

KVANTNA MEHANIKA

Zadaci za vježbe 2. 6. 2025.

20 WKB aproksimacija

20.1 Upotrijebite WKB aproksimaciju i nađite približne energije za problem s potencijalom

$$V(x) = \begin{cases} mgx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}$$

Usporedite točne i približne vrijednosti u tablici. Što se iz tablice može zaključiti?

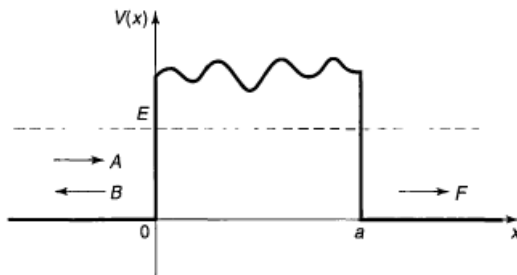
The Quantized Energies of a Bouncing Ball in Units of $(mg^2\hbar^2/2)^{1/3}$

n	WKB	Exact
1	2.320	2.338
2	4.082	4.088
3	5.517	5.521
4	6.784	6.787
5	7.942	7.944
6	9.021	9.023
7	10.039	10.040
8	11.008	11.009
9	11.935	11.936
10	12.828	12.829

20.2 Razmotrite tunel-efekt u problemu 1D potencijalne barijere prikazane na slici. Pokažite da je koeficijent transmisije u WKB aproksimaciji za široku i/ili visoku barijeru

$$T \propto e^{-2\gamma}$$

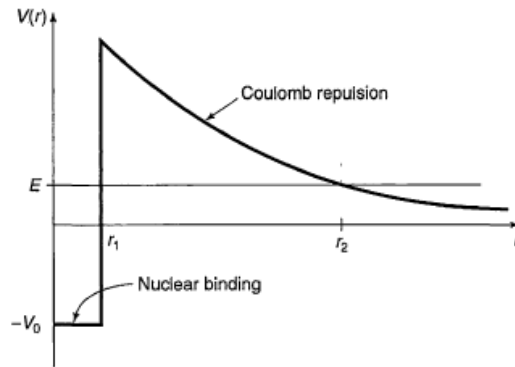
$$\gamma \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx$$



20.3 George Gamow je 1928. godine uspješno primijenio formule iz zadatka 20.2 na proces alfa-raspada koji se događa kod radioaktivnih elemenata. Alfa-čestica (dva protona i dva neutrona) je pozitivno nabijena i s ostatkom jezgre međudjeluje repulzivno ako je dovoljno daleko od jezgre kao što je prikazano na slici. Pokažite da je vrijeme života početne jezgre radioaktivnog elementa u WKB aproksimaciji

$$\tau \simeq \frac{2r_1}{v} e^{2\gamma}$$

gdje je v prosječna brzina alfa-čestice unutar jezgre.



20.4 Za sferno simetrični potencijal WKB aproksimaciju možemo primijeniti na radialnu Schrödingerovu jednadžbu. U slučaju $l = 0$ možemo primijeniti WKB jednadžbu za energije u obliku

$$\int_0^{r_0} p(r) dr = \left(n - \frac{1}{4} \right) \pi \hbar$$

gdje je r_0 točka obrata, a za točku $r = 0$ uzima se kao da se radi o beskonačno visokoj potencijalnoj barijeri. Primijenite ovu jednadžbu za dobivanje energija u problemu s potencijalom

$$V(r) = V_0 \ln(r/a)$$

gdje su V_0 i a konstante.

20.5 Odredite valne funkcije i energije za problem harmonijskog oscilatora u WKB aproksimaciji. Usporedite valnu funkciju i energiju osnovnog stanja s točnim vrijednostima.

20.6 Alternativan izvod za WKB valnu funkciju temelji se na razvoju u red po potencijama po $\hbar$. Zapišimo valnu funkciju u obliku

$$\psi(x) = \exp(if(x)/\hbar)$$

gdje je $f(x)$ kompleksna funkcija.

