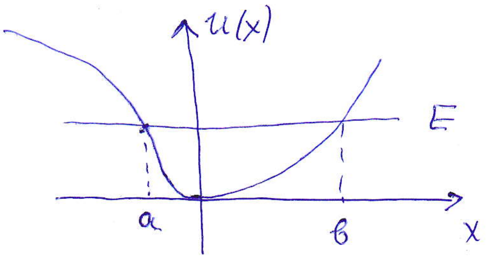
Лекция 13

Квазиклассический метод



В классической механике

$$\frac{p^2}{2m} + U(x) = E \Rightarrow p(x) = \pm\sqrt{2m(E-U(x))}$$

(+) – движение от $a \to b$
(−) – движение от $b \to a$

$p(a) = p(b) = 0$ – классические точки разворота

$p = m\dfrac{dx}{dt}$ $\qquad dt = m\dfrac{dx}{p(x)}$ $\Rightarrow$ время движения классической частицы от $x=a \to x=b$, оно же — половина периода классического движения T_0

$\Rightarrow t - t_0 = \displaystyle\int_{x_0}^{x} \frac{m\,dx}{p(x)}$ – определяет траекторию $x(t)$

$$\frac{T_0}{2} = \int_a^b dx\,\frac{m}{p(x)} = \int_a^b dx\sqrt{\frac{m}{2(E-U(x))}} = \int_a^b \frac{dx}{v(x)}; \quad v(x) = \frac{p(x)}{m}$$

"локальная" скорость.

В квантовой механике $\qquad \psi(x)$ – волновая функция

стационарное У.Ш.: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi$ или $\psi'' + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))\psi = 0$

Если $U(x)=0$ $\qquad \psi(x) = Ae^{i\frac{px}{\hbar}}$ $\qquad$ где $p = \sqrt{2mE}$

— волна де-Бройля с $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{p}$

Идея метода — решение в потенциале $U(x)$ выглядит как волна де-Бройля с "локальным" импульсом

$$p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))} \Leftrightarrow \psi(x) \sim e^{i\frac{p(x)x}{\hbar}}$$ и

с "локальной" длиной волны $\lambda(x) = \dfrac{2\pi\hbar}{p(x)}$

Такой подход может работать если понятие "локальной" длины волны осмысленно: $\lambda(x+\Delta x) \simeq \lambda(x) + \Delta x\dfrac{d\lambda}{dx}$

$$\Delta\lambda(\Delta x) \equiv \lambda(x+\Delta x) - \lambda(x) = \Delta x\frac{d\lambda}{dx}$$

Если $\left|\Delta\lambda\,(\Delta x \simeq \lambda)\right| = \lambda\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll \lambda \Rightarrow \left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1$

$$\left|\frac{d\lambda(x)}{dx}\right| = \frac{2\pi\hbar}{p^2(x)}\left|\frac{dp(x)}{dx}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{при } \hbar \to 0.$$

в классическом пределе.

Термин "квазиклассика" — как будет видно далее, квазиклас. метод позволяет описать количеств. также многие квантовые явления.

Это были наводящие соображения, теперь вернемся к стационарному У.Ш.

Представим волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{i\frac{\sigma(x)}{\hbar}} \Rightarrow \psi'(x) = \frac{i}{\hbar}\sigma' e^{i\frac{\sigma}{\hbar}}$$

$$\psi''(x) = \left(-\frac{\sigma'^2}{\hbar^2} + \frac{i\sigma''}{\hbar}\right)e^{i\frac{\sigma}{\hbar}}$$

Уравнение на $\sigma(x)$

$$\Rightarrow \frac{\sigma'^2}{2m} - \frac{i\hbar\sigma''}{2m} = E - U(x)$$

Нам нужен классический предел, $\hbar \to 0$, поэтому представим

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \ldots$$

$\Rightarrow$ члены $\sim \left(\hbar\right)^0$ $\quad \frac{\sigma_0'^2}{2m} = E - U(x)$

