مکانیک کوانتومی ۲

تقریب WKB

Wentzel-Kramerz-Brillouin approximation

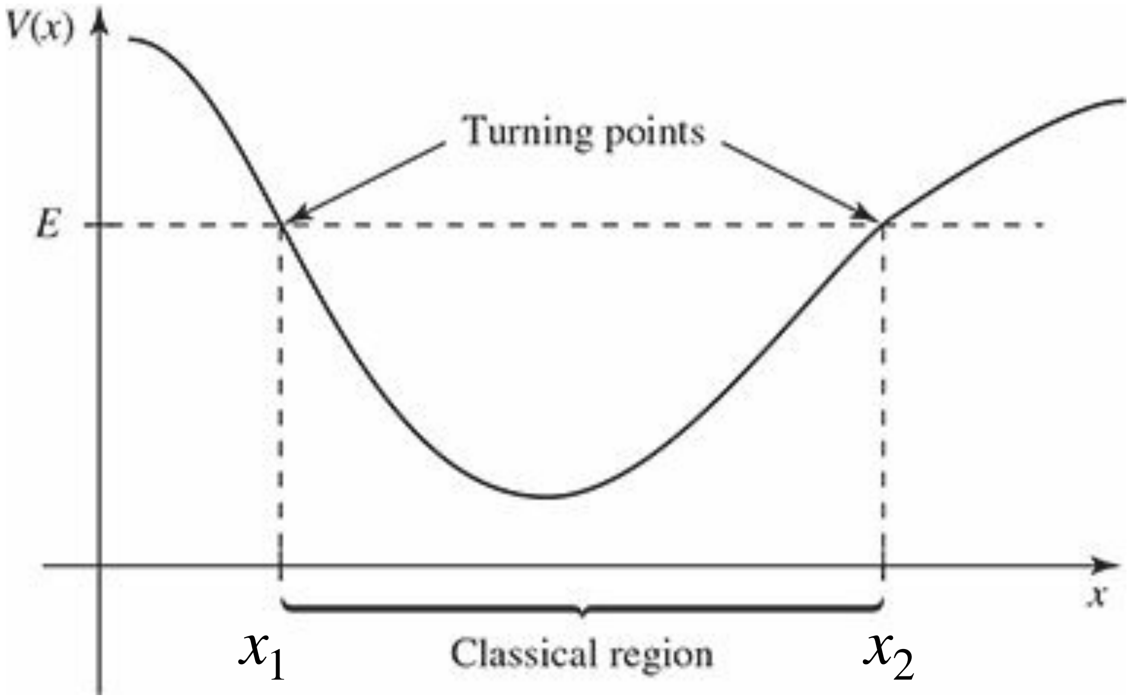
سعید عابدین‌پور

References:

- Chapter 9, D. J. Griffiths, “Introduction to Quantum Mechanics”
- Section 10.6, G. Auletta, M. Fortunato, and G. Parisi, “Quantum Mechanics”
- Section 2.5, J. J. Sakurai and J. Napolitano, “Modern Quantum Mechanics”

- در فیزیک کلاسیک، حرکت ذره در یک پتانسیل محدود به نواحی E<V(x) است.

- در نقاط بازگشت x_i، انرژی جنبشی (سرعت ذره) صفر است.



