הקירוב של WKB

(Wentzel Kramers, Brillouin)

פתרון למשוואת שרדינגר בגבול "הקוואזי-קלאסי":

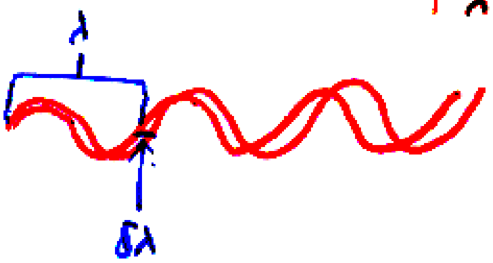
עבור n גבוה (מספר קוונטי המתאר את הפתרון)
הפתרון הקוונטי שואף לקלאסי (דוגמה - מתנד הרמוני n גבוה)

התנאי המאפשר פתרון מקורב:

$$\delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\delta x \quad , \quad \delta x = \lambda \quad , \quad \longrightarrow \quad \delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\cdot\lambda \leftarrow$$

השינוי באורך הגל לאורך אורך גל אחד

התנאי - $\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| = \left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1$



מתי מתקיים התנאי?

$\lambda = \frac{h}{p} \leftarrow$ שינוי איטי ב p

$p^2 = 2m(E-V) \leftarrow$ שינוי איטי ב $V(x)$

$$\frac{d\lambda}{dx} = -\frac{h}{p^2}\frac{dp}{dx} \qquad \frac{dp}{dx} = \sqrt{2m}\,\frac{1}{2\sqrt{E-V}}\cdot(-1)\frac{dV}{dx} = -\frac{m}{p}\frac{dV}{dx}$$

התנאי על $\frac{dV(x)}{dx}$

$$\rightarrow \quad \left|\frac{d\lambda}{dx}\right| = \left|\frac{h\cdot m}{p^3}\frac{dV}{dx}\right| \ll 1$$

$$\frac{dV}{dx} \ll \frac{p^3}{hm} = \frac{p^2}{\lambda\cdot m} = \frac{2E_k}{\lambda}$$

$$\rightarrow \quad \lambda\cdot\frac{dV}{dx} \ll E_k$$

עבודת הכוח החיצוני על פני λ

המשמעות הפיזיקלית:
השינוי ב E_k כתוצאה מהשינוי באנרגיה הפוטנציאלית זניח על פני λ.

כאשר $V=const$ ← הכוח$=0$ ← החלקיק חופשי

הפתרונות הם: $\psi(x)=Ae^{ikx}=Ae^{ipx/\hbar}$

כאשר $V(x)$ משתנה לאט (במובן לצ"ל)

נחפש פתרונות דומים, אבל עם $k=k(x)$

$$\psi(x)=Ae^{iS(x)/\hbar}$$

נציב במשוואת שרדינגר

ונקבל משוואה עבור $S(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\cdot\psi=E\cdot\psi \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+2mV(x)=2mE$$

נניח כי ניתן לפרק את $S(x)$ כסכום:

$$S(x)=S_0(x)+\hbar S_1(x)+\frac{\hbar^2}{2}S_2(x)+\dots$$

בגבול הקלסי $\hbar\to 0$, $S(x)\to S_0(x)$

מהצבה במשוואת שרדינגר ל-$S(x)$ נקבל

$$\left[\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2-\overbrace{p^2}^{2m[E-V(x)]}\right]+2\hbar\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x}-\frac{i}{2}\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}\right)+\hbar^2\left[\frac{\partial S_0}{\partial x}\cdot\frac{\partial S_2}{\partial x}+\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2-i\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}\right]+\dots=0$$

איברים הפרופורציוניים ל-$\hbar^3$ ומעלה.

בהנחה ש-$\hbar$ הוא מספר קטן <u>כלשהו</u>, כל מקדם יתאפס בנפרד.

$$\rightarrow \quad \left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2=p^2 \quad , \quad \frac{\partial S_0}{\partial x}\cdot\frac{\partial S_1}{\partial x}=\frac{i}{2}\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_2}{\partial x}+\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2=i\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}$$

3 משוואות דיפרנציאליות ל- S_0, S_1, S_2.

