WKB近似量子作业

物理二班 魏弘量

320180934321

1.

1. 利用 WKB 近似，求解以下势函数的允许能量 E_n：

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x < \frac{a}{2}; \\ 0, & a/2 < x < a; \\ \infty, & otherwise. \end{cases}$$

请将 E_n 写成 V_0 和$E_n^0 = (n\pi\hbar)^2/2ma^2$的表示形式。在整个求解过程中，假定$E_1^0 > V_0$，对$E_n \gg V_0$不作假定。

要解决这个问题，首先我们需要找到由特定势函数确定允许能量值的公式。在维基百科上，我们可以查看到：

薛定谔方程的近似解 [编辑]

解析一个量子系统的薛定谔方程，WKB近似涉及以下步骤：

1. 将波函数重写为一个指数函数，
2. 将这指数函数代入薛定谔方程，
3. 展开指数函数的参数为约化普朗克常数的幂级数，
4. 匹配约化普朗克常数同次幂的项目，会得到一组方程，
5. 解析这些方程，就会得到波函数的近似。

一维不含时薛定谔方程为

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

其中，$\hbar$是约化普朗克常数，m是质量，x是坐标，$V(x)$是位势，E是能量，ψ是波函数。

稍加编排，重写为

$$\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = 2m\left(V(x) - E\right)\psi(x)。 \tag{1}$$

假设波函数的形式为另外一个函数ϕ的指数（函数ϕ与作用量有很密切的关系）：

$$\psi(x) = e^{\phi(x)/\hbar}。$$

代入方程(1)，

$$\hbar\phi''(x) + \left[\phi'(x)\right]^2 = 2m\left(V(x) - E\right); \tag{2}$$

激活 Windows
转到"设置"以激活

其中，ϕ'表示ϕ随着x的导数。

ϕ'可以分为实值部分与虚值部分。设定两个函数$A(x)$与$B(x)$：

$$\phi'(x)=A(x)+iB(x)。$$

注意到波函数的波幅是$\exp\left[\int^x A(x')dx'/\hbar\right]$，相位是$\int^x B(x')dx'/\hbar$。将$\phi'$的代表式代入方程(2)，分别匹配实值部分、虚值部分，可以得到两个方程：

$$\hbar A'(x)+A(x)^2-B(x)^2=2m\left(V(x)-E\right), \quad (3)$$
$$\hbar B'(x)+2A(x)B(x)=0。\quad (4)$$

半经典近似 [编辑]

将$A(x)$与$B(x)$展开为$\hbar$的幂级数：

$$A(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\hbar^n A_n(x),$$
$$B(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\hbar^n B_n(x)。$$

将两个幂级数代入方程(3)与(4)。$\hbar$的零次幂项目给出：

$$A_0(x)^2-B_0(x)^2=2m\left(V(x)-E\right),$$
$$A_0(x)B_0(x)=0。$$

激活 Windows

假若波幅变化地足够慢于相位（$A_0(x)\ll B_0(x)$），那么，我们可以设定

$$A_0(x)=0,$$
$$B_0(x)=\pm\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}。$$

只有当$E\geq V(x)$的时候，这方程才成立。经典运动只会允许这种状况发生。

更精确一点，$\hbar$的一次幂项目给出：

$$A_0'+2A_0A_1-2B_0B_1=-2B_0B_1=0,$$
$$B_0'+2A_0B_1+2B_0A_1=B_0'+2B_0A_1=0。$$

所以，

$$B_1=0,$$
$$A_1=-\frac{B_0'}{2B_0}=\frac{d}{dx}lnB_0^{-1/2}。$$

波函数的波幅是 $\exp\left[\int^x A(x')dx'/\hbar\right]=\frac{1}{\sqrt{B_0}}$。

定义动量$p(x)=\sqrt{2m\left(E-V(x)\right)}$，则波函数的近似为

$$\psi(x)\approx\frac{C_\pm}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm i\int_{x_0}^{x}p(x')\mathrm{d}x'/\hbar};$$

