## 3. 半古典論（WKB近似）

・近似解が比較的簡単に求まる（← 解の定性的な振る舞い）
・古典描像との対応
　　↔ 解の物理的解釈
　　　：直観的理解

### 3.1. WKB波動関数

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

（1次元のシュレーディンガー方程式）

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

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

[ $e^{\pm ikx}$ の拡張として
$\sim e^{\pm i\int^x k(x')dx'}$
ただし高次の補正項も考える。]

$$\psi'=i\eta\psi$$
$$\psi''=i(\eta'\psi+\eta\psi')$$
$$=i\eta'\psi-\eta^2\psi \quad = -k^2\psi$$

シュレーディンガー方程式

$$\boxed{\eta^2=k^2+i\eta'}$$

半古典近似： $\eta$：ゆっくりと変化する関数

$$\leftrightarrow \quad |\eta'| \ll |\eta|^2$$

$\downarrow$

$$\eta_0(x)^2 \sim k(x)^2 \quad \rightarrow \quad \eta_0(x) = \pm k(x)$$

$\downarrow$ 補正のみつもり

$$\eta(x)^2 \sim \eta_0(x)^2 + i\eta_0'(x)$$
$$= k^2(x) \pm i\, k'(x)$$
$$= k^2(x)\left(1 \pm i \frac{k'(x)}{k^2(x)}\right)$$

$\downarrow$

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

(note)
$$e^{i\int^x dx' \frac{i}{2}\frac{k'(x')}{k(x')}} = e^{-\frac{1}{2}\int^x \underbrace{\frac{k'(x')}{k(x')}}_{(\log k)'} dx'}$$
$$= C \cdot e^{-\frac{1}{2}\log k(x)} = C\, k(x)^{-\frac{1}{2}}$$

$\downarrow$

$$\boxed{\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{k(x)}}\, e^{i\int^x k(x')dx'} + \frac{c_2}{\sqrt{k(x)}}\, e^{-i\int^x k(x')dx'}}$$

(note) 別の導出法

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

$$\psi' = \frac{i}{\hbar} S' \psi$$

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

↓

$$i\hbar S'' - (S')^2 = -p^2$$

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

↓

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

$$\rightarrow \quad S_0' = \pm p$$

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

$O(\hbar^1)$ : $iS_0'' - 2S_0'S_1' = 0$

$$\rightarrow \quad S_1' = \frac{i}{2}\frac{S_0''}{S_0'} = \frac{i}{2}(\ln S_0')'$$

$$\rightarrow \quad S_1 = \frac{i}{2}\ln S_0' + \text{const.}$$

$$= \frac{i}{2}\ln p(x) + \text{const.}$$

↓

$$\psi(x) \sim e^{\pm i\int^x \frac{1}{\hbar} p(x')dx'} e^{-\frac{1}{2}\ln p(x)}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm i\int^x k(x')dx'}$$

(note) 古典的に許されない領域 $(E < V(x))$

$$k(x) = i\gamma(x) \quad \longleftarrow \quad \gamma(x)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)$$

$$\downarrow \quad \psi(x) = \frac{\tilde{C}_1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int^x \gamma(x')dx'} + \frac{\tilde{C}_2}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{+\int^x \gamma(x')dx'}$$

・WKB近似の妥当性

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

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

⇔ 波長の変化量が非常にゆるやか

⇔ 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

(note) $$k'(x) = \frac{\frac{2m}{\hbar^2}V'(x)}{2k(x)} = \frac{m}{\hbar^2}\lambda\!\!\!^{-}(x)V'(x)$$

$$\Leftrightarrow \quad |\lambda\!\!\!^{-}(x)V'(x)| \ll \frac{k^2(x)\hbar^2}{m} = \frac{P(x)^2}{m}$$

⇔ 一波長内のポテンシャルの変化が局所運動エネルギーに比べて充分小さい。

Department of Physics
Tohoku University
Sen...

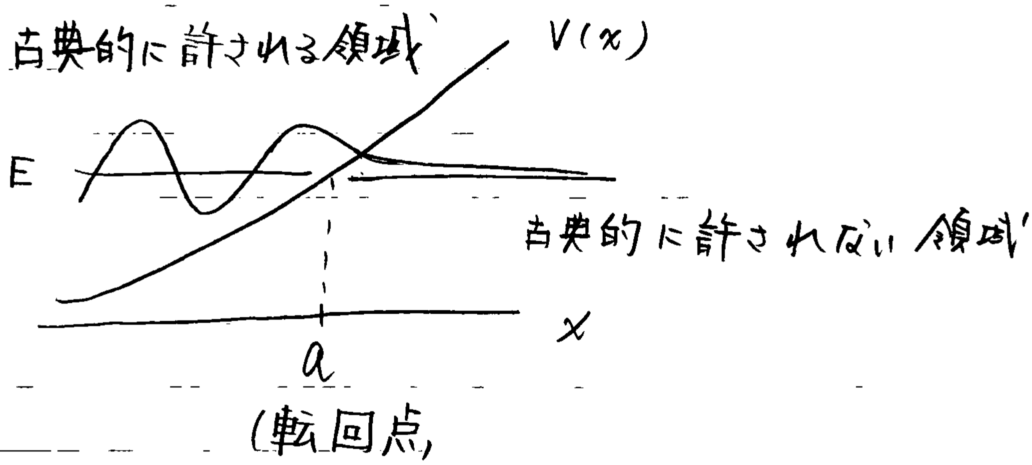
## 3.2. WKB 接続公式

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

⤳ WKB 近似は実際に役立たないか？

↕

WKB 接続公式
（転回点のまわりをうまく避ける）




$$x \gg a : \psi(x) \sim C \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int_a^x \gamma(x') dx'}$$

$$x \ll a : \psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left\{ c_1 e^{i\int_a^x k(x') dx'} + c_2 e^{-i\int_a^x k(x') dx'} \right\}$$

