

4. 半古典 (WKB) 近似

古典力学
($\hbar=0$)

量子力学

\hbar : プランク定数

半古典近似

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \dots$$

WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) 近似とは

- ・ 近似解
- ・ 解の定性的振るまい

4.1. WKB 波動関数

1次元のシュレディンガー方程式

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

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

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

cf. $kx \rightarrow \int^x k(x') dx' + \text{補正}$

$$\psi' = i\eta(x) e^{i\int^x \eta(x') dx'} = i\eta(x) \psi(x)$$

$$\psi'' = i\eta' \psi + i\eta \psi' = i\eta' \psi - \eta^2 \psi$$

$$= -k(x)^2 \psi$$

↑ $\psi = L^{-1} \tilde{\psi} = \text{ガ}$ - 方程式

$$\eta(x)^2 = k(x)^2 + i\eta'(x)$$

半古典近似: $\eta(x)$ $\hbar \ll \rho_0$ < η と変化

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

$$\eta(x)^2 \sim k(x)^2$$

$$\rightarrow \eta(x) = \pm k(x)$$

補正の見積り

$$\eta(x)^2 = k(x)^2 + i\eta'(x) \sim k(x)^2 \pm ik'(x)$$

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

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

$$= \pm k(x) + \frac{i}{2} (\ln k(x))'$$

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

$$= e^{\ln k(x)^{-1/2}} = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}$$

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

↑
↑
 右向き 左向き

※ 古典的に許されぬ領域 ($E < V(x)$) 7" 12

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

ε L T

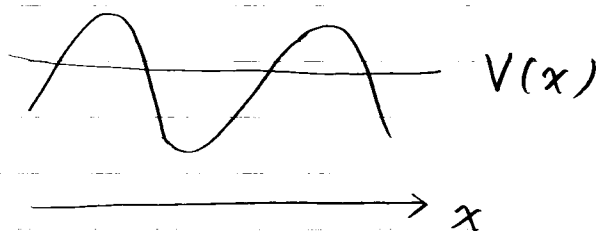
$$\psi(x) = \frac{C_1'}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int^x \gamma(x') dx'} + \frac{C_2'}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{+\int^x \gamma(x') dx'}$$



• WKB近似の妥当性

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

$$\Downarrow \uparrow \gg \left| \frac{k'(x)}{k(x)^2} \right| = \left| \frac{d}{dx} \frac{1}{k(x)} \right| = \left| \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|$$



波長の変化が非常にゆるやかな

↔ 一波長内でポテンシャルの変化が非常にゆるやかな
(井戸型ポテンシャルみたいなものはダメ)

波長が短かければよい

→ E 付近は m が大きい場合

• 別の導出法

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad \text{と仮定} \quad \left(\frac{1}{\hbar} S(x) = \int^x \varphi(x') dx' \right)$$

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

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

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

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

$$\hbar\text{-展開} : S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \dots$$

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

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

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

$$\Downarrow S_1' = \frac{i}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = \frac{i}{2} (\ln |S_0'|)'$$

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

$$\Downarrow \psi(x) \sim \pm \frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx' e^{-\frac{1}{2} \ln |S_0'|} \times \text{const.}$$

$$= \frac{C}{\sqrt{|S_0'|}} e^{\pm i \int^x k(x') dx'}$$

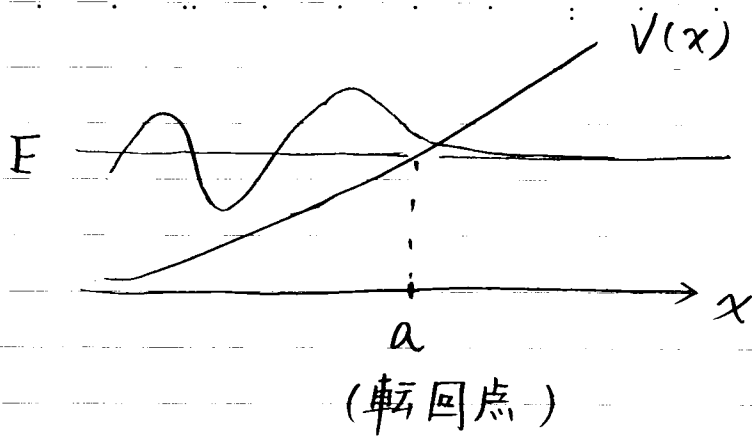
$$= \frac{C'}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i \int^x k(x') dx'}$$