מהמשוואה ל S_0 נקבל:

$$\frac{\partial S_0}{\partial x} = \pm p(x) \longrightarrow S_0(x) = \pm\int_{x_0}^{x} p(x)\,dx = \pm\hbar\int_{x_0}^{x} k(x)\,dx$$

מהמשוואה ל S_1 נקבל:

$$\frac{\partial S_1}{\partial x} = \frac{i}{2}\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}\frac{1}{\partial S_0/\partial x} = \frac{i}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[\ln\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)\right]$$

$$\longrightarrow S_1 = \frac{i}{2}\ln\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right) = \frac{i}{2}\ln(\pm\hbar k(x)) \longrightarrow e^{iS_1(x)} = \frac{1}{\sqrt{\hbar k}}$$

מהמשוואה ל S_2 נקבל:

$$\frac{\partial S_2}{\partial x} = \left[i\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2\right]\frac{1}{\partial S_0/\partial x}$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial x} = \frac{i}{2}\frac{1}{p}\frac{\partial p}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} = \frac{i}{2p}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{i}{2p^2}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial x} = \left[\frac{-1}{2p}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{1}{2p^2}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{4p^2}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2\right]\frac{1}{p}$$

(סימן +)

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\sqrt{2m(E-V(x))} = \frac{1}{2\sqrt{2m(E-V)}}\,2m(-1)\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{m}{p}\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$S_2 = \frac{-1}{2p^2}\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{3}{4}\int\frac{1}{p^3}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)^2 dx$$

$$S_2 = \frac{m}{2p^3}\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{4}\int\frac{m^2}{p^5}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 dx$$

מה התרומה של $S_2(x)$ ל $\psi(x)$?

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \frac{\hbar^2}{2}S_2 \qquad \psi = e^{iS/\hbar} = e^{iS_0/\hbar}e^{iS_1}\cdot e^{\frac{i\hbar}{2}S_2}$$

האבר הראשון של S_2 נותן:

$$\frac{i\hbar}{4}\frac{m}{p^3}\frac{\partial V}{\partial x} \ll 1$$

עפ"י ההגדרה של קירוב WKB

האבר השני נותן:

$$\approx \frac{1}{\hbar}\int p\cdot c^2\,dx = \int \underset{\ll 1}{c^2}\,k(x)\,dx \ll \frac{S_0}{\hbar}$$

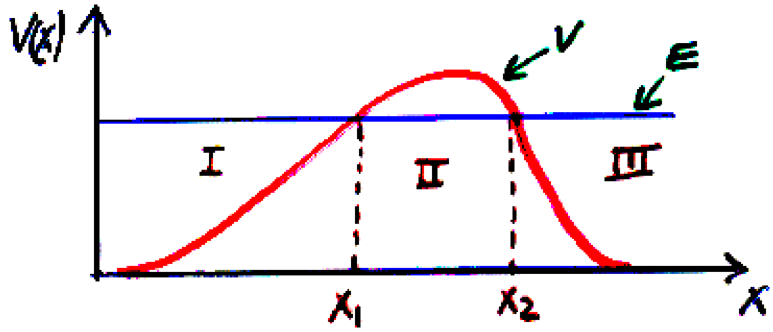
$$c \equiv \frac{m\hbar}{p^3}\frac{\partial V}{\partial x} \ll 1$$

$\underline{S \approx S_0 + \hbar S_1}$ ⟵ עפ"י קירוב WKB S_2 זניח

הפתרון למשוואת שרדינגר, כאשר $V(x)$ משתנה לאט (=קירוב WKB), נתון ע"י:

$$\psi(x) = e^{iS_0/\hbar}\cdot e^{iS_1} = \frac{A}{\sqrt{k(x)}}e^{i\int k\,dx} + \frac{B}{\sqrt{k(x)}}e^{-i\int k\,dx}$$

שימושים: חישוב ההסתברות למעבר מחסום פוטנציאל



$$T = \left|\frac{\psi_{III}}{\psi_I}\right|^2 = \left|\frac{F}{A}\right|^2$$

+ תנאי

בהזנחה של גלים מוחזרים ומחסומי מדרגה

ניתן לרשום ביטוי ל $\psi(x)$ בכל אחד מהאיזורים באופן נפרד.

אבל עבור $x = x_1, x_2$ ← $E = V$ ← $k(x) = 0$ ← $p = 0$

← קירוב WKB לא תקף.

