WKB-approksimationen

November 2017

1 Beskrivelse af projektet

WKB-approksimationen er en metode til at bestemme approksimative løsninger til den tidsuafhængige Schrödingerligning, og denne metode er specielt nyttig, når de betragtede potentialer ikke har en eksakt analytisk løsning. I har i kurset set mange af de elementære potentialer, som har eksakte løsninger (den uendelige brønd, den endelige brønd, harmoniske oscillator osv.), men hvad sker der hvis potentialet i fx den endelige brønd har en bølget bund? I dette tilfælde er en analytisk eksakt løsning ikke garanteret at kunne findes, og derfor må vi i gang med approksimationsregningen.

WKB-approksimationen udføres ved at generalisere de velkendte frie eller bundne løsninger for en partikel i et konstant potentiale til tilfældet med langsomt varierende potentialer, hvormed bølgefunktionen antager en langsomtvarierende amplitude såvel som de velkendte sinusoidale oscillationer. Approksimationens gyldighed beror på potentialet værende langsomtvarierende, således at vi på lokalt plan kan løse vores Schrödingerligning for et konstant potentiale.

I dette projekt vil vi med udgangspunkt i kapitel 8 i Griffiths udlede udtryk for løsningerne til Schrödingerligningen under WKB-approksimationen, og vi vil benytte disse udtryk til at bestemme de tilladte energier og tilhørende bølgefunktioner i brintatomet. Vi kan derefter sammenligne resultaterne med de fra kurset velkendte eksakte analytiske udtryk. Yderligere vil vi undersøge tunnelering under WKB-approksimationen og derfra fx bestemme dissociationsraten af et Rydberg-atom i et stærkt elektrisk felt.

Husk at dette er jeres projekt! De følgende afsnit og deres fremgangsmåde er blot en vejledning. Yderligere er dette et projekt og ikke en opgavebesvarelse; således ønskes en rapport med en rød tråd og sammenhængende teksk. Rapporten skal kunne læses af jeres medstuderende, som ikke har lavet projektet... I må gerne lave referencer til Griffiths osv., men prøv at skrive rapporten som en 'lærebog' og ikke opgavebesvarelser.

2 WKB-approksimationen og løsninger til Schrödingerligningen

Vi starter i kapitel 8.1 af Griffiths. Løs først den stationære Schrödingerligning

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x), \tag{1}$$

ved at benytte ansatzen

$$\psi(x)=A(x)e^{i\phi(x)}, \tag{2}$$

hvor $A(x)$ er en reel amplitude og $\phi(x)$ er en reel fase. Overbevis dig selv om, at dette altid kan gøres.

Vi antager nu, at potentialet $V(x)$ varierer langsomt. Herfra følger det, at den 'lokale' bølgelængde $\lambda(x)$ eller det 'lokale' bølgetal $k(x)=\frac{2\pi}{\lambda(x)}=\sqrt{2m(E-V(x))}/\hbar$ samt amplituden $A(x)$ varierer langsomt mht. positionen. Overvej, hvorfor dette gør sig gældende når potentialet er langsomt varierende.

Med ovenstående, vis da for $E>V(x)$, at løsninger til ligning (1) er

$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm i\int k(x)\mathrm{d}x}, \tag{3}$$

hvor $p(x)=\hbar k(x)$. Den generelle løsning vil da være en linearkombination af disse to løsninger. *Hint:* Antagelsen om langsomt varierende $A(x)$ og $k(x)$ giver os mulighed for at 'rydde op' i reel- og imaginærdele af (2) indsat i (1). Hvad er $p(x)$ i klassisk mekanik?

Kræv nu, at sandsynlighedstætheden $|\psi(x)|^2$ er 0 i de klassiske vendepunkter a og b, $a>b$, for hvilke der gælder at $p(a)=0=p(b)$. Vis herefter, at dette medfører kvantiseringsbetingelsen

$$\int_a^b p(x)\mathrm{d}x=n'\pi\hbar, \quad \text{med } n'=1,2,3,\dots \tag{4}$$

Prøv fx at udføre et såkaldt 'sanity check' på ovenstående ved at betragte den sædvanlige uendelige brønd

$$V(x)=\begin{cases}0, & \text{hvis } 0<x<a,\\ \infty, & \text{ellers}\end{cases} \tag{5}$$

hvor vi gerne skal opnå de sædvanlige løsninger og energier $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. Hvorfor er WKB-approksimationen eksakt i dette tilfælde?

3 Brintatomet

Den radiale Schrödingerligning er givet ved [Griffiths, Eq. 4.37]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left[V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=Eu(r), \tag{6}$$

hvor $V(r)$ her er vores Coulomb-potentiale i brintatomet. Bemærk, at denne ligning er på samme form som (1), dvs. vi kan benytte vores udledte WKB-approksimation til at finde en løsning.

