

(復習) 半古典 (WKB) 近似

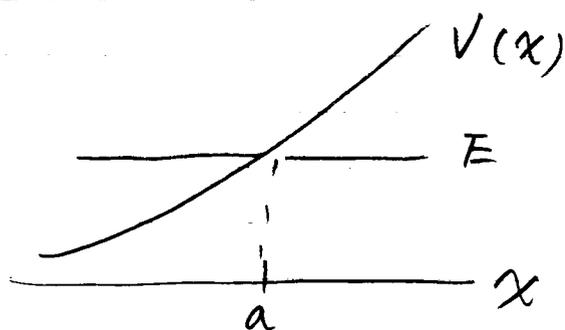
$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))}_{k(x)^2} \psi(x) = 0$$

$|k'(x)| \ll k(x)^2$  とすると (→ 波長内でポテンシャルの変化が小さいとすると)

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

( $E < V(x)$  では  $k(x) = i\gamma(x)$  とし

$$\psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{\mp \int^x \gamma(x') dx'} )$$

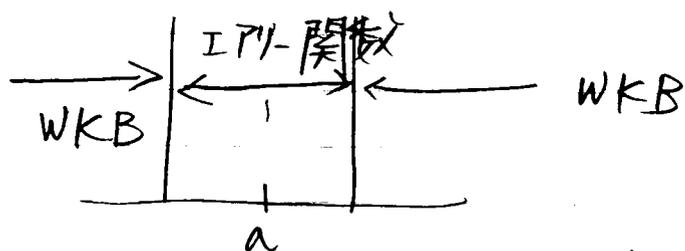


$V(a) = E$  とする点  $a$  のあたりでは

$$k(x) \sim 0$$

→ 近似が破たん

$$V(x) \sim V(a) + V'(a)(x-a)$$



→ WKB 接続公式

## 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) シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E\right) \psi(x) = 0 \quad (7)$$

において、 $V(a) = E$  となる古典的転回点  $x = a$  のまわりでポテンシャル  $V(x)$  を

$$V(x) \sim V(a) + F_0(x - a) \quad (8)$$

のように展開する。

$$z \equiv \left(\frac{2m}{\hbar^2} F_0\right)^{1/3} (x - a) \quad (9)$$

のように  $z$  を定義すると、シュレーディンガー方程式は式 (3) のように変換される。このとき、エアリー関数の漸近形は式 (5), (6) のようになるが、この式の中にあらわれる  $\frac{2}{3} z^{3/2}$  は次のようになる：

$$\frac{2}{3} |z|^{3/2} = \frac{2}{3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} F_0\right)^{1/2} |x - a|^{3/2} = \int_a^x dx' \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} F_0 |x' - a|} = \int_a^x dx' \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E - V(x')|} \quad (10)$$

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

定義：

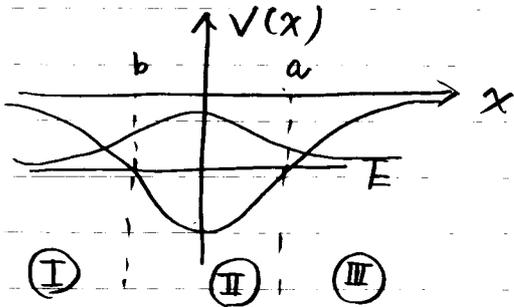
$$\text{Bi}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[ \sin \left( \frac{t^3}{3} + zt \right) + \exp \left( -\frac{t^3}{3} + zt \right) \right] dt \quad (11)$$

漸近形 ( $z \rightarrow \infty$ ):

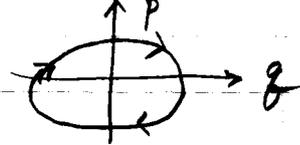
$$\text{Bi}(-z) \rightarrow -\frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \sin \left( \frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right), \quad (12)$$

$$\text{Bi}(z) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp \left( +\frac{2}{3}z^{3/2} \right) \quad (13)$$

4.3. ホルン-ポテンシャル-フェルトの量子化条件



cf. ホルン-ポテンシャル原子模型



$$\oint p dq = n\hbar = 2\pi n\hbar$$

領域 I ( $x < b$ ):

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

→ 領域 II ( $b \leq x < a$ ) に接続:

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

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

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

$$\cos\theta = \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)$$

$$\sin\theta = \cos\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)$$

→ 領域 III ( $x \geq a$ )  $\wedge$

$$\psi_{III}(x) = \frac{2}{\sqrt{\gamma(x)}} \cos\left(\int_b^a dx' k(x')\right) \underbrace{e^{\int_a^x \gamma(x') dx'}}_{\text{---}} + \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} \sin\left(\int_b^a dx' k(x')\right) e^{-\int_a^x \gamma(x') dx'}$$