<u>כיצד נקבל פיתרון אחד (רציף וגזיר) בכל המרחב?</u>

נעשה קירוב נוסף, נניח ש $V(x)$ משתנה לינארית סמוך ל x_1 ו x_2

סמוך ל x_1 – $V(x) \approx V_1(x) = E + c_1(x - x_1)$

סמוך ל x_2 – $V(x) \approx V_2(x) = E - c_2(x - x_2)$

משוואת שרדינגר המתקבלת הינה:

$$\psi'' - \frac{2mc_1}{\hbar^2}(x - x_1)\psi = 0 \longrightarrow \psi'' - y\psi = 0 \qquad y = \left(\frac{2mc_1}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x - x_1)$$

$$\psi'' + \frac{2mc_2}{\hbar^2}(x - x_2)\psi = 0$$

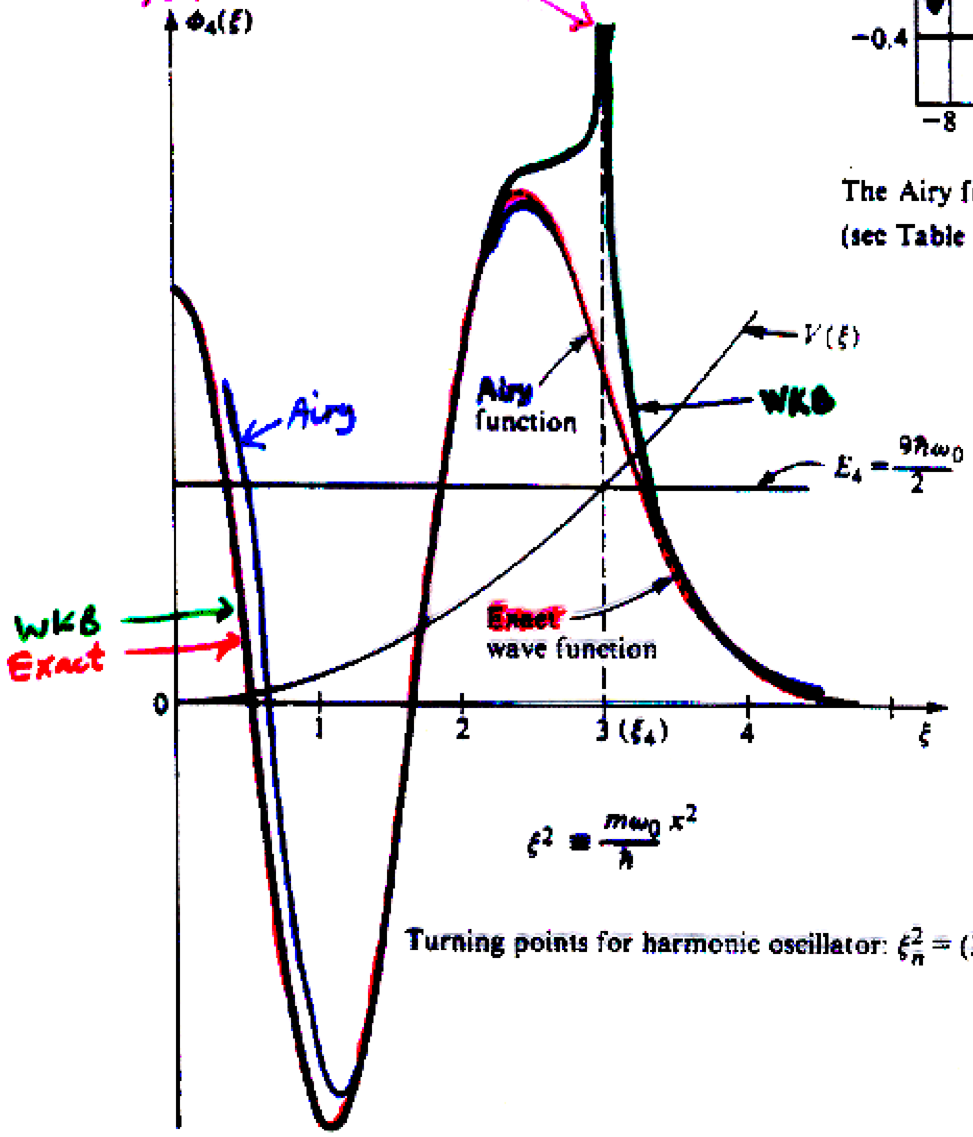
למשוואה פתרונות <u>אנליטיים</u>

Airy Functions (אסטרונום אנגלי, 1801-1892)

