الباب الخامس عشر

التقريب شبه التقليدي (WKB)

Semi-classical approximation (WKB)

الباب الخامس عشر

التقريب شبه التقليدي (WKB)

التقريب شبه التقليدي (WKB)، ينسب إلى العلماء Wentzel, Kramers و Brillouin ، وتطبيقاته متعددة في الفيزياء والرياضيات. بالرغم من أن بعض تقنياته قد ظهر في بداية القرن التاسع عشر، لكن تطويره لم يتم إلا بظهور نظرية ميكانيكا الكم، حيث يستخدم التقريب بنجاح في الحصول على حلول تقريبية شاملة للمعادلات التفاضلية الاعتيادية.

ويتميز التقريب شبه التقليدي بالصفات التالية:

١- يظهر أهميته عندما يستخدم معامل صغير القيمة، مثل ε ، كدليل لأعلى مشتقة بالمعادلة التفاضلية. في ميكانيكا الكم هذا المعامل الصغير ε يستعاض عنه بالثابت $\hbar$ والذي يُعرَف بثابت بلانك.

٢- حينما يطبق التقريب بمسائل ميكانيكا الكم فإنه يسمى بالطريقة شبه الكلاسيكية.

٣- يستخدم في حساب كل من القيم والدوال المميزة للنظام الكمي، وأيضاً معامل النفاذية، ويتم التحقق من صحة الحلول عند الحدود التقليدية، وذلك بمساواة الثابت $\hbar$ بالصفر.

٤- استخدامه لا يتطلب وجود هملتونيان له حل كامل، كما في نظرية الاضطراب غير الزمنية.

٥- يستخدم لإيجاد الحل التقريبي لنظام يتغير فيه الجهد تغيراً بطيئاً، بمعنى أن الجهد يظل ثابتاً تقريباً لمدى مكافئ لطول موجة الجسيم (طول موجة دى برولى). نذكر هنا أن النظام التقليدي يحقق هذه الفرضية، حيث إن الطول الموجي للنظام التقليدي يقترب من الصفر.

٦- يستخدم في المعادلات التفاضلية ذات البعد الأوحد، أو المعادلات التي يمكن تحويلها إلى معادلات ذات بعد واحد.

٧- يستخدم للأطوال الموجية القصيرة، بمعنى أن طول موجة دي برولي يكون صغيراً جداً بالنسبة للمنطقة التي تحدث فيها تغير الحركة.

٨- يعتبر الملاذ الأخير للحسابات، وهذا عندما تفشل الطرق الأخرى.

لتوضيح الصورة قبل الدخول في التفاصيل، فإننا نستطيع تشبيه حركة جسيم في مجال متغير بسلوك الضوء في سقوطه وحركته خلال وسط له معامل انكسار. إذا كان التغير في معامل الانكسار للوسط سريعاً وحاداً؛ فإننا نحصل على انعكاس للضوء. أما إذا كان التغير في معامل الانكسار للوسط تدريجياً فإن مسار الضوء لا يكون مستقيماً ولكن لا يحدث انعكاس. عدم الحصول على انعكاس يتم تحت الشرط أن التغير في الطول الموجي، "$\delta\lambda$"، يجب أن يكون صغيراً مقارنةً بالطول الموجي "λ" للضوء الساقط نفسه، بمعنى أن $\lambda >> |\delta\lambda|$. بإمكاننا استخدام "$\delta\lambda$" كتغير في المسافة بحيث إن:

$$\left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\lambda\right| << \lambda \quad\Rightarrow\quad \left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right| << 1 \qquad \textbf{(i)}$$

هذا الشرط يمكن توليفه بميكانيكا الكم، حيث إن كمية الحركة الخطية التقليدية لجسيم، $p = 2m\sqrt{E - V(x)}$، ترتبط بالطول الموجي لدي-برولي "λ" بالعلاقة:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{2m\sqrt{E - V(x)}} \qquad \textbf{(ii)}$$

