

§10 WKB 法 (準古典近似法)

10.1 量子力学から古典力学への移行

- 定常状態の 1 次元 Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

- 波動関数の置き換え

$$\psi(x) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x) \right]. \quad (2)$$

- S に対する方程式

(2) 式を (1) 式に代入し、以下のように微分を実行する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{iS/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left[\frac{i}{\hbar} \frac{dS}{dx} e^{iS/\hbar} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{i}{\hbar} \frac{dS}{dx} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} \right] e^{iS/\hbar}$$

最後に $e^{iS/\hbar}$ で割ると、次式が得られる。

$$\frac{1}{2m} (S'^2 - i\hbar S'') + V(x) = E \quad (3)$$

(3) 式で、 $\hbar \rightarrow 0$ とすると、古典力学の Hamilton-Jacobi の方程式になる。

10.2 準古典近似 (Wentzel-Kramers-Brillouin 近似)

- \hbar についての展開

上記の事実より、 S を次のように \hbar の冪で展開して解く近似解法が示唆される。

$$S = S_0 - i\hbar S_1 + (-i\hbar)^2 S_2 + \cdots, \quad (4)$$

この解法を準古典近似 (Wentzel-Kramers-Brillouin 近似あるいは WKB 近似) と呼ぶ。

(3) 式に (4) 式を代入し、 \hbar の同じ冪の項を集めると、次式が得られる。

$$0 \text{ 次: } \frac{1}{2m} S_0'^2 + V(x) = E \quad \longleftrightarrow \quad S_0'^2 = 2m[E - V(x)] \quad (5)$$

$$1 \text{ 次: } \frac{1}{2m} (2S_0' S_1' + S_0'') = 0 \quad \longleftrightarrow \quad S_1' = -\frac{S_0''}{2S_0'} \quad (6)$$

$$2 \text{ 次: } \frac{1}{2m} (2S_0' S_2' + S_1'^2 + S_1'') = 0 \quad \longleftrightarrow \quad S_2' = -\frac{S_1'' + S_1'^2}{2S_0'} \quad (7)$$

• 古典運動が可能な領域 — $E > V(x)$ — の解

局所的運動量 $p(x)$ を次式で定義する。

$$p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]}. \quad (8)$$

すると、(5) 式は次のように変形できる。

$$\frac{dS_0}{dx} = \pm p(x) \quad \longrightarrow \quad S_0(x) = \pm \int^x p(x') dx' \quad (9)$$

(6) 式に代入して不定積分を実行する。

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{p'(x)}{2p(x)} \quad \longrightarrow \quad S_1(x) = -\frac{1}{2} \ln p(x) \quad (10)$$

上の 2 式を (4) 式に代入し、その結果を (2) 式の指数の肩に乗せると、以下のようになる。

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}(S_0 - i\hbar S_1)\right] = \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx' - \frac{1}{2} \ln p(x)\right] = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right]$$

一般の波動関数は、2 つの独立解の線形結合として、次のように書ける。

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right] + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right] \quad (11)$$

• 古典運動が不可能な領域 — $E < V(x)$ — の解

$\rho(x)$ を次式で定義する。

$$\rho(x) \equiv \sqrt{2m[V(x) - E]} \quad (12)$$

$|\rho(x)| = |p(x)|$ に注意。 $\rho(x)$ を用いると、(5) 式は次のように変形できる。

$$\frac{dS_0}{dx} = \pm i\rho(x) \quad \longrightarrow \quad S_0(x) = \pm i \int^x \rho(x') dx' \quad (13)$$

(6) 式に代入して不定積分を実行する。

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{\rho'(x)}{2\rho(x)} \quad \longrightarrow \quad S_1(x) = -\frac{1}{2} \ln \rho(x) \quad (14)$$

波動関数は、2 つの独立解の線形結合として、次のように書ける。

$$\psi(x) = \frac{C'_1}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int^x \rho(x') dx'\right] + \frac{C'_2}{\sqrt{\rho(x)}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int^x \rho(x') dx'\right] \quad (15)$$

- WKB 近似の適用範囲

WKB 近似が妥当なのは、(3) の第二項が第一項に比べて無視できるとき、すなわち

$$\hbar|S''| \ll |S'^2| \quad \longleftrightarrow \quad \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{S'} \right) \right| \ll 1 \quad \longleftrightarrow \quad \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right| \ll 1 \quad (16)$$

