Universität Tübingen
Mathematisches Institut
Dr. Stefan Keppeler

Sommersemester 2007

Semiklassische Methoden in der Quantenmechanik

Übungsblatt 2 (Besprechung am 09.05.2007)

Aufgabe 3: (Eindimensionale WKB-Methode)

(a) Betrachten Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung in einer Dimension,

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{mit} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\,. \tag{1}$$

Machen Sie für die Wellenfunktion einen WKB-Ansatz

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^n a_n(x)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(x)}\ .$$

Setzen Sie ψ_{WKB} in die Schrödingergleichung ein, sortieren alle Terme nach Potenzen von $\hbar$ und zeigen Sie, daß sich die Gleichungen iterativ lösen lassen, d.h. man erhält nacheinander Gleichungen für S, a_0, a_1, ...

(b) Lösen Sie explizit die Gleichungen für $S(x)$ und $a_0(x)$ in einer Umgebung $U(x_0)$ von x_0. Unterscheiden Sie dabei die Fälle
(i) $E > V(x)\ \forall x \in U(x_0)$ und
(ii) $E < V(x)\ \forall x \in U(x_0)$.
Hinweis: Drücken Sie das Ergebnis durch den klassischen Impuls

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

aus; die Lösung im Fall (i) lautet

$$\psi_{\text{WKB}}(x)(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x'} + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x'} + \mathcal{O}(\hbar)\,,$$

mit Konstanten $C_\pm \in \mathbb{C}$.

(c) Sei nun $V(x_0) = E$ mit $V'(x_0) \neq 0$. Ersetzen Sie nun näherungsweise $V(x)$ in (1) durch den linearen Term der Taylorreihe um x_0. Geben Sie
(i) die allgemeine Lösung der sich ergebenden Differentialgleichung, sowie
(ii) das führende asymptotische Verhalten (einer nicht exponentiell wachsenden Lösung) für $|x - x_0| \to \infty$ an.
Hinweis: Hier hilft ein Blick auf `http://mathworld.wolfram.com/AiryFunctions.html` oder `http://en.wikipedia.org/wiki/Airy_function` oder in ein einschlägiges Nachschlagwerk.

(d) Betrachten Sie nun ein (i.A. nicht harmonisches) Muldenpotential, siehe Skizze. Für die Bereiche A,B,C haben Sie WKB-Näherungslösungen aus Aufgabenteil (b) – oszillierend im Bereich B, exponentiell abfallend in A und C. Verbinden sie diese nun wie folgt mithilfe der lokalen Lösung aus Aufgabenteil (c):

- Betrachten Sie zunächst die Situation um x_2.
- Sie haben zwei oszillierende WKB-Lösungen im Bereich B und eine exponentiell abfallende im Bereich C. Nähern Sie auch in den WKB-Lösungen zunächst $V(x) \approx V'(x_2)(x - x_2)$.
- Verlangen Sie, daß die Lösung aus Aufgabeteil (c) asymptotisch in diejenigen aus Aufgabenteil (b) übergeht. (Welche Bedingungen müssen erfüllt sein, damit x hier gleichzeitig "nahe" an x_2 (wegen $V(x) \approx V'(x_2)(x - x_2)$) aber auch "weit weg" von x_2 (wegen der asymptotischen Entwicklung von Ai) ist?)
- Welche Bedingung ergibt sich für die relative Phase der oszillierenden Lösungen? Interpretieren Sie das Ergebnis als Phasensprung bei der Reflexion.
- Betrachten Sie analog die Lösungen um x_1 und zeigen Sie, daß sich insgesamt als Konsistenzbedingung (Eindeutigkeit der Wellenfunktion im Bereich B) die korrigierte Bohr-Sommerfeld-Regel

  $$\oint p \, \mathrm{d}x = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

  ergibt.