

Kvaziklasické přiblížení. Metoda WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin)
(také Jeffreys ... někdy JWKB)

- široké pole .. mnoho metod .. metody založené na funkcionální integraci
- zde hlavně 1D WKB ... drtivě výpočetní metoda
- ~~ale~~ dnes: 1D numericky triviální, ale WKB dává vhled a anal. formule i pro přemě neřešitelné probl.
- + souvislost s klasickou mechanikou.

ODVOZENÍ METODY:

vždy můžeme psát $\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)}$ $S \in \mathbb{C}$ pro x, t

dosazení do (SR): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{x}) \psi$

$\Rightarrow -\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta S + \frac{1}{2m} \vec{\nabla} S \cdot \vec{\nabla} S + V(x)$ (*)

semiklas aprox: $\hbar \rightarrow 0$ (v nějakém smyslu, který upřesníme)

.. rozvoj: $S(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} (\frac{\hbar}{i})^n S_n(x, t)$ dosazení do (*)

(0.ř): $\frac{\partial S_0(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \vec{\nabla} S_0 \cdot \vec{\nabla} S_0 + V(x) = 0$ (**)

(1.ř): $\frac{\partial S_1(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{m} (\vec{\nabla} S_0 \cdot \vec{\nabla} S_1) + \frac{1}{2m} \Delta S_0(x, t) = 0$

Poznámky:

(0.ř) je klasická Hamiltonova-Jakobiho rovnice
 jejím řešením je akce $S_0(x, t) = \int_{t_0}^{t} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt$ $q \dots$ trajektorie
 spojuje (x_0, t_0) a (x, t)
 \rightarrow reálná funkce ; $\rightarrow S_1$ rovněž reálná

t_j $\psi(x, t) = |\rho(x, t)| e^{\frac{i}{\hbar} S_0(x, t)}$; zde $|\rho| \equiv \exp\{S_1(x, t)\}$

(v nejmenší řádě)

v klasické mechanice se odvozuje $\vec{p} = \vec{\nabla}_x S_0(x, t)$ UKAZUJE JAK POROVNÁVAT KLAS. A KVAUT. MECHANIKU

\rightarrow hustota proud. $\rho(x, t) \equiv |\psi|^2 = e^{2S_1}$

\rightarrow tok proud. $\vec{j}(x, t) \equiv \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\vec{\nabla} \rho + \frac{i}{\hbar} \rho \nabla S_0) = e^{\frac{2S_1}{\hbar}} \cdot \frac{1}{m} \vec{\nabla} S_0$

v kvant. mech. může být apokryf s interpret. $\frac{1}{m} \vec{\nabla} S_0$ je to rychl. v místě x ,
 (nelze neurčitosti)
 ale nelze ubohně na interpret. s klas. mech. L nicméně platí $\frac{1}{m} \langle p \rangle = \langle \vec{j} \rangle$

proud. interpretace jako stat. ansámbl. částic rozděl s proud. roz. $\rho(x, t)$
 \rightarrow klas. rovnice kont. $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0$

\bullet oblast použitelnosti aproximace $S \approx S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1$:

analýza 1.ř. nelá, t_j (***) a (***) se liší málo t_j : $|\frac{i\hbar}{2m} \Delta S_0| \ll \frac{1}{2m} \vec{\nabla} S_0 \cdot \vec{\nabla} S_0 = \frac{p^2}{2m}$

v 1D: $(\frac{\hbar}{p}) \cdot \frac{d}{dx} \frac{p}{p} \ll 1$ -- relativní změna $p(x)$ na $\frac{d}{dx} \frac{p}{p}$ $\ll 1$ je
 $= \lambda \dots$ de Broglie vlnová délka $\dots e^{\frac{i}{\hbar} p x} = e^{i x / \lambda} = e^{2\pi i x / \lambda}$ λ je
 (až na faktor 2π) malá

APLIKACE: .. řešení na 1D čas nezávislé problémy

.. a klas. mech. řešení: pro čas. závis. nat: $S_0(x,t) = W(x) - Et$

.. rovn. .. pro stacionární stav s energi. E: $\psi(x,t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$

tj; $S_1(x,t) \equiv S_1(x)$ nezávis. na čase

dosažení do (x 0, ħ): $\rightarrow [W'(x)]^2 = 2m[E - V(x)] \dots$ pro $E > V(x)$ klas. fyzik. v místě x

(x 1, ħ): $\rightarrow \frac{1}{M} W'(x) \cdot S_1'(x) + \frac{1}{2M} W''(x) = 0$

def: $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} \Rightarrow \frac{d}{dx} W(x) = \pm p(x)$ (±i | p |) pro $E < V(x)$
 $S_1'(x) = -\frac{1}{2} \frac{W''}{W'} = \frac{d}{dx} \ln \frac{1}{|p(x)|}$

$\Rightarrow W(x) = \pm \int p(x) dx$ exp { $S_1(x)$ } = $\frac{1}{|p(x)|} \cdot C$

aplikace na hledání řešení stac. Š.R. v 1D: $\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi = 0$ (S.R.)