(a) Uvrstite ovo rješenje u Schrödingerovu jednadžbu i pokažite da je

$$i\hbar f'' - (f')^2 + p^2 = 0$$

(b) Napišite $f(x)$ u obliku reda potencija po $\hbar$

$$f(x) = f_0(x) + \hbar f_1(x) + \hbar^2 f_2(x) + \dots$$

i, grupirajući članove po potencijama za $\hbar$, pokažite da je

$$(f_0')^2 = p^2$$

$$if_0'' = 2f_0' f_1'$$

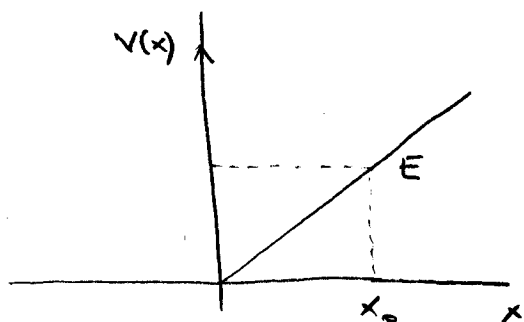
$$if_1'' = 2f_0' f_2' + (f_1')^2$$

$$\vdots$$

(c) Riješite jednadžbe za f_0 i f_1 i pokažite da, do prvog reda po $\hbar$, dobivate WKB valnu funkciju

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right]$$

20.1



Ovaj je problem uopće
"bouncing ball" problem.

$$V(x) = \begin{cases} mgx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}$$

$$\text{uvjet: } \int_0^{x_0} p(x) dx = (n - \frac{1}{4}) \pi \hbar$$

Točka obrata:

$$x_0 = \frac{E}{mg}$$

$$\begin{aligned} \int_0^{x_0} dx \sqrt{2m(E - mgx)} &= -\frac{2\sqrt{2}}{3g\sqrt{m}} \cdot (E - mgx)^{3/2} \Big|_0^{x_0} \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{3g\sqrt{m}} \cdot E^{3/2} \end{aligned}$$

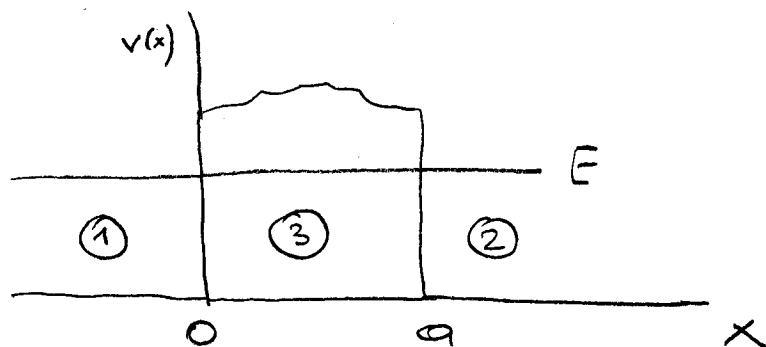
Uvrstimo u uvjet

$$\frac{2\sqrt{2}}{3g\sqrt{m}} E_n^{3/2} = (n - \frac{1}{4}) \pi \hbar$$

$$\begin{aligned} E_n &= \left(\frac{3}{2\sqrt{2}}\right)^{2/3} \cdot (g\sqrt{m} \hbar)^{2/3} \cdot \left[(n - \frac{1}{4}) \pi\right]^{2/3} \\ &= \frac{1}{2} (9g^2 \hbar m)^{1/3} \left[(n - \frac{1}{4}) \pi\right]^{2/3} \end{aligned}$$

Tabela pokazuje da za vel' n dobivamo izvmu slagaye
o točnim vrijednostima.

20.2



Rješavamo Schrödingерову jednačinu u područjima 1, 2 i 3. OPREZ: radi se stanjima rasprševanja.

Rješenje za područje ①:

$$\psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Rješenje za područje ②:

$$\psi_3 = F e^{ikx}$$

U području ③ primijenit ćemo WKB aproksimaciju. Budući je $E < V$, imamo za $0 \leq x \leq a$

$$\psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right] + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'\right]$$

Koeficijent transmisije je

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Koeficijente B, C, D, F treba odrediti pomoću uvjeta neprekidnosti valne funkcije i derivacije na rubovima $x=0$ i $x=a$. U ovom slučaju nema točaka obrata u kojima je $E = V(x)$.

