Cwiczenia 18

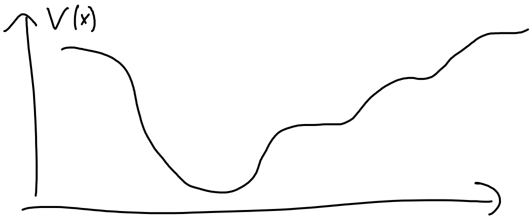
5 maja 2014
22:37

Przybliżenie WKB

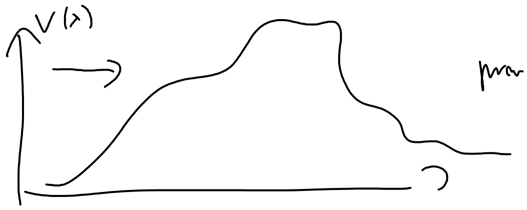
(Wentzel-Kramers-Brillouin)

Umiemy znaleźć stany związane w prostych potencjałach i tunelowanie przez proste bariery.

Co zrobić w ogólnych sytuacjach np



stany związane?
(energie kwantowane?)



prawdop. tunelowania?

Ściśle się nie da, ale chcemy przybliżenie półklasyczne — „I-sza poprawka" do ruchu klasycznego

Rów. Schrödingera bez czasu

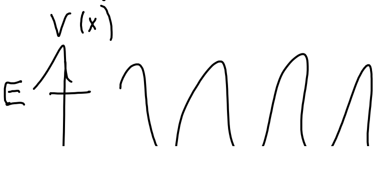
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = \left(E - V(x)\right)\psi$$

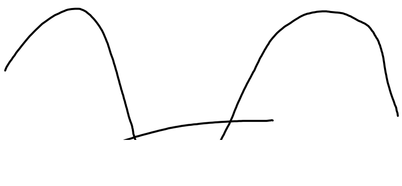
- Wiemy jak rozwiązać jeśli potencjał stały: $V(x)=V$

$$\psi(x) = A e^{\frac{ipx}{\hbar}} \qquad p = \sqrt{2m(E-V)}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

- Może da się coś podobnego jeśli potencjał zmienia się wystarczająco wolno





duży pęd klasyczny, mała λ

mały pęd, duża λ

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p_{klas}(x)} \qquad p_{klas}(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}$$

Spodziewamy się słabych efektów kwantowych jeśli $\lambda(x)$ zmienia się „wolno" tzn na odległości rzędu λ, $\lambda(x)$ zmieni się mało

$$\delta\lambda = \left|\frac{d\lambda}{dx}\cdot\lambda\right| \ll \lambda \quad \Rightarrow \quad \left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\frac{2\pi\hbar}{(2m(E-V(x)))^{\frac{3}{2}}}\, 2m\frac{dV}{dx} \ll 1 \\ \frac{m\lambda^3}{\hbar^2}\left|\frac{dV}{dx}\right| \ll 1 \qquad \left|\frac{dV}{dx}\right| \ll \frac{p_{klas}^3}{m\hbar} \end{cases}$$

Szukamy rozwiązań postaci:

$$\psi(x) = A e^{\frac{iS(x)}{\hbar}}$$

Wstawiamy do rów Schrödingera i patrzymy na wiodące rzędy w $\hbar$:

$$\frac{d}{dx}\psi(x) = \frac{iA}{\hbar} S'(x)\, e^{\frac{iS(x)}{\hbar}}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{iA}{\hbar} S'' e^{\frac{iS}{\hbar}} - \frac{A}{\hbar^2} S'^2 e^{\frac{iS}{\hbar}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{iS''}{\hbar} - \frac{S'^2}{\hbar^2} \right) = (E-V)$$

$$S'^2 - i\hbar S'' = 2m(E-V(x)) = p_{klas}(x)^2$$

Rozwijamy $S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + O(\hbar^2)$

$$S_0'^2 + 2 S_0' S_1' \hbar - i\hbar S_0'' + O(\hbar^2) = p^2$$

Kolejne rzędy:

$$\begin{cases} S_0'^2 = p^2 & (0) \\ 2 S_0' S_1' - i S_0'' = 0 & (1) \\ \dots \end{cases}$$

$$S_0(x) = \pm \int_{x_0}^{x} p(x)\, dx$$

$$\pm 2 p S_1' \mp i \frac{dp}{dx} = 0$$

$$\frac{dS_1}{dx} = i \frac{1}{2} \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} \qquad S_1(x) = \frac{1}{2} \int_{x_0}^{x} \frac{d \ln p(x)}{dx} = i \frac{1}{2} \ln p(x)$$

Żeby to miało sens rozwijając w zmiana od x zdominowana przez S_0

$$\left| \frac{\hbar S_1'}{S_0'} \right| \ll 1 \quad \text{a to oznacza:}$$

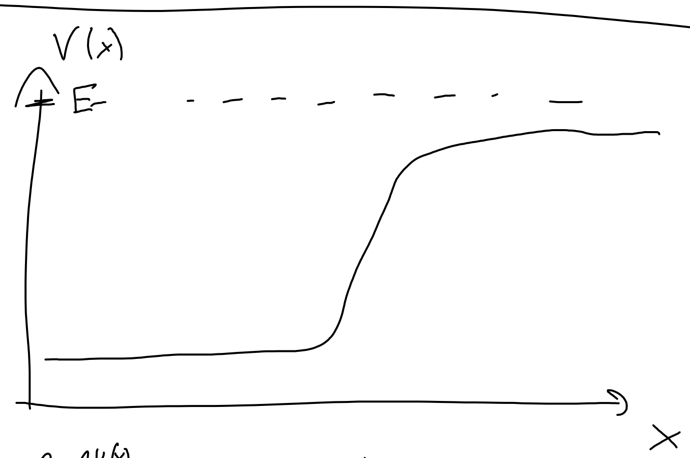
$$\left| \frac{\hbar}{p^2} \frac{dp}{dx} \right| \ll 1 \qquad p = \frac{h}{\lambda} \qquad \frac{dp}{dx} = \frac{h}{\lambda^2} \frac{d\lambda}{dx}$$

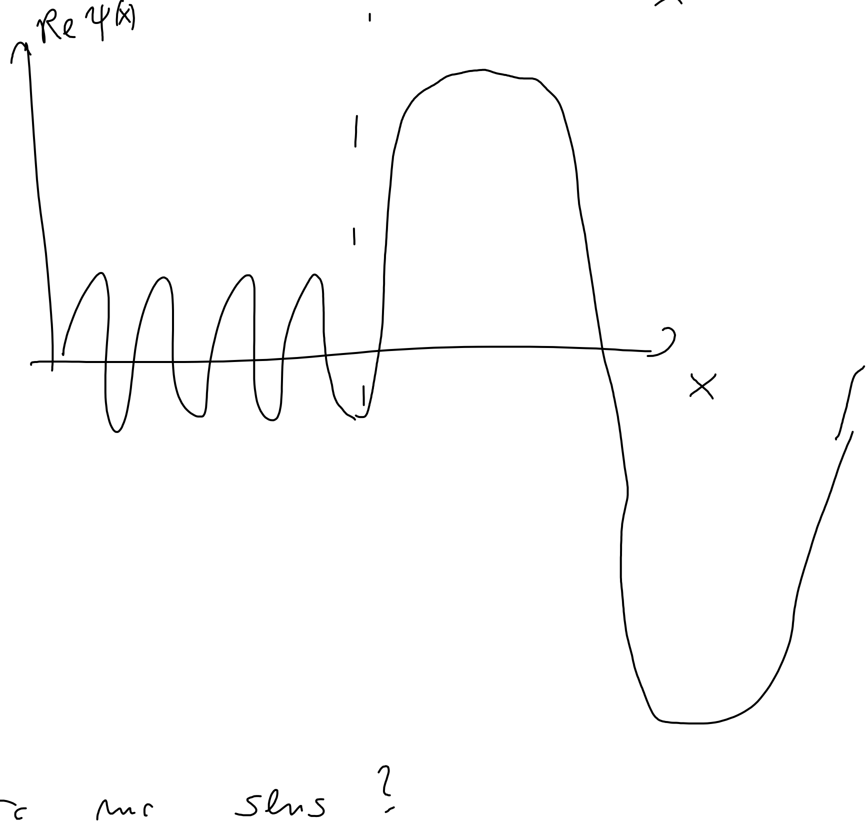
$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad \text{zgodne z naszą intuicją}$$

