

# WKB-Methode

Jan Kirschbaum

Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich Physik  
Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten  
Materie

## 1 Einleitung

Die WKB-Methode, unabhängig und fast gleichzeitig publiziert von Gregor Wentzel, Hendrik Anthony Kramers und Léon Brillouin, beschreibt ein Verfahren, um näherungsweise Lösungen für die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung

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

zu finden. Mit der damit gefundenen Lösung lassen sich sehr leicht Aussagen über die erlaubten Energien und das Tunnelverhalten des Systems treffen.

Ausgangspunkt ist die Idee, dass die Wellenlänge  $\lambda$  eines Teilchens, dass sich in einem räumlich nicht konstanten Potential bewegt, sich sehr viel schneller ändert, als das Potential. Daher nimmt man an, dass die Form der Wellenfunktion des Teilchens gleich bleibt, wobei die Wellenlänge und die Amplitude ortsabhängig werden.

Für die Lösung der Wellenfunktion in einem konstanten Potential gilt:

$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx} \text{ mit } k \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar} \quad (2)$$

und damit für die allgemeine Lösung in der WKB-Näherung:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\psi(x)} \quad (3)$$

Löst man die Schrödinger-Gleichung (Gl.1) mit diesem Ansatz und benutzt, dass sich die Amplitude nur sehr langsam verändert, erhält man als allgemeine Lösung für die Wellenfunktion der WKB-Näherung:

$$\psi(x) \cong \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int dx p(x)} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int dx p(x)} \quad (4)$$

Für den Bereich  $E > V(x)$ , sowie

$$\psi(x) \cong \frac{B}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int dx |p(x)|} + \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int dx |p(x)|} \quad (5)$$

für den Bereich  $E < V(x)$ . Jeweils mit

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad (6)$$

Dabei spricht man für  $E > V$  vom klassischen Bereich und für  $E < V$  vom nichtklassischen Bereich. Man sieht, dass die Näherung an den klassischen Umkehrpunkten des Teilchens, bei denen die Energie gleich dem Potential ist, nicht funktioniert, da die Wellenfunktion an diesen Stellen divergiert.

## 2 Verbindungsgleichungen

Betrachtet man Potentialtöpfe mit vertikalen Wänden, so sind die Randbedingungen einfach und man bekommt keine Probleme mit den klassischen Umkehrpunkten, sind die Wände des Potentials aber nicht vertikal, muss man genauer betrachten, was an den Umkehrpunkten passiert und wie man diese Bereiche überbrückt, damit die WKB-Näherung weiterhin ihre Gültigkeit hat.

Bei der Betrachtung eines aufwärts geneigten Potentials (Abb.1) mit einem Umkehrpunkt bei  $x=0$  erhält man für die WKB-Wellenfunktion mit den Gleichungen 4 und 5:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 dx' p(x')} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 dx' p(x')} & x < 0 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x dx' |p(x')|} & x > 0 \end{cases} \quad (7)$$

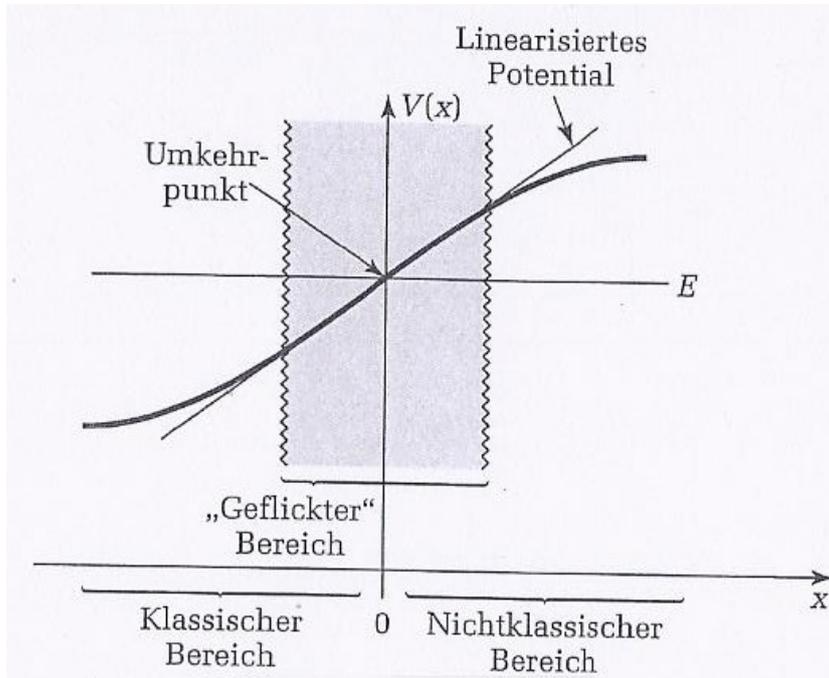


Abbildung 1: Aufwärts geneigtes Potential

Für  $x > 0$  fällt der positive Exponent weg, da dieser nicht normierbar ist. Um den Umkehrpunkt zu überbrücken, führen wir eine Flick-Wellenfunktion ein, die im Bereich um den Umkehrpunkt gültig sein soll. In diesem Bereich kann man das Potential um den Umkehrpunkt herum bis zur 1. Ordnung entwickeln.

