

Семинар 11. Квазиклассическое приближение

17 ноября 2018 года

Квазиклассические волновые функции

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 WKБ (Wentzel, Kramers, Brillouin) — сводится к следующей процедуре. В одномерное уравнение Шрёдингера делается подстановка $\psi(x) = e^{\pm iS(x)/\hbar}$; и дальше методом последовательных приближений строится формальный асимптотический ряд для «действия» $S(x)$ по степеням \hbar .

В ведущем порядке для действия мы получаем уравнение, известное из механики — уравнение Гамильтона-Якоби¹:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U(x) = E \Rightarrow S(x) = \int_{x_0}^x p(x) dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (1)$$

Решения этого уравнения буквально соответствуют классическому действию как функции координат. Однако, несложно заметить, что волновые функции в ведущем приближении «плохие» — они нарушают унитарность. Действительно, если вычислить поток на такой волновой функции, мы получим $j(x) = \hbar p(x)/m$ — а в стационарных состояниях этот поток обязан не зависеть от координат. Поэтому необходим учёт следующего порядка, который восстанавливает унитарность. Тем самым, общий вид волновой функции в квазиклассическом приближении имеет вид (тут и далее мы положили $\hbar = 1$):

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{e^{\pm i \int_{x_0}^x p(x) dx}}{\sqrt{p(x)}}, \quad \psi(x) = c_+ \psi_+(x) + c_- \psi_-(x) \quad (2)$$

Квазиклассически запрещённая область Буквально написанное выше относилось к классически разрешённой области — $U(x) \leq E$. Однако, покуда критерии применимости квазиклассического приближения выполнены, его можно также применять и к запрещённой области $U(x) > E$ — в них импульс становится мнимым, а решения — экспоненциально растущими или затухающими:

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{c_{\pm}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \int_{x_0}^x |p(x)| dx}, \quad |p(x)| = \sqrt{2m(U(x) - E)} \quad (3)$$

Критерии применимости Формальная процедура разложения по степеням \hbar говорит нам, что квазиклассическое приближение применимо при $\hbar \rightarrow 0$. Однако \hbar является размерным параметром и сама по себе не может выступать в роли малого параметра. Если аккуратно проследить за выводом, то правильным критерием оказывается *плавность потенциала*:

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| \ll p^2 \Leftrightarrow \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \Leftrightarrow m \left| \frac{\partial U / \partial x}{p^3} \right| \ll 1. \quad (4)$$

Этот критерий означает, что характерный масштаб изменения потенциала должен быть меньше (локальной) длины волны де Бройля.

В частности это означает, что квазиклассика, как правило, применима на больших энергиях; а также, что немаловажно, она нарушается вблизи квазиклассических точек остановки, в которых квазиклассический импульс обращается в ноль, а длина волны — в бесконечность.

Задача сшивки

В одномерии, квазиклассические точки остановки нарушают связность задачи. Мы приходим к следующей картинке — вещественная ось разделяется квазиклассическими точками остановки на несколько областей, в каждой из которых волновые функции имеют вид (2) или (3), причём в каждой — со своими коэффициентами. С другой стороны, между

¹Это утверждение относится к пространству произвольной размерности

этимися коэффициентами, в силу линейности уравнения Шрёдингера, должна существовать линейная связь. Нахождение этой линейной связи и составляет задачу шивки.

Задача шивки существенно зависит от явного вида области, где нарушается квазиклассическое приближение. Простейший случай, который мы разберём — это случай, когда потенциал в окрестности точки останова $x = x_0$ можно аппроксимировать линейным² $U(x) = F(x - x_0)$. Основная идея метода заключается в следующем. С одной стороны, на достаточном отдалении от точки останова (а именно, $|x - x_0| \gg (mF)^{-1/3}$) квазиклассическое приближение начинает работать. С другой стороны, в линейном потенциале имеется точное решение — функции Эйри. Поэтому, покуда линейное приближение работает ($|x - x_0| \ll a$, где a — масштаб изменения потенциала), мы знаем вид волновых функций. Если эти области перекрываются (что означает $a \gg (mF)^{-1/3}$), имеется промежуточная область, где работает как квазиклассическое приближение, так и аппроксимация с помощью функций Эйри. «Подшивая» асимптотики в этой промежуточной области слева и справа от точки останова, мы найдём искомую линейную связь.