Postavit ćemo: $A=1$; $T=|F|^2$

$$1. \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$2. \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$3. \psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$4. \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

Imamo jednačine (zanemati derivacije za $P^{-1/2} \Rightarrow$ napomena)

$$1. A+B = \frac{C}{\sqrt{p(0)}} + \frac{D}{\sqrt{p(0)}}$$

$$p(0) = \sqrt{2m(V(0)-E)}$$

$$p(a) = \sqrt{2m(V(a)-E)}$$

$$2. i\kappa A - i\kappa B = \frac{1}{\hbar} \sqrt{p(0)} (C - D)$$

$$3. F e^{i\kappa a} = \frac{C}{\sqrt{p(a)}} \exp[\gamma] + \frac{D}{\sqrt{p(a)}} \exp[-\gamma]$$

$$4. i\kappa F e^{i\kappa a} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{p(a)} (C \exp[\gamma] - D \exp[-\gamma])$$

gdje je

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^a p(x) dx$$

Iz ovih jednačina sledi [Mathematica]

$$F = - \frac{4\hbar \sqrt{p(0)p(a)} \kappa e^{-i\kappa a} \cdot e^{\gamma}}{(e^{2\gamma} - 1)(i\kappa^2 \hbar^2 - i p(0)p(a)) - (e^{2\gamma} + 1)[\kappa \hbar (p(a) + p(0))]}$$

$\gamma \gg 1$ visoka ili široka barijera; ugriznik

$$(e^{\pm \gamma} \mp 1) \approx e^{\pm \gamma}$$

$$F \propto e^{-\gamma}$$

$$|F|^2 \propto e^{-2\gamma} \text{ pokazati}$$

NAPOМЕНА: WKB uvjet glavi

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V(x))}} \ll \frac{2m(E-V(x))}{m \cdot dV/dx}$$

ili

$$\boxed{\frac{m\hbar \frac{dV}{dx}}{p^3} \ll 1}$$

Računamo derivacije za $p^{-1/2}$

$$(p^{-1/2})' = \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot p^{-3/2} \cdot p'$$

$$p' = \left(\sqrt{2m(E-V(x))}\right)' = \frac{1}{2} \cdot \frac{(-2m) \frac{dV}{dx}}{\sqrt{2m(E-V(x))}} = -\frac{m \frac{dV}{dx}}{p}$$

Imamo:

$$(p^{-1/2})' = \frac{1}{2} \cdot p^{-3/2} \cdot \frac{m \frac{dV}{dx}}{p} \cdot \frac{p^{1/2}}{p^{1/2}} = \underbrace{\frac{m\hbar \frac{dV}{dx}}{p^3}}_{\ll 1} \cdot \frac{p^{1/2}}{2\hbar}$$

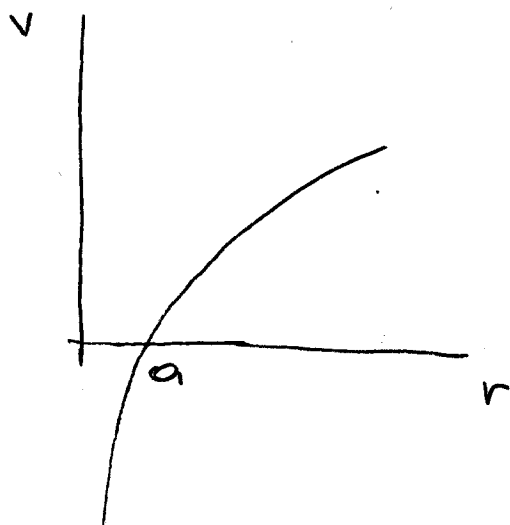
Zbog WKB uvjeta je

$$(p^{-1/2})' \ll \frac{p^{1/2}}{\hbar}$$

Ne, $p^{1/2}/\hbar$ je red veličine članova koje dobijemo derivirajući $\exp\left(\frac{1}{\hbar} \int^x p(x') dx'\right)$ i te članove čemo zadržati.

