

Семинар 12. Квазиклассическое приближение

Антоненко Даниил

2 декабря 2017

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 (далее 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 $\psi(x) = C(x) \exp(\pm i \int^x p(x') dx')$, что является приближением, при котором пренебрегается отражением частиц от потенциала¹. Такое отражение отсутствует в классической механике, но имеет место быть в квантовой (в пределе же плавного на масштабе длины волны де Бройля потенциала оно мало).

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

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

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

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

В общем случае, разумеется, произвольная волновая функция представляет собой произвольную линейную комбинацию этих двух решений. 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 :

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

Граничные условия в классической точке остановки

Как видно из предыдущего выражения, квазиклассическое приближение заведомо не выполняется вблизи **классических точек остановки** $x = x_0$: $E = V(x_0)$, где $p(x_0) = 0$. Без ограничения общности мы можем положить $E = 0$ и $x_0 = 0$, и рассмотреть случай, когда классически запрещённая область $E < V(x)$ располагается справа от точки остановки. При этом мы разберём случай, когда волновая функция затухает вглубь запрещённой области (это требование важно для, к примеру, поиска квазиклассических стационарных состояний). Вдали от точки остановки (конкретный масштаб длины δx определяется поведением потенциала в окрестности точки остановки), квазиклассическое приближение, тем не менее, работает, и мы можем утверждать, что волновая функция с точностью до численного множителя имеет вид:

¹Обратите внимание, что такая зависимость волновой функции от координаты напоминает аналогичную зависимость волновых функций от времени вида $\exp(-i \int E(t) dt)$, возникающую в адиабатических задачах. В действительности, эти два приближения очень сильно перекликаются друг с другом. Пренебрежение отражением от потенциала эквивалентно в данном случае адиабатической теореме — отсутствием переходов в другие состояния.

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\int_0^x |p(x')| dx'\right), & x > 0, \quad |x| \gg \delta x, \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}} (B_1 \exp(i \int_0^x p(x') dx') + B_2 \exp(-i \int_0^x p(x') dx')) & x < 0, \quad |x| \gg \delta x \end{cases} \quad (4)$$

Очевидно, что между коэффициентами A , B_1 и B_2 имеется определённая конкретная линейная связь, ведь волновая функция фиксирована. Эту линейную связь можно определить достаточно в случае точки остановки общего вида — а именно, в окрестности точки остановки, потенциал раскладывается линейным образом $V(x) \approx F \cdot x$ (поскольку мы предположили, что запрещённая область находится справа, то $F > 0$). В таком случае, точное решение уравнения Шрёдингера в окрестности точки остановки известно (были разобраны на шестом семинаре) — это функции Эйри² $\text{Ai}((2mF)^{1/3}x)$. Асимптотики функции Эйри известны, поэтому в окрестности точки остановки эта же волновая функция должна быть устроена следующим образом):

$$\psi(x) = C \cdot \text{Ai}((2mF)^{1/3}x) \approx \frac{C}{2\sqrt{\pi}} \cdot \begin{cases} \frac{1}{[(2mF)^{1/3}x]^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\sqrt{2mF}x^{3/2}\right), & x > 0, \quad |x| \gg (2mF)^{-1/3} \\ \frac{2}{[(2mF)^{1/3}x]^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}\sqrt{2mF}|x|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), & x < 0, \quad |x| \gg (2mF)^{-1/3} \end{cases} \quad (5)$$

Масштаб, на котором мы не можем пользоваться асимптотикой такого вида — это масштаб, на котором перестаёт работать линейное разложение $|x| \ll \delta x = \frac{U'(0)}{U''(0)}$. Существенно то, что в случае общего положения, в промежуточном масштабе $(2mF)^{-1/3} = \delta x \ll |x| \ll \delta x$ работает как квазиклассика, так и функция Эйри — это позволяет нам «сшить» эти два решения, и установить связь между коэффициентами A , B_1 , B_2 и C . Несложно видеть, что $p(x) = \sqrt{2mF}x$, поэтому действие имеет вид $S(x) = \int_0^x p(x') dx' \equiv \frac{2}{3}\sqrt{2mF}x^{3/2}$ — поэтому асимптотика функции Эйри и представляет собой буквально квазиклассические экспоненты. Поэтому мы можем записать:

$$\begin{cases} A &= \frac{(2mF)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}} C \\ B_1 &= \frac{(2mF)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}} C e^{-i\pi/4} \equiv A e^{-i\pi/4} \\ B_2 &= \frac{(2mF)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}} C e^{i\pi/4} \equiv A e^{i\pi/4} \end{cases} \quad (6)$$