$\psi = e^{S_1} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S_0}$: a klas. povolená obl:

(a) klas. povolená oblasi $E > V(x)$:

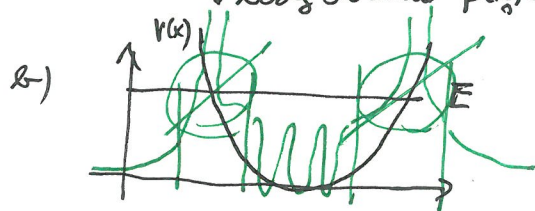
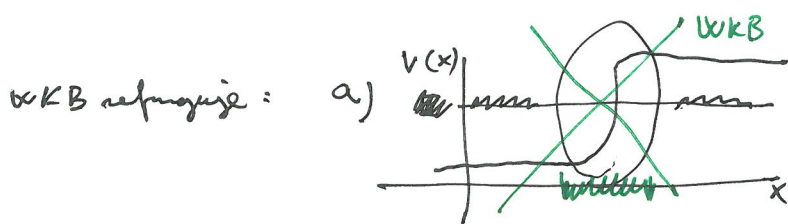
$\psi(x) = C_1 \frac{1}{|p(x)|} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right\} + C_2 \frac{1}{|p(x)|} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right\}$

(b) klas. zakázaná oblasi $E < V(x)$:

$\psi(x) = C_1 \frac{1}{|p(x)|} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx \right\} + C_2 \frac{1}{|p(x)|} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx \right\}$

Problém: oblasi plachosti: $\frac{\hbar}{p} \cdot \frac{p'}{p} \ll 1$... špatné: prudké změny p (tj; V(x))

"body oblasi" $p(x) = 0$

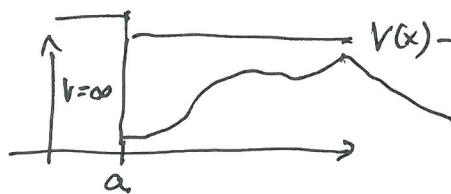


ŘEŠENÍ: - analytické řešení (S.R.) v okolí probl. bodů + nepoznávaní

- tabulka je důvod proč je WKB maloucí relativně zlovede

často použív. příklady:

① Nekonečná stěna:



.. $V = \infty$ pro $x < a$

tj; $\psi(x) = 0$ pro $x < a$ (přesná řeš.)

+ spoj. vln. fun. .. $\psi(x) = 0$ $x = a$

\rightarrow obrázek podmín. $x = a$ a přes. řešení

WKB pro $x > a$: $\psi(x) = \frac{N}{\sqrt{p(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\}$

pozn: pro $V = \text{konst}$ dokonce přesné řešení; pro zátěže na (a, b) dodat. podmín $\psi(b) = 0$ nově mění

Kolo řešení funguje i. pro sfér. sym. problémy

... radiální uln. fce $R(r)$ $\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

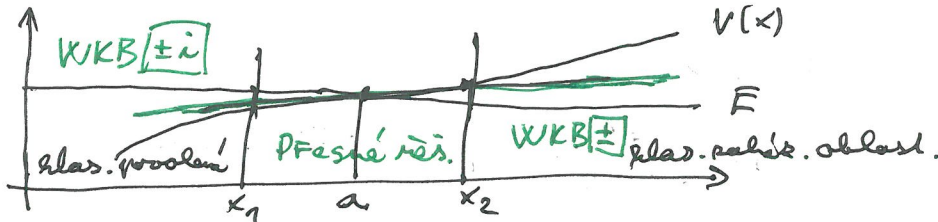
$\chi(r)$ splňuje 1D SR $\circ V \rightarrow V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$

a always podmín $\chi(r=0) = 0 \dots$ tj; jáke $V(r) = \infty$ pro $r < 0$

... ekvival. tomu je $\chi(r)$ je lichá fce

$\rightarrow \chi_0(r) = \frac{N}{\sqrt{|p(x)|}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right\}$