Квазиклассические решения Обезразмерим координату³ $z = (2mF)^{1/3}(x - x_0) \Rightarrow p(z) = \sqrt{-z}$. В квазиклассически разрешённой области, имеем:

$$x < x_0 \Rightarrow z < 0: \quad p(z) = \sqrt{-z}, \quad S(z) = \int_0^z p(z)dz = -\frac{2}{3}(-z)^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{(-z)^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}i(-z)^{3/2}\right) \quad (5)$$

С другой стороны точки останова мы получаем:

$$x > x_0 \Rightarrow z > 0, \quad |p(z)| = \sqrt{z}, \quad \tilde{S}(z) = \int_0^z |p(z)|dz = \frac{2}{3}z^{3/2} \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}z^{3/2}\right) \quad (6)$$

Точные решения С другой стороны, аналогично обезразмеренное уравнение Шрёдингера в линейном потенциале и его решение имеет вид:

$$-\psi''(z) + z\psi(z) = 0 \Rightarrow \psi(z) = C_1 \text{Ai}(z) + C_2 \text{Bi}(z) \quad (7)$$

$$\text{Ai}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & z < 0. \end{cases}, \quad \text{Bi}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z > 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z < 0 \end{cases} \quad (8)$$

Мы сразу получаем, эти решения соответствуют следующим линейным комбинациям квазиклассических решений (2) и (3):

$$\psi(z) = 2\sqrt{\pi} \text{Ai}(z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ = 0 \\ c_{\text{right}}^- = 1 \\ c_{\text{left}}^+ = e^{i\pi/4} \\ c_{\text{left}}^- = e^{-i\pi/4} \end{cases}, \quad \psi(z) = \sqrt{\pi} \text{Bi}(z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ = 1 \\ c_{\text{right}}^- = 0 \\ c_{\text{left}}^+ = \frac{e^{-i\pi/4}}{2} \\ c_{\text{left}}^- = \frac{e^{i\pi/4}}{2} \end{cases} \quad (9)$$

из чего мы заключаем о следующей линейной связи на коэффициенты:

$$\begin{pmatrix} c_{\text{left}}^+ \\ c_{\text{left}}^- \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} c_{\text{right}}^+ \\ c_{\text{right}}^- \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4}/2 & e^{i\pi/4} \\ e^{i\pi/4}/2 & e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Второй случай Аналогичным образом можно рассмотреть зеркально симметричный случай $U(x) = -F(x - x_0)$, когда разрешённая и запрещённая область меняются местами. В таком случае решения ψ_{\pm} устроены следующим образом:

$$x > x_0 \Rightarrow z > 0, \quad p(z) = \sqrt{z}, \quad S(z) = \int_0^z p(z)dz = \frac{2}{3}z^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}iz^{3/2}\right), \quad z > 0 \quad (11)$$

$$x < x_0 \Rightarrow z < 0, \quad |p(z)| = \sqrt{-z}, \quad \tilde{S}(z) = \int_0^z |p(z)|dz = -\frac{2}{3}(-z)^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{(-z)^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}(-z)^{3/2}\right) \quad (12)$$

Ситуация зеркальная, поэтому решения даются $\text{Ai}(-z)$ и $\text{Bi}(-z)$; они раскладываются по квазиклассическим функциям следующим образом:

²Это, разумеется, не всегда так. Наиболее важные примеры, когда это не так:

- Имеются две параметрически близкие точки останова (например, основное состояние гармонического осциллятора)
- Потенциал имеет сингулярность (например, трёхмерный «центробежный потенциал» $U(r) = \frac{l(l+1)}{2mr^2}$ или Кулоновский потенциал $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ в начале координат)

