§. WKB 近似による散乱問題

・WKB 波動関数

1次元のシュレーディンガー方程式

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}_{\shortparallel \atop k(x)^2}\psi(x) = 0$$

もし $V(x) = \text{const.}$ なら $\psi(x) \propto e^{\pm ikx}$

WKB Ansatz : $\psi(x) = \exp\left[i\int^x \eta(x')dx'\right]$

cf. $kx \to \int^x k(x')dx'$
+補正

$$\psi' = i\eta\psi$$
$$\psi'' = i(\eta'\psi + \eta\psi')$$
$$= i\eta'\psi - \eta^2\psi \underset{\uparrow}{=} -k^2\psi$$

シュレーディンガー方程式

$\Downarrow$

$$\eta^2 = k^2 + i\eta'$$

半古典近似　η がゆっくりと変化
$\longleftrightarrow$ $|\eta'| \ll |\eta|^2$

$\Downarrow$ $\eta_0(x)^2 = k(x)^2 \to \eta_0(x) = \pm k(x)$

補正の見積り：

$$\eta(x)^2 \sim \eta_0(x)^2 + i\eta_0'(x)$$

$$= k(x)^2 \pm i k'(x) = k(x)^2\left(1 \pm i\frac{k'(x)}{k(x)^2}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\eta(x) \sim \pm k(x)\left(1 \pm \frac{i}{2}\frac{k'(x)}{k(x)^2}\right) = \pm k(x) + \frac{i}{2}\frac{k'(x)}{k(x)}$$

(note) $$e^{i\int^x dx' \cdot \frac{i}{2}\frac{k'(x')}{k(x')}} = e^{-\frac{1}{2}\int^x (\ln k)' dx'} = \frac{C}{\sqrt{k(x)}}$$

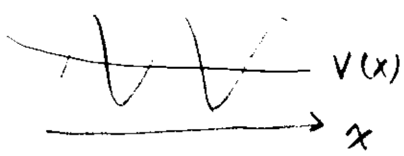
$$\Downarrow \quad \boxed{\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i\int^x k(x')dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\int^x k(x')dx'}}$$

古典的に許されない領域では $k(x) \to i\gamma(x)$

・WKB近似の妥当性

$$|\eta'| \ll |\eta|^2 \longrightarrow |k'(x)| \ll |k(x)|^2$$

$$\Downarrow \quad \left|\frac{d\lambda\!\!\!^{-}(x)}{dx}\right| \ll 1 \qquad \left(\lambda\!\!\!^{-}(x) = \frac{1}{k(x)}\right)$$



波長の変化が非常にゆるやか

$\longleftrightarrow$ 一波長内でポテンシャルの変化が非常にゆるやか

↑

高エネルギー 又は mが大きい場合

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$$\psi' = \frac{i}{\hbar} S' \psi$$
$$\psi'' = \frac{i}{\hbar} S'' \psi - \frac{1}{\hbar^2} (S')^2 \psi$$

四 別の導出法

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar} \quad を仮定$$

$$\longrightarrow \quad \frac{i}{\hbar} S'' - \frac{1}{\hbar^2} (S')^2 + k^2 = 0$$

$$\rightarrow \quad i\hbar S'' - (S')^2 = -k^2\hbar^2 = -p(x)^2$$

$\hbar$-展開 : $S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \cdots$

$O(\hbar^0)$: $-(S_0')^2 = -p(x)^2$

$$\Downarrow \quad S_0(x) = \pm \int^x dx' \, p(x')$$

$O(\hbar^1)$: $i S_0'' - 2 S_0' S_1' = 0$

$$\Downarrow \quad S_1' = \frac{i}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = \frac{i}{2} (\log S_0')'$$

$$\Downarrow$$

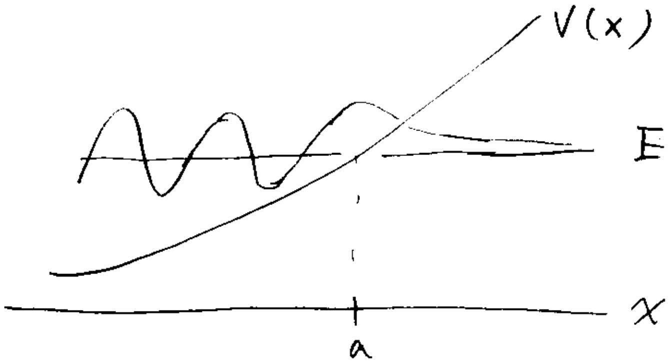
$$S_1 = \frac{i}{2} \log S_0' + \text{const}$$