- **مکانیک کوانتومی (یک بعد برای سادگی)**

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

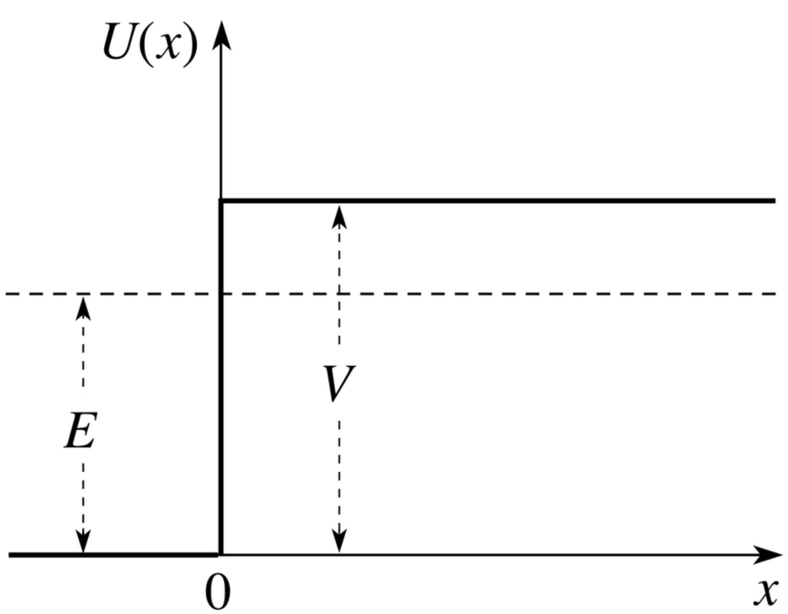
برای پتانسیل ثابت

$$\psi''(x) = -\frac{2m\left(E - V_0\right)}{\hbar^2}\psi(x) \longrightarrow$$

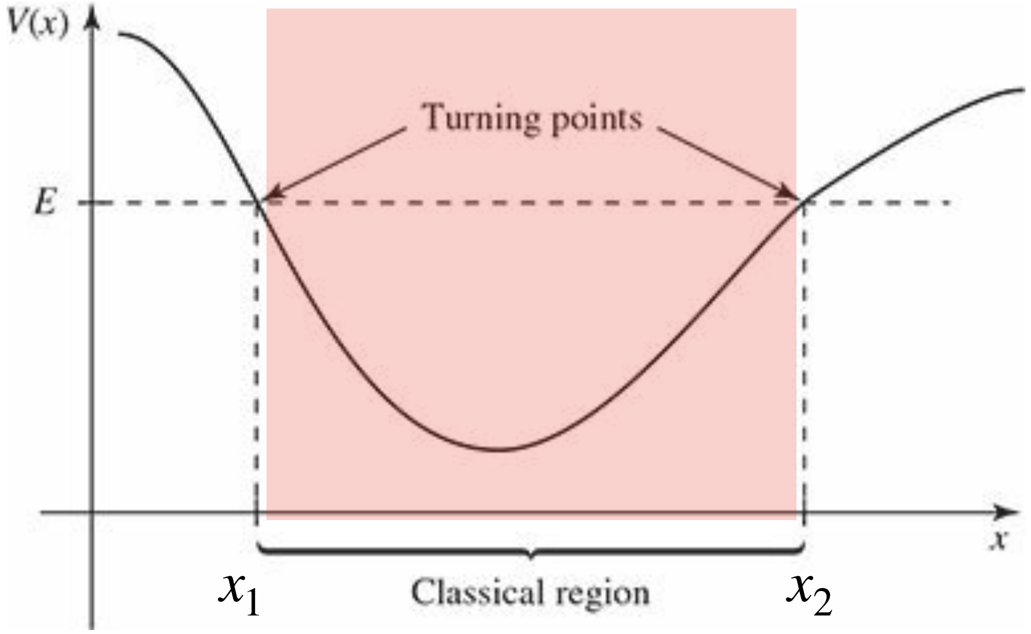
$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx} \quad \text{if } E > V_0$$

$$\psi(x) = Ae^{\pm|k|x} \quad \text{if } E < V_0$$

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$



- جواب در هر ناحیه ترکیب خطی از پاسخهای مجاز بوده و ضرایب از پیوستگی توابع موج در مرز بدست می‌آیند.



