ЛЕКЦИЯ 11. 27.04.2001

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Квазиклассичеким приближением называют схему решения уравнения Шредингера, формально основанное на предположении о малости постоянной Планка. Разумеется нельзя понимать слова "малость постоянной Планка" буквально, поскольку эта постоянная – величина размерная. Речь пойдет о выделении такой функции размерности действия, что отношение

$$\frac{S(x)}{\hbar}$$

можно считать большой величиной. Реализуется эта программа поиском решения уравнения Шредингера в форме (рассматривается система с одной степенью свободы)

$$\psi(x) \quad = \quad exp\Big(i\frac{S(x)}{\hbar}\Big).$$

После этого уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{''}(x) \quad + \quad V(x)\psi(x) \quad = \quad E\psi(x)$$

принимает вид

$$\frac{1}{2m}\Big(S^{'}(x)\Big)^2 \quad - \quad \frac{i\hbar}{2m}S^{''}(x) \quad + \quad V(x) \quad = \quad E.$$

Предположим, что выполняется условие

$$\Big|\frac{\hbar S^{''}(x)}{(S^{'}(x))^2}\Big| \quad = \quad \Big|\frac{d}{dx}\Big(\frac{\hbar}{S^{'}(x)}\Big)\Big| \quad << \quad 1.$$

Если S – классическое действия, то величину размерности длины

$$\lambda(x) \quad = \quad \frac{\hbar}{S^{'}(x)}$$

называют дебройлевской длиной волны частицы. Таким образом, условие применимости квазиклассического приближения можно сформулировать как условие существования медленно меняющейся дебройлевской длины волны.

ИТЕРАЦИИ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ

Чтобы построить эфеективную процедуру приближенного решения уравнения Шредингера представим функцию $S(x)$ в форме

$$S(x) \quad = \quad S_0(x) \quad + \quad S_1(x),$$

где второе слагаемое можно считать малой поправкой к первому. Связав эту малость с постоянной Планка, можно получить эффективную схему итераций уравнения для функции $S(x)$. Для этого разобьем уравнение

$$\frac{1}{2m}({S_0}'(x))^2 + \frac{1}{m}{S_0}'(x){S_1}'(x) + \frac{1}{2m}({S_1}'(x))^2 - \frac{i\hbar}{2m}{S_0}'' - \frac{i\hbar}{2m}{S_1}'' + V(x) = E$$

на два

$$\frac{1}{2m}({S_0}'(x))^2 \quad + \quad V(x) \quad = \quad E$$

и

$${S_0}'(x){S_1}'(x) \quad + \quad \frac{1}{2}({S_1}'(x))^2 \quad - \quad \frac{i\hbar}{2}{S_0}'' \quad - \quad \frac{i\hbar}{2}{S_1}'' \quad = \quad 0.$$

Второе уравнение связывает величины, котрые можно считать, по крайней мере, на порядок меньшими, чем содержащиеся в первом уравнении. Удобно считать, что умножение на $\hbar$ и дифференцирование одинаковым образом прнижают порядок величны. Это означает, что в левой части второго уравнения можно пренбречь вторым слагаемым по сравнению с первым и четвертым по сравнению с третьим. Совершив это, получим

$${S_0}'(x){S_1}'(x) \quad - \quad \frac{i\hbar}{2}{S_0}'' \quad = \quad 0.$$

Если считаь функцию S_0 заданной, то функция S_1 с точностью до постоянной равна

$$S_1(x) \quad = \quad i\hbar ln\sqrt{{S_0}'(x)}.$$

Вернемся к нулевому приближению. В уравнении

$$\frac{1}{2m}({S_0}'(x))^2 \quad + \quad V(x) \quad = \quad E$$

естественно выделяются два случая:
1) энергия E больше потенциальной энергии $V(x)$ и
2) противоположный случай, когда справедливо неравенство $E < V(x)$.