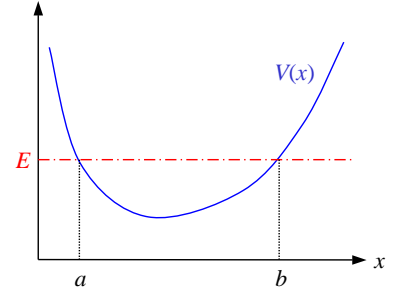
ここで、第3の条件式を得るために、 $S \rightarrow S'_0$ と近似し、(9) 式を用いた。

de Broglie 波長 $\lambda(x) \equiv \frac{h}{p(x)}$ を用いると、上記の条件は、 $\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1$ と書ける。

すなわち、de Broglie 波長が空間的にゆっくりと変化していれば良い。

- 回帰点

- (a) 回帰点とは $V(x) = E$ を満たす点。すなわち、右図の点 a と b 。これらの点の周りでは、 $|p(x)| \approx 0$ すなわち $|\lambda(x)| \rightarrow \infty$ となり、準古典近似は使えない。



- (b) 回帰点 a の周りでポテンシャル $V(x)$ を Taylor 展開し、以下のように近似する。

$$V(x) \approx V(a) - F_a (x - a), \quad F_a \equiv V'(a) : \text{点 } a \text{ での力} \quad (17)$$

この近似の下では、 $p(x)$ と $\rho(x)$ は次のように表せる。

$$\begin{cases} p(x) \approx \sqrt{2mF_a (x - a)} = \gamma_a (x - a)^{1/2} & : x > a \\ \rho(x) \approx \sqrt{2mF_a (a - x)} = \gamma_a (a - x)^{1/2} & : x < a \end{cases} \quad (\gamma_a \equiv \sqrt{2mF_a}) \quad (18)$$

従って、準古典近似が成立する条件 (16) は、以下ようになる。

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2mF_a}} \frac{1}{2|x - a|^{3/2}} \ll 1 \quad \longleftrightarrow \quad |x - a| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{mF_a} \right)^{1/3} \equiv \Delta x_a \quad (19)$$

- (c) 同様に、回帰点 b の周りでは、 $V(x)$ は以下のように近似される。

$$V(x) \approx V(b) - F_b (x - b) = V(b) + |F_b| (x - b), \quad F_b \equiv V'(b) < 0 : \text{点 } b \text{ での力} \quad (20)$$

この近似の下では、 $p(x)$ と $\rho(x)$ は次のように表せる。

$$\begin{cases} p(x) \approx \sqrt{2m|F_b| (b - x)} = \gamma_b (b - x)^{1/2} & : x < b \\ \rho(x) \approx \sqrt{2m|F_b| (x - b)} = \gamma_b (x - b)^{1/2} & : x > b \end{cases} \quad (\gamma_b \equiv \sqrt{2m|F_b|}) \quad (21)$$

10.3 接続公式

- 帰点 a の周りでの解の接続

図の点 a の近傍を考え、 $x < a$ の解と $x > a$ の解を滑らかに接続する。まず、(11) 式と (15) 式で、積分の下限を a にとる。これは積分定数の選び方を変えるのみで、本質的変更ではない。

(a) $x > a + 10\Delta x_a$ の解

(11) 式に (18) 式を代入して積分を実行すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \left\{ C_1 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right] + C_2 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' \right] \right\} \exp \left[-\frac{1}{2} \ln p(x) \right] \\ &= \left\{ C_1 \exp \left[i \frac{2\gamma_a}{3\hbar} (x-a)^{3/2} \right] + C_2 \exp \left[-i \frac{2\gamma_a}{3\hbar} (x-a)^{3/2} \right] \right\} \exp \left[-\frac{1}{4} \ln(x-a) - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right] \quad (22)\end{aligned}$$

(b) $x < a - 10\Delta x_a$ の解

$\psi(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$ の境界条件を考慮すると、この領域の解は次のようになる

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{\rho(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x \rho(x') dx' \right] = C \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x \rho(x') dx' - \frac{1}{2} \ln \rho(x) \right]$$

この式に (18) 式を代入し、積分を実行すると、次式が得られる。

$$\psi(x) = C \exp \left[-\frac{2\gamma_a}{3\hbar} (a-x)^{3/2} - \frac{1}{4} \ln(a-x) - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right] \quad (23)$$

