

WKB-Näherung

Quantenmechanisches Seminar

bei Prof. Dr. Georg Wolschin

Projekt von Martin Kroesen

06.12.2013

Gliederung

1. Allgemeines
2. Bemerkungen zur Geschichte
3. Herleitung der WKB – Formel
4. Grenzen der WKB - Formel
5. Verbindungsgleichungen
6. Bohr-Sommerfeld Quantisierung und der Harmonische Oszillator
7. Tunneleffekt mit Beispiel Alpha-Zerfall
8. Zeitabhängiger Fall
9. Ausblick

Allgemeines

- 1926 zeitgleich von G. Wentzel, H. A. Kramers und L. Brillouin entwickelt
- Näherungslösungen für zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in einer Dimension
- Allgemeiner als die klassische Näherung



Bemerkungen zur Geschichte

- Phase integral approximation
- WKB – Wentzel, Kramers, Brillouin [1926]
- WKBJ – Jeffreys [1923]
- WKBJR – Rayleigh [1912]
- Liouville [1837] und Airy [1849]
- Denham [1932], Langer [1937], Furry [1947]

→ „**WKBJRLADLF-Näherung**“

Herleitung der WKB - Formel

- Stationäre Schrödingergleichung:

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \Delta + V(\vec{r})\right] \Psi = E \Psi$$

- Ansatz:

$$\Psi = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sigma(\vec{r})\right]$$

$$\Rightarrow \Delta \Psi = \frac{i}{\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sigma\right) \Delta \sigma - \frac{1}{\hbar^2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sigma\right) (\nabla \sigma)^2$$

Herleitung der WKB - Formel

- Einsetzen in die Schrödinger Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{i}{\hbar} \Delta \sigma - \frac{1}{\hbar} (\nabla \sigma)^2 \right) + V = E$$

$$\Rightarrow -i \hbar \Delta \sigma + (\nabla \sigma)^2 = 2m(E - V)$$

- Wähle Potenzreihenansatz :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots$$

Herleitung der WKB – Formel

- Oben einsetzen und nach Potenzen von \hbar sortieren

$$\begin{aligned} & [(\nabla \sigma_0)^2 - 2m(E - V)] + \frac{\hbar}{i} [\Delta \sigma_0 + 2(\nabla \sigma_0)(\nabla \sigma_1)] \\ & + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 [2(\nabla \sigma_0)(\nabla \sigma_1) + (\nabla \sigma_1)^2] + \dots = 0 \end{aligned}$$

Herleitung der WKB – Formel

- Setzt man die einzelnen Terme hinter $\frac{\hbar}{i}$ Null und bricht bei $(\frac{\hbar}{i})^2$ ab, so folgt:

$$I. \quad (\nabla \sigma_0)^2 - 2m(E - V) = 0$$

$$II. \quad \Delta \sigma_0 + 2(\nabla \sigma_0)(\nabla \sigma_1) = 0$$

- Bzw. in einer Dimension:

$$I. \quad (\partial_x \sigma_0)^2 - 2m(E - V) = 0$$

$$II. \quad \partial_x^2 \sigma_0 + 2(\partial_x \sigma_0)(\partial_x \sigma_1) = 0$$

Grenzen der WKB - Näherung

- Betrachtet man:

$$\Psi(x) = \frac{C_{1,2}}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int \sqrt{2m(E-V)} dx\right)$$

$$\Psi''(x) = \left[\left(\frac{1}{2} \frac{p'}{p} \pm \frac{i}{\hbar} p \right) \Psi(x) \right]' = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{p'}{p} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{p''}{p} - \frac{p^2}{\hbar^2} \right] \Psi(x)$$

$$\Rightarrow \Psi'' = \left[\frac{\left(\frac{3}{4} \left(\frac{p'}{p} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{p''}{p} \right)}{\left(\frac{p^2}{\hbar^2} \right)} - 1 \right] \frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(x)$$

