# تقریب WKB

سید محمد مهدی صدرنژاد[1]

استاد راهنما: جناب آقای دکتر جعفری [2]

تقریب WKB روش مفیدی برای بدست آوردن تابع موج مستقل از زمان در یک بعد است (این روش به صورت مشابه برای ابعاد بالاتر هم قابل تعمیم است). این روش برای بدست آوردن حالات ایستا و حل معادلات عبور تونلی قابل استفاده است.

## ۱. حل معادله حالت در یک پتانسیل ثابت

فرض کنید ذره در یک پتانسیل ثابت $V(x) = V_0$ قرار دارد. برای مقادیر $E > V$ معادلات بدست آمده از حل معادله حالت عبارت خواهد بود:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow |k;\pm\rangle = Ae^{\pm ikx};\ k \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$$

علامت مثبت مربوط به ذره‌ای است که به سمت راست حرکت می‌کند و منفی برای ذره‌ای به سمت چپ حرکت می‌کند. ذره در حالت $|k;\pm\rangle$ در حالت نوسانی با طول موج $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ است و با حل کلاسیک معادلات ارتعاش ($p = \hbar k$) سازگاری دارد.

حال فرض کنید معادلات را برای $E < V$ حل کنیم. خواهیم داشت:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow |\kappa;\pm\rangle = Ae^{\pm \kappa x}; \kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$$

که حالات واپاشی را می‌سازند. از نظر معادلات کلاسیکی این حالت غیر ممکن است و عبور ذره در محیطی که انرژی آن از پتانسیل آن کمتر باشد (انرژی جنبشی منفی) وجود ندارد. برای امواج کلاسیکی این حالت را به میرایی یا تشدید تعبیر می‌کنند و با دیدگاه موجی کلاسیک هم ارزی دارد.

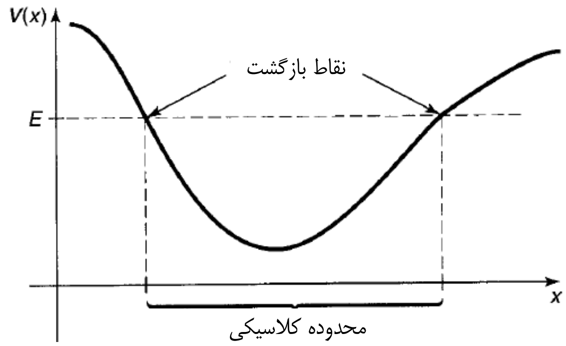
ایده اصلی در تقریب WKB استفاده معادلات فوق به صورت تعمیم یافته برای $V(x)$ متغیر است. این برای حالتی قابل طرح است که تغییرات تابع پتانسیل خیلی زیاد نباشد. به منظور تعمیم کافی است ثوابت حالت تابع موج یعنی دامنه، ثابت موج یا ثابت واپاشی را به صورت متغیر بنوسیم. معادله حالت به صورت عمومی زیر نوشته می‌شود:

$$|\alpha\rangle = \begin{cases} A(x)e^{i\phi(x)} & E > V(x) \quad \text{محدوده کلاسیکی} \\ A(x)e^{\phi(x)} & E < V(x) \end{cases}$$

معادلات فوق در نقاطی که $E \sim V$ دچار مشکل می‌شود. به این نقاط بر اساس دیدگاه کلاسیکی اصلاحا نقاط بازگشت گفته می‌شود. در این حالت طول موج یا طول واپاشی ($\sim \frac{1}{\kappa}$) به بینهایت میل می‌کند. باید توجه داشت که در نقاط بازگشت فرض تغییر آرام پتانسیل دچار مشکل است و این نقاط مشکل اصلی در تقریب WKB است.

---

[1] smmsadr@gmail.com
[2] Mjafari41@yahoo.com



شکل ۱. تابع پتانسیل عمومی

## ۲. محدوده کلاسیکی

برای حل معادله برای محدوده کلاسیکی (شکل ۱) معادله حالت را می نویسیم:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \Rightarrow H|E\rangle = E|E\rangle; p(x) = \sqrt{2m\big(E - V(x)\big)}$$

$$|E;x\rangle = A(x)e^{i\phi(x)}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx}|E;x\rangle = \frac{d}{dx}\left(A(x)e^{i\phi(x)}\right) = A'e^{i\phi} + i\phi' Ae^{i\phi}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}|E;x\rangle = A''e^{i\phi} + i2\phi' A'e^{i\phi} + i\phi'' Ae^{i\phi} + i\phi' A'^{e^{i\phi}} - {\phi'}^2 Ae^{i\phi}$$