³Импульс тоже необходимо обезразмерить так, чтобы действие осталось инвариантным $p(x)dx = p(z)dz$

$$\text{Ai}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & z < 0. \end{cases}, \quad \text{Bi}(|z| \gg 1) \approx \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z > 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z < 0 \end{cases} \quad (13)$$

$$\psi(z) = 2\sqrt{\pi}\text{Ai}(-z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ = 1 \\ c_{\text{right}}^- = 0 \\ c_{\text{left}}^+ = e^{-i\pi/4} \\ c_{\text{left}}^- = e^{i\pi/4} \end{cases}, \quad \psi(z) = \sqrt{\pi}\text{Bi}(z) \Rightarrow \begin{cases} c_{\text{right}}^+ = 0 \\ c_{\text{right}}^- = 1 \\ c_{\text{left}}^+ = \frac{e^{i\pi/4}}{2} \\ c_{\text{left}}^- = \frac{e^{-i\pi/4}}{2} \end{cases} \quad (14)$$

$$\begin{pmatrix} c_{\text{left}}^+ \\ c_{\text{left}}^- \end{pmatrix} = \hat{B} \begin{pmatrix} c_{\text{right}}^+ \\ c_{\text{right}}^- \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} & e^{i\pi/4}/2 \\ e^{i\pi/4} & e^{-i\pi/4}/2 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{i\pi/4} & \frac{1}{2}e^{-i\pi/4} \\ e^{-i\pi/4} & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \hat{A}^\dagger \quad (15)$$

Правило квантования Бора-Зоммерфельда

Рассмотрим простейший пример квантовой ямы с двумя точками остановки, и обсудим связанные состояния в таком потенциале.

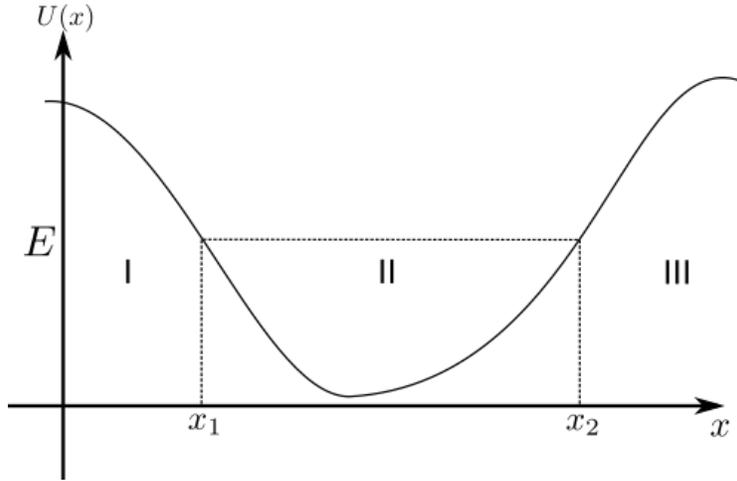


Рис. 1: Схематическое изображение потенциала для задачи о связанных состояниях

Имеется небольшой нюанс. Правила шивки были выведены для случая, когда действие в формулах (2) и (3) было записано от точки остановки. Тем самым, в области II нам будет необходимо записать волновую функцию в виде интеграла как от левой точки остановки, так и от правой, и соответствующие коэффициенты c_{\pm} будут связаны тривиальной трансфер-матрицей:

$$\vec{c}_{II} \simeq \vec{c}_{II} e^{i \int_{x_2}^x p(x) dx} + \vec{c}_{II} e^{-i \int_{x_2}^x p(x) dx} \equiv \vec{c}_{II} e^{-iS} e^{i \int_{x_1}^x p(x) dx} + \vec{c}_{II} e^{iS} e^{-i \int_{x_1}^x p(x) dx}, \quad S = \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \quad (16)$$

$$\overleftarrow{c}_{II} = \hat{S}_{12} \vec{c}_{II} = \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix} \vec{c}_{II} \quad (17)$$