В первом случае справедливо уравнение

$$\frac{dS_0}{dx} \quad = \quad \pm p(x), \qquad p^2(x) \quad = \quad 2m(E \quad - \quad V(x)) \quad > \quad 0,$$

которое имеет решение

$$S_0(x) \quad = \quad \pm\int^x p(x)dx.$$

Функция $p(x)$ имеет смысл классического импульса, поэтому области, в которых выполняются неравенства

$$p^2(x) \quad > \quad 0,$$

называют **классически достижимыми**. Если положительна величина

$$\kappa^2(x) \quad = \quad 2m(V(x)-E),$$

то функция $S_0(x)$ определяется формулой

$$S_0(x) \quad = \quad \pm \int^x \kappa(x)dx.$$

Области положительности значений функции $\kappa^2(x)$ называют **классически недостижимыми** областями. Если вернуться к функции $\psi(x)$, то можно утверждать, что уравнение Шредингера в квазиклассическом приближении имеет решения двух типов:

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)dx\Big) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} exp\Big(-\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)dx\Big), \qquad p^2(x) \quad > 0,$$

или

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C_1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int^x \kappa(x)dx\Big) + \frac{C_2}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int^x \kappa(x)dx\Big), \qquad \kappa^2(x) \quad > 0,$$

Области применимости этих выражений определяются неравенствами

$$\Big|\frac{d}{dx}\Big(\frac{\hbar}{p(x)}\Big)\Big| \quad << \quad 1,$$

или

$$\Big|\frac{d}{dx}\Big(\frac{\hbar}{\kappa(x)}\Big)\Big| \quad << \quad 1.$$

Заметим, квазиклассическое приближение неприменимо вблизи **точек поворота** x_0, в которых выполняются равенства $p(x_0) = 0$ или $\kappa_(x_0) = 0$.
Если квазиклассическое приближение применимо, то выражение

$$\frac{d}{dx}\frac{1}{\sqrt{p(x)}} exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)dx\Big) \quad = \quad \frac{i\sqrt{p(x)}}{\hbar}\Big(1 + \frac{1}{2}\frac{d}{dx}\Big(\frac{\hbar}{p(x)}\Big)\Big) exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)dx\Big)$$

можно заменить на

$$\frac{i\sqrt{p(x)}}{\hbar} exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)dx\Big).$$

Это справедливо при дифференцировании остальных квазиклассических функций. Иначе говоря, если справедливо квазиклассическое приближение, то предэкспоненциальный множитель $\frac{1}{\sqrt{p(x)}}$ можно рассматривать как постоянную величину.

Если бы квазиклассические волновые функции можно было определить в точках поворота, то волновую функцию на отрезке $\Big(x_1 < x < x_2$, содержащем точку поворота x_0, можно было построить по формуле

$$\psi(x) \quad = \quad \begin{cases} \psi_1(x), & x < x_0 \\ \psi_2(x), & x_0 < x \end{cases}$$

Линейную зависимость функций ψ_1 и ψ_2 обеспечило бы условие

$$W(\psi_1, \psi_2) \quad = \quad 0.$$

Поскольку этого сделать нельзя, то решения ψ_1 и ψ_1 приходится сопоставлять более изощренными способами. Отложив пока описание этих способов, приведем окончательные формулы, позволяющие эффективно применять квазиклассическое приближение. Если классически достижимая область лежит справа от точки поворота:

$$E \quad < \quad V(x), x < a, \qquad E \quad > \quad V(x), x > a,$$

то между квазиклассическими решениями слева и справа от точки поворота существует такое соответствие:

$$x < a, \quad \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(- \frac{1}{\hbar} \int_x^a \kappa(x) dx \Big), \quad \Leftrightarrow \quad \frac{2}{\sqrt{p(x)}} cos\Big(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \Big), \quad a < x.$$

Если же классически достижимая область лежит слева от точки поворота:

$$E \quad > \quad V(x), x < b, \qquad E \quad < \quad V(x), x > b,$$

то квазиклассические решения слева и справа от точки поворота связаны соотношением:

$$x < b, \quad \frac{2}{\sqrt{p(x)}} cos\Big(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \Big) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{\kappa(x)} exp\Big(- \frac{1}{\hbar} \int_b^x \kappa(x) dx \Big), \quad b < x,$$