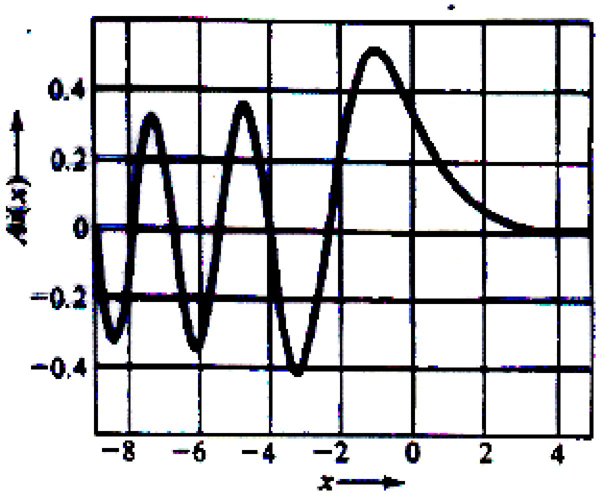
מתנד הרמוני ב $n=4$

Liboff fig. 7.36

$\Psi_{WKB} \propto \frac{1}{\sqrt{K}}$ מתבדר מכיון ?
$K \to 0$



Turning points for harmonic oscillator: $\xi_n^2 = (2n+1)$



The Airy function $Ai(x) = (1/\pi)\int_0^\infty \cos(s^3/3 + sx)ds$ (see Table 7.3)

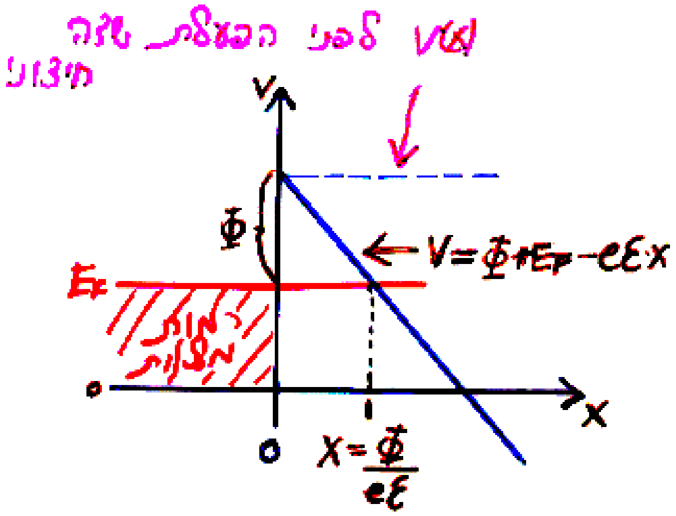
למרבה המזל ניתן "לתפור" בצורה חלקה את
הפתרונות של פונקציות Airy לפתרונות WKB
ולקבל פונקציית גל אחת רציפה וגזירה עבור כל x

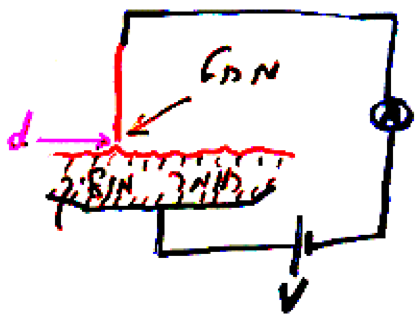
$$T = e^{-2\int_{x_1}^{x_2} k\,dx}$$

התוצאה הסופית
(הוכחה ב Liboff 7.10)

$$k^2 = \frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}$$

דוגמא: TEM - Tunneling Electron Microscope





קצה המחט במרחק d מהמשטח

צפיפות הזרם

מהו $J(d)$?

$$V(x) = \Phi + E_F - e\mathcal{E}\cdot x$$

פונקציית העבודה
אנרגיית פרמי
מטען אלקטרון
השדה החשמלי
המרחק מפני המשטח

מה הסיכוי של אלקטרון עם $E=E_F$ לברוח מהחומר?

