WKB 近似

量子力学でプランク定数についてべき級数展開したときの第1近似

→ 古典力学が導かれる

という準古典的近似法のこと

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x,t)\psi$$

イセン

波動関数を $\boxed{\psi(x,t) = A(x,t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x,t)\right)}$ と仮定

$$左辺 = i\hbar\left[\frac{\partial A(x,t)}{\partial t}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) + A\cdot\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\right]$$

$$= A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\left[i\hbar\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial t}\right]$$

~~右辺=~~

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\nabla A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) + A\cdot\frac{i}{\hbar}\nabla S\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla^2 A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) + \underline{(\nabla A)\cdot\left(\frac{i}{\hbar}\nabla S\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)} + \right.$$

$$\left. + \underline{\frac{i}{\hbar}(\nabla A)\cdot(\nabla S)}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) + \frac{i}{\hbar}A\nabla^2 S\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) - \frac{1}{\hbar^2}A(\nabla S)^2\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\left[\frac{\nabla^2 A}{A} + \frac{2i}{\hbar}(\nabla S)\cdot\frac{\nabla A}{A} + \frac{i}{\hbar}\nabla^2 S - \frac{(\nabla S)^2}{\hbar^2}\right]$$

ℏの0次

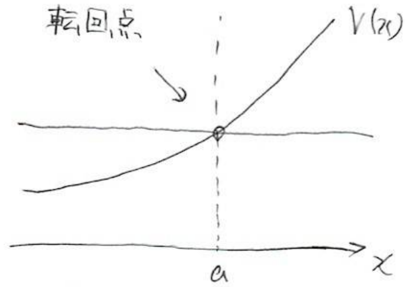
$$\frac{S_0'^2}{2m} - (E - V(x)) = 0$$

$$\therefore \boxed{S_0'^2 - 2m(E - V(x)) = 0}$$

ℏの1次

$$\frac{S_0' S_1'}{m} - \frac{i S_0''}{2m} = 0 \qquad \therefore \boxed{i S_0'' - 2 S_0' S_1' = 0}$$

$E > V(x)$ のとき、



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} = E - V(x)$$ Vが定数ならこのようになる

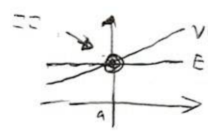
$$\lambda^2 = -\frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \qquad \lambda = \pm i \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}$$

そこで、$\boxed{k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}}$ とおくと、

$$S_0'(x) = \pm\sqrt{2m(E - V(x))} = \pm \hbar k(x)$$

$$\therefore S_0(x) = \pm \hbar \int_a^x dx' \, k(x')$$

$$S_0'(a) = \hbar\sqrt{2m(E - V(a))} = 0$$



2つ目の式に代入

$$S_1' = \frac{i}{2}\frac{S_0''}{S_0'} \Leftrightarrow \cancel{S_1(x) = \frac{i}{2}\int_a^x dx' \frac{d}{dx'}(\log S_0'(x'))}$$

$$\cancel{= \frac{i}{2}(\log S_0'(x) - \log S_0'(a))}$$

$$= \pm \frac{i}{2}$$

$$S_1'(x) = \frac{i}{2}\frac{k'(x)}{k(x)}$$

$$\therefore S_1(x) = \frac{i}{2}\log k(x) + C$$

→ 近似した波動関数 $u(x) = C \exp\left(i \frac{\pm\hbar\int_a^x dx' k(x') + \frac{i\hbar}{2}\log k(x)}{\hbar}\right)$

$$= C \exp\left(\pm i \int_a^x dx' \, k(x')\right) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\log k(x)\right)$$

・$\hbar \to 0$ の極限で、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2}m\left(\frac{\nabla S}{m}\right)^2 + V$$

$$= \frac{(\nabla S(x,t))^2}{2m} + V$$

$$\downarrow$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = 0$$

Hamilton-Jacobi 方程式

$$v = \frac{j}{\rho} = \frac{\nabla S}{m}$$

シュレーディンガー方程式
古典極限

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = 0$$

ポテンシャルが時間に依らない場合

$$\psi(x,t) = u(x)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad u(x) = C\exp\left(i\frac{S(x)}{\hbar}\right)$$

と書ける。

シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(-\frac{(\nabla S)^2}{\hbar^2}\right)\psi + \frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\,\psi\right] \overset{+V\psi}{\wedge} = E\psi$$

$$\Leftrightarrow \frac{(\nabla S)^2}{2m} - [E - V(x)] - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S = 0$$

関数 $S(x)$ をプランク定数についてべき級数展開する。

代入

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \hbar^2 S_2 + \cdots$$

$$\frac{1}{2m}(S_0' + \hbar S_1' + \cdots)^2 - [E - V(x)] - \frac{i\hbar}{2m}(S_0'' + \hbar S_1'' + \cdots) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{2m}\left[S_0'^2 + 2\hbar S_0' S_1'\right] - [E - V(x)] - \frac{i\hbar}{2m}S_0'' = 0$$