● اگر V(x) ثابت نبوده ولی تابعی «کند تغییر» باشد؟

$$\psi''(x) = -\frac{2m\left[E - V(x)\right]}{\hbar^2}\psi(x)$$

- **Classical Region: E > V(x)** $k(x) = \frac{\sqrt{2m[E - V(x)]}}{\hbar}$

$$\boxed{\psi(x) = A(x)\, e^{i\phi(x)}}$$

S.E.: $$A'' - A(\phi')^2 + i(2A'\phi' + A\phi'') = -k^2 A$$

- Imaginary part:

$$2A'\phi' + A\phi'' = 0 \quad \rightarrow \quad (A^2\phi')' = 0 \quad \rightarrow \quad (A^2\phi') = C^2 \quad \rightarrow \quad A(x) = \frac{C}{\sqrt{|\phi'(x)|}}$$

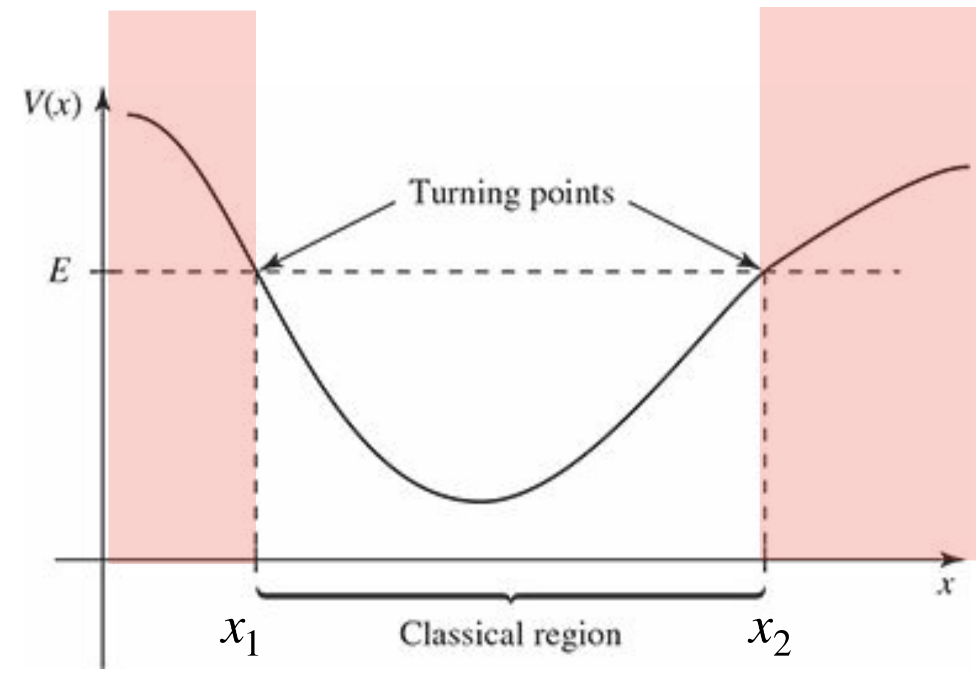
- Real part: $A'' - A(\phi')^2 = -k^2 A \quad \rightarrow \quad \cancel{\frac{A''(x)}{A(x)}} = [\phi'(x)]^2 - k^2(x)$ پتانسیل «کند تغییر»!

$$\rightarrow \quad \phi'(x) = \pm k(x) \quad \rightarrow \quad \phi(x) = \pm \int dx'\, k(x') \quad \rightarrow \quad \psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{C}{\sqrt{|k(x)|}} e^{\pm i \int dx'\, k(x')}$$

- **Non-classical region: E < V(x)**

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m[E - V(x)]}}{\hbar}$$ Complex

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(x) = \frac{C}{\sqrt{|k(x)|}} e^{\pm \int \mathrm{d}x' |k(x')|}$$