・WKB接続公式

WKB近似：古典的転回点（$E = V(x)$）のまわりでは成り立たない。

cf. $\frac{1}{\sqrt{k(x)}}$ = 発散

転回点をうまく避ける → WKB接続公式

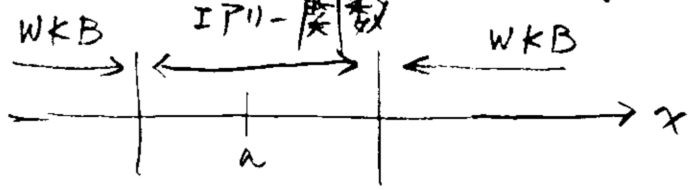


$x=a$ のまわりでポテンシャルを展開

$$V(x) \sim V(a) + V'(a)\,(x-a)$$

↓

解はエアリー関数



エアリー関数の漸近形と一致するように $x=a$ の右側と左側のWKB波動関数をつなぐ

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{c}{2}\dfrac{1}{\sqrt{\gamma(x)}}\, e^{-\int_a^x \gamma(x')\,dx'} & (x>a) \\ \dfrac{c}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_x^a k(x')\,dx' - \dfrac{\pi}{4}\right) & (x<a) \end{cases}$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(note) エアリー関数

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

$z\to\infty$ で指数関数的に減衰する解:

$$Ai(z)=\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3}+zt\right)dt$$

$$\to\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{\pi}\,|z|^{1/4}}\cos\left(\dfrac{2}{3}|z|^{\frac{3}{2}}-\dfrac{\pi}{4}\right) & (z\to-\infty)\\[2ex] \dfrac{1}{2\sqrt{\pi}\,z^{1/4}}\exp\left(-\dfrac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}\right) & (z\to\infty)\end{cases}$$

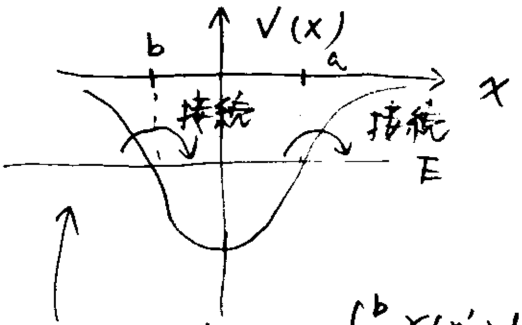
※ 指数関数的に増大する解に関しては

$$\frac{D}{\sqrt{\gamma(x)}}\, e^{+\int_a^x \gamma(x')dx'}$$

$$\to -\frac{D}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_x^a k(x')dx' - \frac{\pi}{4} \right)$$

応用例

✓ ボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件

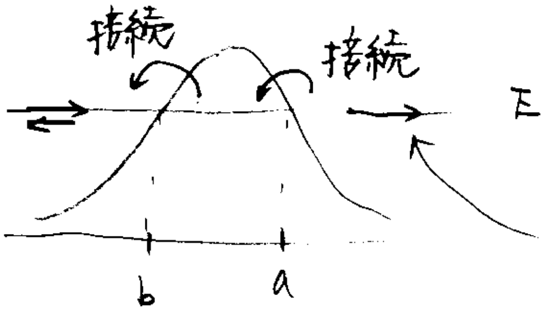


$$\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}}\, e^{-\int_x^b \gamma(x')dx'}$$

波動関数が $x \to \infty$ で発散しない

$$\to \int_b^a dx'\, k(x') = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (n = 0, 1, \cdots)$$

✓ トンネル確率



$$\psi_{III}(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\, e^{i\int_a^x k(x')dx'}$$