其中，C_+和C_-是常数，x_0是一个任意参考点的坐标。

换到另一方面，假若相位变化地足够慢于波幅（$B_0(x)\ll A_0(x)$），那么，我们可以设定

$$A_0(x)=\pm\sqrt{2m\left(V(x)-E\right)},$$
$$B_0(x)=0。$$

只有当$V(x)\geq E$的时候，这方程才成立。经典运动不会允许这种状况发生。只有在量子系统里，才会发生这种状况，称为量子隧穿效应。类似地计算，可以求得波函数的近似为

$$\psi(x)\approx\frac{C_\pm}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm\int_{x_0}^{x}p(x')\mathrm{d}x'/\hbar}; \quad (6)$$

其中，$p(x)=\sqrt{2m\left(V(x)-E\right)}$。

连接公式 [编辑]

显而易见地，我们可以从分母观察出来，在经典转向点$E = V(x)$，这两个近似方程(5)和(6)会发散，无法表示出物理事实。我们必须正确地找到波函数在经典转向点的近似解答。设定$x_1 < x < x_2$是经典运动允许区域。在这区域内，$E > V(x)$，波函数呈振动形式。其它区域$x < x_1$和$x_2 < x$是经典运动不允许区域，波函数呈指数递减形式。假设在经典转向点附近，位势足够的光滑，可以近似为线性函数。更详细地说，在点x_2附近，将$\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)$展开为一个幂级数：

$$\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E) = U_1(x - x_2) + U_2(x - x_2)^2 + \cdots;$$

其中，U_1，U_2，$\cdots$是常数值系数。

取至一阶，方程(1)变为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = U_1(x - x_2)\psi(x)。$$

这微分方程称为艾里方程，其解为著名的艾里函数：

$$\psi(x) = C_{2A}\,\mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{U_1}(x - x_2)\right) + C_{2B}\,\mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{U_1}(x - x_2)\right)。$$

匹配艾里函数和在$x < x_2$的波函数，在$x_2 < x$的波函数，经过一番繁杂的计算，可以得到在x_2附近的**连接公式**（connection formula）[1]：

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{2C_2}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')dx' + \dfrac{\pi}{4}\right) & \text{if } x < x_2 \\ \dfrac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\int_{x_2}^{x} |p(x')|dx'/\hbar\right) & \text{if } x_2 < x \end{cases}。$$

激活 Windows
转到"设置"以激活 Windows。

类似地，也可以得到在x_1附近的连接公式：

类似地，也可以得到在x_1附近的连接公式：

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\int_x^{x_1} |p(x')|dx'/\hbar\right) & \text{if } x < x_1 \\ \dfrac{2C_1}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx' + \dfrac{\pi}{4}\right) & \text{if } x_1 < x \end{cases}。$$

量子化规则 [编辑]

在经典运动允许区域$x_1 < x < x_2$内的两个连接公式也必须匹配。设定角变量

$$\theta_1 = -\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')dx' - \frac{\pi}{4},$$
$$\theta_2 = \frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2} p(x')dx' + \frac{\pi}{4},$$
$$\alpha = \int_{x_1}^{x_2} p(x)dx/\hbar。$$

那么，

$$\alpha = \theta_2 - \theta_1 - \pi/2,$$
$$-C_1\sin\theta_1 = C_2\sin\theta_2 = C_2\sin(\theta_1 + \alpha + \pi/2)。$$

立刻，我们可以认定$|C_1| = |C_2|$。匹配相位，假若$C_1 = C_2$，那么，

$$\alpha + \pi/2 = (2m - 1)\pi, \qquad m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots。$$

激活 Windows
转到"设置"以激活 Windo

所以，

假若$C_1 = -C_2$，那么，

$$\alpha + \pi/2 = 2m\pi, \qquad m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots。$$

所以，

$$\alpha = (2m - 1/2)\pi, \qquad m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots。$$

总结，量子系统必须满足量子化守则：

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = (n - 1/2)\pi\hbar, \qquad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots。$$

通过以上这些步骤，我们得到量子化规则确定的允许能量值。

在我们今天这个问题里，

$$\int_0^a p(x)dx = \sqrt{2mE}\left(\frac{a}{2}\right) + \sqrt{2m(E - V_0)}\left(\frac{a}{2}\right) = \sqrt{2m}\left(\frac{a}{2}\right)\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}\right) = n\pi\hbar$$

故，

$$E + E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)} = \frac{4}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 = 4E_n^0; \quad 2\sqrt{E(E - V_0)} = \left(4E_n^0 - 2E + V_0\right)$$

得，

$$16EE_n^0 = 16E_n^{0^2} + 8E_n^0 V_0 + V_0^2$$

得，

$$E_n = E_n^0 + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0^2}{16E_n^0}$$

2.