УРОВНИ ЭНЕРГИИ В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Приведенные формулы позволяют найти уровни энергии частицы, двигающейся в произвольном потенциальном поле с одним минимумом. Пусть линия постоянной энергии $E(x) = const$ пересекает график функции $V(x)$ в двух точках $a < b$, т.е. в этих точках справедливы равенства $V(a) = V(b) = E$. Это – точки поворота в нашей задаче. Квадратично интегрируемое решение уравнения Шредингера должно удовлетворять условиям

$$\lim_{x \to -\infty} \psi(x) \quad = \quad 0, \lim_{x \to \infty} \psi(x) \quad = \quad 0$$

Первое условие определяет волновую функцию в промежутке $a < x < b$ как

$$\psi_1(x) \quad = \quad \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} cos\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{\pi}{4}\Big),$$

а второе требует чтобы она представлялась в форме

$$\psi_2(x) \quad = \quad \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} cos\Big(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x)dx - \frac{\pi}{4}\Big).$$

Поскольку все уровни энергии в системах с одной степенью свободы – простые, то должно выполняться условие

$$W(\psi_1, \psi_2) \quad = \quad 0.$$

Вычисляя вронскиниан явно, получим условие

$$W \quad = \quad -\frac{C_1 C_2}{\hbar} sin\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)dx - \frac{\pi}{2}\Big) \quad = \quad 0.$$

Это приводит к уравнению для уровней энергии

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(E - V(x))}dx \quad = \quad \pi\Big(n + \frac{1}{2}\Big), \quad n = 0, 1, 2, ...$$

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ С ОПРЕДЕЛЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ПОТОКА

Чтобы применять квазиклассическое приближение к задачам с непрерывным спектром энергии, необходимо построить решения, соответствующие определенной плотности потока. Это можно осуществить следующим образом.

Пусть классически достижимая область лежит справа от точки поворота a. С решением уравнения Шредингера в классически достижимой области

$$u(x) \quad = \quad \frac{1}{p(x)} exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - i\frac{\pi}{4}\Big), \quad a < x$$

сопоставим в классически недостижимой области такое решение:

$$u(x) \quad = \quad C_1 \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_x^a \kappa(x)dx\Big) + C_2 \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a \kappa(x)dx\Big), \quad x < a.$$

Поскольку решению в классически достижимой области

$$u(x) + u^*(x) \quad = \quad \frac{2}{\sqrt{p(x)}} cos\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{\pi}{4}\Big)$$

при $x < a$ соотвествует решение

$$u(x) + u^* \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(- \frac{1}{\hbar} \int_x^a \kappa(x) dx \Big), \quad x < a,$$

то должны выполняться равества

$$C_1 + {C_1}^* = 0, \qquad C_2 + {C_2}^* = 1.$$

Это означает, что коэффициент C_1 – чисто мнимый:

$$C_1 \quad = \quad -iK.$$

Коэффициент C_2 естественно выбрать действительным, поскольку его мнимая часть даст экспоненциально малую добавку к слагаемому с коэффициентом C_1. В этом случае $C_2 = \frac{1}{2}$. Значение K можно определить, приравняв значения вронскиниана $W(u, u^*)$, вычисленные слева и справа от точки поворота. В результате получится значение $K = 1$. Таким образом, получается соотвествие:

$$-i \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar} \int_x^a \kappa(x) dx \Big), \quad + \quad \frac{1}{2\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(- \frac{1}{\hbar} \int_x^a \kappa(x) dx \Big), \quad x < a,$$

$$\Longleftrightarrow$$

$$\frac{1}{p(x)} exp\Big(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - i\frac{\pi}{4} \Big), \quad a < x.$$

Аналогично рассматривая случай, когда классически достижимая область лежит слева от точки поворота. Окончательно новые правила соответствия можно сформулировать так, чтобы они содержали только действительные величины.