Grenzen der WKB – Näherung

- SGL wird exakt gelöst, wenn

$$\left[\frac{\frac{3}{4} \left(\frac{p'}{p} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{p''}{p}}{\frac{p^2}{\hbar^2}} \right] = 0$$

- Resultierende Bedingungen:

$$\hbar^2 \frac{p'^2}{p^4} = 0 \quad \wedge \quad \hbar^2 \frac{p''}{p^3} = 0$$

Grenzen der WKB - Näherung

- Genaue Betrachtung:

$$\left| \hbar \frac{p'}{p^2} \right| = \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{p} \right| = \left| \frac{d}{dx} \frac{\lambda(x)}{2\pi} \right| \ll 1$$

bzw.

$$\left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{p} \right| = \left| \frac{d}{dx} \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \right| = \left| \frac{\hbar m V'(x)}{(2m(E - V(x)))^{\frac{3}{2}}} \right| \ll 1$$

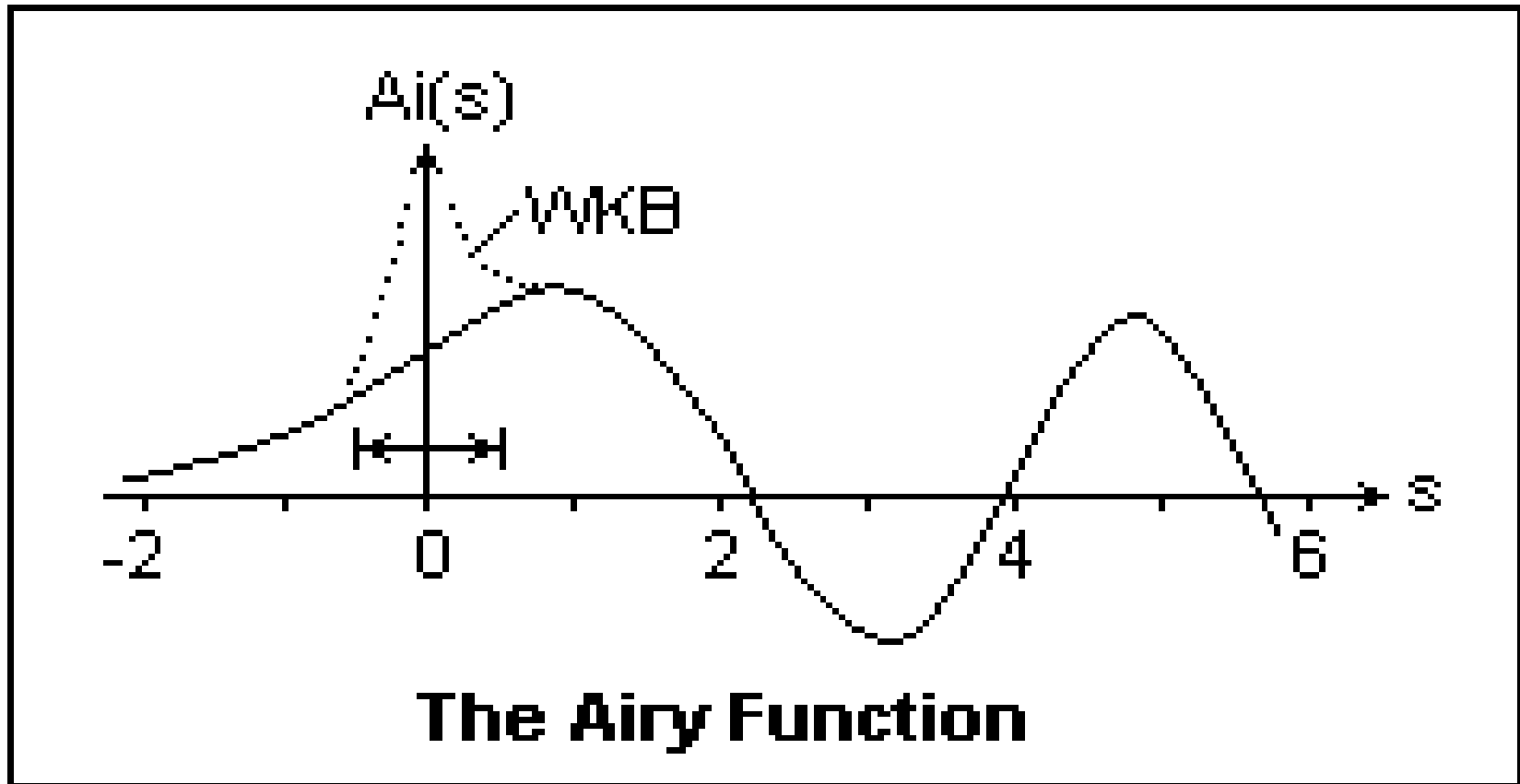
Grenzen der WKB – Näherung

- Aber Hauptproblem bei

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V)} = 0$$

- Gilt, wenn $E=V$ (klassischer Wendepunkt)
→ Verbindungsformel mittels Airy-Funktionen

Verbindungsgleichungen



Verbindungsgleichungen

- Näherung im Übergangsbereich:

$$V(x) \approx V'(x_0)(x - x_0) + E$$

- Für die SGL gilt dann:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' = (E - V) \Psi = -V'(x_0)(x - x_0) \Psi$$

$$\Rightarrow \Psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} V'(x_0)(x - x_0) \Psi$$

Verbindungsgleichungen

- Setzt man $\tilde{x} = (x - x_0)$ und $\tilde{\Psi}(\tilde{x}) = \Psi(x)$:

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}'' = c^2 \tilde{x} \tilde{\Psi}(\tilde{x}); \quad c^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V'(x_0)$$

- Lösungen sind die Airy-Funktionen

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) dt$$

$$Bi(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left(\exp\left(-\frac{t^3}{3} + xt\right) + \sin\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) \right) dt$$

Verbindungsgleichungen

- Asymptotische Formen:

$x \gg 0$:

$$Ai(x) \sim \frac{1}{2 \sqrt{\pi} x^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}}\right)$$

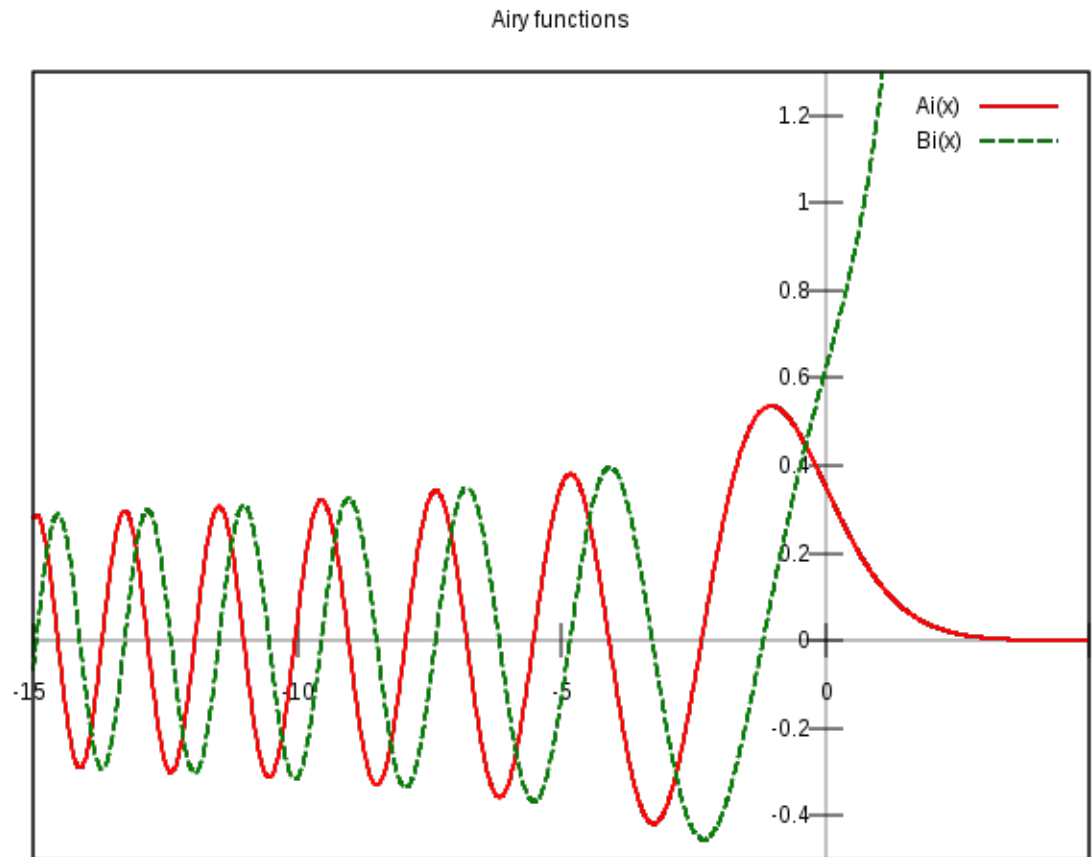
$$Bi(x) \sim \frac{1}{2 \sqrt{\pi} x^{\frac{1}{4}}} \exp\left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}}\right)$$