члены $\sim \left(\hbar\right)^1$ $\quad \sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'}$

малость второго члена в левой части по сравнению с первым дает

$$\left|\frac{\sigma''\cdot\hbar}{\sigma'^2}\right| = \left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{\sigma}\right| \ll 1$$

$$\sigma_0' = \pm p(x) \qquad \text{где} \qquad p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}$$

Условие применимости квазиклас. подхода

$$\left|\frac{d}{dx}\frac{\hbar}{\sigma_0'(x)}\right| = \left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| \ll 1 \qquad \text{или} \qquad \boxed{\left|\frac{d\bar{\lambda}}{dx}\right| \ll 1}$$

где $\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{\hbar}{p}$ – совпало (с точностью до 2π) с нашими сообр. в начале стр. 2.

члены $\sim (\hbar)^1$

$$\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = -\frac{p'}{2p} \Rightarrow d\sigma_1 = -\frac{dp}{2p} \Rightarrow \sigma_1 = -\frac{1}{2}\ln p$$

В классически доступной области

$$\Rightarrow \psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right\} + \frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right\}$$

↑ $p \equiv p(x) = \sqrt{2m(E-U(x))}$; ↑ $\psi(x)$ на интервале $x \in [a, b]$

Фактор $\frac{1}{\sqrt{p}}$ при $\psi(x)$ имеет, на самом деле, классическое истолкование.

$$dx\,|\psi(x)|^2 \sim \frac{dx}{v(x)} = dt$$

← время, за которое классическая частица проходит интервал dx.

В классически недоступной области, $E < U(x)$ и

$$p(x) = \cancel{i(-p(x))}\; i|p| \qquad \text{где} \qquad |p| \equiv \sqrt{2m(U(x)-E)}$$

для $x < a$ или $x > b$

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\,dx\right\} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\,dx\right\}$$

Отметим, что квазиклас. результаты не применимы в окрестн. точек поворота $x=a$ и $x=b$.

(4)

$$\frac{d\lambda}{dx} = -\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx} = \frac{m\hbar}{p^3}\frac{dU(x)}{dx} = -\frac{\hbar m F}{p^3}$$ где $F = -\frac{dU}{dx}$ – сила

Условие $\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| = \frac{\hbar m |F|}{p^3} \ll 1$ не выполнено в точках поворота $x=a$ и $x=b$, поскольку $F \neq 0$ а $p \to 0$ в этих точках

Нужно установить соответствие между квазиклассическими результатами для $\Psi(x)$ в классически доступных и классически недоступных областях. Для этого

① В окрестности точки $x=a$, $E = U(a)$

$$U(x) = U(a) + (x-a)\frac{dU(a)}{dx} + \ldots \approx U(a) - F(x-a)$$

ограничимся первыми двумя членами разложения $U(x)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' - F(x-a)\Psi = 0$$ – У.Ш. в координатном представлении

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{u}\right)|\Psi\rangle = 0$$

$u \equiv x-a$ – будем отсчитывать коорд. от точки $x=a$.

В импульсном представлении

$\hat{p} = p$, $\hat{u} = i\hbar\frac{d}{dp}$,

уравнение, описывающ. физическое решение, учитывающ. в класс. запрещ. области

$$\Rightarrow \frac{p^2}{2m}\Psi_p - i\hbar F\frac{d\Psi_p}{dp} = 0$$

Ψ_p – волновая функция в импульсн. представл.

$$\Rightarrow \frac{d\Psi_p}{\Psi_p} = -\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2mF}dp \Rightarrow \Psi_p = A\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^3}{6mF}\right\}$$

$$\Psi(u) = \int\frac{dp}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i\frac{pu}{\hbar}}\Psi_p \overset{p=\hbar k}{\sim} \int dk\,\exp\left\{i\left(ku - \frac{\hbar^2 k^3}{6mF}\right)\right\}$$ ← точное решение в однородном поле