Если классически недостижимая область лежит слева от точки поворота, то

$$x < a, \quad E < V(x), \quad -\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar} \int_x^a \kappa(x) dx \Big)$$

$$\Longleftrightarrow$$

$$a < x, \quad E > V(x), \quad \frac{1}{p(x)} sin\Big(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \Big)$$

Если классически недостижимая область лежит справа от точки поворота, то

$$x < b, \quad E > V(x), \quad \frac{1}{\sqrt{p(x)}} sin\Big(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \Big)$$

$$\Longleftrightarrow$$

$$b < x, \quad E < V(x), \quad -\frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar} \int_b^x \kappa(x) dx \Big)$$

ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ СКВОЗЬ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Рассмотрим потенциал, монотонно убывающий до нуля от некоторого максимального значения при $x \to \pm\infty$. Пусть энергия частицы E совпадает со значениями потенциала в точках $a < b$, так что $V(a) = V(b) = E$.

В классической механике частица энергии E, начав движение в области слева от барьера не может оказаться слева от него. Остановившись в точке поворота, она начнет бесостановочное движение направо. В квантовой механике частица всегда имеет шанс оказаться справа от барьера. Вероятность же отражения оказывется величиной, меньшей единицы.

Чтобы доказать это построим решение уравнения Шредингера, которое слева от точки b соотвествует движению частицы слева направо. Соотвествующая волновая функция в области $b < x$ равна

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C}{\sqrt{p(x)}} exp\Big(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p(x)dx - i\frac{\pi}{4}\Big).$$

Перейдя к тригонометрической записи, нетрудно найти квазиклассическую волновую функцию в области $a < x < b$:

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C}{2\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_x^b \kappa(x)dx\Big) \quad - \quad i\frac{C}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_x^b \kappa(x)dx\Big) \quad =$$

$$\frac{Ce^{-\alpha}}{2\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^x \kappa(x)dx\Big) \quad - \quad i\frac{Ce^{\alpha}}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_a^x \kappa(x)dx\Big),$$

где

$$\alpha \quad = \quad \frac{1}{\hbar}\int_a^b \kappa(x)dx.$$

Слева от точки a решение принимает вид

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{Ce^{-\alpha}}{2\sqrt{p(x)}} sin\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx + \frac{\pi}{4}\Big) \quad - \quad i\frac{2Ce^{\alpha}}{\sqrt{p(x)}} cos\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x) + \frac{\pi}{4}\Big).$$

Переходя к экспоненциальной записи, получим

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} exp\Big(i\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx + i\frac{\pi}{4}\Big) \quad + \quad \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} exp\Big(-i\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - i\frac{\pi}{4}\Big).$$

Явный вид коэффициентов C_1 и C_2 будет приведен позднее, пока лишь заметим, что коэффициенты прохождения сквозь потенциальный барьер и отражения от барьера равны

$$D \quad = \quad \frac{|C|^2}{|C_1|^2}, \qquad R \quad = \quad \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2}.$$

При этом условие сохранения потока требует выполнения равенства

$$D \quad + \quad R \quad = \quad 1.$$

Достаточно простые выкладки при переходе от тригонометрических функций к экспоненциальным приводят к следующим выражениям:

$$R \quad = \quad \Big(\frac{e^{\alpha} - \frac{1}{4}e^{-\alpha}}{e^{\alpha} + \frac{1}{4}e^{-\alpha}}\Big)^2, \qquad D \quad = \quad \frac{1}{(e^{\alpha} + \frac{1}{4}e^{-\alpha})^2},$$

сумма которых действительно равна единице. В учебниках экспоненту $e^{-\alpha}$ обычно опускают как малую по сравнению с e^{α} величину. В результате коэффициент отражения становится равным единице, а коффициент прохождения определяется широко известной формулой

$$D \quad = \quad exp\Big(- \frac{2}{\hbar}\int_a^b \kappa(x)dx\Big).$$

РАСЩЕПЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ В ДВОЙНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Квазиклассическое приближение позволяет достаточно просто описать важное физическое явление – расщепление уровней энергии в двойной потенциальной яме. Рассмотрим систему, потенциальная энергия которой определяется симметричной функцией

$$V(x) \quad = \quad V(-x)$$

с двумя минимумами в точках $-c, c$, а в точке $x = 0$ располагается относительный максимум $V(0) = V_0$. Если энергия такова, что выполняются неравенства $V(c) < E < V_0$, то имеются четыре точки поворота $-b, -a, a, b$. Общая задача о квантовании энергии в системе с четырьмя точками поворота слишком трудна, чтобы излагаться в этом курсе лекций, однако симметрия потенциала упрощает дело. Поскольку в случае симметричного потенциала уровням энергии соответствуют четные или нечетные волновые функции, можно рассматривать задачу лишь при положительных x, выделяя четное или нечетное решение условиями в точке $x = 0$: $\psi^{'}(0) = 0$ или $\psi(0) = 0$. В этом случае достаточно рассмотреть лишь две точки поворота.

