

# Семинар 13. Квазиклассическое приближение (часть 2)

Антоненко Даниил

9 декабря 2017 г.

## Трансфер-матрица

Как было выяснено на предыдущем семинаре, с точки зрения квазиклассики, в общем виде в классически разрешённой области волновая функция представляется в следующем виде:

$$\psi(x) = \frac{a}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(i \int^x p(x) dx\right) + \frac{b}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-i \int^x p(x) dx\right) \quad (1)$$

В свою очередь, в классически запрещённой области волновая функция представляется в виде:

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\int^x |p(x)| dx\right) + \frac{d}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\int^x |p(x)| dx\right) \quad (2)$$

Таким образом, в каждой области достаточно лишь задать два числа  $(a, b)$ , соответствующие волнам, бегущим направо и налево, или числа  $(c, d)$ , соответствующие затухающим и возрастающим экспонентам соответственно, чтобы задать волновую функцию в каждой из таких областей (нижний предел интегрирования для каждой области тоже должен быть зафиксирован). Области эти разделены *точками остановки*  $p(x) = 0$ , вблизи которых квазиклассическое приближение заведомо неприменимо; но вблизи часто оказывается возможным решить уравнение Шрёдингера точно, и при помощи этого точного решения «сплечь» квазиклассические решения (а именно — найти связь между коэффициентами  $(a, b)$  и  $(c, d)$ , которая, в силу линейности УШ задаётся матрицей  $2 \times 2$ ). Как правило, вблизи точки остановки потенциал аппроксимируется прямой  $U(x) = Fx$ ; благодаря чему уравнение Шрёдингера вблизи точки сводится к уравнению Эйри:

$$-\psi'' + z\psi = 0, \quad z = (2mF)^{1/3}x$$

Решения этого уравнения суть  $\text{Ai}(z)$  и  $\text{Bi}(z)$  с известными асимптотиками:

$$\text{Ai}(z) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z \rightarrow +\infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & z \rightarrow -\infty, \end{cases}, \quad \text{Bi}(z) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z \rightarrow +\infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z \rightarrow -\infty. \end{cases} \quad (3)$$

Можно заметить, что, например, функция  $\text{Bi}(z)$  соответствует (с точностью до константы, одинаковой слева и справа)  $c = 1$ ,  $d = 0$ ; а с другой стороны,  $\text{Bi}(z) \approx \frac{1}{2|z|^{1/4}}(e^{i\pi/4}e^{i\frac{2}{3}|z|^{3/2}} + e^{-i\pi/4}e^{-i\frac{2}{3}|z|^{3/2}})$ ; тем самым,  $a = \frac{1}{2}e^{-i\pi/4}$  и  $b = \frac{1}{2}e^{i\pi/4}$  (обратите внимание, что  $e^{i\frac{2}{3}|z|^{3/2}}$  соответствует  $e^{-i \int^x p(x) dx}$ , то есть волне, бегущей влево!). Аналогично,  $\text{Ai}(z) \approx \frac{1}{i|z|^{1/4}}(e^{i\frac{2}{3}|z|^{3/2} + i\frac{\pi}{4}} - e^{-i\frac{2}{3}|z|^{3/2} - i\frac{\pi}{4}})$ ; что соответствует  $c = 0$ ,  $d = 1$ ,  $a = e^{i\pi/4}$ ,  $b = e^{-i\pi/4}$ . Таким образом, можно записать  $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$  с матрицей

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-i\pi/4} & e^{i\pi/4} \\ \frac{1}{2}e^{i\pi/4} & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}, \quad \hat{A}^{-1} = \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & e^{-i\pi/4} \\ \frac{1}{2}e^{-i\pi/4} & \frac{1}{2}e^{i\pi/4} \end{pmatrix} \quad (4)$$

В таком виде, матрица  $\hat{A}$  в общем виде связывает коэффициенты при *растущей и затухающей* волной с коэффициентами при *падающей и отражённой* волнами (именно в таком порядке), и может быть обобщено и на обратный случай (когда запрещённая область — слева, а разрешённая — справа).

