Δομικά στοιχεία της προσέγγισης WKB

Ν. Λυγερός

Η προσέγγιση των G. Wentzel, H.A. Kramers και L. Brillouin επιτρέπει την επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger όταν δεν υπάρχει ακριβής λύση. Έστω

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

Εάν το δυναμικό V είναι σταθερό τότε $\psi = \pm e^{ikx}$ είναι λύση. Αυτό σημαίνει ότι, εάν το δυναμικό V είναι ομαλή συνάρτηση της μεταβλητής x, τότε μπορούμε να δοκιμάσουμε τις συναρτήσεις μορφής: $\psi(x) = e^{iu(x)}$.

Άρα έχουμε: $\frac{d^2}{dx^2}e^{iu(x)} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)e^{iu(x)} = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dx}\left(\frac{idu(x)}{dx} \cdot e^{iu(x)}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)e^{iu(x)} = 0.$

$$i\frac{d^2}{dx^2}u(x) \cdot e^{iu(x)} + i\frac{du(x) \cdot i}{dx}\frac{du(x) \cdot e^{iu(x)}}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)e^{iu(x)} = 0$$
$$\Leftrightarrow i\frac{d^2}{dx^2}u(x) + i^2\left(\frac{du(x)}{dx}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big) = 0$$

Έστω $k(x) = \left\{\frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\right\}^{\frac{1}{2}}$ εάν $E > V(x)$ και $k(x) = -i\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\right\}^{\frac{1}{2}} = -i\kappa(x)$ εάν $E < V(x)$

τότε $i\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \left(\frac{du(x)}{dx}\right)^2 + k^2(x) = 0$. Για ένα ελεύθερο σωμάτιο, έχουμε: $u'' = 0$.

Εάν η συνάρτηση $u(x)$ είναι ομαλή, τότε u'' παραμένει μικρό. Έστω $\frac{d^2}{dx^2}u(x) = 0$,

έχουμε ${u_0'}^2 = k^2(x)$ άρα $u_0 = \pm\int^x k(x)dx + C$. Παρατηρούμε ότι εάν το $u(x)$ είναι

σταθερό δυναμικό, τότε είναι ακριβή λύση το u_0. Ας επανέλθουμε στην αρχική

εξίσωση: $\left(\frac{du(x)}{dx}\right)^2 = k^2(x) + i\frac{d^2u(x)}{dx^2}$. Αν τη θεωρούμε ως μη γραμμικό σύστημα,

μπορούμε να εισάγουμε τη $u_n(x)$ ως n- προσέγγιση. Σε αυτό το πλαίσιο βρίσκουμε:

$$u_{n+1}(x) = \pm\int^x \sqrt{k^2(x) + iu_n''(x)}\,dx + C_{n+1}$$

Για $n = 0$ έχουμε λοιπόν: $u_1(x) = \pm\int^x \sqrt{k^2(x) + iu_0''(x)}\,dx + C_1$

Με άλλα λόγια έχουμε: $u_1(x) = \pm \int^x \sqrt{k^2(x) \pm ik'(x)}\ dx + C_1$

Έστω: $u(x) = u_+ - iln\left[1 + Ae^{i(u_- - u_+)}\right] + B$

$u(x) = u_- - iln\left[1 + Ae^{i(u_+ - u_-)}\right] + B$

Άρα: $\psi(x) = e^{iu(x)} = e^{iB} e^{iu_+(x)} + Ae^{iB} e^{iu_-(x)}$

Τότε, εάν: $|k'(x)| \ll |k^2(x)|$, θα έχουμε:

$$u_1(x) = \int^x \left[\pm k'(x) + \frac{i}{2}\frac{k'(x)}{k(x)}\right] dx + C_1$$

$$u_1(x) = \pm \int^x k(x) + \frac{i}{2} lnk(x) + C_1$$

Και τελικά βρίσκουμε τη WKB κυματοσυνάρτηση, η οποία είναι μια προσεγγιστική λύση της εξίσωσης του Schrödinger:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(e)}} e^{\pm i \int^x k(x) dx}$$