Если волновая функция убывает при $x \to \infty$, то в промежутке $a < x < b$ она должна иметь вид

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C}{\sqrt{p(x)}}cos\Big(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x)dx - \frac{\pi}{4}\Big).$$

Чтобы определить эту функцию в интервале $0 < x < a$, представим ее форме

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{C}{\sqrt{p(x)}}cos\Big(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx - \frac{\pi}{4} + \beta\Big),$$

где

$$\beta = \frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)dx + \frac{\pi}{2}.$$

При $0 < x < a$ волновая функция определяется выражением

$$\psi(x) = \frac{C cos\beta}{2\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a \kappa(x)dx\Big) + \frac{C sin\beta}{\sqrt{\kappa(x)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_x^a \kappa(x)dx\Big).$$

Значения функции и ее производной в точке $x = 0$ определяются выражениями

$$\psi(0) = \frac{C cos\beta}{2\sqrt{\kappa(0)}} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big) + \frac{C sin\beta}{\sqrt{\kappa(0)}} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big),$$

$$\psi^{'}(0) = \frac{C cos\beta\sqrt{\kappa(0)}}{2\hbar} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big) - \frac{C sin\beta\sqrt{\kappa(0)}}{\hbar} exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big).$$

В уравнения, определяющие уровни энергии,

$$\frac{1}{2} cos\beta exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big) + sin\beta exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big) = 0$$

и

$$\frac{1}{2} cos\beta exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big) - sin\beta exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big) = 0,$$

слагаемое

$$sin\beta exp\Big(\frac{1}{\hbar}\int_0^a \kappa(x)dx\Big)$$

содержит большой экспоненциальный множитель. Чтобы скомпенсировать его, функцию энергии $\beta(E)$ следует сделать малой величиной. Это определяет выбор значений энергии. Если

$$E = E_0 + \delta E,$$

то

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m(E - V(x))} \sim \frac{1}{\hbar}\int_a^b p_0(x)dx + \frac{m\delta E}{\hbar}\int_a^b \frac{1}{p_0(x)}dx,$$

где

$$p_0(x) = \sqrt{2m(E_0 - V(x))}.$$

Второе слагаемое можно представить следующим образом:

$$\frac{m\delta E}{\hbar}\int_a^b \frac{1}{p_0(x)}dx, = \frac{\delta E}{\hbar}\int_a^b \frac{dx}{v_0(x)} = \frac{\delta E T}{2\hbar},$$

где T – период колебания классической частицы с энергией E_0. Если энергия E_0 такова, что

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p_0(x)dx = \pi(n + \frac{1}{2}),$$

то

$$cos\beta \quad \sim \quad (-1)^n, \qquad sin\beta \quad \sim \quad (-1)^{n+1}\frac{\pi\delta E}{\hbar\omega}, \qquad \omega = \frac{2\pi}{T}.$$

Если $V_1(x)$ – потенциал, совпадающий с $V(x)$ при положительных значениях x, и монотонно возрастающий при убывании x, то принятве нами значения E_0 – это уровни энергии частицы в поле V_1. При изменении потенциала от V_1 до V уровни энергии расщепляются, причем низшему уровню энергии соотвествует четная, а высшему – нечетная волновые функции:

$$E \quad = \quad \begin{cases} E_0 + \frac{\Delta E}{2}, & \psi(x) = -\psi(-x) \\ E_0 - \frac{\Delta E}{2}, & \psi(x) = \psi(-x) \end{cases}$$

где

$$\Delta E \quad = \quad \frac{\hbar\omega}{\pi} exp\Big(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{a}\kappa_0(x)dx\Big).$$