## Двухъямный потенциал<sup>1</sup>

Применим теперь наш матричный формализм к решению задачи о туннельном расщеплении уровня в квазиклассическом двухъямном потенциале. Если туннельный барьер достаточно высок, а вероятность проникновения через него — мала, то

<sup>1</sup>Иной способ решения этой задачи изложен в [ЛЛ, глава 7 «квазиклассический случай», §50 «прохождение через потенциальный барьер», задача 3]. Разумеется, приводит он к такому же ответу.

каждую из двух ям с хорошей точностью можно считать независимыми. Если при этом потенциал симметричный, то в каждой из двух ям имеется набор квазиклассических уровней энергии, даваемых правилом Бора-Зоммерфельда.

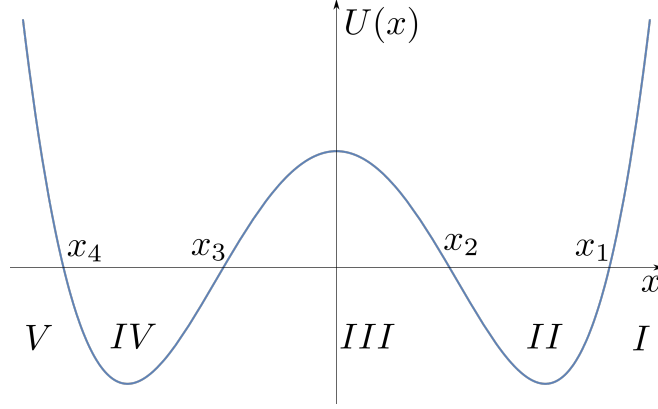


Рис. 1: Двухъямный потенциал

Однако, учёт возможности туннелирования — хоть и экспоненциально маленькое, но конечное перекрытие волновых функций в каждой из ям — приводит к гибридизации. Двукратно вырожденные уровни энергии слабо (в меру малости проходимости барьера) расщепляются на пары, соответствующие симметричным и анти-симметричным волновым функциям, которые с некоторой точностью являются простыми линейными комбинациями волновых функций в отдельных ямах,  $|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle)$  и  $|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle)$  ( $|\psi_{S,A}\rangle$  — симметричная и антисимметричная волновые функции, а  $|\psi_{L,R}\rangle$  — волновые функции, локализованные в левой и правой ямах соответственно). Такое расщепление называют *туннельным расщеплением*. Такую ситуацию мы уже рассматривали на примере двух мелких ям,  $U(x) = -U_0(\delta(x-a) + \delta(x+a))$ ; теперь же рассмотрим такую задачу в квазиклассическом приближении.

- Для связанных состояний, в области I должно остаться только затухающее решение,  $\psi(x) \sim e^{-\int_{x_1}^x |p|dx}$ ; это условие фиксирует пару коэффициентов, которые мы выберем в виде  $|\psi_I\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .
- Далее мы можем произвести сшивку в точке  $x_1$  при помощи матрицы  $\hat{A}$ ;  $\hat{A}|\psi_I\rangle$  при этом описывает коэффициенты вблизи точки  $x_1$  в разрешённой области.
- Это решение необходимо «протащить» до точки  $x_2$ , а именно:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &\sim \psi_{II}^{(1)} e^{i \int_{x_1}^x p(x)dx} + \psi_{II}^{(2)} e^{-i \int_{x_1}^x p(x)dx} = \psi_{II}^{(1)} e^{-i \int_{x_2}^{x_1} p(x)dx} e^{i \int_{x_2}^x p(x)dx} + \psi_{II}^{(2)} e^{-i \int_{x_2}^{x_1} p(x)dx} e^{-i \int_{x_2}^x p(x)dx} \equiv \\ &\equiv \psi_{II}'^{(1)} e^{i \int_{x_2}^x p(x)dx} + \psi_{II}'^{(2)} e^{-i \int_{x_2}^x p(x)dx} \end{aligned} \quad (5)$$

Тем самым, это производится при помощи диагональной «трансфер-матрицы»  $\hat{S}_{21} = \begin{pmatrix} e^{-iS_{21}} & 0 \\ 0 & e^{iS_{21}} \end{pmatrix}$ .