よって

$$i\hbar\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial t}-\frac{\partial S}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\nabla^2 A}{A}+\frac{2i}{\hbar}(\nabla S)\cdot\left(\frac{\nabla A}{A}\right)+\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S-\frac{(\nabla S)^2}{\hbar^2}\right]+V$$ 虚部と実部に分ける

$$\Leftrightarrow\quad -\left(\frac{\partial S}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A}+V+\frac{(\nabla S)^2}{2m}\right)+i\hbar\left(\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{1}{mA}(\nabla S)\cdot(\nabla A)+\frac{1}{2m}\nabla^2 S\right)=0$$

各括弧 0 より

① $$\frac{\partial S}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A}+V+\frac{(\nabla S)^2}{2m}=0$$

$$\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{1}{mA}(\nabla S)\cdot(\nabla A)+\frac{1}{2m}\nabla^2 S=0$$

$$\Leftrightarrow\quad m\frac{\partial A}{\partial t}+(\nabla S)\cdot(\nabla A)+\frac{A}{2}\nabla^2 S=0$$ ②

シュレーディンガー方程式と等価

プランク定数 0 の極限 = 古典極限

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V=0}$$

何故 $\hbar\to 0$ を古典近似というか

$\Leftrightarrow [x,p]=i\hbar\to 0$

つまり x と p が交換

今 A について、

$\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2=A(x,t)^2$ より 確率密度となっている.

$j(x,t)=$

$$P=\int d^3x\,|\psi|^2$$

$$\left(\begin{aligned} i\hbar\frac{d\psi}{dt}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\\ -i\hbar\frac{d\psi^*}{dt}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*\end{aligned}\right)$$

$$0=\frac{dP}{dt}=\int d^3x\left(\frac{d\psi^*}{dt}\psi+\psi^*\frac{d\psi}{dt}\right)=$$

$$=\int d^3x\left(-\frac{\hbar}{2mi}\right)\left[-\nabla^2\psi^*\psi+\psi^*\nabla^2\psi\right]$$

$$=\int d^3x\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)\left[\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\nabla\psi^*\psi\right)+\cancel{(\nabla\psi^*)(\nabla\psi)}-\cancel{(\nabla\psi^*)(\nabla\psi)}\right]$$

$$=\int\frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\nabla\psi^*\psi\right)\quad\longrightarrow\quad\boxed{j(x,t)=\frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi^*(\nabla\psi)-(\nabla\psi^*)\psi\right)}$$

$$j(x,t) = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\frac{\nabla A}{A} + \frac{i}{\hbar}\nabla S - \frac{\nabla A}{A} + \frac{i}{\hbar}\nabla S\right]A^2$$

$$= \frac{+2\nabla S}{2m}A^2 = +\frac{\nabla S}{m}A^2.$$

$$\nabla\psi = \nabla A \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) + \frac{i}{\hbar}(\nabla S)A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

$$= \left(\frac{\nabla A}{A} + \frac{i}{\hbar}\nabla S\right)\psi$$

$$\nabla\psi^* = \left(\frac{\nabla A}{A} - \frac{i}{\hbar}\nabla S\right)\psi^*$$

② より

$$m\frac{dA}{dt} + (\nabla S)\cdot(\nabla A) + \frac{A}{2}\nabla^2 S = 0$$

$$\Leftrightarrow 2A\frac{dA}{dt} + \frac{2A}{m}(\nabla S)\cdot(\nabla A) + A^2\frac{\nabla^2 S}{m} = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{dA^2}{dt} + \nabla\left(A^2\frac{\nabla S}{m}\right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d\rho}{dt} + \nabla\cdot j = 0$$ ← 連続の方程式が成り立つ.

このとき、$v = \frac{j}{\rho}$ で表せるので、

$$v = \frac{j}{\rho} = \frac{1}{A^2}\cdot\frac{\nabla S}{m}A^2 = \frac{\nabla S}{m}$$

$v = \frac{\nabla S}{m}$

代入

シュレーディンガー方程式の ~~虚~~ 実部

$$\frac{dS}{dt} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A} + V + \frac{(\nabla S)^2}{2m} = 0$$

↓ 古典極限

$$\frac{dS}{dt} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = 0$$

$$\frac{dS}{dt} + \frac{mv^2}{2} + V = 0 \Leftrightarrow \nabla\left(\frac{dS}{dt} + \frac{mv^2}{2} + V\right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \underline{\frac{d(\nabla S)}{dt} + mv\cdot(\nabla v)} + \nabla V = 0$$

$$\Leftrightarrow \cancel{\frac{d(mv)}{dt} + mv}$$

$$m\frac{dv}{dt}$$

$$\therefore m\frac{dv}{dt} = -\nabla V$$