من ثم فإن هذا الشرط يمكن تحقيقه في منطقتين: الأولى هي المسموح بها تقليدياً، حيث "$E > V$"، وتكون "λ" في هذه المنطقة كمية حقيقية، والثانية هي المنطقة المُحرمة كلاسيكياً، حيث "$E < V$"، وتكون "λ" في هذه المنطقة كمية تخيلية. باستخدام المعادلة **(ii)** نجد أن الشرط **(i)** يؤول إلى:

$$\left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right| = \left|\frac{\hbar}{p}\frac{\partial p}{\partial x}\right| = \left|\frac{\hbar}{p}\frac{m\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)}{2m(E - V)}\right| = \lambda\left|\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)\right| << \text{Kinetic energy}$$

١- المعالجة الرياضية

الهد ف من هذه الطريقة هو إيجاد حل تقريبي لمعادلة شرودنجر غير الزمنية التي تأخذ الصورة:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=E\psi \quad (١)$$

الفكرة عامةً بسيطة، ونبدأها من أنه عند ثبوت الجهد، فإن المعادلة (١) يصبح لها الحلول:

$$\psi=e^{\pm ikx}=e^{\pm ipx/\hbar}.$$

وهي دالة موجة مستوية تصف حركة الجسيم بالاتجاه الموجب أو السالب للمحور السيني. بالتشابه، هذا يجعلنا نقترح أنه بتغير الجهد تغيراً بطيئاً مع المسافة x، بإمكاننا محاولة إيجاد حل عام بالشكل التالي:

$$\psi=e^{iS(x)/\hbar} \quad (٢)$$

مع مراعاة أن $S(x)$ لن تصبح دالة خطية في المتغير x.

بتفاضل المعادلة (٢) نحصل على:

$$\frac{d\psi}{dx}=\left[\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\right]\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\left[\frac{i}{\hbar^2}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right]\psi \quad (٣)$$

بالتعويض من المعادلة (٣) في المعادلة (١) نجد أنها تؤول إلى:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}=2m(E-V) \quad (٤)$$

على ماذا تدل المعادلة (٤)؟ نلاحظ هنا أننا إذا وضعنا $\hbar=0$ فإن المعادلة تؤول إلى معادلة مشهورة بالميكانيكا التقليدية تسمى معادلة هاملتون-جاكوبي.

الآن، ولإيجاد حل تقريبي، يمكننا محاولة استخدام مفكوك $S(x)$ على هيئة متسلسلة قوى للوسيط $\hbar$ بالشكل:

$$S(x)=S_o(x)+\hbar S_1(x)+\frac{1}{2}\hbar^2 S_2(x)+\cdots \quad (٥)$$

ولنا هنا ملاحظة على المعادلة (٥)، فهي متسلسلة لا نهائية تباعدية لكن باستخدام الشرط $\hbar\to 0$ يجعلها تقاربية. عملياً نستخدم التقريب في الحالات التي لا تتطلب أكثر من حدين وهما S_o و S_1. بالتعويض من المعادلة (٥) في المعادلة (٤) نحصل على:

$$\left(S_o'(x)+\hbar S_1'((x)+\hbar^2 S_2'(x)+\cdots\right)^2-i\hbar\left(S_o''(x)+\hbar S_1''((x)+\hbar^2 S_2''(x)+\cdots\right)$$
$$=\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]$$

حيث الشرطة ' والشرطتان" بالدليل العلوي يدل على المشتقة الأولى والثانية للدالة S بالنسبة إلى المتغير x ، بالترتيب.