② Aproximace lineárním potenciálem v okolí bodu obrátu:



v oblasti přech. řešení ... $V(x) \sim V(a) \cdot (x-a) + E$

$\rightarrow \psi(x)$ - přech. je evané

v bodech x_1 a x_2 napojování $\psi(x)$ na přes řešení

pro lin. potenciál $\psi(x) =$ Airyho fce resp. Bessel. fce $\nu = 1/3$ $\left(\frac{2}{3} (x-a)^{3/2} \right)$

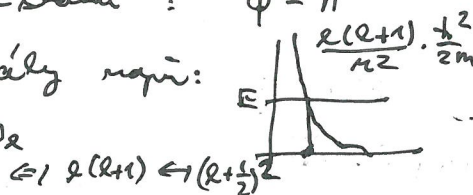
výsledek: obecně: $\frac{N}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\phi}{2} \right\}$

ϕ je KKB fáze ... pro lin. potenciál: $N=1$ $\phi = \frac{\pi}{2}$

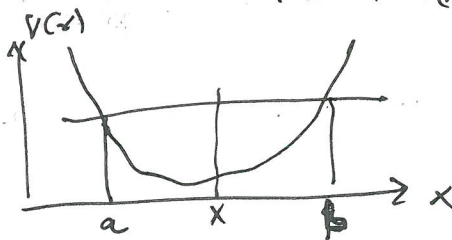
přech. přívod ∞ -státni: $\phi = \pi$

Podobně se, když uděláš jiné potenciály např.:

... Langerova korekce ... ϕ_2



Aplikace na vázané stavy:



always podmín v a: $\psi \sim \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx' - \frac{\phi_a}{2} \right\}$

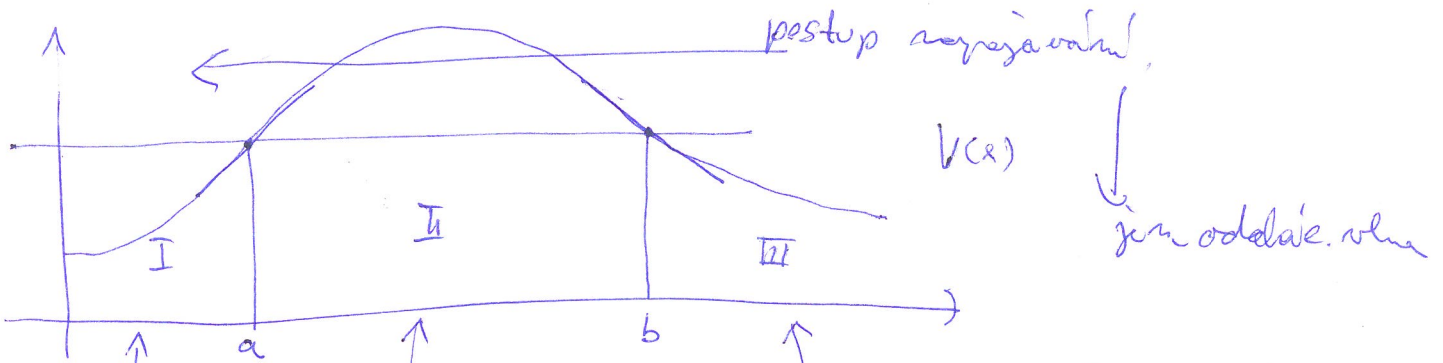
-v- v b: $\psi \sim \cos \left\{ +\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx' - \frac{\phi_b}{2} \right\} = \cos \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx' + \frac{\phi_b}{2} \right\}$

... napojování $\Rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_a^x p x' - \frac{\phi_a}{2} - \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx' + \frac{\phi_b}{2} \right) = m\pi$

tj $\int_a^b p(x') dx' = \left\{ m\pi + \frac{\phi_a + \phi_b}{2} \right\} \hbar$

v případě always dobře aprox. lin. potenciálem: $\int_a^b p(x') dx' = \pi \hbar \left(m + \frac{1}{2} \right)$
 $\phi_a = \phi_b = \frac{\pi}{2}$

Koeficient příniku bariéry:



$$2 \sqrt{\frac{D}{\hbar v}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx - \frac{1}{4}\pi\right) \rightarrow \sqrt{\frac{D}{\hbar v}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx + i\frac{\pi}{4}\right)$$

$$\sqrt{\frac{D}{\hbar v}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right\} = \sqrt{\frac{D}{\hbar v}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right| - \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx \right\}$$

ϕ ... jen fáze ... faktor zeslabení je dáno $e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx}$
 t ; pravděpodobnost průniku $P \sim |\phi|^2 = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx}$