

6. 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

6.1. WKB 波動関数

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

(note) if $V(x) = \text{const.}$ $\rightarrow \psi(x) \propto e^{\pm ikx}$

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

↓

$$\psi' = i\eta \psi$$

$$\begin{aligned} \psi'' &= i(\eta' \psi + \eta \psi') \\ &= i\eta' \psi - \eta^2 \psi = -k^2 \psi \end{aligned}$$

↷

$$\eta^2 = k^2 + i\eta'$$

半古典近似: η : ゆっくりと変化する関数
 $\leftrightarrow |\eta'| \ll |\eta|^2$

↓

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

↓

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

↓

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

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

↓

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

(note) 古典的に許されない領域 ($E < V(x)$)

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

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

• WKB近似の妥当性

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

\Downarrow

$$\left| \frac{d\eta(x)}{dx} \right| \ll 1 \quad \left(\eta(x) = \frac{1}{k(x)} \right)$$

\Downarrow 波長の変化量が非常にゆるやか

\Downarrow - 波長内でポテンシャルの変化が非常にゆるやか.

\leftrightarrow high E , a/o large m

$$(note) \quad k'(x) = \frac{\frac{2m}{\hbar^2} V'(x)}{2k(x)} = \frac{m}{\hbar^2} \eta(x) V'(x)$$

$$\Downarrow \quad |\eta(x) V'(x)| \ll \frac{k^2(x) \hbar^2}{m} = \frac{P(x)^2}{m}$$

\Downarrow - 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.

6.2. WKB 接続公式

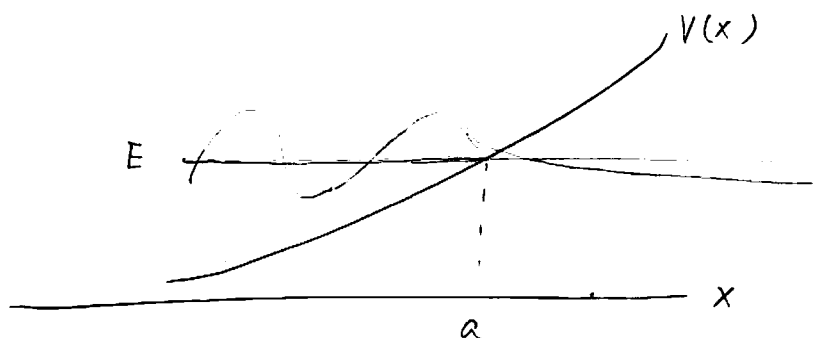
WKB 近似: 古典的転回点, ($E=V(x)$) のまわりでは
成り立たない。 $\rightarrow \frac{1}{\sqrt{k(x)}$: 発散

~ WKB 近似は実際には役に立たないか?



WKB 接続公式

(転回点のまわりをうまく避ける)



$$x \gg a: \psi(x) \sim \frac{1}{2} C r(x)^{-1/2} e^{-\int_a^x r(x') dx'}$$

$$x \ll a: \psi(x) \sim k(x)^{-1/2} \left\{ C_1 e^{i \int_a^x k(x') dx'} + C_2 e^{-i \int_a^x k(x') dx'} \right\}$$

C_1, C_2 は C とどのように関連するか?

(i) Airy 関数法

$x = a$ の周りで $V(x)$ を展開:

$$\begin{aligned} V(x) &\sim V(a) - F_0 \cdot (x-a) \\ &= E - F_0 \cdot (x-a) \end{aligned}$$

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

↓

Schrödinger 方程式

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

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

↓ $\frac{d^2}{dz^2} \psi + z \psi = 0$

Solution: $\boxed{\psi(z) = \text{Ai}(-z)}$

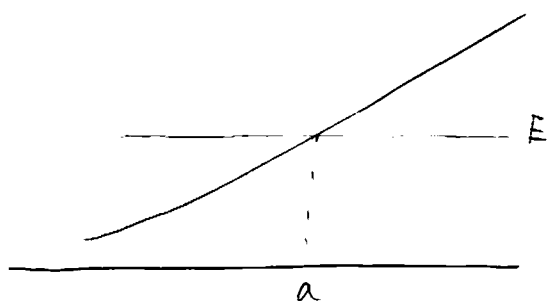
↓

$\text{Ai}(-z)$ (の漸近形) と WKB 解を比較する。

↓

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

(ii) 解析接続法 (ランダム-リフシッツ)



$$E - V(x) \sim F_0 \cdot (x-a)$$

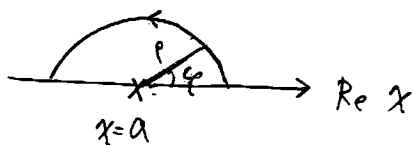
↓

$x > a$ の WKB 波動関数:

$$\psi(x) = \frac{C}{2} \cdot \frac{1}{\left(\frac{2m}{\hbar^2} F_0\right)^{1/4}} \cdot \frac{1}{(x-a)^{1/4}} \cdot e^{-\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} F_0(x'-a)} dx'}$$

