WKB近似和一个一维势阱例子

LeQuic
这个人很懒，还没有也永远不会有写任何东西。

WKB方法由Wenzel, Kramers和Brillouin三人提出，是得到一维定态薛定谔方程近似解的一种方法。其基本思想是：假设粒子在全空间均一的势能下运动，其波函数解为自由粒子解。如下公式所示，其中 $V(x)$ 是常数。当 $V>E$ 时， k 为虚数。

$$\phi(x)=Ae^{\pm ikx},\ k=\sqrt{2m(E-V)}/\hbar$$

现在考虑势能随空间位置变化不显著的情况，即在自由粒子解波长 $\lambda=2\pi/k$ 范围内势能变化不明显。此时仍能采用上述公式表示近似解，但波函数幅度 $A=A(x)$ ，是随空间位置变化的函数。下面会通过计算给出 $A=A(x)$ 的具体表达式，其中困难在于 $E=V$ 对应的空间位置处解的处理，因为此时自由粒子解波长无穷大，势能随空间位置变化不显著的前提条件得不到满足。

先考虑 $E>V(x)$ 的情况。定态薛定谔方程

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

定义 $p(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$ ，则方程可以简写为

$$\frac{d^2\phi}{dx^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\phi$$

基于前面的假设，取波函数解为 $\phi(x)=A(x)e^{i\psi(x)}$ ，并将其代入改写过的薛定谔方程，分实部和虚部可列出两个方程

$$\left(A^2\psi'\right)' = 0$$

而由于已经假设势能变化不显著，上方程组第一个方程中的 A''/A 和 $\psi'^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}$ 相比可以忽略不计。则有