В области III, волновая функция должна экспоненциально затухать; поэтому мы накладываем граничное условие $c_{III} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Сшивая в окрестности точки остановки x_2 , мы понимаем, что в области II, волновая функция устроена как $\vec{c}_{II} = \hat{A} c_{III}$. Наконец, используя шивку в окрестности точки остановки $x = x_1$, мы получаем:

$$c_I = \hat{A}^\dagger \overleftarrow{c}_{II} = \hat{A}^\dagger \hat{S}_{12} \hat{A} c_{III} = \begin{pmatrix} \sin S \\ 2 \cos S \end{pmatrix} \quad (18)$$

Для связанного состояния, волновая функция в области I также экспоненциально затухает, поэтому $c_I^- = 0 \Rightarrow \cos S = 0$. Таким образом, уровни энергии определяются из следующего выражения, которое носит название **правила квантования Бора-Зоммерфельда**:

$$\boxed{\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad (19)$$

Обсудим дополнительно несколько его свойств.

- Его можно применять только для высоковозбуждённых уровней $n \gg 1$.
- Член $1/2$, хоть и мал по сравнению с n — но тем не менее законен; следующие члены разложения будут начинаться с $O(1/n)$. Кроме того, если проследить внимательно, этот член возник из различных фаз, которые были в задаче сшивки; этот член будет другим для других типов точек останковки. Поэтому часто записывают правило квантования в виде $\pi\hbar(n + \gamma)$ в правой части.
- Номер n тут в точности равен числу нулей квазиклассической волновой функции (которые могут быть только в разрешённой области), то есть полученная волновая функция описывает n -тое возбуждённое состояние.
- Для квантового гармонического осциллятора, правило квантования воспроизводит точный ответ $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.
- Его можно переписать в следующем виде:

$$\oint p(x)dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (20)$$

что означает, что номер уровня связан с классическим адиабатическим инвариантом. В частности, сохранения адиабатического инварианта в классической механике и адиабатическая теорема в квантовой механике оказываются связаны посредством этой формулы.

- Об этой формуле можно думать так — если взять классическое фазовое пространство (p, x) , рассмотреть в ней поверхность постоянной энергии $E = H(p, x)$, то число состояний внутри этой поверхности будет даваться следующей формулой

$$N(E) = \iint \frac{d^d p d^d x}{(2\pi\hbar)^d} \theta(E - H(p, x)) \quad (21)$$

и эта формула обобщается на пространство произвольной размерности. В частности, говорят, что на одно квантовое состояние приходится ячейка $(2\pi\hbar)^d$ фазового пространства.

- Разницу между соседними уровнями энергии можно получить, разложив эту формулу по $\Delta E \equiv E_{n+1} - E_n$:

$$2\pi\hbar = \Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \Delta E \oint \frac{dx}{v} = \Delta E \cdot T \Rightarrow \Delta E = \frac{2\pi\hbar}{T} = \hbar\omega \quad (22)$$

где T — классический период движения, а $\omega = \frac{2\pi}{T}$ — его частота.

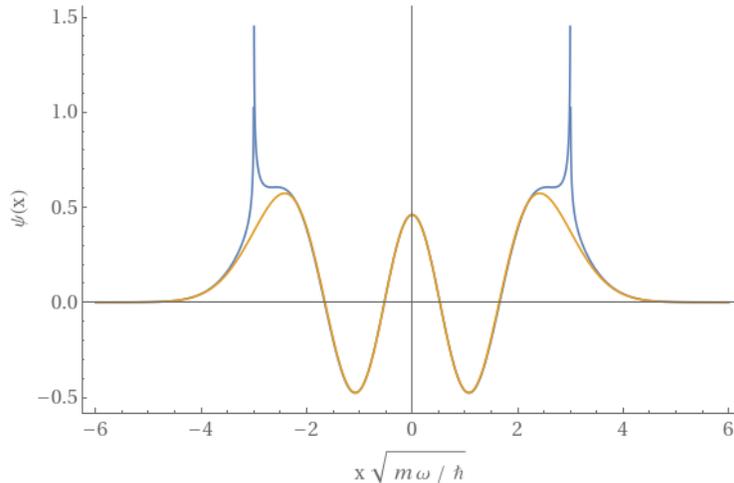


Рис. 2: Точная осцилляторная волновая функция и её квазиклассическое приближение для $n = 3$. Заметное отличие наблюдается только вблизи точек останковки.