دعونا هنا نساوي المعاملات لأول ثلاث قوى للوسيط $\hbar$:

مساواة معاملات $\hbar^o$ تُعطي:

$$\left(\frac{dS_o}{dx}\right)^2 = \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]}$$

$$\Rightarrow S_o = \pm\int_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} \qquad (٦)$$

ومساواة معاملات $\hbar^1$ تُعطي:

$$2\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right) - i\,\frac{\partial^2 S_o}{\partial x^2} = 0 \qquad (٧)$$

التي يمكن كتابتها بالشكل:

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right) = \frac{i}{2}\frac{\left(\frac{\partial^2 S_o}{\partial x^2}\right)}{\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)} = i\,\frac{\partial}{\partial x}\ln\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_1 = \frac{i}{2}\ln\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)} \qquad (٨)$$

وباستخدام المعادلة (٦) فإن المعادلة (٨) تؤول إلى:

$$e^{-iS_1} = \left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)^{\frac{1}{2}} = 2m[E - V]^{\frac{1}{4}} = p^{\frac{1}{2}} \qquad (٩)$$

بالطبع يمكننا حساب S_2 ، لكننا سنكتفي بالتقريب إلى هذا الحد على أساس أنه تقريب تقليدي.

واجب منزلي: أثبت أن:

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

بالرجوع إلى المعادلة (٢) نجد أنها تؤول إلى:

$$\psi = e^{iS_1/\hbar}e^{iS_o/\hbar} = p^{-\frac{1}{2}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int\sqrt{2m(E - V)}\,dx}$$

من ثم فإن الحل العام يعتبر التجميع الخطي بالشكل:

$$\psi = e^{iS_1/\hbar} e^{iS_o/\hbar} = Ap^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p\,dx} + Bp^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p\,dx} \qquad (١٠)$$

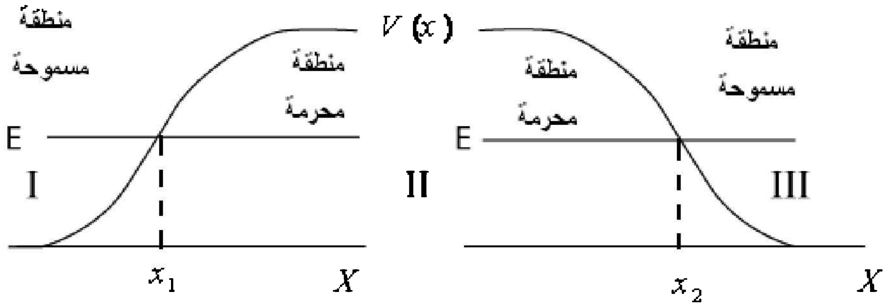
حيث A و B ثوابت تحدد بالشروط الحدودية. وفي الحالة $V(x) > E$ نجد أن الحل العام هو:

$$\psi = e^{iS_1/\hbar} e^{iS_o/\hbar} = C\ \not{p}^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{\hbar}\int \not{p}\,dx} + D\ \not{p}^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int \not{p}\,dx} \qquad (١١)$$

حيث C و D ثوابت و $\not{p} = 2m\sqrt{V(x) - E}$.

٢- نقاط الانقلاب (الانعطاف)

ولنا هنا وقفة للإيضاح. بالنظر إلى المعادلة (١٠) نجد أن الدالة ψ تؤول إلى ما لانهاية عندما تقترب كمية حركة الجسيم، $p \approx (E - V)$ ، من الصفر. وهذا التصرف الفردي (Singular) يتسبب في خلق مشكلة خطيرة لتقريب WKB المقترح، حيث إن تطبيقاته المهمة تحتوي على مناطق بينهما حائل. ونحن نعلم من ميكانيكا الكم أن الدالة ومشتقاتها يجب أن تكون متصلة عند نقاط الاتصال.



شكل (١) حائل يوضح المناطق المسموحة والمحرمة لحركة جسيم كلاسيكي

على سبيل المثال، الشكل (١) يوضح حركة جسيم تقليدي له الطاقة الكلية، E ، في اتجاه المحور السيني، ويمر على جهد $V(x)$. من الشكل نجد أن الجسيم سوف يكون له القيمة $[E - V(x_i)] = 0$ عند نقطتين (x_1, x_2) ، يقال عنهما نقاط انقلاب. نقاط الانقلاب هذه تعبر عن النقاط التي يصل الجسيم الكلاسيكي فيها إلى حالة السكون، بعدها يبدأ الحركة في الاتجاه المعاكس. من وجهة نظرية