$C \longleftrightarrow c_1, c_2$ の関係式

↑

WKB 接続公式

考え方： $x=a$ の周りで $V(x)$ を展開

$$V(x) = V(a) + F_0(x-a) = E + F_0(x-a)$$

$$F_0 = +V'(a)$$

↓

シュレーディンガー方程式

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}F_0(x-a)\psi(x) = 0$$

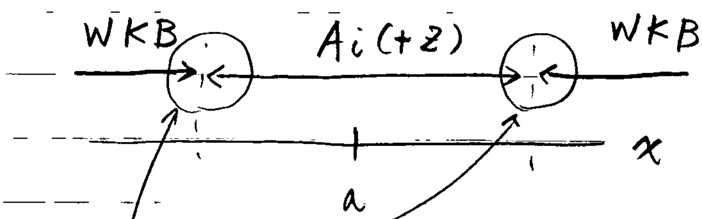
(note) $z \equiv \left(\frac{2m}{\hbar^2}F_0\right)^{\frac{1}{3}}(x-a)$

↓ $\frac{d^2}{dz^2}\psi - z\psi = 0$

解：エアリー関数 $\psi(z) = A_i(+z)$

↓

$A_i(+z)$ (の漸近形) とWKB解を比べる




一致するようにWKB波動関数の係数を決める

↓

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

一般に

$$\frac{C}{2}\,\gamma(x)^{-1/2}\,e^{-\left|\int_a^x \gamma(x')\,dx'\right|} \qquad (E<V(x))$$

$$\longleftrightarrow\quad C\,k(x)^{-1/2}\cos\left(\left|\int_a^x k(x')\,dx'\right|-\frac{\pi}{4}\right)$$

$$(E>V(x))$$

と

$$D\,\gamma(x)^{-1/2}\,e^{+\left|\int_a^x \gamma(x')\,dx'\right|} \qquad (E<V(x))$$

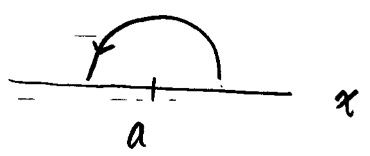
$$\longleftrightarrow\quad -D\,k(x)^{-1/2}\sin\left(\left|\int_a^x k(x')\,dx'\right|-\frac{\pi}{4}\right)$$

$$(E>V(x))$$

※ 他にも解析接続の方法も
（ランダウ－リフシッツを見よ）

(note) for $V(x) = E - F_0(x-a)$

$$\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \propto (x-a)^{1/4}$$




$$x-a=\rho e^{i\varphi} \qquad \varphi: 0\to\pi$$

$$(x-a)^{1/4} \to (a-x)^{1/4}\,e^{i\frac{\pi}{4}}$$

# WKB 接続公式

一般に、指数関数的に減衰する関数に対し、

$$\begin{aligned} &\frac{C}{2\sqrt{\gamma(x)}}\ \exp\left(-\left|\int_a^x \gamma(x')dx'\right|\right) \quad (E < V(x)) \\ &\quad \longleftrightarrow \frac{C}{\sqrt{k(x)}}\cos\left(\left|\int_a^x k(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right) \quad (E > V(x)) \end{aligned} \tag{1}$$

指数関数的に増大する関数に対し、

$$\begin{aligned} &\frac{D}{\sqrt{\gamma(x)}}\ \exp\left(+\left|\int_a^x \gamma(x')dx'\right|\right) \quad (E < V(x)) \\ &\quad \longleftrightarrow -\frac{D}{\sqrt{k(x)}}\sin\left(\left|\int_a^x k(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right) \quad (E > V(x)) \end{aligned} \tag{2}$$

**エアリー関数**

方程式

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) - z\psi(z) = 0 \tag{3}$$

の解はエアリー関数：$\psi(z) = \mathrm{Ai}(z)$.

定義：

$$\mathrm{Ai}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + zt\right) dt \tag{4}$$

漸近形 $(z \to \infty)$：

$$\mathrm{Ai}(-z) \quad \to \quad \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}}\ \cos\left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \tag{5}$$

$$\mathrm{Ai}(z) \quad \to \quad \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}}\ \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \tag{6}$$

(note)

$$\frac{2}{3}|z|^{3/2} = \frac{2}{3}\left(\frac{2m}{\hbar^2}F_0\right)^{1/2}|x-a|^{3/2} = \int_a^x dx' \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}F_0\,|x'-a|} = \int_a^x dx'\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E - V(x')|} \tag{7}$$

(note2) 方程式 (3) のもう一つの解は、$\psi(z) = \mathrm{Bi}(z)$

定義：

$$\mathrm{Bi}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\sin\left(\frac{t^3}{3} + zt\right) + \exp\left(-\frac{t^3}{3} + zt\right)\right] dt \tag{8}$$

漸近形 $(z \to \infty)$：

$$\mathrm{Bi}(-z) \quad \to \quad -\frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}}\ \sin\left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \tag{9}$$

$$\mathrm{Bi}(z) \quad \to \quad \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}}\ \exp\left(+\frac{2}{3}z^{3/2}\right) \tag{10}$$