$$V(x) = E + \left. \left( \frac{dV}{dx} \right) \right|_{x=0} x \quad (8)$$

Für das linearisierte Potential lässt sich die Schrödingergleichung analytisch lösen. Dabei erhält man als Lösung eine Linearkombination der Airy-Funktionen (Abb.2):

$$\psi_F = a Ai(\alpha x) + b Bi(\alpha x) \quad \text{mit} \quad \alpha \equiv \left[ \frac{2m}{\hbar^2} V'(0) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (9)$$

Die so erhaltene Flick-Wellenfunktion muss an beide Seiten der WKB-Wellenfunktion (Gl. 7) angepasst werden, um den Umkehrpunkt zu überbrücken. Für den Anpassungsbereich nimmt man an, dass sowohl die WKB-Wellenfunktion,

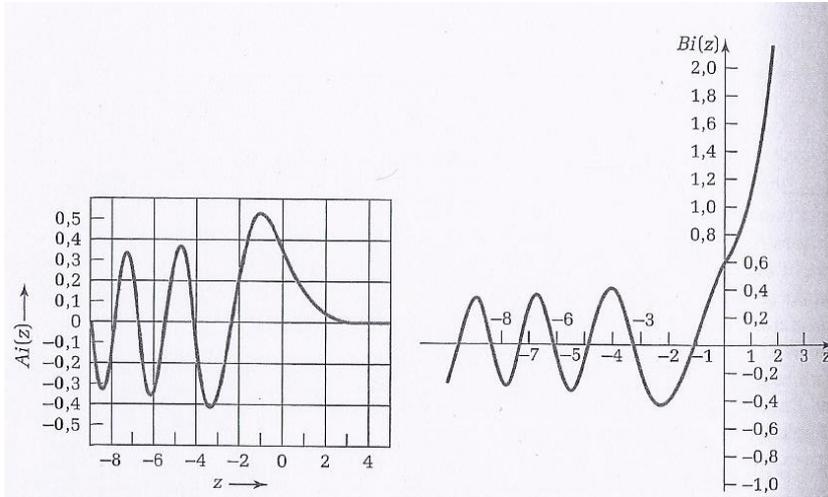


Abbildung 2: Verlauf der beiden Airy-Funktionen

als auch die Näherung des Potentials als Gerade gut funktionieren. Diese Bedingung ist nicht für alle Systeme gültig, allerdings für die meisten Anwendungsbeispiele gut genug.

Daher setzt man in den Impuls  $p(x)$  der WKB-Funktion das genäherte Potential ein:

$$p(x) \cong \hbar \alpha^{3/2} \sqrt{-x} \quad (10)$$

Außerdem wird angenommen, dass die Airy-Funktionen in dem Bereich, in dem man die beiden Wellenfunktionen zusammenfügt, durch ihre Asymptotische Form beschrieben werden können. Die Asymptotischen Formen der Airy-Funktionen lauten:

für  $\alpha x \gg 0$ :

$$Ai(\alpha x) \propto \frac{1}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{2/3}} \quad (11)$$

und

$$Bi(\alpha x) \propto \frac{1}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}z^{2/3}} \quad (12)$$

und für  $\alpha x \ll 0$ :

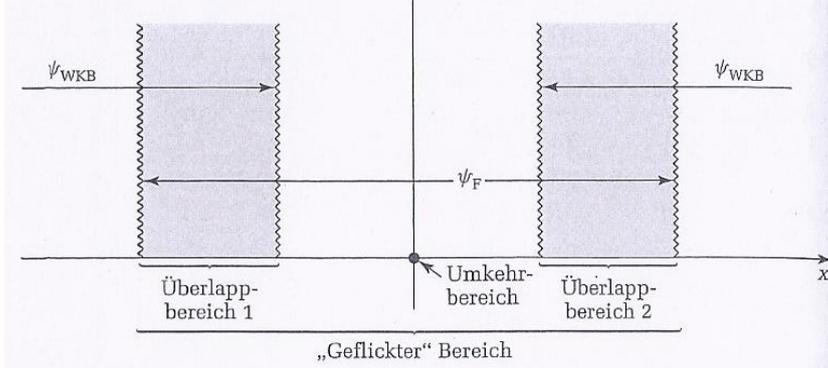


Abbildung 3: Anpassungsbereich von WKB- und Flick-Wellenfunktion

$$Ai(\alpha x) \propto \frac{1}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin \left[ \frac{2}{3}(-\alpha x)^{2/3} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (13)$$

und

$$Bi(\alpha x) \propto \frac{1}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \cos \left[ \frac{2}{3}(-\alpha x)^{2/3} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (14)$$

Beim Vergleich im Überlappbereich 2 (Vgl. Abb.3) erhält man:

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}} D \text{ und } b = 0 \quad (15)$$

Und im Überlappbereich 1:

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \text{ und } \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \quad (16)$$

Vergleicht man die beiden Ergebnisse erhält man die ganze Wellenfunktion, die nur noch von einem Parameter abhängt. Der Umkehrpunkt kann dabei an einen beliebigen Punkt  $x_0$  versetzt werden, dass verändert nur die Integrationsgrenzen.