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{\Phi/e\mathcal{E}} \sqrt{2m(\Phi - e\mathcal{E}x)}\,dx}$$

קצוות מחסום הפוטנציאל

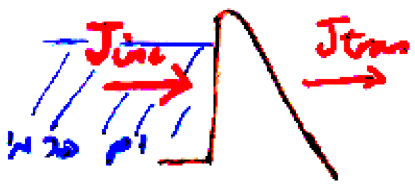
$$\int\sqrt{A+Bx}\,dx = \frac{(A+Bx)^{3/2}}{3B/2}$$

$$\rightarrow T = e^{-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{\Phi^{3/2}}{e\mathcal{E}}}$$

נוסחת Fowler-Nordheim

מה תהיה עוצמת הזרם?

לאלקטרונים עם $E=E_F$ מהירות $v_F=\sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}$ (כאשר $\frac{v}{c}\ll 1$)



$J_{inc}=n_e v_F e$ — צפיפות הזרם הפוגע בדופן בור הפוטנציאל

צפיפות האלקטרונים החופשיים

$J_{tran}=J_{inc}\cdot T$ — צפיפות הזרם העובר את המחסום

מספרים אופייניים: $E_F=10eV \longrightarrow v_F\approx 2\cdot 10^8 cm/s$ ($\frac{v_F}{c}\approx 0.006$)

$n_e\approx 10^{23}/cm^3$ $e=1.6\cdot 10^{-19}$ קולון

$$J_{inc}=10^{23}\cdot 2\cdot 10^8\cdot 1.6\cdot 10^{-19}=3\cdot 10^{12}\,A/cm^2$$

אם הפרש הפוטנציאל בין המתכת לאלקטרודה הוא 10V, מה צריך להיות d כדי לקבל את $J_{tran}=1\frac{mA}{cm^2}, 1\frac{A}{cm^2}$?

$$T=\frac{J_{tran}}{J_{inc}} \longrightarrow -\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{\Phi^{3/2}}{e\mathcal{E}}=\ln\left(\frac{J_{tran}}{J_{inc}}\right)$$

עוצמת השדה - $\mathcal{E}=\frac{V}{d}$ $\longrightarrow$ $d=-\frac{3}{4}\frac{\hbar}{\sqrt{2m_e}}\frac{e\cdot V}{\Phi^{3/2}}\ln\left(\frac{J_{tran}}{J_{inc}}\right)$

מספר אופייני: $\Phi=5eV$ - פונקציית העבודה

$$d=-\frac{3}{4}\frac{1.05\cdot 10^{-27}}{(2\cdot 9.11\cdot 10^{-28})^{1/2}}\frac{10\cdot 1.6\cdot 10^{-12}}{(5\cdot 1.6\cdot 10^{-12})^{1.5}}\ln\left(\frac{J_{tran}}{J_{inc}}\right)$$

$$d=1.3\text{Å}\ln\left(\frac{J_{inc}}{J_{tran}}\right)$$

$J_{tran}=1mA/cm^2 \longrightarrow d=1.3\cdot\ln\left(\frac{3\cdot 10^{12}}{10^{-3}}\right)=\underline{46\text{Å}}$

$=1A/cm^2 \longrightarrow \underline{d=37\text{Å}}$

← שינוי d ב־20% משנה את J בפקטור 1000.

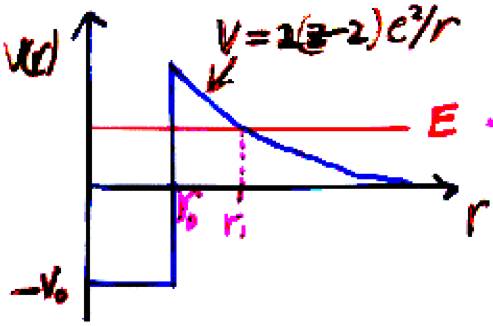
$T=e^{-7.66\frac{(\Phi/5eV)^{1.5}}{(\mathcal{E}/10^8 V/cm)}}$ — נוסחה כללית

שינוי $\mathcal{E}$ מ־$10^8\frac{V}{cm}$ ל־$10^7\frac{V}{cm}$ ישנה את T מ־$e^{-7.66}$ ל־$e^{-76.6}$!

דוגמא: התפרקות α

מהו $\tau(E)$?