● **اعتبار تقریب: قابل اغماض بودن A”**

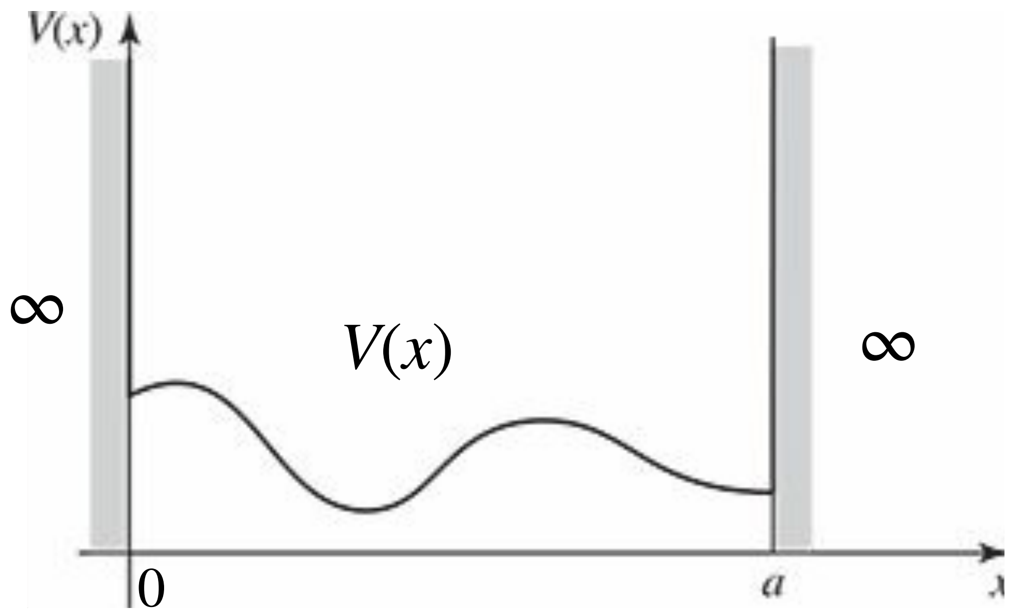
$$\left| \frac{A''(x)}{A(x)} \right| << |k^2(x)| \quad \rightarrow \quad \left| \frac{k''(x)}{k^3(x)} - \frac{3}{2} \left(\frac{k'(x)}{k^2(x)} \right)^2 \right| << 1$$

● پتانسیل باید «کند تغییر» باشد، یعنی تغییرات V(x) در بازه یک طول موج $\lambda(x)$ کوچیک باشد

$$\lambda(x) = \frac{1}{k(x)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}$$

● در مجاورت نقاط بازگشت (E=V)، طول موج بینهایت شده و تقریب WKB غیر معتبر خواهد بود.
مگر برای پتانسیل ثابت: $V(x) = V_0 \rightarrow k' = 0$

● مثال: چاه پتانسیل بینهایت با کف ناهموار [E>V(x)]



$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left[C_+ e^{i\phi(x)} + C_- e^{-i\phi(x)}\right]$$
$$= \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left\{C_s \sin[\phi(x)] + C_c \cos[\phi(x)]\right\}$$

(اثر ثابتهای انتگرالگیری و انتخاب مبدا در ضرایب C قابل جذب است)

$$\phi(x) = \int_0^x \mathrm{d}x'\, k(x') \qquad \phi(0) = 0$$

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m[E - V(x)]}}{\hbar}$$

Boundary Conditions:

● چون پتانسیل در دیواره ها بینهایت است، تابع موج در مرزها صفر خواهد بود.