ميكانيكا الكم نجد أن دالة الجسيم خارج الحائل حيث $E > V(x)$ ، بالمنطقتين (I) و (III) ، هي دوال تذبذبية تأخذ الشكل:

$$\psi_{E>V} = A p^{-\frac{1}{2}} e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p\, dx}$$

بالمنطقة (II) حيث $E < V(x)$ هي دوال تناقصية تأخذ الشكل:

$$\psi_{E<V} = C\ \cancel{p}^{-\frac{1}{2}} e^{\pm\frac{1}{\hbar}\int \cancel{p}\, dx}$$

راجع تطبيقات معادلة شرودنجر غير الزمنية لجسيم داخل وخارج حائل جهد. وعند الحائل الفاصل بين المناطق الثلاث، الذي لا يتحقق بالطبع عنده تقريب WKB ، يجب أن تكون الدوال ومشتقاتها متصلة.

للتغلب على هذه العقبة وجب أن تستبعد الدوال من المنطقة القريبة من نقاط الانقلاب وتكوين صيغة وصل (Connection formula) لربط الدالتين $\psi_{E>V}$ و $\psi_{E<V}$. اشتقاق صيغة الوصل تحتاج معالجة رياضية أعلى من مستوى هذا الكتاب. لذلك سوف نتعرض لهذه المعالجة باختصار ونذكر ما نحتاجه فقط. بجوار نقطة الانقلاب، فرضاً x_o ، نستطيع استخدام مفكوك تيلور لوضع الجهد كتقريب خطي على شكل متسلسلة تأخذ الصورة:

$$V(x) = V(x_o) + (x - x_o)\frac{\partial V}{\partial x} + \cdots$$

من ثم نجد أن:

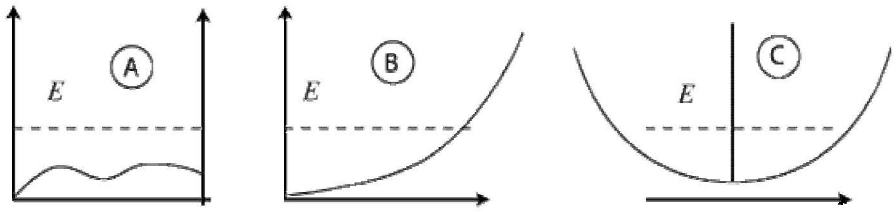
$$p^2 = 2m\left[E(x_o) - V(x)\right] = 2m\left[\cancel{E(x_o)} - \cancel{V(x_o)} - (x - x_o)\frac{\partial V}{\partial x}\right]$$
$$\approx -2m(x - x_o)\frac{\partial V}{\partial x}$$

بالتعويض في معادلة شرودنجر وبمساواة الدوال عند نقاط الانقلاب واستخدام ثوابت تقريبية للتكاملات نصل إلى العلاقة الشهيرة لشرط تكميم تقريب WKB وهي:

$$\int_{x_1}^{x_2} dy\, \sqrt{2m\left[E - V(y)\right]} = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar$$

حيث $n = 0,1,2,\cdots$. تمثل n عدد العقد (nodes) لدالة WKB بين نقطتي الانقلاب.

بعض الحالات توصلنا إلى الاستنتاجات للحالات التالية:



الحالة (A) لحائلين صلبين (غير نفاذين) (two hard shoulders) ،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = n\pi\hbar$$

الحالة (B) لحائل صلد (one hard shoulder) ،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = (n - \tfrac{1}{4})\pi\hbar$$

الحالة (C) لحائلين مرنين (two soft shoulders) ،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(x)\right]} = (n - \tfrac{1}{2})\pi\hbar$$

حيث إن $n = 1,2,3,\cdots$.