זמן החיים



אנרגית חלקיק ה α

הדחיה החשמלית $V(r)=\frac{2(Z-2)e^2}{r}$

של גרעין ה α מיתר הגרעין עבור $r>r_0$

נסמן $V(r)=\frac{A}{r}$

קצה המחסום, $V(r_1)=E$

$$r_1=\frac{A}{E}\quad , \quad T=e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{r_0}^{r_1}\sqrt{2m\left(\frac{A}{r}-E\right)}\,dr}$$

$$\equiv e^{-G}$$

$$G=\frac{2}{\hbar}\int_{r_0}^{r_1}\sqrt{2m\left(\frac{A}{r}-\frac{A}{r_1}\right)}\,dr=\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mA}\int_{r_0}^{r_1}\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{r_1}}\,dr$$

$$\int_{r_0}^{r_1}\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{r_1}}\,dr=\sqrt{r_1}\left[\cos^{-1}\left(\frac{r_0}{r_1}\right)^{1/2}-\left(\frac{r_0}{r_1}-\frac{r_0^2}{r_1^2}\right)^{1/2}\right]$$

נעבור למשתנה $W\equiv\cos^{-1}\left(\frac{r_0}{r_1}\right)^{1/2}$

$$=\sqrt{r_1}\left[W-\left(\cos^2W-\cos^4W\right)^{1/2}\right]$$

$\cos^4=\cos^2(1-\sin^2)$

$\cos\cdot\sin=\frac{1}{2}\sin 2\cdot$

$$=\sqrt{r_1}\left[W-\tfrac{1}{2}\sin 2W\right]$$

$$G=\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mA}\sqrt{\frac{A}{E}}\left[W-\tfrac{1}{2}\sin 2W\right]\qquad \sqrt{\frac{2E}{m}}=v$$

$$T=e^{-\frac{2A}{\hbar v}(2W-\sin 2W)}$$

נוסחת גאמוב

$$\frac{A}{\hbar v}=\frac{2(Z-2)e^2}{\hbar v}=2(Z-2)\underbrace{\frac{e^2}{\hbar c}}_{\alpha=\frac{1}{137}}\cdot\frac{c}{v}$$

עבור חלקיקי α עם אנרגיה נמוכה $r_0 \ll r_1$

$$\rightarrow w \approx \cos^{-1}(0) = \pi/2 \quad \rightarrow \quad \underline{T \approx e^{-\frac{2\pi A}{\hbar v}}}$$

כיצד מתקשר T לזמן החיים?

חלקיק ה α נע בתוך הגרעין במהירות v

← מתנגש בדופן מחסום הפוטנציאל $\frac{v}{2r_0}$ - פעמים בשניה

בכל התנגשות יש סיכוי T לעבור ← כעבור $\sim\frac{1}{T}$ התנגשויות

חלקיק ה α יעבור את המחסום

$$\rightarrow \tau \approx \frac{2r_0}{v} \cdot e^{G}$$

מספרים אופייניים,

$E_\alpha \sim 5\,MeV \rightarrow v \sim 10^9\,cm/s$ (זמן חצית הגרעין)

תחולת המחסום - $r_0 \sim 1.3\cdot10^{-13} A^{1/3} \approx 8\cdot10^{-13}\,cm \quad \rightarrow \quad \underline{\tau \approx 10^{-21} \cdot e^{G}\ sec}$

קצה המחסום - $r_1 \sim \frac{A}{E} = \frac{2\cdot90(4.8\cdot10^{-10})^2}{5\cdot10^6\cdot1.6\cdot10^{-12}} = 5\cdot10^{-12}\,cm$

$\rightarrow \frac{r_0}{r_1} \sim 0.16 \rightarrow w \approx 1.16 \qquad 2w-\sin 2w \approx 1.58$

$\rightarrow G = 2\cdot2\cdot90 \frac{1}{137}\frac{3\cdot10^{10}}{10^9}(2w-\sin 2w)$

$G = 78(2w-\sin 2w) = 124 \qquad \tau = 10^{-21}e^{124} \approx 10^{25}\,years$

זמן ארוך מדי!