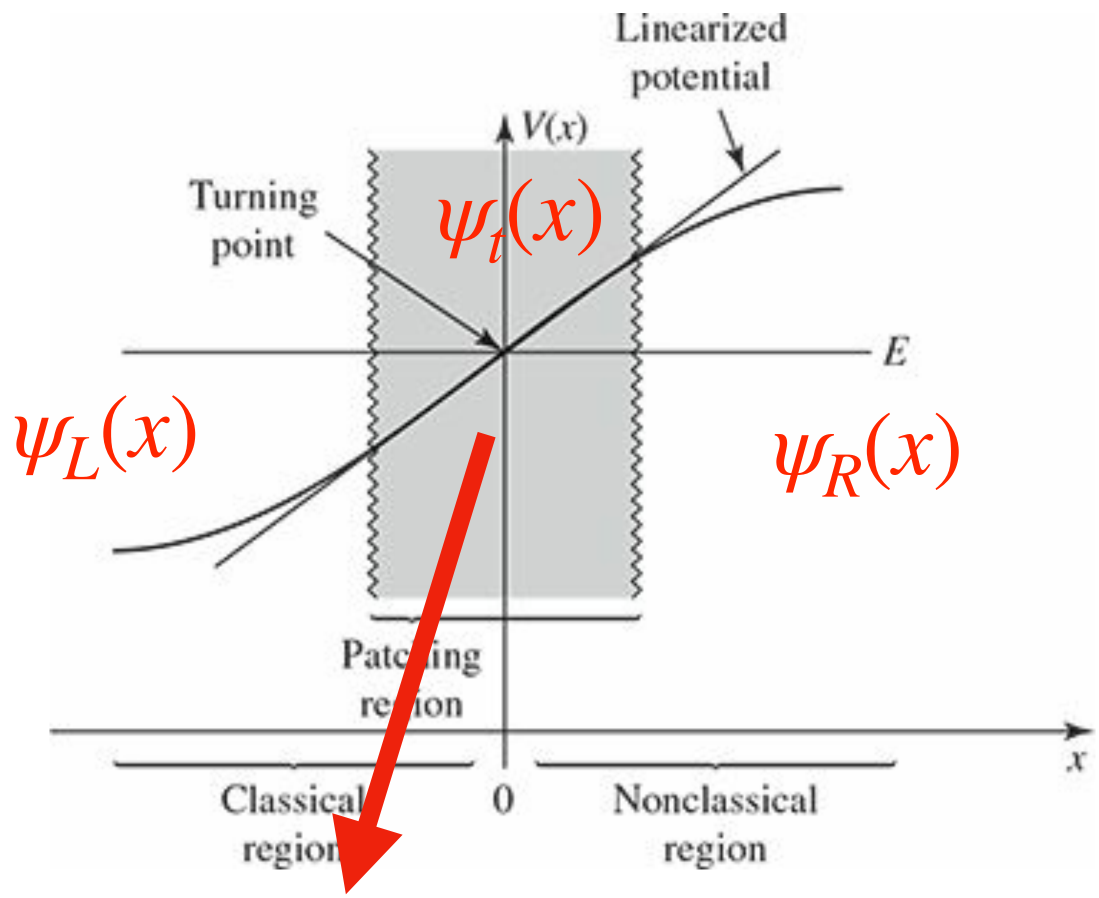
$$\psi_{\text{WKB}}(0) = 0 \quad \rightarrow \quad C_c = 0$$
$$\psi_{\text{WKB}}(a) = 0 \quad \rightarrow \quad \phi(a) = n\pi \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

Quantization condition $$\int_0^a \mathrm{d}x\, k(x) = n\pi$$

بررسی کنید که برای پتانسیل ثابت، همان انرژی های مجاز شناخته شده چاه پتانسیل بینهایت بدست می‌آید.

اتصال در نقاط بازگشت:

- ضرایب نامعلوم علی الاصول باید از شرط پیوستگی تابع موج در مرز بدست آیند، ولی جوابهای تقریبی فوق، در مرز که نقطه بازگشت است نامعتبرند.
- برای رفع این مشکل، جواب تقریبی برای تابع موج از حل معادله شرودینگر بدست می آوریم که در مجاورت نقطه بازگشت (هر دوسوی آن) معتبر باشد. سپس این جواب جدید را در سمت چپ و راست به پاسخهای بدست آمده از تقریب WKB در همان سمت متصل می‌کنیم.



$$\psi_L(x<0) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left[A_+ e^{i\int_x^0 dx' k(x')} + A\_ e^{-i\int_x^0 dx' k(x')}\right]$$

$$\psi_R(x>0) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left[B e^{-\int_0^x dx' |k(x')|} + \cancel{C e^{+\int_0^x dx' |k(x')|}}\right]$$

