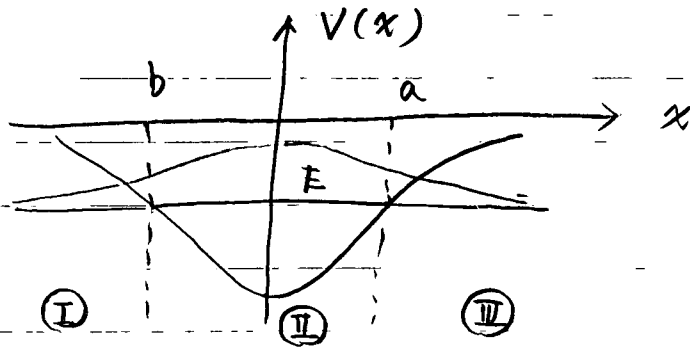


$$\gamma(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)}$$

3.3. ボーア-ゾンマーフェルトの量子化条件



領域 I ($x < b$) の波動関数

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int_x^b \gamma(x') dx'} \quad (x < b)$$

この波動関数を接続公式を使って領域 II ($b < x < a$)
 更に領域 III ($x > a$) に接続

領域 I \rightarrow II :

$$\psi(x) = \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\underbrace{\int_b^x k(x') dx'}_{\int_b^a dx' - \int_x^a dx'} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (b < x < a)$$

$$= \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_b^a dx' k(x') \right) \cos \left(\int_x^a dx' k(x') + \frac{\pi}{4} \right)$$

$$+ \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(\int_b^a dx' k(x') \right) \sin \left(\int_x^a dx' k(x') + \frac{\pi}{4} \right)$$

$$\begin{cases} \cos \theta = \sin(\theta + \frac{\pi}{2}) = -\sin(\theta - \frac{\pi}{2}) \\ \sin \theta = \cos(\theta - \frac{\pi}{2}) \end{cases}$$

$$= -\frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^a dx' k(x')\right) \sin\left(\int_x^a dx' k(x') - \frac{\pi}{4}\right) + \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_b^a dx' k(x')\right) \cos\left(\int_x^a dx' k(x') - \frac{\pi}{4}\right)$$

領域 II \rightarrow III

$$\psi(x) = +\frac{2}{\sqrt{\gamma(x)}} \cos\left(\int_b^a dx' k(x')\right) e^{+\int_a^x \gamma(x') dx'} + \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} \sin\left(\int_b^a dx' k(x')\right) e^{-\int_a^x \gamma(x') dx'} \quad (x > a)$$

2

領域 III 7" 解が exponential 的に小さく なるため

$$\cos\left(\int_b^a dx' k(x')\right) = 0 \quad \text{が必要}$$

2

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

2

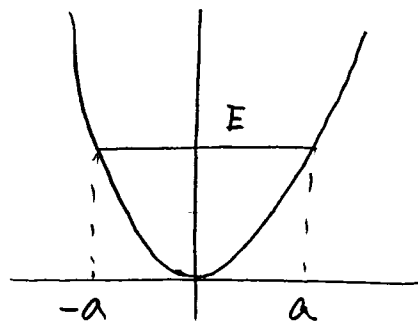
$$\oint P(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot (2\pi \hbar)$$



↑

$$k(x) = P(x)/\hbar$$

(note) 調和振動子: $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$



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

$$\int_{-a}^a k(x) dx = \int_{-a}^a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2)} dx$$

$$= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_{-a}^a \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} dx$$

$$y = \frac{x}{a}$$

$$\frac{1}{E} \cdot \frac{1}{2} m \omega^2$$

$$= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^2} \cdot a dy$$

$$= \frac{1}{a^2}$$

$$= \frac{2E}{\hbar\omega} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^2} dy$$

$$\parallel \leftarrow y = \cos\theta$$

$$\int_0^\pi \sin^2\theta d\theta = \int_0^\pi \frac{1}{2} (1 - \cos 2\theta) d\theta = \frac{\pi}{2}$$

↓

$$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

調和振動子に對しては WKB 近似は exact

cf. 経路積分

3.4 トンネリング



領域 III: $\psi(x) = \frac{i \cdot c}{\sqrt{k(x)}} e^{i(\int_a^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4})}$

$$= \frac{i \cdot c}{\sqrt{k(x)}} \left\{ \cos \left(\int_a^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) + i \sin \left(\int_a^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) \right\}$$

領域 II \wedge $\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{\int_x^a \gamma(x') dx'} + \frac{i \cdot c}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int_x^a \gamma(x') dx'}$

$$\sim \frac{c}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{\int_b^a \gamma(x') dx' - \int_b^x \gamma(x') dx'}$$