Vis vha. ligning (4) at energiniveauerne er givet ved

$$E_{n'l} = \frac{-\mathrm{Ry}}{\left[n' + \sqrt{l(l+1)}\right]^2}, \tag{7}$$

hvor $\mathrm{Ry} = 13.6eV$ er den såkaldte rydbergenergi, altså grundtilstandsenergien i brint. *Hint:* Benyt evt. at

$$\int_a^b \frac{1}{x}\sqrt{(x-a)(x-b)}\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}\left(\sqrt{b} - \sqrt{a}\right)^2. \tag{8}$$

Sammenlign (7) med de eksakte energier for brint, og kommenter her på hvordan kvantetallene n' og l i WKB-approksimationen forholder sig til n og l i den eksakte løsning.

For de eksakte løsninger til brintatomet er brintbølgefunktionernes asymptotiske form for store værdier af r

$$R_{nl}(r) \sim \left(\frac{r}{a_0}\right)^{n-1} e^{-r/na_0}; \tag{9}$$

for at se dette kan [Griffiths, Eq. 4.75] betragtes i tilfældet $r \to \infty$. Bestem i WKB-approksimationen den asymptotiske form af bølgefunktionerne. Dette kan gøres ved fx at indse, at $k(r) = p(r)/\hbar$ kan skrives som

$$k(r) = \frac{\sqrt{\mathcal{E}}}{a_0}\sqrt{\left(1 - \frac{a}{r}\right)\left(1 - \frac{b}{r}\right)}, \quad \text{for } r > a, b, \tag{10}$$

hvor a og b er de førnævnte klassiske vendepunkter og hvor $\mathcal{E} = 1/\left[n + \sqrt{l(l+1)}\right]^2$. Da vi er interesserede i opførslen for $r \to \infty$, kan vi rækkeudvikle (10) til første orden i $1/r$. Vi finder den asymptotiske form af $u(r)$ til at blive

$$u(r) \sim \exp\left[-\int_{a_0}^{r} |k(r')|\mathrm{d}r'\right]. \tag{11}$$

Bestem (11) og derefter $R(r) = u(r)/r$, og sammenlign resultatet med den asymptotiske form af vores eksakte bølgefunktionsløsninger i (9).

4 Tunnelering

I Griffiths kapitel 8.2 gennemgåes tunnelering, som indtræffer når $E < V$. Gennemgå her argumentationen og udled at

$$T \approx e^{-2\gamma}, \quad \gamma = \int_0^a |k(x)|\mathrm{d}x, \tag{12}$$

hvor T er transmissionssandsynligheden gennem barrieren, og hvor a og b i dette tilfælde er de 'klassiske' vendepunkter i det *ikke-klassiske* regime, dvs. vendepunkterne på hver af barrierens sider. Argumenter herefter for, at levetiden kan bestemmes ved formlen

$$\tau = \frac{2L}{v} e^{2\gamma}, \tag{13}$$

hvor L er afstanden mellem vendepunkterne i det *klassiske* regime ($E > V$) og v er partiklens hastighed i samme område.

5 Ionisation af et Rydberg-atom

Som eksempel på anvendelse af ovenstående betragter vi nu et Rydberg-atom, som er et brintlignende atom med et højt hovedkvantetal. Generelt er et Rydberg-atom med atomnummer Z et atom, hvor de $Z - 1$ elektroner ligger omkring kernen, mens den sidste elektron er exciteret til en højtliggende skal. Således skærmer de $Z - 1$ indre elektroner for kernens Ze-ladning, så den højtliggende elektron ser effektivt kun en kerne med ladning e – altså en brintkerne. Som vi ved er energiniveauerne i brint givet ved $E_n = -Ry/n^2$, og vi antager nu at n er stor så vores Rydberg-atom kan approksimeres som brintlignende ($n \geq 10$).

Modellér Rydberg-atomet som en endelig brønd med dybde V_0 for $-a_0 < x < a_0$, hvor V_0 vælges således at grundtilstanden er $-1Ry$. Nu pålægges Rydberg-atomet et statisk eksternt elektrisk felt; den potentielle energi for dette E-felt er givet ved

$$V(x) = -eE_{\text{ext}}x, \tag{14}$$

hvor E_{ext} er det elektriske felt. Prøv at skitsere det totale potentiale $V_0 + V(x)$. Vi kan se, at elektronen kan tunnelere igennem barrieren i den positive x-retning, når E_{ext} er positiv; vores energiniveau E_n er jo negativt. Denne tunnelering svarer til at ionisere atomet.

Målet er nu at udlede en approksimativ analytisk formel for ionisationsraten af Rydberg-atomet vha. vores WKB-approksimation teori for tunnelering. Udtryk svaret i termer af n og forholdet mellem E_{ext} og E_H, hvor

$$E_H = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} \tag{15}$$

er den atomare enhed for det elektriske felt (feltstyrken af kernen i en afstand af 1 a_0). Overvej hvordan ionisationsraten påvirkes af ændringer af n og E_{ext}/E_H.

Endeligt prøv at bestemme levetiden (ionisationstiden) i et stærkt laboratoriefelt på $E_{\text{ext}} = 10^7 \frac{V}{m}$ for $n = 10$. Bestem også den størrelse af E_{ext}, som giver en levetid på 1 sekund.