$x \ll 0$:

$$Ai(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} (-x)^{\frac{1}{4}}} \sin\left[\frac{2}{3} (-x)^{\frac{2}{3}} + \frac{\pi}{4}\right]$$

$$Bi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi} (-x)^{\frac{1}{4}}} \cos\left[\frac{2}{3} (-x)^{\frac{2}{3}} + \frac{\pi}{4}\right]$$

Verbindungsgleichungen



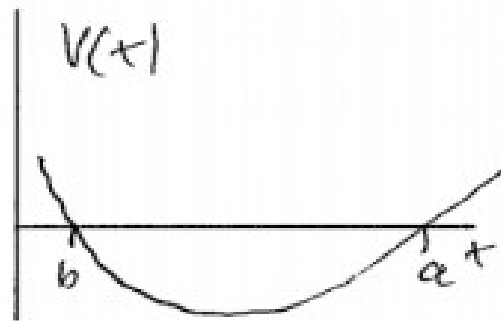
Verbindungsgleichungen

- Flick-Wellenfunktion ist Linearkombination:

$$\Psi_F(x) = aAi(\alpha x) + bBi(\beta x)$$

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung und der Harm. Osz.

- Man nehme den harmonischen Oszillator oder ein ähnliches Potential



- a und b sind die klassischen Wendepunkte

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung und der Harm. Osz.

- Die WKB-Formel muss übergehen in:

$$\Psi_I = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(\tilde{x}) d\tilde{x} - \frac{\pi}{4}\right)$$

und:

$$\Psi_{II} = \frac{C'}{\sqrt{p}} \cos\left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^a p(\tilde{x}) d\tilde{x} + \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\Rightarrow \Psi_{II} = \frac{C'}{\sqrt{p}} \cos\left(-\frac{1}{\hbar} \int_b^a p(\tilde{x}) d\tilde{x} + \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(\tilde{x}) d\tilde{x} + \frac{\pi}{4}\right)$$

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung und der Harm. Osz.

- Verlangt man nun, dass $\Psi_I = \Psi_{II}$, so ist $C = \pm C'$

und:

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(\tilde{x}) d\tilde{x} - \frac{\pi}{4} = -\frac{1}{\hbar} \int_b^a p(\tilde{x}) d\tilde{x} + \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(\tilde{x}) d\tilde{x} + \frac{\pi}{4} + N\pi$$

- Somit folgt:

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a p(\tilde{x}) d\tilde{x} = \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi$$

oder:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(\tilde{x}) d\tilde{x} = \left(N + \frac{1}{2}\right)$$

Dies ist die **Bohr-Sommerfeldsche-Quantisierungsbedingung**

Bohr-Sommerfeld-Quantisierung und der Harm. Osz.