$\underline{\underline{ku = \xi}}$; $\xi_0 \equiv \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}u$

$$\frac{1}{u}\int d\xi\,\exp\left\{i\left(\xi - \frac{\xi^3}{3\xi_0^3}\right)\right\}$$

В однородном поле $p = \sqrt{2mFu} = \sqrt{2mF(x-a)}$

Условие примен. квазиклассики

$$\left|\frac{d\lambdabar}{dx}\right| = \frac{\hbar m|F|}{p^3} \ll 1 \quad \rightarrow \quad \left|\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3} u\right| = |\xi_0| \gg 1$$

Вычисляя интеграл при $|\xi_0| \to \infty$ методом перевала находим

$$\frac{1}{u}\int d\xi\, e^{i\left(\xi - \frac{\xi^3}{3\xi_0^3}\right)}$$

классически доступная область, $\xi_0 \gg 1$, $u > 0$.

$$\frac{2\sqrt{\pi}\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/4}}{(u)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}\, u^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

классически недоступная область, $-\xi_0 \gg 1$, $u < 0$

$$\frac{\sqrt{\pi}\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/4}}{(|u|)^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}\, |u|^{3/2}\right)$$

Это то что даёт точное решение (его разложение) в области x, где применима квазиклассика.

Сравним эти выражения с квазиклассическими формулами

а) классически недоступная область, $x < a$ $\quad |p| = \sqrt{2mF(a-x)}$

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{+\frac{1}{\hbar}\int_a^x |p|\, dx\right\} = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\, dx\right|\right\}$$

решение убывающее экспоненциально вглубь классически недоступн. области

$$\int_a^x |p|\, dx = -\int_x^a |p|\, dx = -\int_x^a dx\,\sqrt{2mF(a-x)} = \sqrt{2mF}\left(-\frac{2}{3}\right)(a-x)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = \frac{C}{(2mF)^{1/4}(a-x)^{1/4}} \exp\left\{-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}\,(a-x)^{3/2}\right\}$$

в) Классически доступная область, $x>a \quad p=\sqrt{2mF(x-a)}$

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right\}+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right\}$$

$$\int_a^x p\,dx=\sqrt{2mF}\int_a^x dx\sqrt{x-a}=\sqrt{2mF}\,\frac{2}{3}(x-a)^{3/2}$$

$$\psi(x)=\frac{1}{(2mF)^{1/4}(x-a)^{1/4}}\left\{C_1\exp\left\{i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(x-a)^{3/2}\right\}+C_2\exp\left\{-i\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2mF}{\hbar^2}}(x-a)^{3/2}\right\}\right\}$$

Сравнение квазиклассики с точным решением дает следующ. правила соответствия:

$$C_1=C\exp\left\{-i\frac{\pi}{4}\right\} \quad \text{и} \quad C_2=C\exp\left\{+i\frac{\pi}{4}\right\}$$

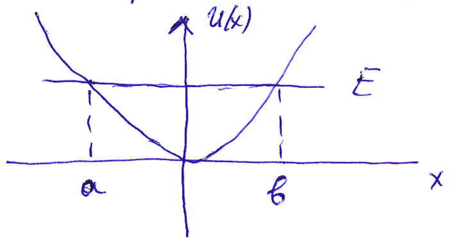
Мы нашли правила соотв. для левой точки поворота $x=a$. Для правой точки поворота $x=b$ можно провести аналогичные рассуждения.

Общий результат, верный как для правой, так и для левой точки поворота (Крамерс 1926) $\quad p=\sqrt{2m(E-U(x))}$

$$\underset{\uparrow \text{ при } U(x)>E}{\frac{C}{2\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right\}}\rightarrow\underset{\uparrow \text{ при } U(x)<E}{\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|-\frac{\pi}{4}\right\}}$$

Эти формулы продолжают квазиклассическое решение из классически недоступной $\rightarrow$ в классически доступную область.