W tym przybliżeniu funkcja falowa :

$$\psi(x) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(S_0(x) + i\hbar \frac{1}{2}\ln p(x)\right)} =$$

$$\boxed{\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}}\, e^{\frac{i S_0(x)}{\hbar}} \qquad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \qquad S_0(x) = \pm\int_{x_0}^{x} p(x)\, dx \qquad \text{jeśli } E > V(x)}$$





Czy to ma sens ?

$$|\psi(x)|^2 = \frac{|A|^2}{p(x)} = \frac{|A|^2}{mv(x)}$$

gęstość prawd. znalezienia klasycznej cząstki gęstość prawd. znalezienia cząstki odwrotnie propor. do prędkości – tak jak klasycznie

Jeśli $E < V(x)$

możemy powtórzyć rozumowanie, wszystko tak samo tylko $p(x)$ – urojony $\quad p(x) = i\,|p(x)|$

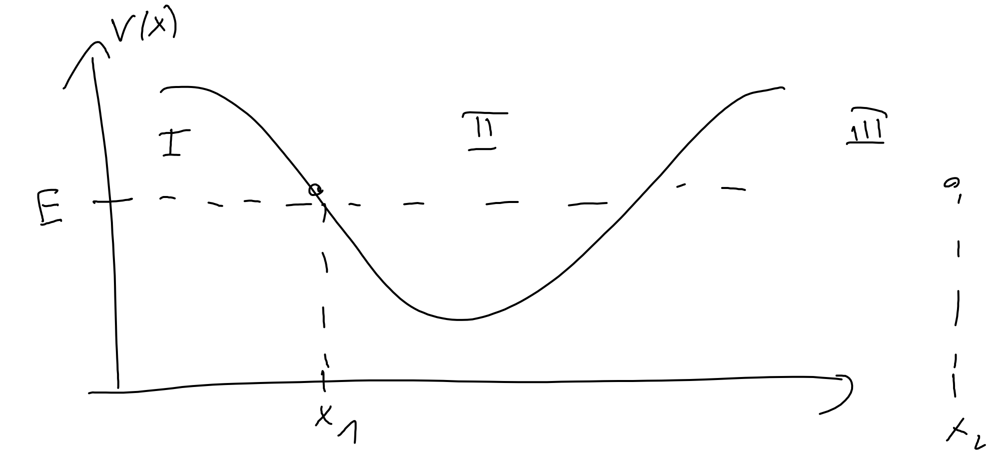
$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}}\, e^{\pm \frac{|S_0(x)|}{\hbar}} \qquad |S_0(x)| = \int_{x_0}^{x} |p(x)|\, dx$$

Σ f. wykładnicze.

Ten opis załamuje się gdy $E \approx V$ wtedy $p(x) \approx 0$ $\quad \lambda \approx \infty$ i warunek $\frac{d\lambda}{dx} \ll 1$ nie spełniony.

Jak to zastosować do liczenia czegoś konkretnego?