$$= \left[\left(A'' - {\phi'}^2 A\right) + i(2\phi' A' + \phi'' A)\right]e^{i\phi} = -\frac{2m\big(E - V(x)\big)}{\hbar^2}Ae^{i\phi}$$

$$= -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}Ae^{i\phi}$$

با تفکیک بخش حقیقی و موهومی داریم:

$$\begin{cases} A'' - {\phi'}^2 A = -\dfrac{p(x)^2}{\hbar^2}A \\ 2\phi' A' + \phi'' A = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow 2\phi' A' A + \phi'' A^2 = 0 \Rightarrow (\phi' A^2)' = 0 \Rightarrow \phi' A^2 = C \Rightarrow \phi' A^2 = C \Rightarrow A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}}$$

$$\frac{A''}{A} - {\phi'}^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}$$

برای فرض خطی سازی فرض می‌کنیم که $\frac{A''}{A}$ برابر ${\phi'}^2$ و $\frac{p^2}{\hbar^2}$ قابل صرفه نظر کنیم:

$$\xRightarrow{\frac{A''}{A}\sim 0} \phi' = \pm\frac{p}{\hbar} \Rightarrow \phi(x) = \pm\frac{\int p(x)dx}{\hbar}$$

حال معادلات را بازنویسی می‌کنیم:

$$|E;x\rangle \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx}$$

باید به این نکته توجه کرد که احتمال حضور ذره در انرژی $E$ در مکان $x$ عبارت است از:

$$P(x) = \langle E;x|E;x\rangle = \frac{C^2}{p}$$

یعنی احتمال حضور با معکوس اندازه حرکت کلاسیک آن یا می‌توان گفت سرعت آن ذره در آن نسبت عکس دارد.

## ۳. محدوده غیر کلاسیکی

برای حل معادله برای محدوده غیر کلاسیکی ($E < V(x)$) کافی است معادلات را باز نویسی کنیم و خواهیم داشت:

$$p'(x) = \sqrt{2m\big(E - V(x)\big)} = i\sqrt{2m(V(x) - E)} = ip(x)$$

با کمی دقت متوجه می‌شویم با جایگذاری مقدار جدید $p'(x)$ به جای $p(x)$ در معادلات محدوده کلاسیکی معادله محدوده غیرکلاسیکی هم بدست می‌آید:

$$|E; x\rangle \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm\frac{1}{\hbar}\int p(x)dx}$$

برای درک بهتر مفهوم $p(x)$ در اینجا لازم است که معادله را برای سد پتانسیل به عرض $a$ و پتانسیل $E < V(x)$ در نظر می‌گیریم (شکل ۲) و معادلات عبور را برای آن بررسی می‌کنیم. برای موج ورودی $A$ با ثابت موج $k$ داریم:

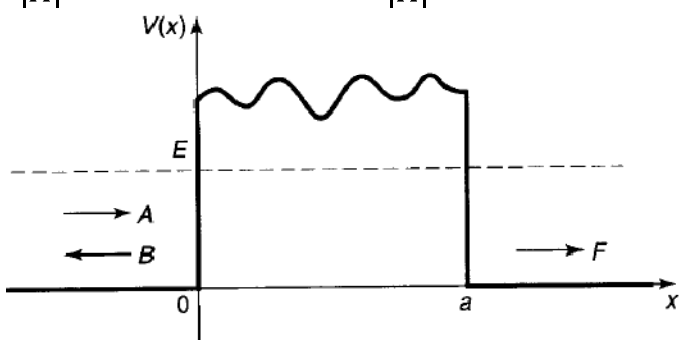
$$|\psi(x)\rangle = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Fe^{ikx} & x > a \end{cases} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

حال اگر معادله حالت را از تقریب $WKB$ برای محدوده غیرکلاسیکی می‌نویسیم:

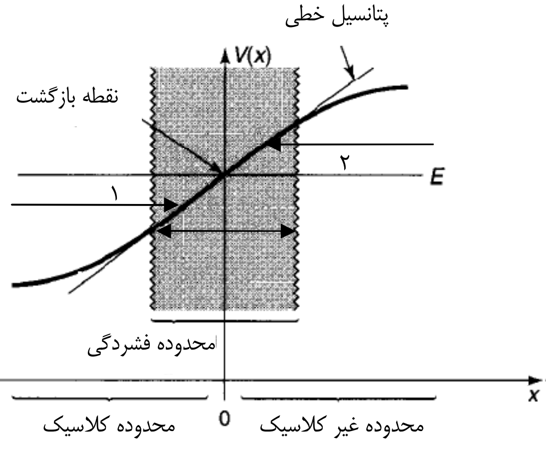
$$|\psi(x)\rangle = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^a p(x)dx} + \frac{D}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a p(x)dx}$$

