4. 半古典（WKB）近似

古典力学 ——— 量子力学
($\hbar = 0$) $\hbar$：フルオーダー

半古典近似
$$S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \cdots$$

WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) 近似とも

・近似解
・解の定性的振るまい

4.1. WKB 波動関数

1次元のシュレーディンガー方程式

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

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

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

cf. $kx \to \int^x k(x')\,dx'$ ＋ 補正

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

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

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

シュレーディンガー方程式

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

半古典近似 : $\eta(x)$ がゆっくりと変化

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

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

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

補正の見積り

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

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

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

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

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

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

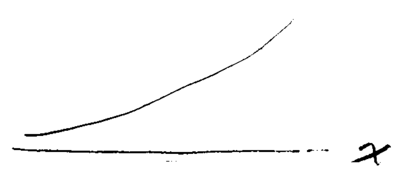
$$\boxed{\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{k(x)}} \underbrace{e^{i\int^x k(x')dx'}}_{\text{右向き}} + \frac{c_2}{\sqrt{k(x)}} \underbrace{e^{-i\int^x k(x')dx'}}_{\text{左向き}}}$$

※古典的に許されない領域（ $E < V(x)$ ）では

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

として

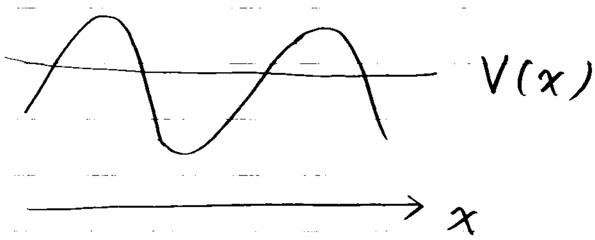
$$\psi(x) = \frac{c_1'}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int^x \gamma(x')dx'} + \frac{c_2'}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{+\int^x \gamma(x')dx'}$$



・WKB近似の妥当性

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

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



波長の変化が非常にゆるやか

⟷ 一波長内でポテンシャルの変化が非常にゆるやか
(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 または m が大きい場合.

・別の導出法

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

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

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

↓

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

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

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

$O(\hbar^0)$： $-(S_0')^2 = -p(x)^2$

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

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

$$\Rightarrow \quad S_1' = \frac{i}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = \frac{i}{2} \left(\ln |S_0'| \right)'$$

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

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

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

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

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。
（$k(x) \sim 0$ なので $|k'(x)| \ll k(x)^2$ とならない。
$1/\sqrt{k(x)}$ は発散）

→ WKB接続公式で転回点をうまく避けることでWKB近似を有用なものにする