Семинар 7. Квазиклассическое приближение

29 октября 2016

Введение

Квазиклассическое приближение — полезный и мощный метод, который используется в решении большого количества задач. Он хорошо работает в том случае, когда характерное действие для системы много больше постоянной Планка $\hbar$ и позволяет находить вид волновых функций, матричных элементов, и пр.

Последовательный вывод вида волновых функций — метод WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) — сводится к следующей процедуре. В одномерное уравнение Шрёдингера делается подстановка $\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}$; и дальше методом последовательных приближений строится формальный асимптотический ряд для «действия» $S(x)$ по степеням $\hbar$. Подробный вывод можно найти в литературе [ЛЛ, глава 7 «Квазиклассический случай»]; тут мы лишь приведём качественную интерпретацию результата (дальше мы будем по-прежнему полагать $\hbar = 1$).

Рассмотрим частицу в *плавно* меняющемся потенциале $V(x)$. Тогда локально решения должны быть устроены как плоские волны $e^{\pm ipx}$; но $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$ — «импульс» частицы, который, вообще говоря, может зависеть от координаты. Это позволяет написать решение в виде $\psi(x) = C(x) \exp\left(\pm i \int^x p(x')dx'\right)$[1], что является приближением, при котором пренебрегается отражением частиц от потенциала. Такое отражение отсутствует в классической механике, но имеет место быть в квантовой (в пределе же плавного по сравнению с длиной волны де Бройля потенциала оно мало).

Для стационарных решений уравнения Шредингера поток вероятности не зависит от координаты ($\partial j/\partial x = \mathrm{div} j = -\partial\left(|\psi|^2\right)/\partial t = 0$). Потребуем от нашего приближенного решения такого же условия. Тогда $j(x) = |C|^2 p(x) = \mathrm{const}$, что приводит к волновым функциям следующего вида:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\pm i \int^x p(x')dx'\right)}, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \tag{1}$$

В классически недоступной области, где $E < V(x)$, импульс $p(x)$ оказывается чисто мнимым; это соответствует экспоненциально растущим или затухающим решениям:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\pm \int^x |p(x')|dx'\right).} \tag{2}$$

Критерий применимости

В большинстве случаев критерий применимости квазиклассического приближения сводится к требованию того, чтобы на характерном масштабе изменения потенциала $U(x)$ происходило достаточно много осцилляций фазы. Это условие можно формализовать, сведя его к требованию того, чтобы длина волны де Бройля $\lambda \sim \hbar/p$ менялась мало на масштабе λ по сравнению с λ:

$$\left|\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right| \lambda \ll \lambda \Leftrightarrow m \left|\frac{\partial U/\partial x}{p^3}\right| \ll 1.$$

Гранусловия для отражения от потенциала, приближаемого линейным

Как видно из предыдущего выражения, квазиклассическое приближение заведомо не выполняется вблизи классических *точек остановки* $x = a$: $E = V(a)$, где $p(a) = 0$. Без ограничения общности мы можем положить $E = 0$ и $a = 0$, и рассмотреть случай, когда классически запрещённая область располагается справа от точки остановки. На достаточном отдалении от неё ($|x| > x_0$) волновая функция с точностью до численного множителя имеет вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\int_0^x |p(x')|\, dx'\right), & x > x_0, \\ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\int_0^x p(x')dx' + \phi\right), & x < -x_0. \end{cases} \tag{3}$$

[1] Это очень похоже на адиабатическое приближение, где мы вводили динамическую фазу $\int E(t)dt$. Эта аналогия достаточно глубокая.