ننهي هنا بوصفة بسيطة من عدة خطوات لاستخدام طريقة WKB في حل مسائل الحالات المقيدة. الخطوات كالتالي:

أ- أوجد قيم نقاط الانقلاب الكلاسيكية، مثلاً x_1 و x_2 ،

ب- أوجد قيمة التكامل:

$$\int_{x_1}^{x_2} dy p(y) = \int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(y)\right]}$$

ج- ساوِ قيمة التكامل، بالخطوة ٢، مع الشرط الصحيح للتكميم.

٣- أمثلة محلولة

مثال: باستخدام تقريب WKB أوجد طاقة جسيم، كتلته m ، يهتز في حركة توافقية بسيطة ذو بعد واحد، حيث يأخذ الجهد الشكل $V(x) = \frac{1}{2}\beta x^2$ ، $\beta = m\omega^2$.

الحل: المطلوب هنا أن نحسب نقطتي الانقلاب، اللتان تحققان شرط التكميم وهو:

$$\int_{x_1}^{x_2} dy \sqrt{2m\left[E - V(y)\right]} = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar$$

حيث إن $n = 0,1,2,3,\cdots$.

وحيث إن $V(x) = \frac{1}{2}\beta x^2$ لذلك سنفترض أن الطاقة الكلية المكممة للجسيم تعطي بالعلاقة $E_n = \frac{1}{2}\beta x_n^2$ ومنها نجد أن:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_n - V(x)\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}\beta x_n^2 - \frac{1}{2}\beta x^2\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{k = \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}\left(x_n^2 - x^2\right)}}$$

وشرط التكميم يعطي:

$$\int_{-x_n}^{x_n} \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}\left(x_n^2 - x^2\right)}dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi,$$

بحساب التكامل كالتالي:

$$\int_{-x_n}^{x_n} \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}\left(x_n^2 - x^2\right)}dx = 2\sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}}\underbrace{\int_{0}^{x_n} \sqrt{\left(x_n^2 - x^2\right)}dx}_{\frac{\pi}{4}x_n^2}$$

$$= \frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}}\, x_n^2$$

وباستخدامنا للتكامل القياسي $I = \int_{-b}^{b} (1 - \frac{x^2}{b^2})dx = \frac{b\pi}{2}$ ، نجد أن:

$$\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}}\, x_n^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

$$\Rightarrow x_n = \left(\sqrt{\frac{4\hbar^2}{m\beta}}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{1/2} = \left(\frac{4\hbar^2}{m\beta}\right)^{1/4}\left(n + \frac{1}{2}\right)^{1/2}$$

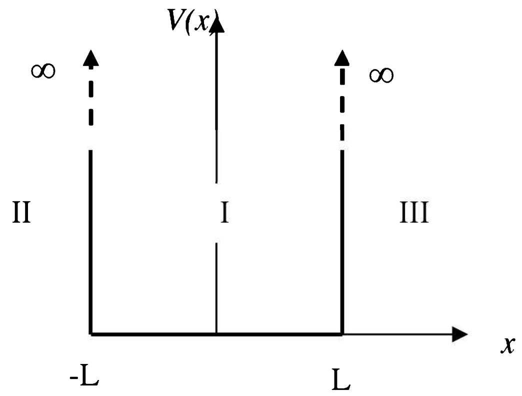
بتعويض المعادلة الأخيرة في الطاقة الكلية نحصل على:

$$E_n = \frac{1}{2}\beta x_n^2 = \frac{1}{2}\beta\left[\left(\frac{4\hbar^2}{m\beta}\right)^{1/4}\left(n + \frac{1}{2}\right)^{1/2}\right]^2$$

$$= \left(\frac{1}{m}\right)^{1/2}\underbrace{\beta}_{m\omega^2}{}^{1/2}\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

وهي نفس النتيجة التي حصلنا عليها باستخدام تطبيق معادلة شرودنجر على المتذبذب التوافقي البسيط سابقاً.