אבל מקבלים את התלות הנכונה:

(מקדמים שונים מאד מהמתקבל

בחישוב הפשטני למעלה)

$\underline{\log\tau = C_1 + \frac{C_2}{\sqrt{E}}} \leftarrow G \propto \frac{1}{v}$ $\left(=\frac{-2\pi A}{\hbar v}\right)$

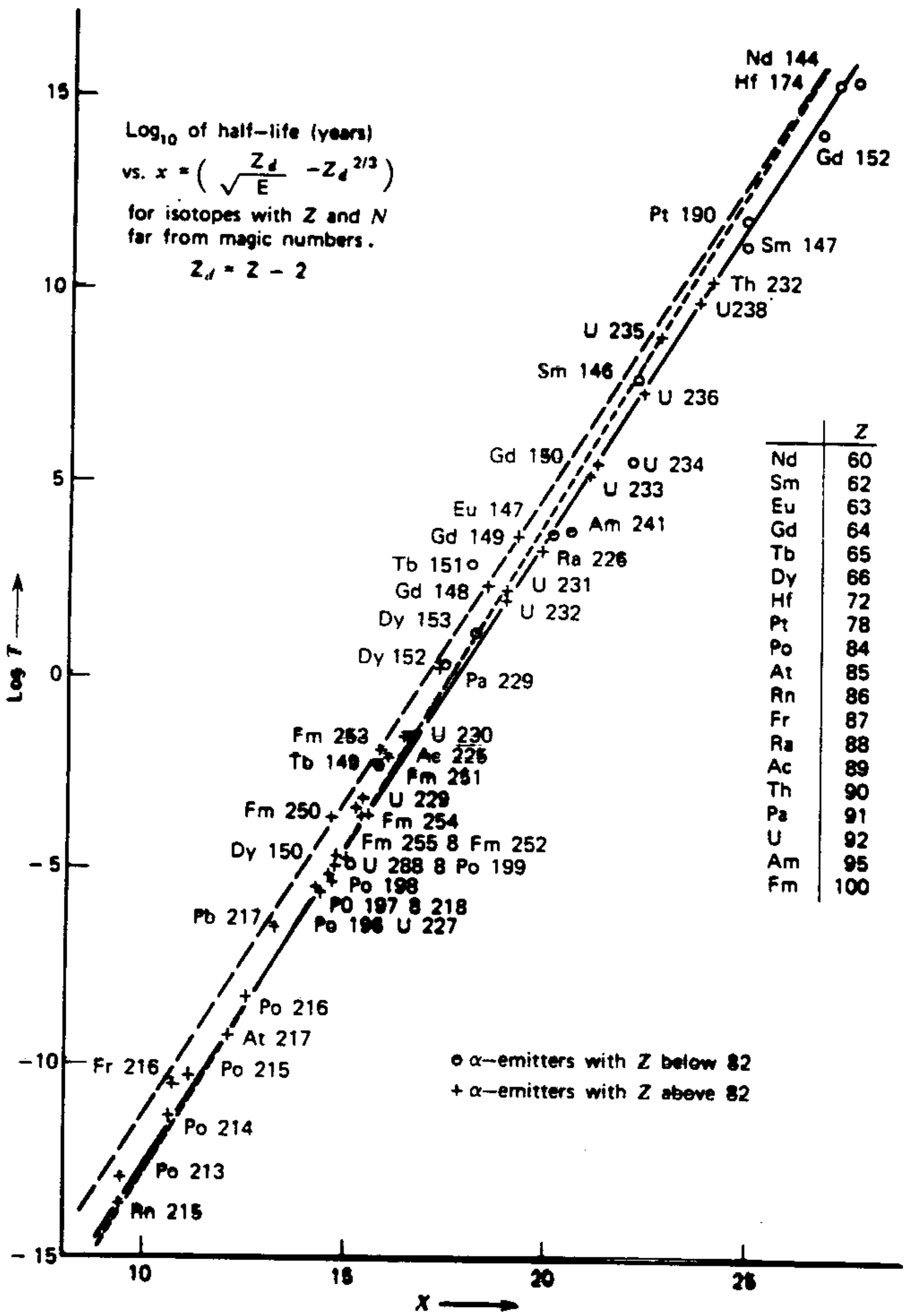


Figure 5-9. Plot of $\log_{10} 1/\tau$ versus $C_2 - C_1 Z_1/\sqrt{E}$ with $C_1 = 1.61$ and a slowly varying $C_2 = 28.9 + 1.6Z_1^{2/3}$. (From E. K. Hyde, I. Perlman, and G. T. Seaborg, *The Nuclear Properties of the Heavy Elements*, Vol. 1, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1964), reprinted by permission.)