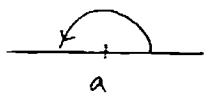
この関数を複素変数の関数とみなし、複素平面上を半径 ρ の円に沿って関数をまわす:

lx 上半面に沿って π 回する場合



$$x-a = \rho e^{i\varphi} \quad (\varphi: 0 \rightarrow \pi)$$

$$\begin{aligned} \int_a^x \sqrt{x'-a} dx' &= \int_0^\rho (\rho e^{i\varphi})^{1/2} e^{i\varphi} d\rho' \\ &= \frac{2}{3} \rho^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\varphi} \end{aligned}$$



at $\varphi = \pi$:

$$\int_a^x \sqrt{x'-a} dx' \rightarrow \frac{2}{3} \rho^{\frac{3}{2}} \cdot (-i) = +i \int_a^x \sqrt{a-x'} dx'$$

(note) $\int_a^x \sqrt{a-x'} dx' \quad (x < a)$
 $\rightarrow -\int_0^{\rho} \rho'^{1/2} d\rho' = -\frac{2}{3} \rho^{\frac{3}{2}}$
 $a-x = \rho$

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

↓

$$\frac{c}{2} \frac{1}{\left(\frac{2m}{k^2} F_0\right)^{1/4}} \frac{1}{(x-a)^{1/4}} e^{-\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{k^2} F_0(x-a)} dx'}$$

$$\rightarrow \frac{c}{2} \frac{1}{\left(\frac{2m}{k^2} F_0\right)^{1/4}} \frac{1}{(a-x)^{1/4}} e^{-i \int_a^x \sqrt{\frac{2m}{k^2} F_0(a-x')} dx' - i \frac{\pi}{4}}$$

・ 下半面に沿って回ると

$$e^{+i \int_a^x \sqrt{\frac{2m}{k^2} F_0(a-x')} dx' + i \frac{\pi}{4}}$$

を得る。

↓

2つの解をあわせて:

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

- 一般

$$\frac{C}{2} \gamma(x)^{-1/2} e^{-|\int_a^x \gamma(x') dx'|} + D \gamma(x)^{-1/2} e^{+\int_a^x \gamma(x') dx'|}$$

($E < V(x)$)

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

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

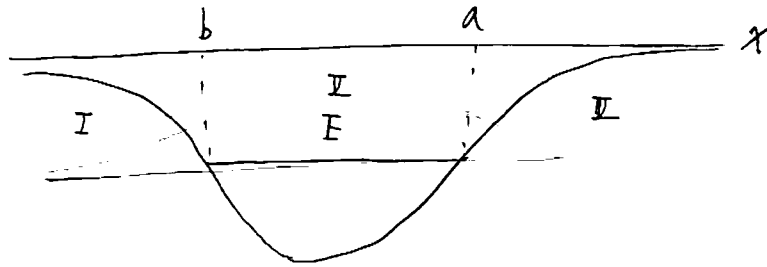
($E > V(x)$)

$$\cos x = \sin(x + \frac{\pi}{2}) = -\sin(x - \frac{\pi}{2})$$

$$\sin x = \cos(x - \frac{\pi}{2}) = -\cos(x + \frac{\pi}{2})$$

求: Γ -

6.3. $\psi'' > \psi$ - 左ルトの WKB 量子化条件
(束縛状態への応用)



Region I:

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

→ Region II:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \quad (b < x < a) \\ &= \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^a k(x') dx' - \int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \\ &= -\frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^a k(x') dx'\right) \sin\left(\int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \\ &\quad + \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\int_b^a k(x') dx'\right) \cos\left(\int_x^a k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned}$$

→ Region III:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= +\frac{2}{\sqrt{\gamma(x)}} \cos\left(\int_b^a k(x') dx'\right) e^{+\int_a^x \gamma(x') dx'} \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{\gamma(x)}} \sin\left(\int_b^a k(x') dx'\right) e^{-\int_a^x \gamma(x') dx'} \quad (x > a) \end{aligned}$$

↓

Region II τ'' exp. 的に解が小さくなるためには

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

↓

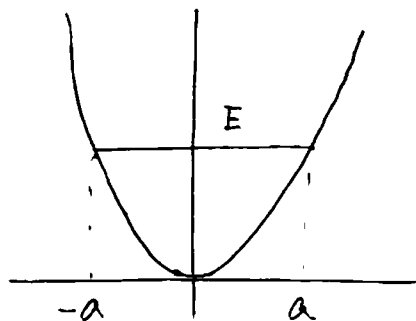
$$\int_b^a k(x') dx' = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (n=0, 1, \dots)$$

↓

$$\int P(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{h}{2\pi k}$$



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



$$a = + \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

$$\int_{-a}^a k(x) dx = \int_{-a}^a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2)} dx$$

$$= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_{-a}^a \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} dx$$

$$y = \frac{x}{a}$$

$$= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_{-1}^1 \sqrt{1-y^2} \cdot a dy$$

$$= \frac{2E}{\hbar\omega} \underbrace{\int_{-1}^1 \sqrt{1-y^2} dy}_{\text{"}}$$

$$\int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta = \int_0^\pi \frac{1}{2} (1 - \cos 2\theta) d\theta = \frac{\pi}{2}$$

↓

$$\boxed{E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega}$$

調和振動子に對しては WKB 近似は exact

cf. 経路積分