20.4

$$V = V_0 \ln(r/a)$$



$$P^2(r) = 2m \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right]$$

$$\ell = 0$$

$$\int_0^{r_0} \sqrt{2m[E - V_0 \ln(r/a)]} dr = (n - \frac{1}{4})\pi\hbar$$

Točka obrata definirana je jednačinom

$$E = V_0 \ln(r_0/a)$$

Računamo integral

$$\sqrt{2m} \int_0^{r_0} \sqrt{V_0 \ln(r_0/a) - V_0 \ln(r/a)} dr = \sqrt{2mV_0} \int_0^{r_0} \sqrt{\ln(r_0/r)} dr$$

Promjena varijabli: $u \equiv \ln(r_0/r)$; $r = r_0 e^{-u}$; $dr = -r_0 e^{-u} du$

Granice: za r_0 ; $u = 0$
za 0 ; $u \rightarrow \infty$

$$\sqrt{2mV_0} r_0 \int_0^{\infty} \underbrace{\sqrt{u} e^{-u}}_{\Gamma(\frac{3}{2})} du = \sqrt{2mV_0} r_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Dobijemo:

$$\sqrt{2mV_0} \pi \cdot \frac{r_0}{2} = (n - \frac{1}{4})\pi\hbar$$

N_0 ,

$$r_0 = a e^{E/N_0}$$

pa je

$$E_n = V_0 \ln \left[\frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2\pi}{mV_0}} \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]$$

Razlika energija

$$E_{n+1} - E_n = V_0 \ln \left(\frac{n + \frac{3}{4}}{n - \frac{1}{4}} \right)$$

ne ovisi o masi čestice.

$$(a) \quad \psi(x) = \exp(i f(x)/\hbar)$$

$f(x)$ općenito kompleksna funkcija

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{i}{\hbar} \exp(i f/\hbar) f'$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{i}{\hbar} \left[\exp(i f/\hbar) \cdot \frac{i}{\hbar} f'^2 + \exp(i f/\hbar) f'' \right]$$

$$p^2 \psi = -\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} \quad ; \quad p^2 = 2m[E - V(x)]$$

$$p^2 \exp(i f/\hbar) = -\hbar^2 \frac{i}{\hbar} \left[\frac{i}{\hbar} f'^2 + f'' \right] \exp(i f/\hbar)$$

$$p^2 - f'^2 + i\hbar f'' = 0 \quad (*)$$

$$(b) \quad f = f_0 + \hbar f_1 + \hbar^2 f_2 + \dots$$

$$f' = f_0' + \hbar f_1' + \hbar^2 f_2' + \dots$$

$$f'' = f_0'' + \hbar f_1'' + \hbar^2 f_2'' + \dots$$

$$\begin{aligned} (f')^2 &= (f_0' + \hbar f_1' + \hbar^2 f_2' + \dots)(f_0' + \hbar f_1' + \hbar^2 f_2' + \dots) \\ &= (f_0')^2 + \hbar (f_0' f_1' + f_0' f_1') + \hbar^2 (f_0' f_2' + f_1'^2 + f_0' f_2') \\ &\quad + \dots \\ &\quad \quad \quad \underbrace{2 f_0' f_1'} \end{aligned}$$

Uvrstimo u (*) i uporedimo članove uz jednake potencije od $\hbar$

$$p^2 = f_0'^2$$

$$i\hbar f_0'' = 2 f_0' f_1'$$

$$i\hbar f_1'' = 2 f_0' f_2' + f_1'^2$$

$\vdots$

$$(c) \quad f_0' = \pm p$$

$$\Rightarrow f_0 = \pm \int p(x) dx + C_1$$

$$f_1' = \frac{i}{2} \frac{f_0''}{f_0'} = \frac{i}{2} \frac{\pm p'}{\pm p} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \ln p$$

$$\Rightarrow f_1 = \frac{i}{2} \ln p + C_2$$

Uvratimo se početne funkciji s tim da je

$$\psi \approx f_0 + \hbar f_1$$

$$\psi(x) = \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx - \frac{1}{2} \underbrace{\ln p}_{p^{-1/2}} + C_3 \right]$$

$$= \frac{C}{\sqrt{p}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int p dx \right)$$