Anwendung: Harmonischer Oszillator

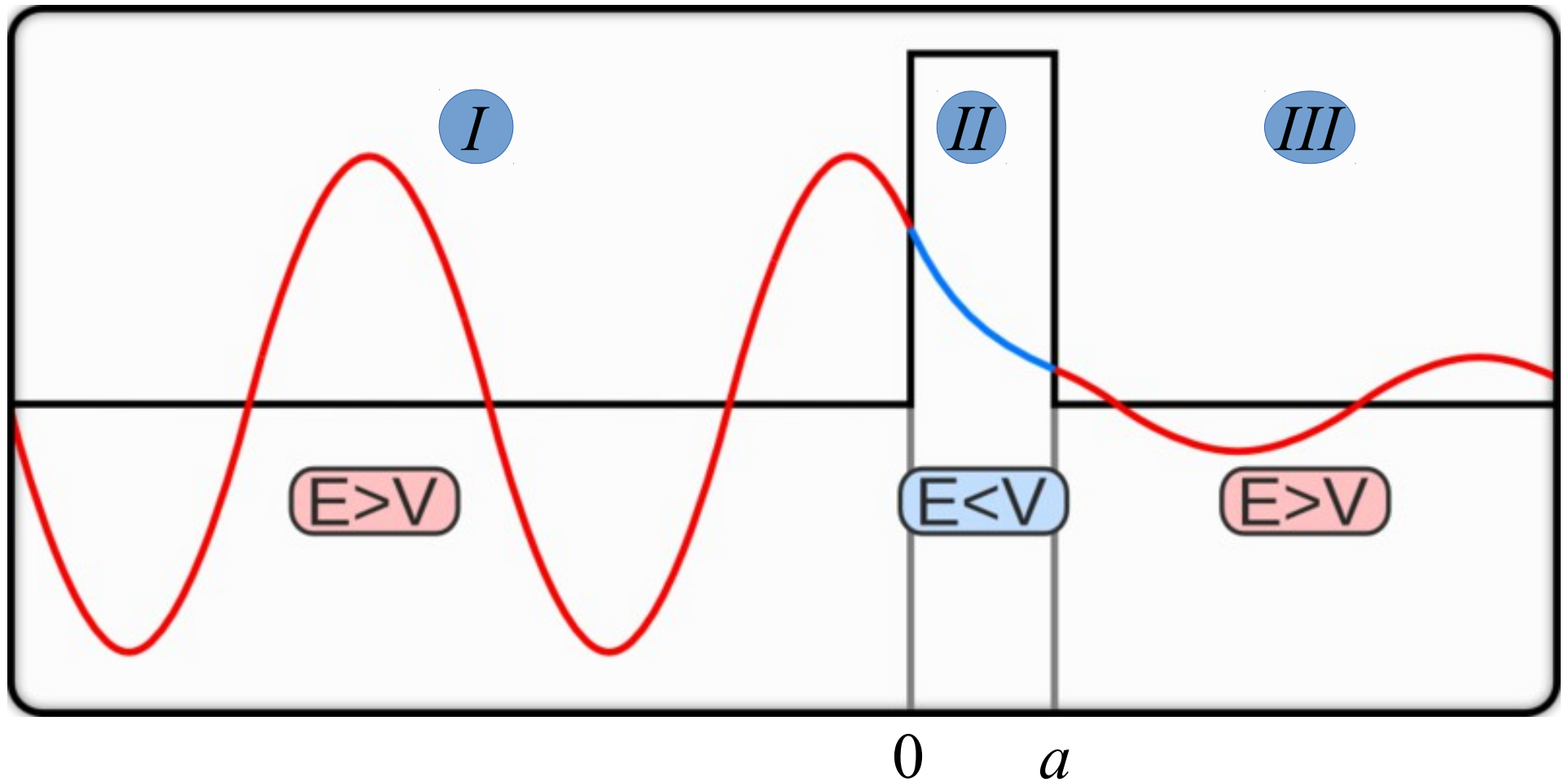
$$p(x) = \sqrt{2m \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)} = \sqrt{2mE \left(1 - \frac{1}{2} \frac{m}{E} \omega^2 x^2 \right)}$$