В общем случае произвольной точки остановки x_0 и произвольного знака F справедливы следующие выражения:

$$\psi(x) = C \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\left|\int_{x_0}^x |p(x')| dx'\right|\right), & x > x_0, \quad |x - x_0| \gg \delta x, \\ \frac{2}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\left|\int_{x_0}^x p(x') dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right), & x < x_0, \quad |x - x_0| \gg \delta x \end{cases} \quad (7)$$

Обратите внимание на то, что хотя интегралы имеют одним из пределов a , это вовсе не предполагает, что выражение верно вплоть до $x = x_0$!

Иные 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 условиям связи коэффициентов.

Нормировка состояний непрерывного спектра

Рассмотрим состояния, описывающие движение, инфинитное в одну сторону ($x \rightarrow +\infty$; 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:

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle_{\text{sing}} &\simeq \int_0^{+\infty} dx \frac{A_1}{\sqrt{p_1(x)}} \cos\left(\int_0^x p_1(x') dx' + \phi(E_1)\right) \frac{A_2^*}{\sqrt{p_2(x)}} \cos\left(\int_0^x p_2(x') dx' + \phi(E_2)\right) \simeq \\ &\simeq \frac{A_1 A_2^*}{4} \int_0^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{p_1(x) p_2(x)}} \left(\exp\left(i \int_0^x p_1(x') dx' - i \int_0^x p_2(x') dx'\right) + h.c. \right) \end{aligned} \quad (8)$$

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

$$t \cdot (E_1 - E_2) = \int_0^x (p_1(x') - p_2(x')) dx', \quad \frac{dt}{dx} = \frac{p_1(x) - p_2(x)}{E_1 - E_2}, \quad (9)$$

²Второе линейно независимое решение «отпадает», поскольку оно не удовлетворяет поставленному требованию экспоненциального затухания в запрещённой области

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle_{\text{sing}} \simeq \frac{A_1 A_2^*}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{E_1 - E_2}{p_1(x(t)) - p_2(x(t))} \frac{1}{\sqrt{p_1(x(t)) p_2(x(t))}} \exp(i(E_1 - E_2)t). \quad (10)$$

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 $E_1 \rightarrow E_2$, что даёт:

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

где $v = \partial E / \partial p = p/m$ — 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.

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 (7) 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:

$$S(E_n) = 2 \int_a^b p(x) dx = \oint p(x) dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (11)$$

Условие квазиклассичности в данном случае означает попросту критерий $n \gg 1$. Множитель $1/2$, связанный с полученное ранее фазой $-\pi/4$, хоть и представляет собой следующий порядок разложения по $1/n \ll 1$, тем не менее входит в границы применимости квазиклассики — следующие поправки имеют точность $O(1/n)$.

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: $\oint p(x) dx \equiv \iint dp dx$. В связи с этой формулой часто говорят, что фазовый объем, отвечающий одному состоянию, равен $2\pi\hbar$. В таком виде это утверждение обобщается и на произвольные размерности; имеет место квазиклассическое выражение для количества состояний с энергией, меньшей E :

$$N(E) = \int \frac{d^d x d^d p}{(2\pi\hbar)^d} \theta(E - H(p, x)), \quad (12)$$

где $H(p, x)$ — 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:

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \oint \frac{dx}{v} = \oint dt = T \Rightarrow E_{n+1} - E_n \approx \hbar \omega_n, \quad \omega_n = \frac{2\pi}{T}, \quad (13)$$

где T — период классических колебаний частицы с энергией E .

Связь с адиабатическим приближением

В классической механике, если параметры гамильтониана меняются достаточно медленно, имеется величина, которая сохраняется — так называемый **адиабатический инвариант** $I = \oint p(x) dx$. В квантовой же механике мы уже познакомились с адиабатической теоремой — при достаточно медленном изменении параметров гамильтониана, переходы между уровнями с различными n практически не происходят. Правило квантования Бора-Зоммерфельда устанавливает соответствие между этими двумя утверждениями.