↪ 領域 IV 7" 解  $\propto$  exponential 的に  $\psi < 0$  なるため  $\psi = 0$

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

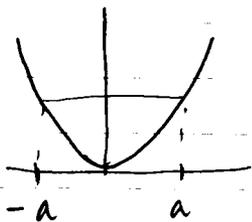
$$\int_b^a dx k(x) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \quad (n=0, 1, \dots)$$

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

↑  
 $p(x) = k(x)\hbar$



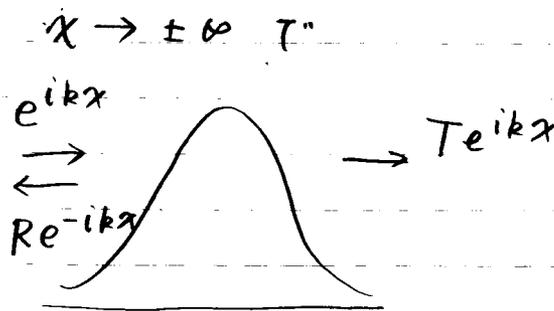
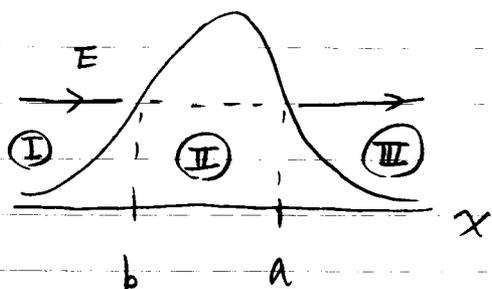
cf. 調和振動子  $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$



$$\int_{-a}^a dx k(x) = \dots = \frac{\pi E}{\hbar \omega}$$

$$\rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (\text{exact})$$

4.4. トネリ>7"



$$\psi_{III}(x) = \frac{iC}{\sqrt{k(x)}} e^{i\left(\int_a^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right)} \quad (x \geq a)$$

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

領域 II

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{\int_x^a \gamma(x') dx'} + \frac{iC}{2} \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} e^{-\int_x^a \gamma(x') dx'}$$

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

領域 I

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

$$= \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \left[ e^{\int_b^a \gamma(x') dx'} \left( e^{i\int_x^b k(x') dx' - \frac{i\pi}{4}} + e^{-i\int_x^b k(x') dx' + \frac{i\pi}{4}} \right) \right]$$

$$\Downarrow \quad P(E) = \frac{J_{III}}{J_I} = e^{-2\int_b^a \gamma(x') dx'} = e^{-2\int_b^a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx}$$

→ Eが関数 <math>E \ll V\_{max}</math> exp. 的,  $m$ が大きいほど  $P(E)$ は小,

## 4.5. 経路積分と半古典近似

### 経路積分

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

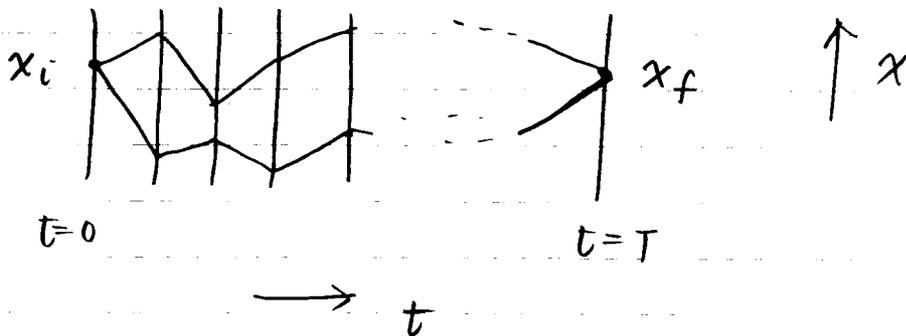
$$K(x_f, x_i; T) = \langle x_f | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | x_i \rangle$$

時間インターバルを  $N$  等分

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

$$N \square \quad (\Delta t = \frac{T}{N})$$

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



$x_i$  と  $x_f$  を結ぶすべての経路を  
足し合わせる。

$$\downarrow$$

$$K(x_f, x_i; T) = \dots = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \cdot i\Delta t}} \prod_{i=1}^{N-1} \int \left( \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \cdot i\Delta t}} dx_i \right) \times e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \left( \frac{m}{2} \left( \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t} \right)^2 - V\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) \right)}$$

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

$$x(0) = x_i$$

$$x(T) = x_f$$

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

(note) 古典力学

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

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

• 半古典近似

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

→ 積分は正負が打ち消し合いゼロに

→ 但し, 停留点 ( $\frac{\delta}{\delta x} S = 0$ ) 近傍では打ち消し合いがおこらない

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

$$\downarrow$$

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

停留条件で零となる

(→ 半古典近似は 2次関数ポテンシャルに対しては exact)

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