Nullstellen: $x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

$$\Rightarrow \oint p(\tilde{x}) d\tilde{x} = 2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2mE \left(1 - \frac{1}{2} \frac{m}{E} \omega^2 x^2 \right)} dx = 2 \sqrt{2mE} \int_{-1}^1 (1 - \theta^2)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} d\theta = \frac{2E}{\omega} \pi$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{2E}{\omega} \pi = N + \frac{1}{2} \quad \Rightarrow E = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Tunneleffekt mit Beispiel Alphazerfall



Tunneleffekt mit Beispiel Alphaerfall

- Links der Barriere:

$$\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

- Rechts der Barriere:

$$\Psi(x) = F e^{ikx}$$

- Transmissionkoeffizient:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

- Im Tunnelbereich mit WKB:

$$\Psi(x) \simeq \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right) + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right)$$

Tunneleffekt mit Beispiel

Alphazerfall

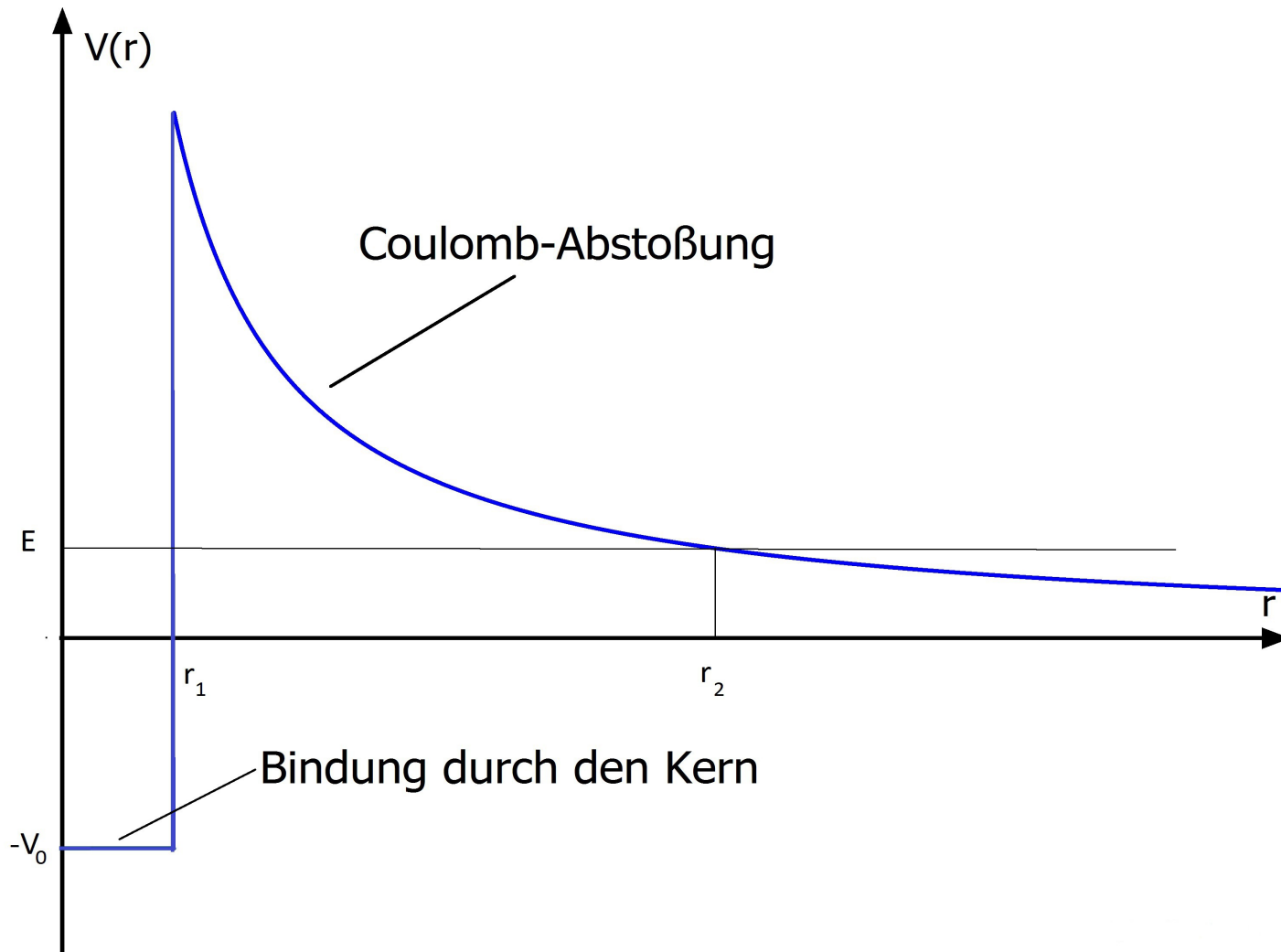
- Amplitudenverhältnis einfallender und transmittierter Welle ist im Wesentlichen durch Abschwächung des Exponentialterms bestimmt