اگر V(x) برای تمامی مقادیر مثبت x بزرگتر از E باقی بماند

$$V(x \to 0) \approx E + V'(0)\,x$$

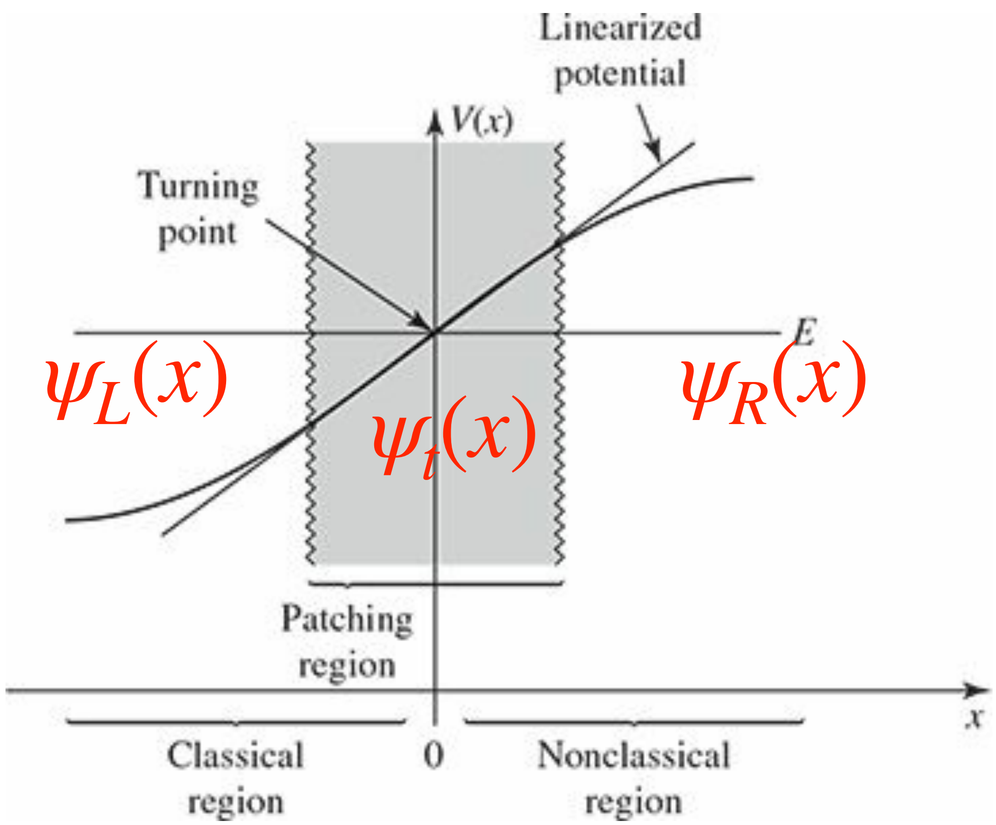
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + E + V'(0)x\right]\psi_t(x) = E\psi_t(x)$$

$$\frac{d^2\psi_t(x)}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_t(x) \quad [\alpha^3 \equiv 2mV'(0)/\hbar^2]$$

$$\frac{d^2\psi_t(y)}{dy^2} = y\psi_t(y) \quad [y \equiv \alpha x]$$

- جوابهای این معادله دیفرانسیل توابع ایری (Airy) است
(مستقل از شکل تابع پتانسیل اولیه V(x))

$$\psi_t(x) = a\,Ai(\alpha x) + b\,Bi(\alpha x)$$



- شرط پیوستگی تابع موج میانی ψ_t را در سمت چپ با پاسخ تقریب WKB برای سمت چپ، و در سمت راست با پاسخ تقریب WKB در سمت راست برآورده می‌کنیم.

- برای این منظور از رفتار حدی توابع ایری در x<<0 و x>>0 و بسط k(x) در نزدیکی نقطه بازگشت برای جوابهای WKB کمک میگیریم.

$$\psi_L(x<0) = \frac{2B}{\sqrt{k(x)}} \sin\left[\int_x^0 dx' k(x') + \frac{\pi}{4}\right]$$

$$\psi_R(x>0) = \frac{B}{\sqrt{|k(x)|}} \exp\left[-\int_0^x dx' |k(x')|\right]$$

- جزئیات محاسبات نسبتا طولانی و رفتار حدی توابع ایری را در کتاب مکانیک کوانتومی گرفیتز (Griffiths) ببینید.

- در حالت کلی باید در مجاورت هر نقطه بازگشت، یک تابع اتصال بدست آورده و آنرا با پاسخهای تقریب WKB در دو سوی همان نقطه بازگشت متصل داد.