$$A = \frac{C}{\sqrt{\psi'}}$$
$$\frac{d\psi}{dx} = \pm\frac{p}{\hbar}$$

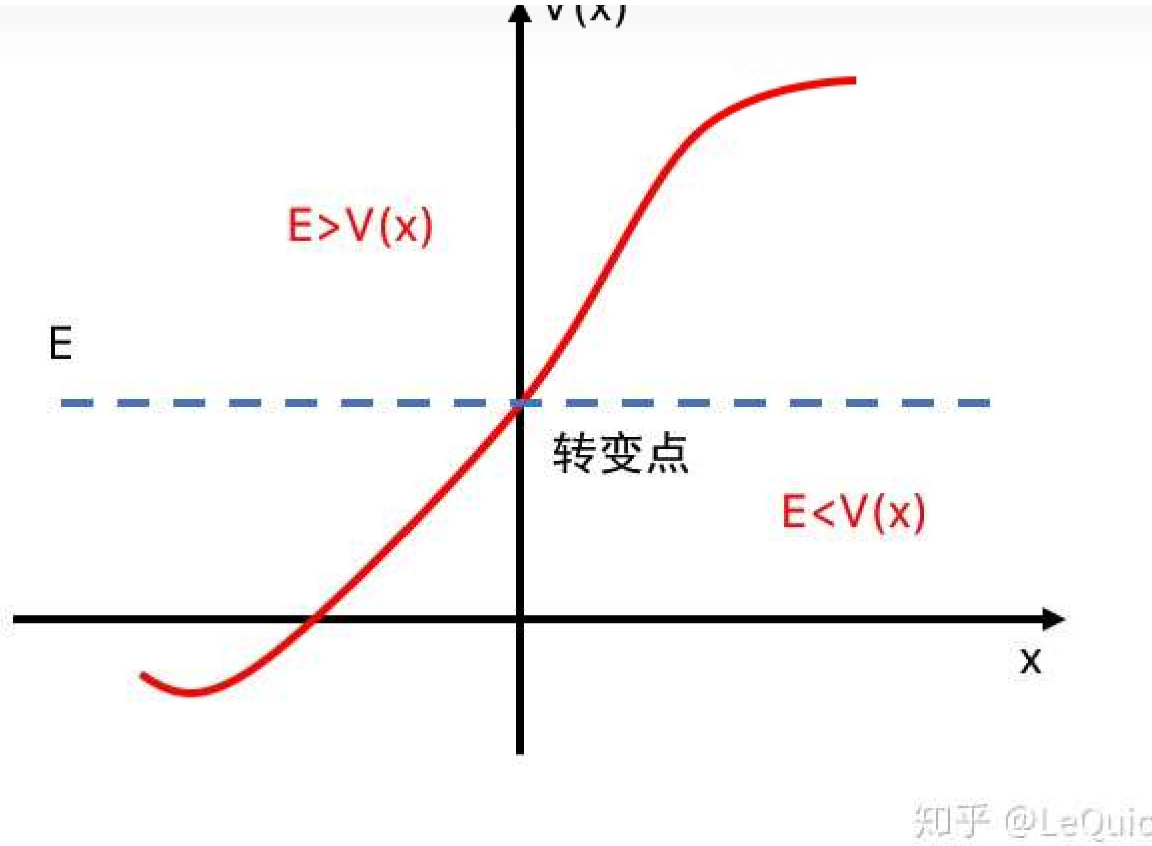
这组方程容易解，其结果为

$$\phi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x')dx'}$$

这就是对于 $E > V(x)$ 下WKB方法给出的近似波函数解，其中包含待定常数。对于 $E < V(x)$ 的情况同样可解，其结果完全相似

$$\phi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}}e^{\pm\frac{1}{\hbar}\int |p(x')|dx'}$$

而对于 $E = V(x)$ 附近的解，需要综合上述两个方程来进行“修补”。对于势垒或势阱壁是突变函数的情况下，不会碰到此问题，因为势能值得突变使得 $E = V(x)$ 一般不存在，所以只需要根据上面的结果求边界条件的解即可。因此接下来考虑的势能在 $E = V(x)$ 点处总是缓变的，我们假设在这个转变点($E > V(x)$ 到 $E < V(x)$ 的转变)处势能导数为 α ，因此可以将势能写为 $V(x) = E - \alpha x$ ，其中已经取转变点处于坐标原点。如下图所示，同时假定在右侧始终有 $E > V(x)$ ，则右侧不会出现正指数解。



需要“修补”的情况

此时波函数在两个区域的WKB解为

$$\phi(x)=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Be^{\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')dx'}+Ce^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')dx'}\right] & x<0\\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}De^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|dx'} & x>0\end{cases}$$

求得了三个系数 B,C,D 之间的关系便算是将此问题解决了。但由于边界点为转变点，前面的近似完全失效，并不能通过上述波函数相等且波函数导数相等这个常见边界条件来求解这个问题，因为在 0^+ 和 0^- 点，WKB解均不成立。合理的方法是重新在转变点周围严格求解线性势能的薛定谔方程通解，此时我们便得到三个区域的波函数通解：

$$x\ll 0,x\sim 0,x\gg 0$$

且由于 $x\sim 0$ 附近波函数解已经替代成了合理的线性势能近似解，前面说到的问题已经解决，只

$\phi(x) = aAi(z) + bBi(z)$ ，其中

$$z = \beta x,\ \beta = \left(\frac{2m}{\hbar}\alpha\right)^{1/3}$$

我们主要关心艾里函数在宗量 z 很大和很小的情况下的近似表达式，如下所示。具体推导这里不再给出。

$z \gg 0$ 时：

$$Ai(z) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}}$$
$$Bi(z) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{\frac{2}{3}z^{3/2}}$$

$z \ll 0$ 时：

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

并注意到在线性势能下

$$x < 0 : \int_x^0 p(x')dx' = \frac{2}{3}\hbar(-\beta x)^{3/2}$$
$$x > 0 : \int_0^x |p(x')|dx' = \frac{2}{3}\hbar(\beta x)^{3/2}$$