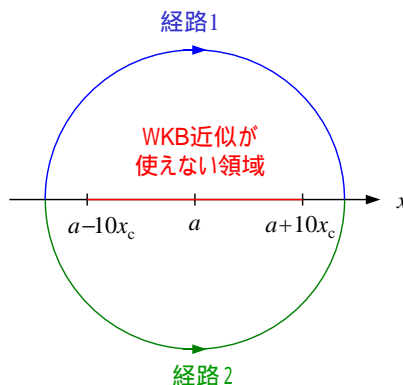
(c) 複素平面を経由した解の接続

まず、(23) 式の x を複素平面に解析接続し、次のように表す。

$$a - x = R e^{i(\theta - \pi)} \quad (24)$$

この表式を用いると、実軸上での $x < a$ に対する $\psi(x)$ は次のように複素平面に解析接続される。

$$\psi(x) = C \exp \left\{ -\frac{2\gamma_a}{3\hbar} \left(R e^{i(\theta - \pi)} \right)^{3/2} - \frac{1}{4} [\ln R + i(\theta - \pi)] - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right\} \quad (25)$$



この表式を、準古典近似が使えない領域を通らないで、図の経路 1 経由で (a) の領域に接続する。この経路では、(24) 式の θ が $\pi \geq \theta \geq 0$ と変化するので、 $\theta = 0$ での波動関数は次のようになる。

$$\begin{aligned}\psi(x) &= C \exp \left[-\frac{2\gamma_a}{3\hbar} \left(R e^{-i\pi} \right)^{3/2} - \frac{1}{4} (\ln R - i\pi) - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right] \\ &= C e^{i\pi/4} \exp \left(-i \frac{2\gamma_a}{3\hbar} R^{3/2} - \frac{1}{4} \ln R - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right)\end{aligned}\quad (26)$$

$\theta = 0$ で $R = |a - x| = x - a$ であることを考慮し、(26) 式を (22) 式と見較べる。すると、(26) 式は、定数因子を除いて、(22) 式の第 2 項と同じ位相因子を持つことがわかる。両者が完全に一致することを要請すると、次式が得られる。

$$C e^{i\pi/4} = C_2 \quad (27)$$

同様に、図の経路 2 経由で (a) の領域に接続する。この経路では、(24) 式の θ が $\pi \leq \theta \leq 2\pi$ と変化するので、 $\theta = 2\pi$ での波動関数は次のようになる。

$$\begin{aligned}\psi(x) &= C \exp \left[-\frac{2\gamma_a}{3\hbar} \left(R e^{i\pi} \right)^{3/2} - \frac{1}{4} (\ln R + i\pi) - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right] \\ &= C e^{-i\pi/4} \exp \left(i \frac{2\gamma_a}{3\hbar} R^{3/2} - \frac{1}{4} \ln R - \frac{1}{2} \ln \gamma_a \right)\end{aligned}\quad (28)$$

$\theta = 2\pi$ で $R = |a - x| = x - a$ であることを考慮し、(28) 式を (22) 式と見較べる。すると、(28) 式は、定数因子を除いて、(22) 式の第 1 項と同じ位相因子を持つことがわかる。両者が完全に一致することを要請すると、次式が得られる。

$$C e^{-i\pi/4} = C_1 \quad (29)$$

(27) 式と (29) 式を (11) 式に代入すると、 $x > a$ での解が、 $x < a$ での解 (15) に現れる定数 C を用いて、以下のように表されることがわかる。

$$\psi(x) = \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] \quad (30)$$

- 回帰点 b の周りでの解の接続

図の点 b の近傍を考え、 $x < b$ の解と $x > b$ の解を滑らかに接続する。まず、(11) 式と (15) 式で、積分の下限を b にとる。

(a) $x < b - 10\Delta x_b$ の解

(11) 式に (21) 式を代入して積分を実行すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \left\{ C_1 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' \right] + C_2 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' \right] \right\} \exp \left[-\frac{1}{2} \ln p(x) \right] \\ &= \left\{ C_1 \exp \left[-i \frac{2\gamma_b}{3\hbar} (b-x)^{3/2} \right] + C_2 \exp \left[i \frac{2\gamma_b}{3\hbar} (b-x)^{3/2} \right] \right\} \exp \left[-\frac{1}{4} \ln(b-x) - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right]\end{aligned}\quad (31)$$

(b) $x > b + 10\Delta x_b$ の解

$\psi(x \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ の境界条件を考慮すると、この領域の解は次のようになる

$$\psi(x) = C' \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_b^x \rho(x') dx' - \frac{1}{2} \ln \rho(x) \right] \quad (32)$$

この式に (21) 式を代入し、積分を実行すると、次式が得られる。

$$\psi(x) = C' \exp \left[-\frac{2\gamma_b}{3\hbar} (x-b)^{3/2} - \frac{1}{4} \ln(x-b) - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right] \quad (33)$$