2. 计算 U^{238} 和 Po^{212} 的寿命 τ。其中用到了原子核的密度为常数的假定，即可以表示成：

$$r_1 \cong (1.07\text{fm})A^{1/3},$$

此处 A 是质子数和中子数之和。发射 α 粒子的能量可以用 Einstein 公式获得：

$$E = m_p c^2 - m_d c^2 - m_\alpha c^2,$$

其中 m_p 和 m_d 分别是母核和子核的质量，m_α 是 α 粒子的质量。速度用以下公式估算：

$$E = \frac{1}{2} m_\alpha v^2.$$

我不会做。

但是我知道大概思路是求波函数透射率。在维基百科上可以查看到：

思考一个入射波$A_r e^{ikx}$，遇到处于$x=0$与$x=a$之间的位势$V(x)$。入射波的一部分会反射回去，成为反射波$A_l e^{-ikx}$；另一部分则会穿透过位势$V(x)$，成为透射波$C_r e^{ikx}$。那么，在位势垒的左边与右边，波函数分别是[6]:320-325

$$\psi_A(x) = A_r e^{ikx} + A_l e^{-ikx},$$
$$\psi_C(x) = C_r e^{ikx}。$$

而在位势垒的内部，根据WKB近似，波函数大约为

$$\psi_B(x) \approx \frac{B_r}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_0^x |p(x')|dx'/\hbar} + \frac{B_l}{\sqrt{|p|}} e^{\int_0^x |p(x')|dx'/\hbar};$$

其中，$p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}$是动量。

通过边界条件的匹配，可以设定常数A_l，B_r，B_l，C_r对于A_r的比例。

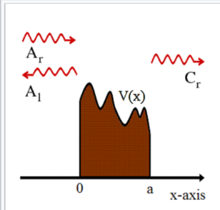
一个粒子穿透过位势垒的概率等于透射系数，定义为

$$T \equiv \frac{|C_r|^2}{|A_r|^2}。$$

假若位势垒又宽又强，那么，指数递增项目必定很小，可以忽略。所以，

$$\psi_B(x) \approx \frac{B_r}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_0^x |p(x')|dx'/\hbar}。$$

毛估C_r对于A_r的比例为



对于一个不规则位势垒的量子隧穿效应。往左与往右的量子波的波幅与方向都分别表示于图内。入射波、反射波、透射波的波幅分别是A_r、A_l、和C_r。

激活 Windows

假若位势垒又宽又强，那么，指数递增项目必定很小，可以忽略。所以，

$$\psi_B(x) \approx \frac{B_r}{\sqrt{|p|}} e^{-\int_0^x |p(x')|dx'/\hbar}。$$

毛估C_r对于A_r的比例为

$$\frac{|C_r|}{|A_r|} \approx e^{-\gamma};$$

其中，$\gamma = \int_0^a |p(x')|dx'/\hbar$。

所以，粒子穿透过位势垒的概率为

$$T = e^{-2\gamma}。$$

请注意，取所有物理参数都超大于普朗克常数的经典极限，表达为$\hbar \to 0$。那么，透射系数正确地变为零，也就是说，粒子无法穿透过位势垒。

所以原则上我们可以求透射率（但是实际我不会算那个数）。

3.

3*. 利用 WKB 近似求谐振子允许的能量。

这道题是我三道题之中最懂的一道。好简单，跟第一道题类似。运用公式：

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = (n - 1/2)\pi\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

假设经典限制点是x_t，那么：

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_t^2$$

$$x_t = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

粒子的动量是：

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

代入允许能量公式：

$$\int_{-2E/m\omega^2}^{2E/m\omega^2} \sqrt{2m\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)}dx = (n - 1/2)\pi\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

积分出来得到：

$$E_n = (n - 1/2)\omega\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

恰好与严格解一致。