مثال: استخدام تقريب WKB لحساب طاقة جسيم داخل صندوق، متماثل حول نقطة الأصل، عرضه $2L$ لا نهائي الجهد بالشكل:



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad -L \le x \le +L \\ \infty & \text{elsewhere} \end{cases}$$

الحل: من الرسم يمكن إيجاد نقاط الانقلاب التقليدية، حيث إن النقاط هي حدود جداري الصندوق $x_2 = L$ و $x_1 = -L$. ومن شرط التكميم لجدارين غير نفاذين والذي يُعطى بالمعادلة:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(y)dy = n\pi\hbar$$

حيث التكامل بالمنطقة I يعطي:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x')dx' = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m\left(E_n - V(x')\right)}dx' = \int_{-L}^{L} \sqrt{2mE_n}dx'$$

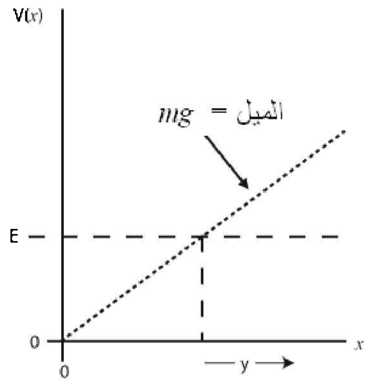
$$= \sqrt{2mE_n}\int_{-L}^{L} dx' = 2L\sqrt{2mE_n}$$

أخيراً نجد طاقة الجسيم تحقق المعادلة:

$$\boxed{E_n = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}}$$

وهي نفس النتيجة التي حصلنا عليها من حل معادلة شرودنجر لجسيم داخل صندوق لا نهائي الجهد. نلاحظ هنا أن طريقة WKB لم تعط قيمة تقريبية، لكنها أعطت قيمة كاملة (Exact). تطابق نتيجة شرودنجر وطريقة WKB ناتج من أن دالة موجة WKB هي دالة جيبية بسيطة.

مثال: استخدم تقريب WKB لحساب طاقة جسيم يتحرك فوق سطح الأرض تبعاً للجهد:



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

الحل: لإيجاد نقاط الانقلاب التقليدية، نعلم أن النقطة الأولى هي سطح الأرض عندها $x_1=0$. النقطة الثانية تأتي من الشرط:

$$p(x)=\sqrt{2m\left(E-mgx_2\right)}=0$$

$$\Rightarrow \boxed{x_2=\frac{E}{mg}}$$

ومن شرط التكميم لحائل صلد،

$$\int_{x_1}^{x_2} dy\,\sqrt{2m\left[E-V(x)\right]}=(n-\tfrac{1}{4})\pi\hbar$$

وبحساب التكامل:

$$\begin{aligned}\int_{0}^{x_2} dx\,\sqrt{2m\left[E-V(x)\right]} &= \int_{0}^{E/mg} dx\,\sqrt{2m\left[E-mgx\right]}, \qquad u=\left(\frac{mg}{E}\right)x \\ &= \frac{E}{mg}\int_0^1 \sqrt{2mE}\,\sqrt{1-u}\,du, \qquad y=1-u \\ &= \sqrt{\frac{E^3}{mg}}\underbrace{\int_0^1\sqrt{y}\,dy}_{2/3}\end{aligned}$$

نحصل على:

$$E_{\text{WKB}}=E=\left[\frac{9}{8}\pi^2\hbar^2 mg^2(n-\tfrac{1}{4})^2\right]^{1/3}$$

يمكن حل هذه المسألة حلاً كاملاً كالتالي:

نبدأ بمعادلة شرودنجر اللازمنية:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-mgx)\psi=E\psi$$

مع وجوب الشرط الحدودي $\psi(0)=0$ ، نكتب المعادلة السابقة بطريقة أخرى بالشكل:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m^2g}{\hbar^2}(x-\frac{E}{mg})\psi$$

بإزاحة نقطة الأصل، وذلك باستخدام التعويض $y=x-E/mg$ ، نحصل على المعادلة:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2}=\frac{2m^2g}{\hbar^2}y\psi(y)$$

باستخدام المعامل z عديم الوحدات:

$$z=\left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3}y$$

نصل إلى المعادلة التفاضلية التالية:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2}=z\psi(z)$$

وحلها العام هو:

$$\psi(z)=a\ \mathrm{Ai}(z)+b\ \cancel{\mathrm{Bi}(z)}$$

حيث الدوال $\mathrm{Ai}(z)$ و $\mathrm{Bi}(z)$ تسمى دوال إيري (Airy functions). قد تم حذف الحد الثاني بالمعادلة السابقة حيث إنه لا يحقق الشرط الحدودي $\psi(0)=0$.