4.2. 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。

($k(x) \sim 0$ だが $|k'(x)| \ll k(x)^2$ と仮定)。
($1/\sqrt{k(x)}$ は発散)

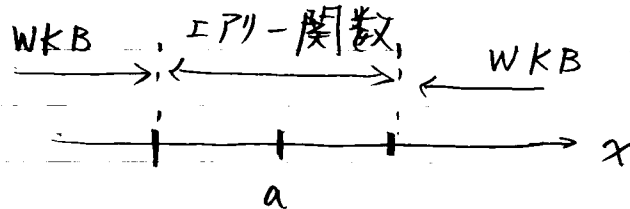
→ WKB 接続公式で転回点をうまく避けること
WKB 近似を有用に使える



$x=a$ のまわりでポテンシャルを展開:

$$V(x) \sim V(a) + \underbrace{V'(a)}_{\text{Airy関数}} (x-a)$$

↓
解はエアリ-関数



エアリ-関数の漸近形と一致するように $x=a$ の右側と左側の関数をつなぐ.

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

(note) エアリ-関数

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

$z \rightarrow \infty$ で指数関数的に減衰する解

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

$$\rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi} |z|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3} |z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) & (z \rightarrow -\infty) \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right) & (z \rightarrow \infty) \end{cases}$$

一般に

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

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

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

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

• 解析接続の方法

$$\psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int_a^x \gamma(x') dx'} \quad (x > a)$$

例3. $x \sim a$ 附近 $V(x) \sim V(a) + V'(a)(x-a)$

↓

$$\gamma(x) \sim \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(a) + V'(a)(x-a) - E)}$$

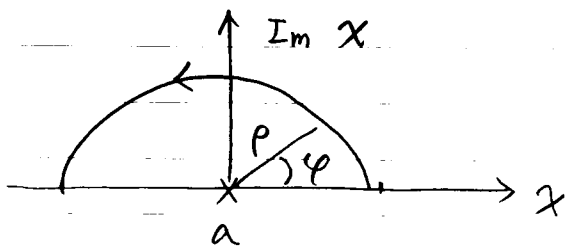
$$= \underbrace{\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V'(a)} \right)}_{\beta} \sqrt{x-a}$$

≡

β

↓

$$\psi(x) \sim \frac{C}{2\sqrt{\beta} (x-a)^{1/4}} e^{-\beta \int_a^x \sqrt{x'-a} dx'}$$



$$x-a = p e^{i\varphi} \quad \text{と解析接続.}$$

$$(\varphi = 0 \rightarrow \pi)$$

$$(x-a)^{1/4} \rightarrow p^{1/4} e^{i\varphi/4} \Big|_{\varphi=\pi} = p^{1/4} e^{i\pi/4} = (a-x)^{1/4} e^{i\pi/4}$$

$$(x-a)^{1/2} \rightarrow (a-x)^{1/2} e^{i\pi/2} = i(a-x)^{1/2}$$

$$\begin{aligned} \Downarrow \\ \psi(x) &\rightarrow \frac{c e^{-i\pi/4}}{2\sqrt{\beta} (a-x)^{1/4}} e^{-i\beta \int_a^x \sqrt{a-x'} dx'} \\ &\sim \frac{c e^{-i\pi/4}}{2\sqrt{k(x)}} e^{-i \int_a^x k(x') dx'} \end{aligned}$$

下半面の経路をとると

$$\psi(x) \rightarrow \frac{c e^{i\pi/4}}{2\sqrt{k(x)}} e^{+i \int_a^x k(x') dx'}$$

両者の線形結合をとると

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_a^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(- \int_a^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{c}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned}$$