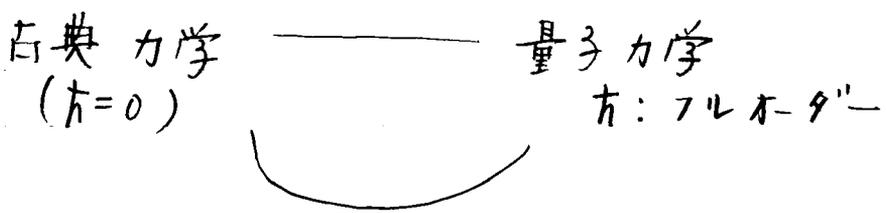


# 4. 半古典 (WKB) 近似



半古典近似  
 作用:  $S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \dots$

WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) 近似とE

- 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  $\psi(x) \propto e^{\pm ikx}$

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

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

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

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

↑  
シュレディンガー方程式

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

半古典近似:  $\eta(x)$  が  $k(x)$  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

$$\eta(x) = \pm k(x) + \Delta\eta(x)$$

$$\rightarrow \eta(x)^2 \sim k(x)^2 \pm 2k(x) \cdot \Delta\eta(x)$$

$$\rightarrow \cancel{k(x)^2} \pm 2k(x) \cdot \Delta\eta(x) \sim \cancel{k(x)^2} \pm i k'(x)$$

$$\rightarrow \Delta\eta(x) \sim \frac{i}{2} \frac{k'(x)}{k(x)} = \frac{i}{2} (\ln k(x))'$$

$$\rightarrow \eta(x) \sim \pm k(x) + \frac{i}{2} (\ln k(x))'$$

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

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

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

↑
↑  
 右向き波                      左向き波

※古典的に許されぬ領域 ( $E < V(x)$ ) 内は

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

とLT

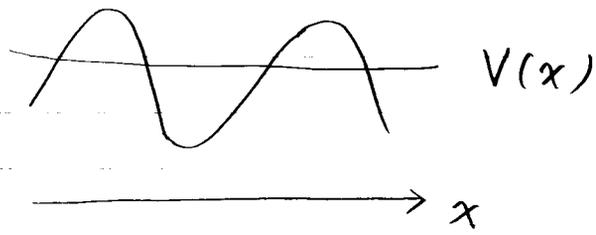
$$\psi(x) = \frac{C_1'}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int^x \gamma(x') dx'} + \frac{C_2'}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{+\int^x \gamma(x') dx'}$$



• WKB近似の妥当性

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

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



波長の変化が非常にゆるやかな

↔ - 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 対は m が大きい場合

• 別の導出法

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

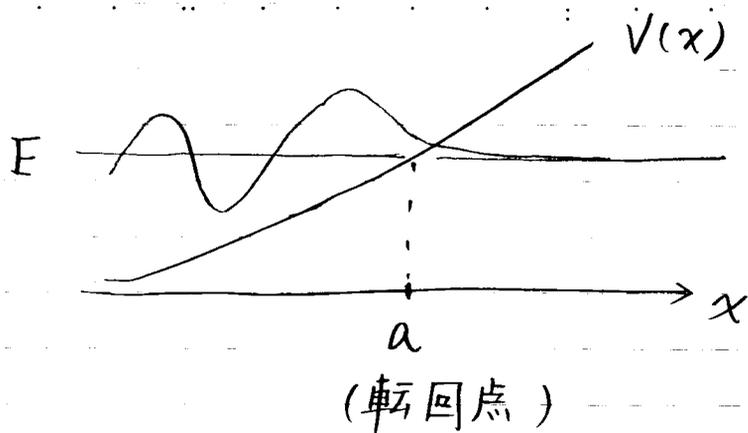
$$= \frac{C'}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i \int^x k(x') dx'}$$

## 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。

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

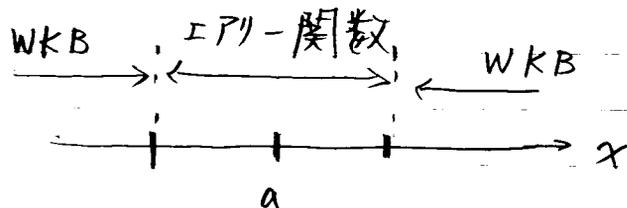
→ WKB 接続公式で転回点をうまく避けることで WKB 近似を有効に使える



$x = a$  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

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

$z \rightarrow \infty$  で指数関数のように減衰する解

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

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

一般に

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

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

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

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

## WKB 接続公式

一般に、指数関数的に減衰する関数に対し、

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

指数関数的に増大する関数に対し、

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

### エアリー関数

方程式

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

の解はエアリー関数： $\psi(z) = \text{Ai}(z)$ .

定義：

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

漸近形 ( $z \rightarrow \infty$ ) :

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

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

(note)

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

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

定義：

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

漸近形 ( $z \rightarrow \infty$ ) :

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

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

• 解析接続の方法

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

とす。  $x \sim a$  附近  $V(x) \sim V(a) + V'(a)(x-a)$

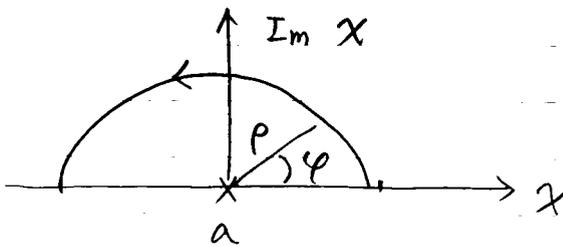
↓

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

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

↓

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



$x-a = \rho e^{i\varphi}$  と解析接続.

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

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

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

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

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

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