Здесь была оставлена только затухающая экспонента, как этого требует условие нормируемости. После этого коэффициенты A и ϕ становятся вполне определёнными. Для их нахождения потенциал в окрестности нуля можно в большинстве случаев приблизить линейным: $V(x) \approx V'(0) \cdot x$ ($V' > 0$). Далее можно продвинуться несколькими способами. Один из них заключается в аналитическом продолжение по x и обходе точки остановки в комплексной плоскости. Этот способ мы обсудим позднее, а пока воспользуемся справочными данными об асимптотиках функции Эйри $\mathrm{Ai}(z)$, дающей решение уравнения $y''(z) - zy(z) = 0$, с экспоненциально затухающей асимптотикой при $z \to +\infty$ (как раз это условие нам и необходимо выполнить). Асимптотики функции Эйри имеют вид:

$$\mathrm{Ai}(t) \sim \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}t^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}t^{3/2}\right), & t \to +\infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}|t|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|t|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) & t \to -\infty. \end{cases}$$

Решение уравнение Шредингера получается из них подстановкой $t = (2mV')^{1/3}x$, и их следует сравнить с выражениями (3), вычисленными при $V(x) = V'x$. (При взятии интеграла от $p(x)$ при $x < 0$ будьте аккуратнее со знаком). Сравнение даёт $A = 2$, $\phi = -\pi/4$. В общем случае произвольной точки остановки a и произвольного знака V' справедливы выражения:

$$\boxed{\psi(x) = C \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\left|\int_a^x |p(x')|\, dx'\right|\right), & x > a + d, \\ \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\left|\int_a^x p(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right), & x < a - d. \end{cases}} \tag{4}$$

Обратите внимание на то, что хотя интегралы имеют одним из пределов a, это вовсе не предполагает, что выражение верно вплоть до $x = a$.

Для того, чтобы вышеприведенный вывод был справедлив, необходимо, чтобы в области, где справедливо асимптотическое выражение ($z \gg 1$) все еще оставалось корректным линейное приближение потенциала, а также уже работала квазиклассика.

Случаи, в которых потенциал в области, через которую сшиваются квазиклассические асимптотики, нельзя приблизить линейным (например, вертикальная стенка, скачок, излом, экстремум потенциала или его особенность — скажем, $V(x) \sim 1/x$) требуют отдельного рассмотрения, которое приводит к другим значениям амплитуды A и фазы ϕ.

Нормировка состояний непрерывного спектра

Рассмотрим состояния, описывающие движение, инфинитное в одну сторону ($x \to +\infty$). (Вывод нормировки для инфинитного в обе стороны движения обобщается тривиально.) Как обсуждалось на семинаре, посвящённом непрерывному спектру, такие состояния можно нормировать по асимптотикам. При этом сингулярное слагаемое в скалярном произведении волновых функций, отвечающих энергиям E_1 и E_2, сводится к интегралу от экспонент:

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle_{\text{sing}} \simeq \int_\Lambda^{+\infty} dx \frac{A_1}{\sqrt{p_1(x)}} \cos\left(\int_0^x p_1(x')dx' + \phi(E_1)\right) \frac{A_2^*}{\sqrt{p_2(x)}} \cos\left(\int_0^x p_2(x')dx' + \phi(E_2)\right) \simeq$$

$$\simeq \frac{A_1 A_2^*}{4} \int_\Lambda^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{p_1(x)p_2(x)}} \left(\exp\left(i\int_0^x p_1(x')dx' - i\int_0^x p_2(x')dx'\right) + h.c.\right)$$

Перейдём формально к интегрированию по t (можно заметить, что это действительно является собственным временем частиц), которое определено согласно:

$$t \cdot (E_1 - E_2) = \int_0^x (p_1(x') - p_2(x'))dx', \quad \frac{dt}{dx} = \frac{p_1(x) - p_2(x)}{E_1 - E_2},$$

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle_{\text{sing}} \simeq \frac{A_1 A_2^*}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{E_1 - E_2}{p_1(x) - p_2(x)} \frac{1}{\sqrt{p_1 p_2}} \exp\left(i(E_1 - E_2)t\right).$$

Мы знаем, что этот интеграл должен зануляться при $E_1 \neq E_2$ в силу ортогональности собственных состояний с разными собственными числами, поэтому имеем право устремить $E_1 \to E_2$, что дает

$$\frac{E_1 - E_2}{p_1(x) - p_2(x)} \frac{1}{\sqrt{p_1(x)p_2(x)}} \to \frac{\upsilon(x)}{p(x)} = \frac{1}{m} = \text{const},$$