- В точке  $x_2$  необходимо произвести сшивку; однако, во-первых, теперь  $\psi_{II}'^{(1)}$  описывает отражённую волну, а  $\psi_{II}'^{(2)}$  — падающую. Поэтому, прежде чем «сшивать» при помощи обратной матрицы  $\hat{A}^{-1}$ , необходимо сперва поменять их местами, что производится при помощи матрицы Паули  $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ .
- Аналогично вышесказанному, теперь необходимо «протащить» решение в квазиклассически запрещённой области. Это делается при помощи соотношения:

$$\psi_{III}(x) \sim \psi_{III}^{(1)} e^{-\int_{x_2}^x |p(x)|dx} + \psi_{III}^{(2)} e^{\int_{x_2}^x |p(x)|dx} = \psi_{III}^{(1)} e^{\int_{x_3}^{x_2} |p(x)|dx} e^{-\int_{x_3}^x |p(x)|dx} + \psi_{III}^{(1)} e^{-\int_{x_3}^{x_2} |p(x)|dx} e^{\int_{x_3}^x |p(x)|dx} \quad (6)$$

(поскольку  $x < x_2$ , то именно  $\psi_{III}^{(1)}$  соответствует экспоненциально растущему решению) и тем самым, это производится при помощи опять же диагональной матрицы  $\hat{S}_{32} = \begin{pmatrix} e^{S_{32}} & 0 \\ 0 & e^{-S_{32}} \end{pmatrix}$

- Поскольку та волновая функция, что вблизи точки  $x_2$  соответствовала экспоненциальному росту, вблизи точки  $x_3$  соответствует затуханию (и наоборот), то их опять нужно поменять местами при помощи матрицы  $\hat{\sigma}_x$ .

Продолжая эту процедуру, мы приходим к выводу, что при  $x < x_4$ , волновая функция следующая:

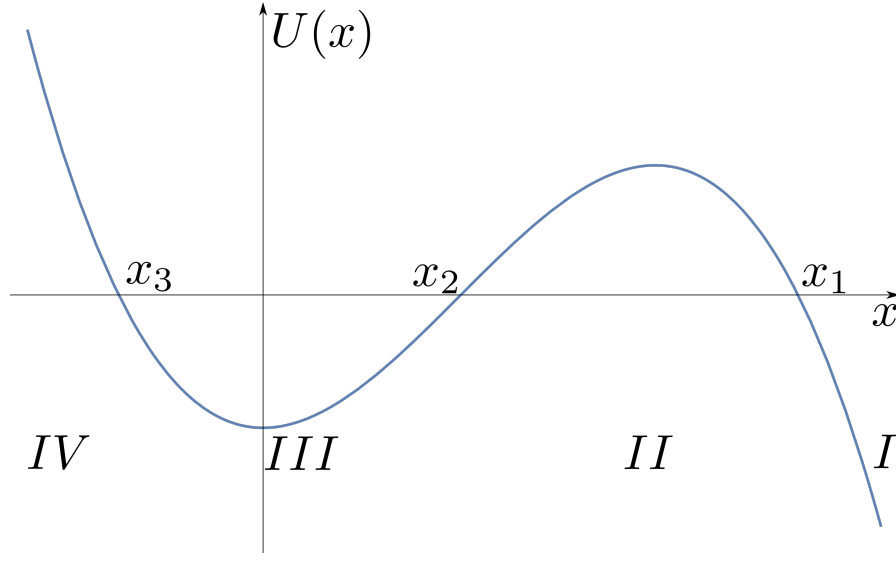


Рис. 2: Квазистационарное состояние

$$|\psi_V\rangle = \underbrace{\hat{A}^{-1}\hat{\sigma}_x}_{x_4} \underbrace{\hat{S}_{43}}_{IV} \underbrace{\hat{A}\hat{\sigma}_x}_{x_3} \underbrace{\hat{S}_{32}}_{III} \underbrace{\hat{A}^{-1}\hat{\sigma}_x}_{x_2} \underbrace{\hat{S}_{21}}_{II} \underbrace{\hat{A}}_{x_1} |\psi_I\rangle$$