$$\frac{|F|}{|A|} \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x')| dx'\right)$$

Folglich gilt:

$$T \simeq \exp(-2 \gamma) \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx$$

Tunneleffekt mit Beispiel Alphazerfall



Tunneleffekt mit Beispiel Alphazerfall

- Für den Tunnelfaktor γ gilt nun:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r} - E \right)} dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dr$$

$$\Rightarrow \gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[r_2 \left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)} \right]$$

$r_1 \ll r_2$:

$$\Rightarrow \gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[\frac{\pi}{2} r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2} \right] = K_1 r_2 + K_2 \sqrt{r_2}$$

Tunneleffekt mit Beispiel Alphazerfall

- Für den Transmissionskoeffizienten ergibt sich:

$$T(E) \simeq e^{-2\gamma} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m(V-E)} dr\right)$$

$$\rightarrow T(E) \simeq \exp\left(-2\left(K_1 r_2 + K_2 \sqrt{r_2}\right)\right)$$

- Bzw $\gamma = k_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - k_2$

Zeitabhängiger Fall

- Zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{x}, t) \Psi = i \hbar \partial_t \Psi$$

- Ansatz: $\Psi = A(\vec{x}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)\right)$

- Einsetzen, Ordnung \hbar^0 abtrennen:

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(\vec{x}, t) + \partial_t S = 0$$

Zeitabhängiger Fall

- Mit $\nabla S = \vec{p}$ folgt:

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) + \partial_t S = 0$$

- Da aber

$$\frac{dS}{dt} = \sum_i \frac{\partial S}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial S}{\partial x_i} \dot{x}_i - H = L$$

folgt:

$$S = \int L dt$$

→ Klassische Wirkung

Ausblick

- ~100 Jahre WKB
- Trotzdem moderne Anwendungen
 - Akustik
 - Faltenbildung unter Spannung
 - Kosmologie
- Beispiele:
 - WKB approximation for inflationary cosmological perturbations – Jerome Martin, Dominik Schwarz [2008]
 - Cosmological particle production and the precision of the WKB approximation – Sergei Winitzki [2008]

**VIELEN DANK FÜR DIE
AUFMERKSAMKEIT!**

Quellen

- David J. Griffiths, Quantenmechanik: Eine Einführung, S.356 – 380, Pearson Studium – Physik, 2012
- Albert Messiah, Quantenmechanik Band 1, S. 208 - 218 , De Gruyter, 1991,
- Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen, S. 213 – 215 , Springer, 2012
- Links:
 - http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~gasenzer/Vorlesung_SS13_QM/QM_SS13_Skript_Kap6.pdf
 - http://inspirehep.net/record/851395/files/LogTRacEalpha_PoRnRaTh_zoom.png
 - <http://mysite.du.edu/~jcalvert/phys/wkb.htm>
 - http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Airy_plot.svg
 - <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/1d/TunnelEffektKling1.png>