(c) 複素平面を経由した解の接続

まず、(33) 式の x を複素平面に解析接続し、次のように表す。

$$x - b = Re^{i\theta} \quad (34)$$

この表式を用いると、実軸上での $x > b$ に対する $\psi(x)$ は、次のように複素平面に解析接続される。

$$\psi(x) = C' \exp \left[-\frac{2\gamma_b}{3\hbar} (Re^{i\theta})^{3/2} - \frac{1}{4} (\ln R + i\theta) - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right] \quad (35)$$

まず $0 \leq \theta \leq \pi$ と変化させて、この表式を $x < b$ の領域に接続する。 $\theta = \pi$ での波動関数は次のようになる。

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C' \exp \left[i\frac{2\gamma_b}{3\hbar} (Re^{i\pi})^{3/2} - \frac{1}{4} (\ln R + i\pi) - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right] \\ &= C' e^{-i\pi/4} \exp \left(i\frac{2\gamma_b}{3\hbar} R^{3/2} - \frac{1}{4} \ln R - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right) \end{aligned} \quad (36)$$

$\theta = \pi$ で $R = |x - b| = b - x$ であることを考慮し、(36) 式と (31) 式と見較べる。すると、(36) 式は、定数因子を除いて、(31) 式の第 2 項と同じ位相因子を持つことがわかる。両者が完全に一致することを要請すると、次式が得られる。

$$C' e^{-i\pi/4} = C_2 \quad (37)$$

同様にして、(35) 式の θ を $0 \geq \theta \geq -\pi$ と変化させて $x < b$ の領域に接続する。 $\theta = -\pi$ での波動関数は次のようになる。

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C' \exp \left[-\frac{2\gamma_b}{3\hbar} (Re^{-i\pi})^{3/2} - \frac{1}{4} (\ln R - i\pi) - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right] \\ &= C' e^{i\pi/4} \exp \left(-i\frac{2\gamma_b}{3\hbar} R^{3/2} - \frac{1}{4} \ln R - \frac{1}{2} \ln \gamma_b \right) \end{aligned} \quad (38)$$

$\theta = -\pi$ で $R = |x - b| = b - x$ であることを考慮し、(38) 式を (31) 式と見較べる。すると、(38) 式は、定数因子を除いて、(31) 式の第 1 項と同じ位相因子を持つことがわかる。両者が完全に一致することを要請すると、次式が得られる。

$$C' e^{i\pi/4} = C_1 \quad (39)$$

(37) 式と (39) 式を (11) 式に代入すると、 $x < b$ での解が、 $x > b$ での解 (32) に現れる定数 C' を用いて、以下のように表されることがわかる。

$$\psi(x) = \frac{2C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{2C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] \quad (40)$$

10.4 Bohr-Sommerfeld の量子化則

(30) 式と (40) 式が、 $a + 10\Delta x_a < x < b - 10\Delta x_b$ の領域における同じ波動関数を表すためには、 n を整数として、次のいずれかの条件が必要である。

[$C \cos \theta = C' \cos \theta'$ が成立する条件は、 $\theta' = \pm \theta + n\pi$ かつ $C' = (-1)^n C$]。

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x') dx' - \frac{\pi}{4} = \pm \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right] + n\pi, \quad C' = (-1)^n C \quad (41)$$

右辺の複号が $+$ の場合は、条件が x に依存するため、領域 $a + 10\Delta x_a < x < b - 10\Delta x_b$ の任意の x について成立させることは不可能である。一方、 $-$ 符号の場合は次のように変形できる。

$$\int_a^b p(x') dx' = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{h}{2}, \quad C' = (-1)^n C. \quad (42)$$

さらに、 $b \rightarrow a$ の積分寄与を付け加え、1 周期にわたる積分の形に表すと、次の Bohr-Sommerfeld の量子化則が得られる。

$$\oint p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) h. \quad (43)$$

● 例：1 次元調和振動子

$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ に $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ を代入すると、転回点が $a = -\sqrt{2E/m\omega^2}$, $b = \sqrt{2E/m\omega^2}$ と求まる。 $x = \sqrt{2E/m\omega^2} \cos \theta$ ($a \leq x \leq b \longleftrightarrow \pi \geq \theta \geq 0$) と変数変換し、(42) 式の積分を実行する。

$$\int_a^b p(x) dx = \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \int_\pi^0 (-\sin^2 \theta) d\theta = \frac{2E}{\omega} \frac{\pi}{2} = \frac{\pi E}{\omega}. \quad (44)$$

これを (42) 式に代入して $E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$ が得られる。