Для связанного состояния, коэффициент при возрастающей экспоненте у  $|\psi_V\rangle$  должен быть равен нулю, то есть  $|\psi_V\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_V \end{pmatrix}$ . Поскольку все квазиклассические действия являются функциями энергии, то это условие — трансцендентное уравнение, определяющее уровни энергии данной задачи. Производя необходимое перемножение, мы получаем следующее условие (тут учтено, что ямы одинаковы, поэтому  $S_{43} = S_{21} \equiv S_0$  и  $S_{32} = S_T$  — «туннельное» действие):

$$4e^{2S_T-2iS_0} + 4e^{2S_T+2iS_0} + e^{-2iS_0} + e^{2iS_0} + 8e^{2S_T} - 2 = 0, \quad (7)$$

которое после нехитрых преобразований приводится к виду:

$$4e^{2S_T} \cos^2 S_0 - \sin^2 S_0 = 0 \Rightarrow \cot(S_0(E)) = \pm \frac{1}{2} e^{-S_T(E)} \quad (8)$$

В рамках квазиклассического приближения,  $S_T \gg 1$ , поэтому справа стоит малая величина. В ведущем приближении, уровни энергии тем самым определяются условием  $S_0(E_n^{(0)}) = \pi(n + \frac{1}{2})$  — что тождественно совпадает с правилом Бора-Зоммерфельда в каждой отдельной яме (в полном согласии с тем, что было сказано в начале параграфа). Чтобы учесть вклад правой части, необходимо разложиться:

$$\cot(S_0(E_n^{(0)} + \delta E_n)) \approx \cot\left(S_0 + \frac{\partial S_0}{\partial E} \delta E_n\right) \approx -\frac{\partial S_0}{\partial E} \delta E_n \quad (9)$$

Поскольку  $S_0(E) = \int_{x_2}^{x_1} p_E(x) dx$ , то  $\frac{\partial S_0}{\partial E} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{\partial E / \partial p} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{v} = \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\omega}$  (где  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  — период классического периодического движения в каждой из ям на уровне энергии  $E$ ). Тем самым, мы получаем окончательный ответ (тут восстановлен  $\hbar$  по размерности):

$$\delta E_n = \pm \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p_E(x)| dx} \quad (10)$$

Важно отметить, что интегрирование тут происходит между квазиклассическими точками остановки (а не, например, между минимумами ям)! Расщепление действительно оказалось экспоненциально маленьким (сравните с задачей о двух мелких ямах). Кроме того, стоит отметить, что данный ответ, вообще говоря, был получен только для высоких по энергии уровней, то есть  $n \gg 1$ ; однако, даже для основного состояния  $n = 0$  он даёт правильную экспоненциальную зависимость, и правильную параметрическую зависимость предэкспоненты. Неправильным оказывается лишь число в предэкспоненте, которое требует гораздо более нетривиальных вычислений.

## Распад метастабильного состояния

О метастабильных состояниях имелаась задача в семинаре 4 «Непрерывный спектр». Тем не менее, мы изложим тут основные свойства метастабильных состояний. Пусть имеется яма, отделённая туннельным барьером. В такой задаче,

вообще говоря, не имеется дискретного спектра, а движение является инфинитным — всякая частица рано или поздно «уйдёт» на бесконечность. Однако, из физических соображений понятно, что если барьер достаточно высок, туннельная проницаемость его мала, а частица была «посажена» в эту яму в состоянии, близкие к собственным для данной ямы, то частица будет оставаться в яме достаточно продолжительное время, и в течении этого времени волновая функция будет вести себя практически как стационарная. Такие состояния называют **квазистационарными**, или **метастабильными**.

Как правило, уход частицы из такой ямы определяется экспоненциальным законом,  $P(t) = |\psi(t)|^2 \sim e^{-\Gamma t}$ , с некоторой малой величиной  $\Gamma$ . Оказывается возможным утверждать, что часть волновой функции, отвечающая яме, с некоторой точностью эволюционирует согласно  $\psi(t) \sim e^{-iEt - \Gamma t/2}$ , что позволяет интерпретировать обратное время жизни квазистационарного уровня  $\Gamma = \tau^{-1}$  как комплексную добавку к энергии:  $E - i\frac{\Gamma}{2}$  (обратите внимание, что знак этой мнимой добавки важен!). Величину  $\Gamma$  также часто называют **шириной уровня**<sup>2</sup>.