Stany związane



Poza punktami x_1 i x_2 stosujemy WKB

II:

$$\psi_{II}(x) = \frac{B_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x)} + \frac{B_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x)} =$$

$$= \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x)\,dx + \delta\right)$$

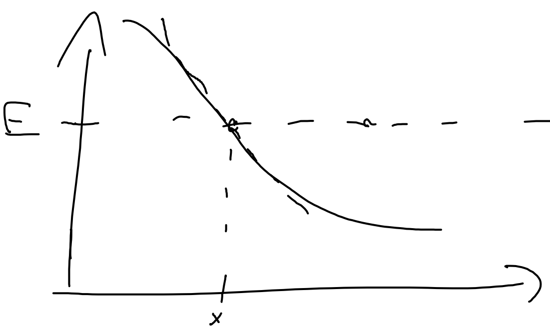
I: (odrzucamy wybuchające wykładniczo)

$$\psi_{I}(x) = \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1} |p(x)|}$$

III

$$\psi_{III} = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} |p(x)|}$$

Jak te funkcje zszyć?

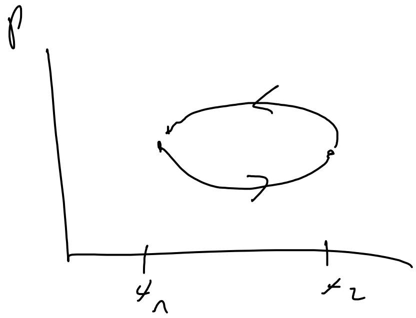


Zszywamy przez rozwiązanie dla potencjału liniowego – f. Airy'ego

...

$$\boxed{\int^{x_2} p(x)\,dx = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi = \frac{h}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)}$$

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,dx = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi = \frac{h}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$



$$\oint p(x)\,dx = h\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Warunek kwantyzacji na „ruch klasyczny”

Przykład oscylator harmoniczny

$$p(x) = \sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}$$

$$x_1 = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \qquad x_2 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

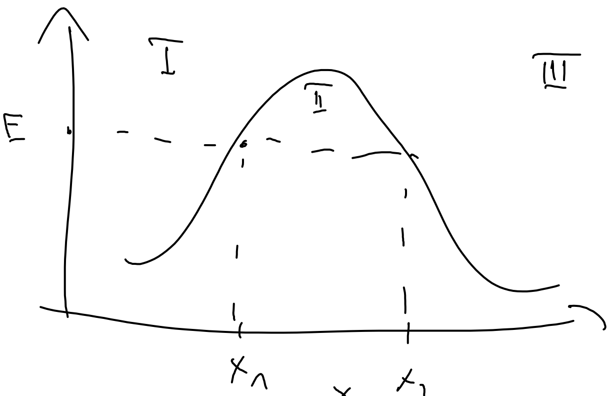
$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}\,dx = \left\{ \cos\theta = x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} \right.$$

$$= \sqrt{2mE}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{1-\cos^2\theta}\,\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\,\sin\theta =$$

$$= \sqrt{\frac{4mE^2}{m\omega^2}}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-t^2}\,dt = \frac{2E}{\omega}\,\frac{\pi}{2} = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$$

$$E = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$ wyjątkowo się zgadza

Tunelowanie przez barierę



$$\psi_I(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_1} p(x)\,dx + \frac{\pi}{4}} + \frac{B}{\sqrt{p(x)}}\, e^{+\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_1} p(x)\,dx + \frac{\pi}{4}}$$

(fala padająca) (odbita) dla wygody

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} |p(x)|} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}}\, e^{\frac{1}{\hbar} |p(x)|}$$

$$\psi_{III}(x) = \frac{F}{\sqrt{p(x)}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_2}^{x} p(x)\,dx + \frac{\pi}{4}}$$

Współczynnik transmisji:

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{1}{\left(\frac{1}{4r} + r\right)^2} \qquad r = e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p(x)|\,dx}$$

w przybliżeniu WKB $r \gg 1$

czyli

$$T \simeq \frac{1}{r^2} \qquad R = 1 - \frac{1}{r^2}$$

pamiętacie ... związane z rozpadem α ?