где $\upsilon = \partial E/\partial p = p/m$ — скорость. Тогда:

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle_{\text{sing}} \sim \frac{A_1 A_2^*}{4m} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i(E_1 - E_2)t) = \frac{A_1 A_2^*}{4m} 2\pi\delta(E_1 - E_2).$$

Для инфинитного в обе стороны движения скалярное произведение выглядит аналогично: $\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \frac{A_1 A_2^*}{m} 2\pi\delta(E_1 - E_2)$. При этом, если выбрать константы $A = \sqrt{\frac{m}{2\pi}}$, то волновые функции будут нормированы на дельта-функции от энергии. Обратим внимание, что поток частиц $j(x)$ на таких волновых функциях равен $j = |A|^2 = \text{const}$.

Связанные состояния дискретного спектра

Правило квантования Бора-Зоммерфельда Рассмотрим состояния дискретного спектра, которые имеют две точки остановки a и b. В этом случае выражение из второй строчки (4) можно записать и для точки остановки a, и для точки остановки b. При $a < x < b$ это должно соответствовать одной и той же волновой функции, из чего следует условие на интеграл $\int_a^b p(x)dx$, называемой правилом квантования Бора-Зоммерфельда:

$$\boxed{S(E_n) = \oint p(x)dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right),} \tag{5}$$

Множитель 1/2, связанный с полученное ранее фазой $-\pi/4$, хоть и представляет собой следующий порядок разложения по $1/n \ll 1$, оказывается не лишним и зачастую улучшает точность квазиклассического приближения так, что оно становится применимым практически до $n \sim 1$.

Интегрирование $\oint p(x)dx$ происходит по полной замкнутой классической траектории с фиксированной энергией $\oint p(x)dx = 2\int_a^b p(x)dx$. С другой стороны, этот же интеграл можно переписать через интеграл по *площади* классического фазового пространства (x,p), заметаемой классической же замкнутой траекторией: $\oint p(x)dx \equiv \iint dpdx$. В связи с этой формулой часто говорят, что фазовый объем, отвечающий одному состоянию, равен $2\pi\hbar$. В таком виде это утверждение обощается и на произвольные размерности; имеет место квазиклассическое выражение для количества состояний с энергией, меньшей E:

$$\boxed{N(E) = \int \frac{d^dxd^dp}{(2\pi\hbar)^d}\theta(E - \epsilon(p,x)),}$$

где $\epsilon(p,x)$ — классическая энергия частицы. Естественно, это утверждение работает для достаточно больших энергий, когда $N(E) \gg 1$.

Далее можно заметить, что расстояние между соседними квазиклассическими уровнями энергий имеют следующий вид:

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \oint \frac{\partial p}{\partial E}dx = \oint \frac{dx}{v} = \oint dt = T \Rightarrow E_{n+1} - E_n \approx \hbar\omega_n, \quad \omega_n = \frac{2\pi}{T}$$

где T — период классических колебаний частицы с энергией E.

Нормировка связанных состояний дискретного спектра При нормировке этих состояний пренебрежём экспоненциально затухающими хвостами, а быстро (по сравнению с амплитудой $1/\sqrt{p}$) меняющийся $\cos^2\phi$ заменим его средним, равным 1/2. Тогда нормированное на единицу решение УШ имеет следующий вид:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p(x)}}\cos\left(\left|\int_a^x p(x')dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right).$$

Переменные «действие-угол» Переменные S и θ (где θ — угол в фазовой плоскости xy) являются переменными действие-угол в классической механике. Это означает, что их скобка Пуассона имеет вид $\{S,\theta\} = -1$, и верны уравнения Гамильтона $\dot\theta = \partial H/\partial S$, $\dot S = -\partial H/\partial\theta$ (для H, не зависящего явно от времени, нет зависимости и от θ, поэтому S сохраняется). Скобка Пуассона при квантовании определяет коммутатор и это означает (после перехода к n и $\varphi = 2\pi\theta$):

$$\boxed{[n,\varphi] = -i.}$$

Эти переменные квантовомеханически сопряжены так же, как координата и импульс. Для них верно соотношение неопределённости (без множителя $\hbar$). Действительно, при фиксированном номере уровня n фаза неопределена (а в классической механике она быстро меняется со временем). Подобное соотношение можно получить и для многочастичных задач, в которых n обозначает число частиц в (под)системе. [2]