Искать метастабильные состояния можно по-разному. Наиболее прямолинейным способом является решение нестационарного уравнения Шрёдингера, используя разложение по непрерывному спектру, и явный поиск этой самой вероятности (о чём и имеется соответствующая задача). Однако это может оказаться достаточно трудоёмкой задачей, и имеется более простой способ. Дело в том, что квазистационарным состояниям, как правило, соответствуют решения *стационарного* уравнения Шрёдингера, с асимптотикой волновой функции, соответствующей только вылетающим из ямы частицам. Такое решение очевидным образом нарушает унитарность эволюции, поэтому может существовать только с комплексной энергией, и оно ненормируемо (на одной из бесконечностей оно будет экспоненциально расходиться). Это решение как раз отвечает метастабильному состоянию; а мнимая часть энергии — ширине уровня.

## Квазиклассическое приближение

Рассмотрим с точки зрения квазиклассического приближения метастабильные состояния в исследуемой яме. Используя полностью аналогичные предыдущей задаче шпивки, мы можем написать следующее соотношение:

$$|\psi_{IV}\rangle = \underbrace{\hat{A}^{-1}\hat{\sigma}_x}_{x_3} \underbrace{\hat{S}_{32}}_{III} \underbrace{\hat{A}\hat{\sigma}_x}_{x_2} \underbrace{\hat{S}_{21}}_{II} \underbrace{\hat{A}^{-1}}_{x_1} |\psi_I\rangle \quad (11)$$

При этом  $\hat{S}_{21} = \begin{pmatrix} e^{S_{21}} & 0 \\ 0 & e^{-S_{21}} \end{pmatrix}$ ,  $\hat{S}_{32} = \begin{pmatrix} e^{-iS_{32}} & 0 \\ 0 & e^{iS_{32}} \end{pmatrix}$ ; в области I имеется только выходящая волна  $|\psi_I\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , а в области IV — только затухающая,  $|\psi_{IV}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{IV} \end{pmatrix}$ . Этих условий опять же оказывается достаточно, чтобы написать следующее условие на квазистационарный уровень (тут опять  $S_{32} \equiv S_0$  — квазиклассическое действие в разрешённой зоне, а  $S_{21} \equiv S_T$  — «туннельное» действие):

$$4e^{2S_T + 2iS_0} - e^{2iS_0} + 4e^{2S_T} + 1 = 0 \Rightarrow \cot(S_0(E)) = \frac{i}{4}e^{-2S_T(E)} \quad (12)$$

(где аналогично  $S_T \equiv S_{21}$  — «туннельное» действие, а  $S_0 \equiv S_{32}$ ). Как и раньше, в ведущем приближении  $S_0(E_n^{(0)}) = \pi(n + \frac{1}{2})$  отвечало ведущему приближению — правилу Бора-Зоммерфельда; а при разложении, мы получаем  $E_n = E_n^{(0)} - i\frac{\Gamma_n}{2}$ , причём:

$$\Gamma_n = \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p_E(x)| dx} \quad (13)$$

Обратим внимание, что время жизни такого уровня даётся  $\tau = \Gamma^{-1} \equiv D^{-1}T$ , где  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  — период классического движения, а  $D = \exp(-2 \int |p(x)| dx)$  — туннельная проницаемость потенциального барьера. Таким образом, полученный результат имеет сугубо классическую интерпретацию: в яме колеблется классическая частица, и каждый раз отражаясь от точки поворота, она может протуннелировать с конечной вероятностью  $D$ . При этом среднее число соударений со стенкой будет равно  $D^{-1}$ , а время жизни —  $D^{-1}T$ .

## Список литературы

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

<sup>2</sup>Это связано в первую очередь с туннельной плотностью состояний. Для отдельного уровня, плотность состояний устроена как  $\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - E_0 + i0} = \delta(E - E_0)$ ; в свою очередь, для квазистационарного состояния она устроена как  $\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}} = \frac{1}{\pi} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$ , то есть уровень действительно оказывается уширенным.