وبتطبيق الشرط الحدودي $\psi(0)=0$ نجد أن $y=-E/mg$ ، أي:

$$z=\left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(-\frac{E}{mg}\right)$$

وبتعبير آخر فإن الطاقة المميزة ترتبط بالحلول الصفرية للدالة $\mathrm{Ai}(z)$ بالمعادلة:

$$E_{\text{exact}}=-\left[\frac{1}{2}\hbar^2mg^2\right]^{1/3}z_o=-(3.766\times10^{-23}\ \text{Joule})\,z_o$$

الجدول التالي يوضح المقارنة بين الحل التقريبي E_{WKB} والحل الكامل E_{exact} لبعض قيم n.

n	z_o	$E_{\text{exact}}(10^{-23}$ Joule)	$E_{\text{WKB}}(10^{-23}$ Joule)
1	−2.336	8.805	8.738
2	−4.088	15.395	15.371
3	−5.521	20.791	20.777
4	−6.787	25.559	25.549
5	−7.944	29.916	29.910

مثال: استخدام تقريب WKB لحساب الطاقة الكلية لجسيم واقع تحت تأثير جهد كولوم. استخدم على سبيل المثال إلكترون بذرة الهيدروجين.

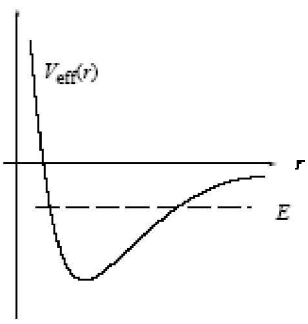
الحل: باستخدام الوحدات الذرية نجد أن الجهد المؤثر لإلكترون بذرة الهيدروجين $V_{\text{eff}}(r)$ و $p(r)$ ، هما:

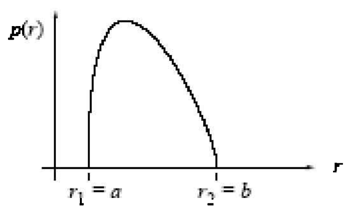
$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{1}{r} + \frac{1}{2}\frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$p(r) = \sqrt{2\left[E - V_{\text{eff}}(r)\right]} = \sqrt{2\left[E + \frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{2r^2}\right]}$$

$$= \frac{\sqrt{2(-E)}}{r}\sqrt{-r^2 + \frac{r}{(-E)} - \frac{l(l+1)}{2(-E)}}$$

ويمثلان بالشكل التالي:





نفضل هنا استخدام تعريف الثابت $(-E)$ وهو موجب بدلاً من (E). وقد تم فصل النقطة المتفردة بالمركز وهي $(\frac{1}{r})$.

نقاط الانقلاب تحسب من الشرط $p(r) = 0$، وهو:

$$\left(-r^2 + \frac{r}{(-E)} - \frac{l(l+1)}{2(-E)}\right)_{tp} = 0$$

وهذه معادلة من الدرجة الثانية يمكن إيجاد حلولها وهي:

$$r_1 = a = \frac{1-\sqrt{1-2l(l+1)(-E)}}{2(-E)}, \qquad r_2 = b = \frac{1+\sqrt{1-2l(l+1)(-E)}}{2(-E)},$$