Адиабатическое приближение в классической и квантовой механике Полученные выше формулы позволяют проследить связь адиабатических приближений в классической и квантовой механике. Действительно, при бесконечно медленном изменении гамильтониана в квантовой механике сохраняется номер уровня, а в классической — адиабатический инвариант $\oint p(x)dx$. А выше мы как раз получили (5), что эти величины пропорциональны в квазиклассическом приближении.

[2] Тогда ток частиц j можно найти из уравнения $j = \dot n = -\partial H/\partial\varphi$. Калибровочным преобразванием φ можно занулить ценой ненулевого вектор-потенциала $\mathbf{A}$. Это приводит к формуле $\mathbf{j} \propto \partial H/\partial\mathbf{A}$, которая должна быть знакомой знатокам элетродинамики.

Туннелирование

Как известно, квантовая механика приводит к ненулевой вероятности прохождения через потенциальный барьер высоты, большей E. Можно найти эту вероятность в квазиклассическом приближении. Пусть классически запрещённая область простирается на интервал $a < x < b$, а частица налетает слева. Тогда при $x < a$ имеется налетающая и отражённая волны, а при $x > b$ — только прошедшая. Эту задачу удобно решать «с конца», наложив условие на то, что справа имеется только прошедшая волна вида

$$\psi_r = \frac{t}{\sqrt{p}} \exp\left(i \int_b^x p(x)dx - i\frac{\pi}{4} \right).$$

Вблизи точки поворота эта функция представляет собой линейную комбинацию функций Ai и Bi: $\psi_r = c(\mathrm{Ai}(x) + i\mathrm{Bi}(x))$. Последняя имеет асимптотиками растущую экспоненту и синус с той же фазой[3]:

$$\mathrm{Bi}(z) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi} z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} z^{3/2}\right), & t \to +\infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), & t \to -\infty. \end{cases}$$

Таким образом, можно получить выражение в классически запрещённой области:

$$\begin{aligned} \psi_q = \frac{it}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_b^x |p| dx' \right) + \frac{t}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_b^x |p| dx' \right) = \\ = \frac{it}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_a^x |p|dx' \right) \exp\left(\int_a^b |p|dx' \right) + \frac{t}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_a^x |p|dx' \right) \exp\left(-\int_a^b |p|dx' \right) \approx \\ \approx /x \text{ near } a/ \approx \frac{it}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_a^x |p|dx' \right) \exp\left(\int_a^b |p|dx' \right), \end{aligned}$$

в котором мы «протянули» экспоненты до точки a и оставили лишь растущую. Далее применима уже использовавшаяся ранее процедура сшивки с использованием функции Эйри, которая дает для $x < a$:

$$\psi_l = \frac{2it}{\sqrt{|p|}} \cos\left(-\int_a^x |p|dx' + \frac{\pi}{4} \right) \exp\left(\int_a^b |p|dx' \right) = \frac{it}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_a^b |p|dx' \right) \left[\exp\left(-\int_a^x |p|dx' + i\frac{\pi}{4} \right) + \exp\left(\int_a^x |p|dx' - i\frac{\pi}{4} \right) \right].$$

В таком случае, коэффициент прохождения будет равен потоку вероятности в прошедшей волне, отнесённой к потоку в падающей волне. После преобразования получаем:

$$\boxed{T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx' \right).}$$

При наличии других граничных условий (например, если одна из точек поворота представляет собой скачок потенциала) предэкспоненциальный множитель поменяется, а выражение в экспоненте (что более важно) — нет.

Список литературы

[ЛЛ] Ландау, Лифшиц, курс теоретической физики, том 3 «Квантовая механика (нерелятивистская теория), 5-е изд. (2002)

[3]Обратите внимание на то, что в экспоненциальной асимптотике функции Bi нет коэффициента 1/2 в отличие от функции Эйри Ai