Вероятность квазиклассического туннелирования

Рассмотрим другое применение приведённого формализма для задачи рассеяния.

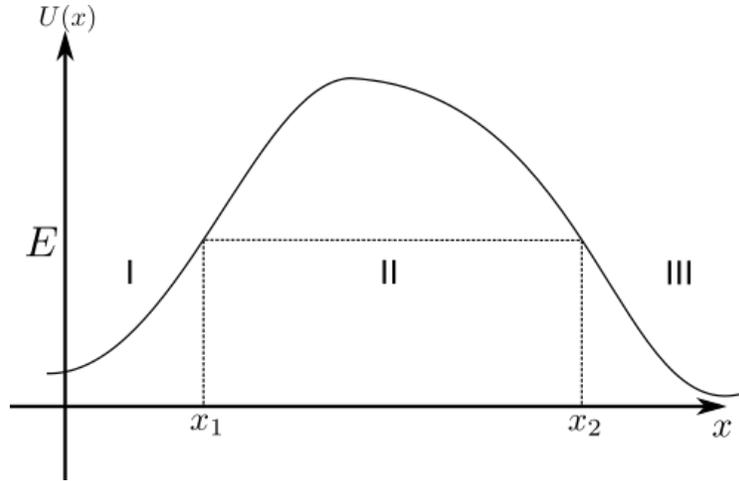


Рис. 3: Схематическое изображения потенциала для задачи о связанных состояниях

Трансфер-матрица в запрещённой области будет устроена следующим образом:

$$\psi(x) = \vec{c}_{II}^+ e^{\int_{x_2}^x |p(x)| dx} + \vec{c}_{II}^- e^{-\int_{x_2}^x |p(x)| dx} \equiv \vec{c}_{II}^+ e^{-S} e^{\int_{x_1}^x |p(x)| dx} + \vec{c}_{II}^- e^S e^{-\int_{x_1}^x |p(x)| dx}, \quad S = \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx \quad (23)$$

$$\overleftarrow{c}_{II} = \hat{S}_{12} \vec{c}_{II} = \begin{pmatrix} e^{-S} & 0 \\ 0 & e^S \end{pmatrix} \vec{c}_{II} \quad (24)$$

Для задачи рассеяния, мы фиксируем асимптотику в области III как $c_{III} = \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}$, а в области I — как $c_I = \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$; и между ними имеется следующая связь:

$$c_I = \hat{A} \hat{S}_{12} \hat{A}^\dagger c_{III} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-S}}{4} + e^S \\ (\frac{1}{4} i e^{-S} - i e^S) \end{pmatrix} t \Rightarrow \begin{cases} t \approx e^{-S} \\ r \approx -i \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} T \approx e^{-2S} \\ R \approx 1 \end{cases} \quad (25)$$

Эта формула носит название **формулы Гамова**. Разумеется, в классической физике коэффициент отражения был бы строго равен единице, а прохождения — нулю. Квантовая механика же допускает возможность туннелирования, просто вероятность туннелирования оказывается экспоненциально малой. Обсудим несколько свойств выведенной формулы:

- Естественно, что данное приближение применимо только при $S \gg 1$.
- Наивное квазиклассическое приближение утверждает, что при надбарьерном рассеянии $E > \max U(x)$, коэффициент отражения строго равен нулю. Из точных решений для некоторых потенциалов мы знаем, что в действительности это не так — коэффициент отражения просто оказывается экспоненциально мал. Решение этой задачи мы рассмотрим в будущем.
- При наличии других граничных условий (например, если одна из точек поворота представляет собой скачок потенциала) предэкспонента может поменяться, но экспоненциальный фактор (наиболее важный) является совершенно универсальным.