اگر عرض سد را زیاد در نظر بگیریم جمله با توان مثبت سمت راست معادله باید ضریب کوچکی داشته باشد. لذا:

$$\frac{|F|}{|A|} \sim e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a p(x)dx} \Rightarrow T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \cong e^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a p(x)dx}$$




شکل ۲. سد پتانسیل




شکل ۳. نقطه بازگشت

## ۴. نقطه بازگشت

حال معادله حالت را برای پتانسیل $V(x)$ در محدوده کلاسیک و غیرکلاسیک در نظر بگیرید. می‌دانیم در تغییرات ناگهانی نوشتن روابط دچار مشکل نیستند و تنها کافی است مقادیر توابع حالت راا برابر قرار دهیم. برای تابع $V(x)$ در نقطه بازگشت عمودی نباشد برای بدست آوردن تابع حالت نمی‌توان روابط را به راحتی برابر قرار داد. برای راحتی $x = 0$ را در نقطه بازگشت قرار می‌دهیم (شکل ۳). بر اساس تقریب *WKB* می‌دانیم:

$$|\psi\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Bexp\left(\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')dx'\right) + Cexp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')dx'\right)\right] & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}}Dexp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x')dx'\right) & x > 0 \end{cases}$$

معادله حالت برای $x > 0$ با این فرض است که در تمام محدوده $x > 0$ تابع پتانسیل $E < V(x)$ باشد، لذا جمله توان مثبت به دلیل میل کردن به بینهایت حذف شده است. کاری که باید انجام شود مرتبط کردن دو رابطه فوق در محدوده نقطه بازگشت است.

ولی در اینجا مشکلاتی وجود دارد. معادلات تقریب WKB به دلیل میل کردن $p(x)$ به صفر در نقطه بازگشت به بینهایت میل می‌کند. معادله حالت واقعی چنین رفتاری ندارد. از طرفی نقطه بازگشتن مقادیر انرژی‌های مجاز را مشخص می‌کند. لذا لازم است ما دو رابطه WKB را با یک تابع موج وصله به هم جوش بدهیم.

رابطه پتانسیل را در محدوده نقطه بازگشت به صورت خطی تقریب می‌زنیم:

$$V(x) \cong E + V'(0)x$$

حال معادله حالت زیر در می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_p}{dx^2} + (E + V'(0)x)\psi_p = E\psi_p \Rightarrow \frac{d^2\psi_p}{dx^2} = \alpha^3 x\psi_p, \alpha \equiv \left[-\frac{2m}{\hbar^2}V'(0)\right]^{\frac{1}{3}}$$

$x$ را با $z = \alpha x$ تغییر متغیر دهیم:

$$\frac{d^2\psi_p}{dz^2} = z\psi_p$$

این معادله آیری است و حل آن معادله آیری نامیده می‌شود که خصوصیات آن در جدول زیر آمده است.

*Differential Equation:* $\frac{d^2y}{dz^2} = zy.$

*Solutions:* Linear combinations of Airy Functions, $Ai(z)$ and $Bi(z)$.