入射フラックスと透過フラックスの比を計算すると

$$\boxed{P = e^{-2\int_b^a \gamma(x)dx}}$$

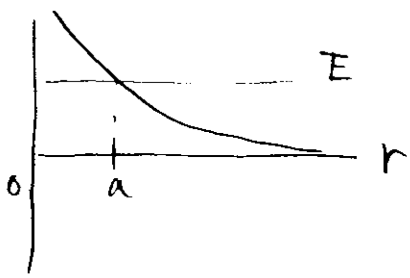
$$\Psi_I(x) = \frac{1}{i\sqrt{k(x)}}\, e^{\int_b^a \gamma(x)dx} \left\{ e^{i\int_x^b dx'\, k(x')} + e^{-i\int_x^b dx'\, k(x') + i\frac{\pi}{2}} \right\}$$

• 3次元への拡張

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{u_\ell(r)}{r} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$$

$$\rightarrow \quad \Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)}_{\equiv\, V_{\mathrm{eff}}(r)} - E \Big) u_\ell(r) = 0$$

実質的には一次元と同じ取り扱い



$r > a$ で $\quad u_\ell(r) = \dfrac{C}{\sqrt{k(r)}} \cos\left(\int_a^r k(r')dr' - \dfrac{\pi}{4} \right)$

$$= \frac{C}{\sqrt{k(r)}} \sin\left(\int_a^r k(r')dr' + \frac{\pi}{4} \right)$$

$r < a$ で $\quad u_\ell(r) = \dfrac{C}{2\sqrt{\gamma(r)}} e^{-\int_r^a \gamma(r')dr'}$

(note) $r \sim 0$ で

$$\gamma(r) = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) - E \right)} \sim \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{r}$$

$\downarrow$

$$u_\ell(r) \sim \sqrt{r}\, e^{\sqrt{\ell(\ell+1)}\ln r} = r^{\sqrt{\ell(\ell+1)}+\frac{1}{2}}$$

exactな解は　$u_\ell(r) \sim r^{\ell+1}$

→ ランガーの補正　$\ell(\ell+1) \to \left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2$

（数学上は　$r = e^{\xi}$，$u_\ell(r) = g(\xi)\, e^{\xi/2}$
という変換をして $g(\xi)$ に対して WKB 近似
を使うとこの補正がでてくる。）

■ WKB 位相差

$$u_\ell(r) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\underbrace{\int_a^r k(r')\,dr'}_{= \int_a^r (k(r')-k)\,dr' + kr - ka} + \frac{\pi}{4} \right)$$

$$\longleftrightarrow \quad \frac{C}{\sqrt{k}} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right)$$

↓

$$\delta_\ell = \int_a^\infty (k(r)-k)\,dr - ka + \frac{\pi}{2} \underbrace{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}$$

ランガー

ポテンシャルがないとき:

$$\frac{(l+\frac{1}{2})^2\hbar^2}{2\mu a_0{}^2} = E = \frac{k^2\hbar^2}{2\mu}$$

$$\int_{a_0}^{r} k_0(r')dr' = \int_{(l+\frac{1}{2})/k}^{r} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\frac{(l+\frac{1}{2})^2\hbar^2}{2\mu r'^2}\right)}\, dr'$$

$$= \int_{l+\frac{1}{2}}^{kr} \sqrt{1-\frac{(l+\frac{1}{2})^2}{k^2r'^2}}\, d(kr')$$

$$= \sqrt{(kr)^2-(l+\tfrac{1}{2})^2} + (l+\tfrac{1}{2})\sin^{-1}\frac{l+\frac{1}{2}}{kr} - (l+\tfrac{1}{2})\cdot\frac{\pi}{2}$$

$$\int dx \frac{\sqrt{x^2-\alpha^2}}{x} = \sqrt{x^2-\alpha^2}+\alpha\left|\sin^{-1}\frac{\alpha}{x}\right|$$

$$\rightarrow kr - (l+\tfrac{1}{2})\cdot\frac{\pi}{2} \quad (r\rightarrow\infty)$$

$$\delta_l = \lim_{r\to\infty}\left[\int_a^r k(r')dr' - \int_{a_0}^r k_0(r')dr'\right]$$