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} dx' p(x') + \frac{\pi}{4} \right] & x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x dx' |p(x')|} & x > x_2 \end{cases} \quad (17)$$

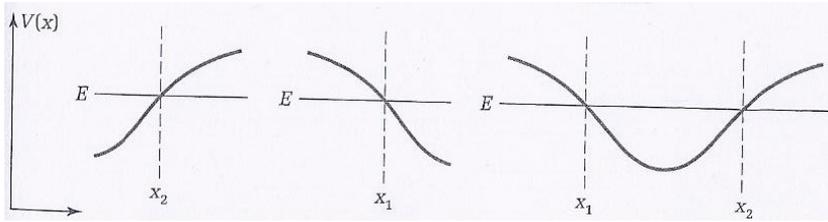


Abbildung 4: Verschiedene Potentialwände

Diese Gleichung gilt allgemein für alle aufwärts geneigten Potentiale. Will man allgemein Potentialtöpfe betrachten (Abb.4), braucht man noch die Gleichung für das abwärts geneigte Potential. Diese erhält man mit einer analogen Rechnung wie die des aufwärts geneigten Potentials. Als Ergebnis erhält man:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} dx' |p(x')|} & x < x_1 \\ \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x dx' p(x') + \frac{\pi}{4} \right] & x > x_1 \end{cases} \quad (18)$$

Damit hat man beide Seiten des Potentialtopfes. Um daraus die Wellenfunktion für den Potentialtopf zu bestimmen, müssen die beiden Funktionen auf dem ganzen Intervall  $[x_1; x_2]$  gleich sein. Das bedeutet, dass die Argumente der beiden Sinus gleich sein müssen (modulo  $n\pi$ ).

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left( n - \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \quad (19)$$

Das ist die Quantisierungsbedingung des Potentialtopfes ohne vertikale Wand in der WKB-Näherung.

## 3 Beispiele

### 3.1 Harmonischer Oszillator

Als Beispiel für einen Potentialtopf mit einer vertikalen Wand wird zuerst der halbe harmonische Oszillator betrachtet:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2 x^2}{2} & x > 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases} \quad (20)$$

Aus der Randbedingung für  $x=0$  erhält man zusammen mit Gl.17 die Quantisierungsbedingung für den Potentialtopf mit einer vertikalen Wand:

$$\int_0^{x_2} p(x)dx = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi\hbar \text{ mit } n \in \mathbb{N} \quad (21)$$

Zusammen mit dem in dem Impuls, in den man das Potential einsetzt

$$\int_0^{x_2} p(x)dx = \int_0^{x_2} \sqrt{2m\left[E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right]} = \frac{\pi E}{2\omega} \quad (22)$$

erhält man für die erlaubte Energien:

$$E_n = \left(2n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \text{ mit } n \in \mathbb{N} \quad (23)$$

Das sind genau die erlaubten, ungeraden Energien des vollen harmonischen Oszillators. In diesem Fall liefert die Näherung sogar das exakte Ergebnis, weil nur die ungeraden Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators die Randbedingung erfüllen, sind auch nur diese ungeraden Eigenfunktionen Eigenzustände des betrachteten Potentials.

Mit Gl.19 kann man auch die Energien des vollen harmonischen Oszillators berechnen.

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (24)$$

Dabei erhält man für die erlaubten Energien, bei ähnlicher Rechnung wie beim halben harmonischen Oszillator:

$$E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\omega \text{ mit } n \in \mathbb{N} \quad (25)$$

Es ergibt sich also auch beim vollen harmonischen Oszillator mit der Näherungsmethode das exakte Ergebnis.

## 4 Zusammenfassung

Die so so gefundenen Ergebnisse lassen sich auf Potentiale mit beliebigen Umkehrpunkten anwenden. Im Detail sind hier nur Potentialtöpfe berechnet worden, aber dasselbe Prinzip funktioniert z.B. auch bei Tunnelwahrscheinlichkeiten von Potentialbarrieren.

Hat man mithilfe der Verbindungsgleichungen das Problem für ein Potential mit einer bestimmten Art von Umkehrpunkten gelöst, lässt sich das Ergebnis auf alle Potentiale mit ähnlichen Umkehrpunkten verallgemeinern. Dabei erhält man in erster Linie einen Überblick über die Energieverteilung des Systems, ohne genauere Betrachtung der Wellenfunktion selber.