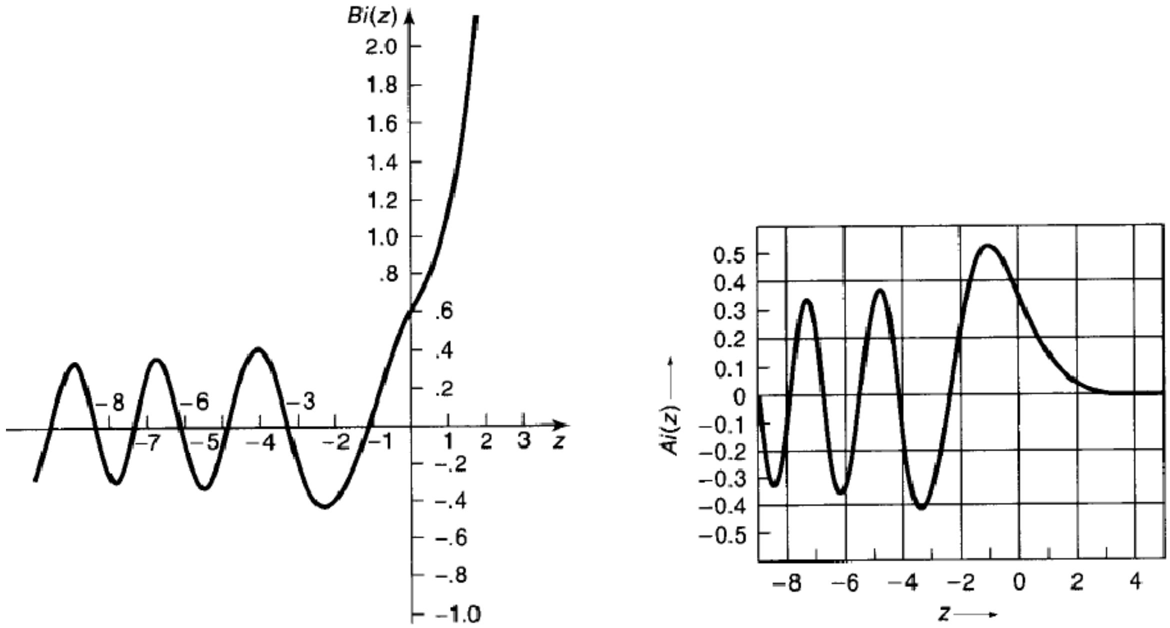
*Integral Representation:*

$$Ai(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)ds$$

$$Bi(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[e^{-\frac{s^3}{3}+sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)\right]ds$$

*Asymptotic Forms:*

$$\left.\begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}\,z^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}\,z^{1/4}}e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \end{aligned}\right\} z \gg 0 \qquad \left.\begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\sin\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\cos\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned}\right\} z \ll 0$$




شکل ۴. توابع آیری

با توجه به اینکه معادله آیری غیرخطی مرتبه دو است توابع آیری دو جواب $Ai(z)$ و $Bi(z)$ دارد که جواب کلی جمع خطی این دو جواب است که در شکل ۴ تصویر آن‌ها آمده است.

حال باید بین روابط WKB و توابع آیری در محدوده مشترکشان اشتراک ایجاد کنیم. این به این دلیل که معادلات خطی سازی شده‌اند از معادلات آیری پیروی می‌کنند و همینطور در این محدوده هنوز توابع تقریب WKB کار می‌کند (شکل ۳).

حال اگر روابط را برای این محدوده بازنویسی کنیم داریم:

$$p(x) \cong \sqrt{2m(E-E-V'(0)x)} = \hbar\alpha^{\frac{3}{2}}\sqrt{-x}$$

برای مقادیر فوق را جایگذاری می‌کنیم:

$$\int_0^x p(x')dx' \cong \hbar\alpha^{\frac{3}{2}}\int_0^x \sqrt{x}dx' = \frac{2}{3}\hbar(\alpha x)^{\frac{3}{2}}$$

حال معادله د این محدوده دوم مشترک به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$|\psi\rangle \cong \frac{D}{\sqrt{\hbar}\alpha^{\frac{3}{4}}x^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}\right)$$

حال اگر معادله آیری را برای این محدوده بنویسیم داریم:

$$|\psi\rangle_p \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}\right) + \frac{b}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{\frac{1}{4}}}\exp\left(\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}\right)$$

با مقایسه روابط فوق داریم:

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}}D, b = 0$$

حال این موارد را برای محدوده ۱ هم تکرار می‌کنیم:

$$\int_x^0 p(x')dx' \cong \frac{2}{3}\hbar(-\alpha x)^{\frac{3}{2}}$$

حال روابط را باز نویسی می کنیم:

$$|\psi\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{\hbar}\alpha^{\frac{3}{4}}x^{\frac{1}{4}}}\left[B\exp\left(-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}\right)+C\exp\left(-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}\right)\right]$$

$$|\psi\rangle_p = \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{-\frac{1}{4}}}\sin\left(-\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right)$$

$$= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{-\frac{1}{4}}}\frac{1}{2i}\left[e^{i\frac{\pi}{4}}e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}} - e^{-i\frac{\pi}{4}}e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{\frac{3}{2}}}\right]$$

حال اگر معادلات را با هم مساوی قرار دهیم می‌توانیم ضریب $a$ را حذف کنیم و معادله به صورت زیر در می‌آید:

$$B = -ie^{\frac{i\pi}{4}}D \; and \; C = ie^{-\frac{i\pi}{4}}D$$

$$|\psi\rangle = \begin{cases} \dfrac{2D}{\sqrt{p(x)}} sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^{x_2} p(x')dx' + \dfrac{\pi}{2}\right) & x < x_2 \\ \dfrac{D}{\sqrt{p(x)}} exp\left(-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_0^{x} p(x')dx'\right) & x > x_2 \end{cases}$$

## ۵. منابع

Griffiths, D. J., “Introduction to Quantum Mechanics”, Prentice Hall, (1995), 274-279.
Zettili, N., “Quantum Mechanics: Concept and Applications”, John Wiley & Sons, (2001), 495-510.