Дискретные уровни энергии. Правило квантования Бора–Зоммерфельда.



Ищем решение в области $x \in [a, b]$ двумя способами, I) продолжая его из области $x \in [-\infty, a]$ или II) продолжая его из области $x \in [b, +\infty]$. Требуем, чтобы $\psi_I(x) = \psi_{II}(x)$

$$\psi_I(x) = \frac{C_I}{\sqrt{p}} \cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\}$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{C_{II}}{\sqrt{p}} \cos\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\} = \frac{C_{II}}{\sqrt{p}} \cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\} =$$

$$= \frac{C_{II}}{\sqrt{p}} \cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx - \frac{\pi}{2} - \left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)\right\}$$

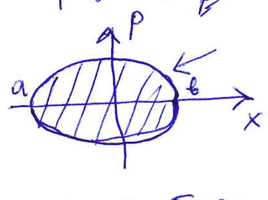
Для того чтобы при $\forall x$ $\psi_I(x) = \psi_{II}(x)$

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx - \frac{\pi}{2} = \pi n \quad и \quad C_{II} = C_I(-1)^n$$

$n = 0, 1, 2, \ldots$

Условие квантования $\int_a^b p\,dx = \pi\hbar(n + 1/2)$

или $\oint p\,dx = 2\pi\hbar(n + 1/2)$ где $\oint p\,dx$ – даёт площадь на фазовой плоскости



$\frac{p^2}{2m} + u(x) = E$

для состояний с энергией $\le E$

$$\psi(x) = \psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right\}$$

аргумент cos меняется в пределах $-\frac{\pi}{4} \le \ldots \le \frac{\pi}{4} + \pi n$

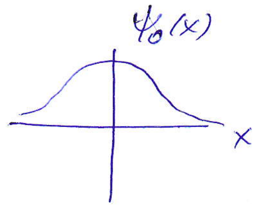
$x = a$ $\Rightarrow \psi(x)$ – имеет n-нулей в области $[a, b]$

Нормируем квазиклассическую функцию условием

$$\int \psi(x)\,dx = 1 \approx \int_a^b dx\,\psi(x) = |C|^2\int_a^b \frac{dx}{p}\cos^2(\dots)$$

области $x<a$ и $x>b$ — классически недоступные дают экспоненц. подавленные вклады.

Квазиклассика применима при больших n.
Для основного состояния, $n=0$ — нет нулей и $\psi_0(x)$



очевидно что $\Delta\lambda \sim \lambda \sim \sqrt{\langle\Delta x^2\rangle}$

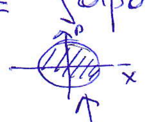
При больших n $\cos^2(\dots)$ в нормировочном интеграле меняется от 0 до 1 — n-раз $\Rightarrow \cos^2(\dots) \to \frac{1}{2}$

Тогда $$\int\psi(x)\,dx \approx \frac{|C|^2}{2}\int_a^b\frac{dx}{p(x)} = \frac{|C|^2}{2m}\int_a^b\frac{dx}{v(x)} = \frac{|C|^2}{2m}\frac{T_0}{2} = 1$$

где T_0 — классический период финитного движения. или вводя угловую частоту $\omega = \frac{2\pi}{T_0}$ $\quad \frac{|C|^2\pi}{2m\omega} = 1$

$$\Rightarrow \psi(x) = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi\, v(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\oint p\,dx = \int dp\,dx = 2\pi\hbar(n+1/2)$$ n — количество состояний у которых энергия $\leq E$



$E = const$

$2\pi\hbar = h$ — "клетка" в фазовом пространстве соответствующая одному состоянию

$\iint \frac{dp\,dx}{2\pi\hbar}$ — заменяет в квазиклассике $\sum_n$ — сумму по квантовым состояниям.