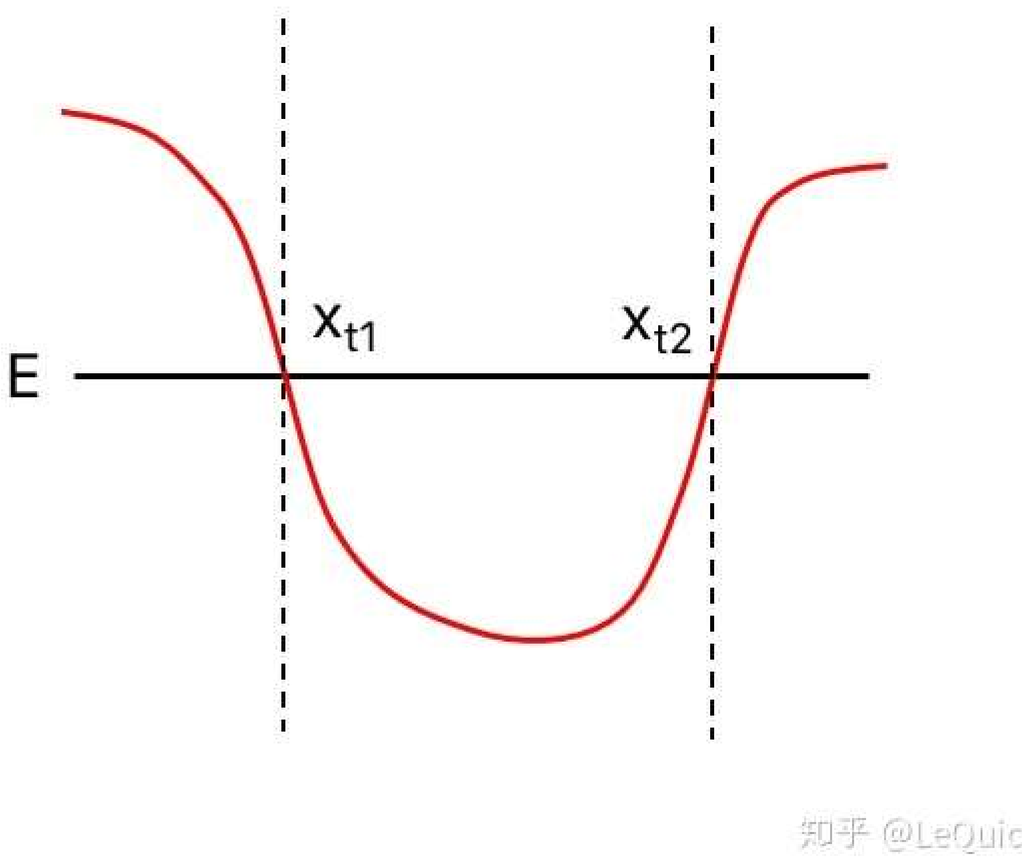
求解相应的边界条件就可以得到

$$B = -ie^{i\pi/4}D,\ C = ie^{-i\pi/4}D$$

$$\phi(x)=\begin{cases}\frac{2D}{\sqrt{p(x)}}\sin[\frac{1}{\hbar}\int_x^0 p(x')dx'+\pi/4], & x<0\\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|dx'], & x>0\end{cases}$$

故转变点的效果看上去就像是产生了一个额外的相位差 $\pi/4$ 。对于转变点不在原点而在 x_t 的情况，将积分限中的 0 改为 x_t 即可。

接下来考虑一个一维势阱的例子，其两个势阱壁均存在转折点，设其位置分别为 x_{t1}, x_{t2} 。入下图所示。



一个一维势阱示意图

因此可以根据上面的方程组从不同的转折点出发，写出两组解，对于 x_{t2} 其解已在上面给出，将积分变量中的 0 换为 x_{t2} 即可，而对于 x_{t1} 求解过程类似，结果如下

$$\frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}}\exp[-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_{t1}}|p(x')|dx'], \qquad x < x_{t1}$$

显然 $x_{t1} < x < x_{t2}$ 区域内只能有一个合理解。则必有正弦函数内的变量只能相差 π 的整数倍(其中奇数倍会产生一个负号，但它能被吸收到系数 D' 和 D 当中)

$$\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_{t2}} p(x')dx' + \frac{\pi}{4} = -\frac{1}{\hbar}\int_{x_{t1}}^{x} p(x')dx' - \frac{\pi}{4} + n\pi$$

$$\Rightarrow \int_{x_{t1}}^{x_{t2}} p(x)dx = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

n 为正整数。这个表达式给出了能量的量子化条件，且势阱内势能任何形状都能满足此表达式。因此有时候为了方便，能够简单地只通过上式来研究特定势阱的能级分布，这样能够避开对严格本征解的讨论。需要注意的是此表达式是通过近似后得来的。

