|x-x_1|=\hbar^2g_1^2z\quad(x<x_1)$$

積分は $(z'=g_1(x_1-x'),\ dz'=-g_1dx')$

$$\int_{x_1}^{x}dx'\ F(x')=-\hbar\int_0^z dz'\sqrt{-z'}=\hbar\int_0^{-z}dz'\sqrt{z'}=\frac{2\hbar}{3}(-z)^{3/2}\quad(x>x_1)$$

$$\int_{x}^{x_1}dx'|F(x')|=-\hbar\int_z^0 dz'\sqrt{z'}=\frac{2\hbar}{3}z^{3/2}\quad(x<x_1)$$

というわけで、x_2 のときと同じで、$z\gg0$ は $x\ll x_1$、$z\ll0$ は $x\gg x_1$ なので

$$\psi_1(x)=\frac{C_1}{\sqrt{|F(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1}dx'|F(x')|]\ \Leftrightarrow\ \sqrt{\frac{\hbar g_1}{\pi}}\frac{a}{2\sqrt{|F(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1}dx'|F(x')|]$$

$$\psi_2(x)=C_2\sin(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}dx\ F(x)+\alpha)\ \Leftrightarrow\ \sqrt{\frac{\hbar g_1}{\pi}}\frac{a}{\sqrt{|F(x)|}}\sin[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}dx'|F(x')|+\frac{\pi}{4}]$$

よって

$$C_2=\sqrt{\frac{\hbar g_1}{\pi}}\frac{a}{\sqrt{F(x)}}\ ,\ \alpha=\frac{\pi}{4}\ ,\ C_1=\frac{a}{2}\sqrt{\frac{\hbar g}{\pi}}=\frac{1}{2}C$$

として、x_1 での定数が与えられます。

x_1,x_2 での ψ_2 の定数がそれぞれ求まり、ψ_2 は $E<V$ となる x_1 から x_2 の領域にいます。どちらの定数でも同じ領域の波動関数なので

$$\psi_2(x)=D_1(x)\sin(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}dx'\ F(x')+\frac{\pi}{4})=D_2(x)\sin(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2}dx'\ F(x')+\frac{\pi}{4})$$

となる必要があります。右辺を

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} dx'\ F(x') + \frac{\pi}{4} &= \frac{1}{\hbar}(\int_{x_1}^{x} dx' + \int_{x}^{x_2} dx' - \int_{x_1}^{x} dx')F(x') + \frac{\pi}{4} \\
&= \frac{1}{\hbar}(\int_{x_1}^{x_2} dx' - \int_{x_1}^{x} dx')F(x') + \frac{\pi}{4} \\
&= \beta(x_2, x_1) - \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} dx'F(x') + \frac{\pi}{4}
\end{aligned}
$$

と変形すれば

$$
D_1 \sin\theta = D_2 \sin(\beta - \theta + \frac{\pi}{2})
$$

$\sin((n+1)\pi - \theta) = (-1)^n \sin\theta\ (n = 0, 1, 2, \ldots)$ から

$$
\beta = (n + \frac{1}{2})\pi\ ,\ \frac{D_1}{D_2} = (-1)^n
$$

となり

$$
\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx'\ F(x') = (n + \frac{1}{2})\pi
$$

そして、$F(x)$ は古典的な運動量 $p(x)$ $(E < V)$ なので

$$
2\int_{x_1}^{x_2} dx'\ p(x') = 2\int_{x_1}^{x_2} dx'\sqrt{2m(E - V(x'))} = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})
$$

これはボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件に $\pi\hbar$ ($n = 0$ のときなので零点エネルギーと言える) が加わったものです。この制限によって、古典的な運動量から離散的なエネルギーが取り出されます。

最後に WKB 近似が有効な条件を求めます。WKB 近似は w の展開において

$$
|\frac{\hbar w_1}{w_0}| \ll 1
$$

であれば近似の精度がよくなります。w は

$$
-(\frac{dw}{dx})^2 + i\hbar\frac{d^2w}{dx^2} = -2m(E - V)
$$

第二項は第一項に比べて小さくなるべきなので

$$
|\frac{\hbar w''}{(w')^2}| = \hbar|\frac{d}{dx}\frac{1}{w'}| \ll 1 \quad (w' = \frac{dw}{dx})
$$

w' を w'_0 とすれば

$$\hbar|\frac{d}{dx}\frac{1}{w'}| \simeq \hbar|\frac{d}{dx}\frac{1}{w_0'}| \simeq \hbar|\frac{d}{dx}\frac{1}{F}| = |\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p}| = \frac{1}{2\pi}|\frac{d\lambda}{dx}|$$

$\lambda = 2\pi\hbar/p$ はド・ブロイ波長です。これから

$$\frac{1}{2\pi}|\frac{d\lambda}{dx}| \ll 1$$

よって、ド・ブロイ波長の変化が小さければ WKB 近似は有効になります。また、変形させると

$$|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{p}| = \frac{\lambda}{2\pi}\frac{1}{p}|\frac{dp}{dx}| \ll 1$$

と書けるので、運動量の変化が小さいなら有効とも言えます。

・補足

$w \simeq w_0 + \hbar w_1$ と展開したときに (3a),(3b) が出てくることを示します。1 次元として、w によるシュレーディンガー方程式は、(1) で $S = w,\ A = 1$ にすればいいので

$$-(\frac{dw}{dx})^2 + i\hbar\frac{d^2w}{dx^2} = -F^2(x) \quad (F^2(x) = 2m(E - V(x)))$$

第一項と第二項は

$$(\frac{dw}{dx})^2 \simeq (\frac{dw_0}{dx} + \hbar\frac{dw_1}{dx})^2 = (\frac{dw_0}{dx})^2 + 2\hbar\frac{dw_0}{dx}\frac{dw_1}{dx} + \hbar^2(\frac{dw_1}{dx})^2$$
$$i\hbar\frac{d^2w}{dx^2} \simeq i\hbar\frac{d^2w_0}{dx^2} + i\hbar^2\frac{d^2w_1}{dx^2}$$

これらを $\hbar^0$ と $\hbar^1$ の項でまとめると

$$\hbar^0 : (\frac{dw_0}{dx})^2 = F^2(x)$$
$$\hbar^1 : i\frac{d^2w_0}{dx^2} = 2\frac{dw_0}{dx}\frac{dw_1}{dx}$$

w_0 は S に対応するので、$\hbar^0$ の式は (3a) と一致します。A とは

$$A = e^{iw_1}$$

と対応しているので、$\hbar^1$ の式は

$$
\begin{aligned}
i\frac{d^2w_0}{dx^2} &= 2\frac{1}{i}\frac{dw_0}{dx}\frac{d\log A}{dx} \qquad (\log A = iw_1) \\
-\frac{d^2w_0}{dx^2} &= 2\frac{dw_0}{dx}\frac{1}{A}\frac{dA}{dx} \\
-A\frac{d^2w_0}{dx^2} &= 2\frac{dw_0}{dx}\frac{dA}{dx}
\end{aligned}
$$

となり、(3b) と一致します。