Нормировка связанных состояний дискретного спектра

Рассмотрим произвольное состояние дискретного спектра, с классически разрешённой областью $a < x < b$. Экспоненциально затухающие «хвосты» дают малый вклад в нормировочный интеграл для состояний дискретного спектра $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$; в свою очередь, косинус в классически разрешённой области быстро осциллирует, поэтому его квадрат можно заменить на $1/2$. В результате нормировочный интеграл оказывается возможным выразить через период классической периодической траектории в этом потенциале $T = \oint \frac{mdx}{p(x)}$ (или через соответствующую частоту $\omega = \frac{2\pi}{T}$). В результате, правильно нормированные квазиклассические волновые функции дискретного спектра в классически разрешённой области устроены следующим образом:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2m\omega_n}{\pi p_n(x)}} \cos \left(\left| \int_a^x p_n(x') dx' \right| - \frac{\pi}{4} \right) \quad (14)$$

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 $\varphi = 2\pi\theta$):

$$[n, \varphi] = -i \quad (15)$$

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)³.

Туннелирование

Теперь можно обсудить также задачу рассеяния в квазиклассическом приближении. Если энергия $E > U(x)$ (так называемое надбарьерное рассеяния), то классических точек остановки нет вовсе, поэтому ведущее квазиклассическое приближение утверждает, что коэффициент отражения попросту равен нулю⁴. Разумеется, в классической механике в таком случае отражение тоже отсутствовало бы.

Мы же разберём обратный случай, когда имеется туннельный барьер конечной толщины, и имеются две классические точки остановки a и b , так что $E < U(x)$ при $a < x < b$; и мы будем искать квазиклассическую волновую функцию вида задачи рассеяния:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} (\exp(i \int_a^x p(x) dx) + r \exp(-i \int_a^x p(x) dx)), & x < a \\ \frac{t}{\sqrt{p}} \exp(i \int_b^x p(x) dx), & x > b \end{cases} \quad (16)$$

Аналогично задаче поиска связанного состояния, мы должны провести сшивки в окрестности двух точек остановки $x = a, b$, выразив амплитуды проходящей волны t и коэффициенты при экспоненциально растущем и затухающем решениях под барьером $C_{1,2}$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left(C_1 \exp \left(- \int_b^x |p(x)| dx \right) + C_2 \exp \left(\int_b^x |p(x)| dx \right) \right), \quad a < x < b \quad (17)$$

Для такой сшивки уже функции Эйри недостаточно — она не обладает интересующей нас асимптотикой, и нужно также учесть второе линейно-независимое решение $\text{Bi}(z)$. Несложно видеть, что линейная комбинация $\text{Ai}(z) + i\text{Bi}(z)$ соответствует именно нужной асимптотикой. Условие сшивки в точке $x = b$ даёт нам следующую связь:

$$C_1 = it, \quad C_2 = \frac{t}{2} \quad (18)$$

Это же решение можно переписать, если «действие» отсчитывать от точки a :

$$\psi(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left(C'_1 \exp \left(- \int_a^x |p(x)| dx \right) + C'_2 \exp \left(\int_a^x |p(x)| dx \right) \right), \quad (19)$$

$$C'_1 = \exp \left(\int_a^b |p(x)| dx \right) C_1, \quad C'_2 = \exp \left(- \int_a^b |p(x)| dx \right) C_2. \quad (20)$$

³Подобное соотношение можно получить и для многочастичных задач, в которых n обозначает число частиц в (под)системе. Ток частиц j можно найти из уравнения $j = \dot{n} = -\partial H / \partial \varphi$. Калибровочным преобразованием 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 электродинамики.

⁴Опять-таки, это переключается с адиабатическим приближением, где в ведущем приближении отсутствуют переходы. В действительности же, коэффициент отражения, разумеется, отличен от нуля, но оказывается экспоненциально мал.

Условие сшивки вблизи точки $x = a$ теперь говорит, что экспоненциально затухающее вглубь запрещённой области (C'_1) преобразится в функцию $\text{Ai}(z)$, а экспоненциально растущее — в $\text{Bi}(z)$. Однако, поскольку C'_1 экспоненциально больше C'_2 , то для этого условия сшивки достаточно оставить лишь затухающую экспоненту, и воспользоваться имеющимся уже условием сшивки при помощи функции Эйри (6). В результате мы получаем:

$$1 = C'_1 e^{-i\pi/4}, \quad r = C'_1 e^{i\pi/4} = e^{i\pi/2} \quad (21)$$

Отсюда мы получаем следующий важный результат — квазиклассический коэффициент прохождения:

$$T = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right) \quad (22)$$

Опять-таки, при наличии других граничных условий (например, если одна из точек поворота представляет собой скачок потенциала) предэкспоненциальный может поменяться, но экспоненциальный фактор (наиболее важный) является совершенно универсальным.

Список литературы

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