وذلك يعني أن:

$$p(r) = \frac{\sqrt{2(-E)}}{r}\sqrt{(r-a)(r-b)}$$

والآن نحن بصدد حساب التكامل التالي:

$$\begin{aligned}\int_a^b p(r)dr &= \sqrt{2(-E)}\int_a^b \frac{1}{r}\sqrt{(r-a)(r-b)}dr \\ &= \sqrt{2(-E)}\,\frac{\pi}{2}\left(\sqrt{a}-\sqrt{b}\right)^2 = \sqrt{2(-E)}\,\frac{\pi}{2}\left((a+b)-2\sqrt{ab}\right) \\ &= \sqrt{2(-E)}\,\frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{(-E)} - 2\sqrt{\frac{l(l+1)}{2(-E)}}\right) = \frac{\pi}{2}\left(\sqrt{\frac{2}{(-E)}} - 2\sqrt{l(l+1)}\right)\end{aligned}$$

وباستخدام الشرط:

$$\int_a^b p(r)dr = (n-\frac{1}{2})\pi$$

حيث $n = 1,2,\cdots$، نجد أن:

$$E_n = -\frac{1}{2\left[(n-\frac{1}{2}) - \sqrt{l(l+1)}\right]^2} \text{ a.u.}$$

ملاحظة: يمكن حل المثال السابق بتحويل معادلة شرودنجر ذات الثلاثة أبعاد إلى معادلة في بعد واحد كما في المثال التالي.

مثال: استخدام تقريب WKB للتعامل مع مسائل الجهد ذي الثلاثة أبعاد.

الحل: نعلم أن المعادلة القطرية للمجال المركزي تعرف كالتالي:

$$\frac{d^2u_{nl}}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]u_{nl}=0$$

بالرغم من تشابه هذه المعادلة مع معادلات البعد الواحد، لكننا لا نستطيع استخدام هذا التقريب هنا وذلك لوجود نقطة التفرد عند $r=0$. لذا يجب علينا أن نحول المعادلة ذات الثلاثة أبعاد إلى معادلة في بعد واحد، بمعنى أننا يجب أن نحول التفرد من النقطة $r=0$ إلى النقطة $x=-\infty$. لعمل هذا نستخدم التحويل $r=e^x$ لتصبح المعادلة الرئيسة بالشكل:

$$\frac{d^2u}{dx^2}-\frac{du}{dx}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(e^x)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m}e^{-2x}\right]e^{2x}u=0$$

ومرة أخرى للتحويل إلى بعد واحد نستخدم التعويض:

$$u(x)=\chi(x)e^{-x/2}$$

حيث تحقق المعادلة التفاضلية:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(e^x)-\frac{\hbar^2}{2m}(l+\tfrac{1}{2})^2e^{-2x}\right]e^{2x}\chi=0$$

وهي تمثل معادلة في بعد واحد، ومنها نستخدم الشرط:

$$\int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E-V(e^x)-\frac{\hbar^2}{2m}(l+\tfrac{1}{2})^2e^{-2x}\right\}e^{2x}\right]^{1/2}=(n+\tfrac{1}{2})\pi,\quad n=0,1,2,\cdots$$

والآن، نستخدم التعويضات: $r=e^x$ و $dr=e^x dx$ والجهد $V(r)=-\frac{1}{r}$ لنحصل على:

$$\int_{r_1}^{r_2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E+\frac{1}{r}-\frac{\hbar^2}{2mr^2}(l+\tfrac{1}{2})^2\right\}\right]^{1/2}dr=(n_r+\tfrac{1}{2})\pi$$

حيث $n_r = 0,1,2,\cdots$.

وبنفس طريقة المثال السابق نحصل على:

$$E=-\frac{1}{2n^2}\ \text{a.u.}$$

حيث يمثل $n = n_r + l + 1$ العدد الكمي الأساسي.

٤- تمارين عامة

١- باستخدام تقريب WKB أوجد الطاقة المميزة لجسيم للجهود التالية:

أ- $$V=-V_o\operatorname{sech}^2\left(\frac{x}{a}\right)$$

ب- $$V(x)=\begin{cases}V_o\left(\dfrac{x^2}{a^2}-1\right) & \text{for}\quad |x|<a\\ 0 & \text{for}\quad |x|>a\end{cases}$$

حيث V_o و a ثوابت.