領域 I \wedge $\psi(x) = \frac{2c}{\sqrt{k(x)}} e^{\int_b^a \gamma(x') dx'} \cos \left(\int_x^b k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right)$

$$= \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \left[e^{\int_b^a \gamma(x') dx'} \right]$$

$$\times \left\{ e^{i \int_x^b k(x') dx' - \frac{i\pi}{4}} \right.$$

$$\left. + e^{-i \int_x^b k(x') dx' + \frac{i\pi}{4}} \right\}$$

トンネル確率: 入射フラックスと透過フラックスの比
(振幅の比の2乗)

$$P = e^{-2 \int_b^a \gamma(x) dx} = e^{-2 \int_b^a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx}$$

↓ m が大きいと P は小

(note) a と b が近いと接続公式が破綻

→ 一様近似

$$P = \frac{1}{1 + e^{2 \int_b^a \gamma(x) dx}}$$

(note) $E > V_b$ ても一様近似は成立

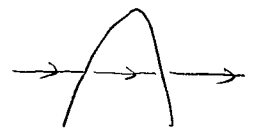
→ a, b は複素数

$$E = V_0 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$x = \pm \sqrt{\frac{2}{m \omega^2} (V_0 - E)}$$

(note) $V(x) = V_0 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ のとき

$$P = \frac{1}{1 + e^{-\frac{2\pi}{\hbar \omega} (E - V_b)}}$$



↔ PWKB と一致

3.5. 経路積分と半古典近似

経路積分

座標 $x_i \xrightarrow{\text{時間 } T} x_f$ への遷移

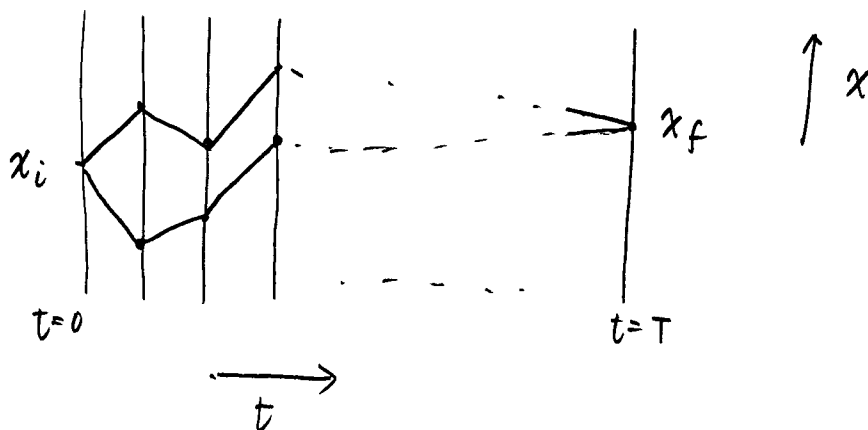
$$K(x_f, x_i; T) = \langle x_f | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | x_i \rangle$$

時間 t -バール $(0, T)$ を N 等分

$$\downarrow e^{-i\hat{H}T/\hbar} = \underbrace{e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \dots e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}}_{N \text{ } (\Delta t = \frac{T}{N})}$$

$$= \left(\int dx_N |x_N\rangle \langle x_N| \right) e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \left(\int dx_{N-1} |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}| \right) \\ \times e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \dots \left(\int dx_1 |x_1\rangle \langle x_1| \right) e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \\ \times \underbrace{\left(\int dx_0 |x_0\rangle \langle x_0| \right)}_{\text{"1 (完全性)"}}$$

x_i と x_f を結ぶ
あらゆる経路を足し
合わせる



↷

$$K(x_f, x_i; T) = \langle x_f | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | x_i \rangle$$

$$= \dots = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \cdot i\Delta t}} \prod_{i=1}^{N-1} \int \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \cdot i\Delta t}} dx_i \right)$$

$$\times e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t} \right)^2 - V\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) \right)}$$

$$= \int_{\substack{x(0)=x_i \\ x(T)=x_f}} d\mathcal{L}[x(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S(x, T)} \quad (\text{経路積分})$$

$$S(x, T) = \int_0^T dt L(x, \dot{x})$$

$$= \int_0^T dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right)$$

(note) 古典力学

最小作用の原理 $\frac{\delta S}{\delta x} = 0$

$$\rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x}$$

半古典近似

$\hbar \rightarrow 0$ では $e^{iS/\hbar}$ は激しく振動

→ 積分をすると正負が打ち消し合ってゼロ。

→ 但し、停留点 ($\frac{\delta S}{\delta x} = 0$) 近似では打ち消しがない。

(note) 停留点, $\frac{\delta S}{\delta x} = 0$ は 古典軌道
(最小作用の原理)

半古典近似: $x(t) = x_{cl}(t) + \delta x(t)$ とおいて
 δx の 2 次まで考慮する
(停留位相近似)

↓

$$V(x) \sim V(x_{cl}) + \underline{(\delta x) V'(x_{cl})} + \frac{(\delta x)^2}{2} V''(x_{cl}) + \dots$$

(半古典近似は 2 次関数
ポテンシャルに対しては exact)

↓

$$K(x_i, x_f; T) \sim (\text{係数}) \times e^{iS_{cl}/\hbar}$$