谐振子势是一个非常经典的一维势阱，大家都喜欢拿来做示范。其势能如下

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

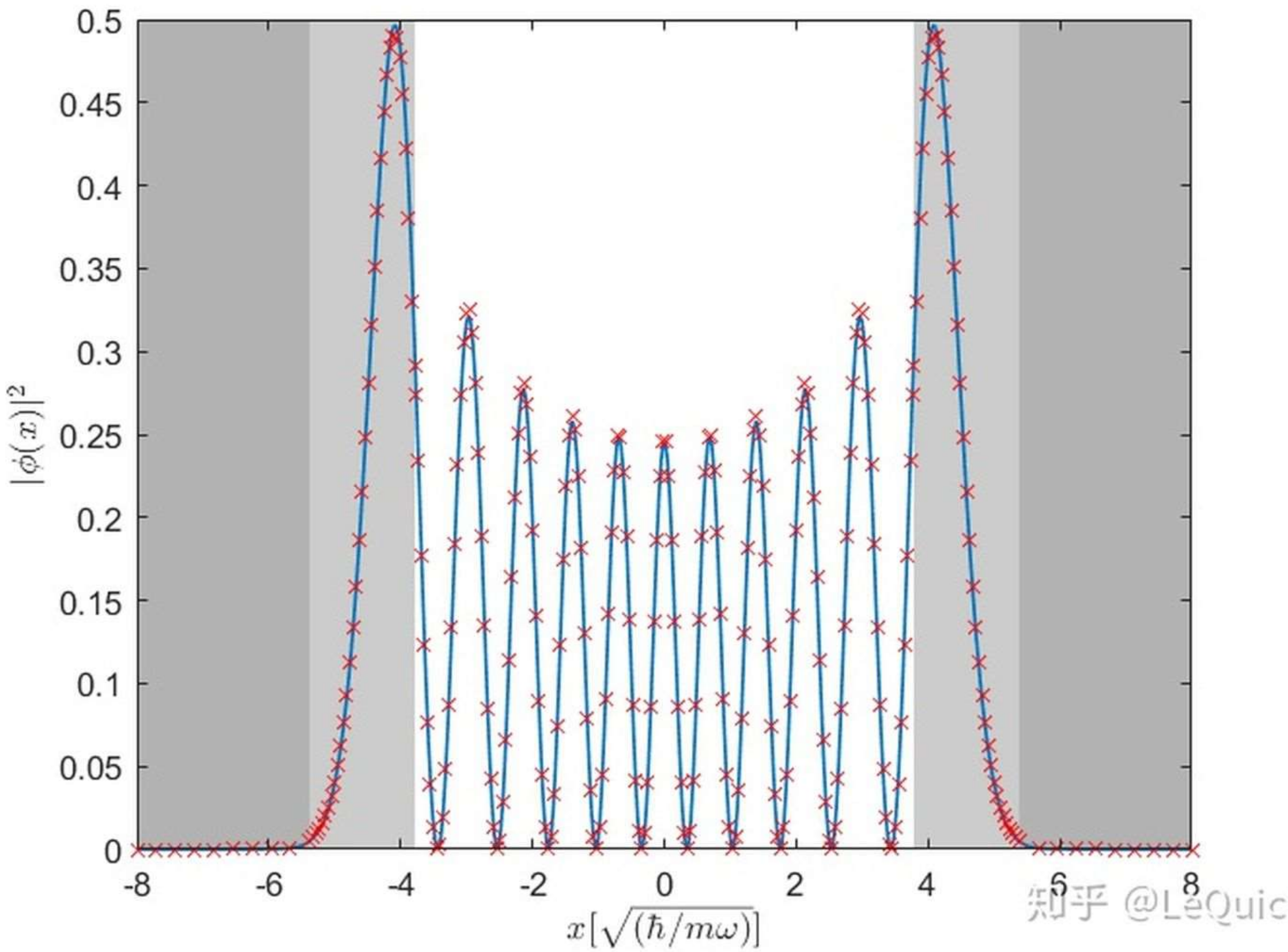
转折点位置在 $x_t = \sqrt{2E/m\omega^2}$ 和 $-x_t$ 处。边界条件写为

$$\int_{-x_t}^{x_t}\sqrt{2m\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)}dx = (n - 1/2)\pi\hbar$$

此积分较为简单，不再给出过程，其结果为

$$E = (n - 1/2)\hbar\omega$$

考虑到此处 n 为正整数，将其取为自然数则有 $E = (n + 1/2)\hbar\omega$ ，恰好和严格解给出相同的结果。



n=10的一维谐振子势阱解

其中蓝线对应的是严格解，红叉散点对应的是近似解，其中白色背景的近似解对应的是WKB近似的振荡解，灰色背景对应的是转变点附近采用线性势的严格解(艾里函数解)，深灰色背景对应的是WKB近似的衰减解。可见WKB近似在这个例子当中效果非常好(当然其他例子就不一定了 ×)。

上面给出的例子是势阱的本征解问题。WKB近似方法的另一个应用是用来求解势垒的穿透率，即散射问题，但本文并不会写散射问题 ×

编辑于 2020-07-07 21:30

量子物理

推荐阅读

一维无限深方势阱问题

在量子力学里，无限深方势阱问题是一个简单化、理想化的问题。 无限深方势阱是一个有限尺寸的方势阱，阱内位势为0，势外位势为无限大。在阱内，粒子感受不到任何作用力，可自由移动于阱内。...

Richard Kung

量子力学笔迹-2-一维波性质

笼中奇

1 条评论

切换为时间排序

评论区功能升级中

魁北克plus可比克 2020-10-03

好评，比书上写得更清楚

赞