

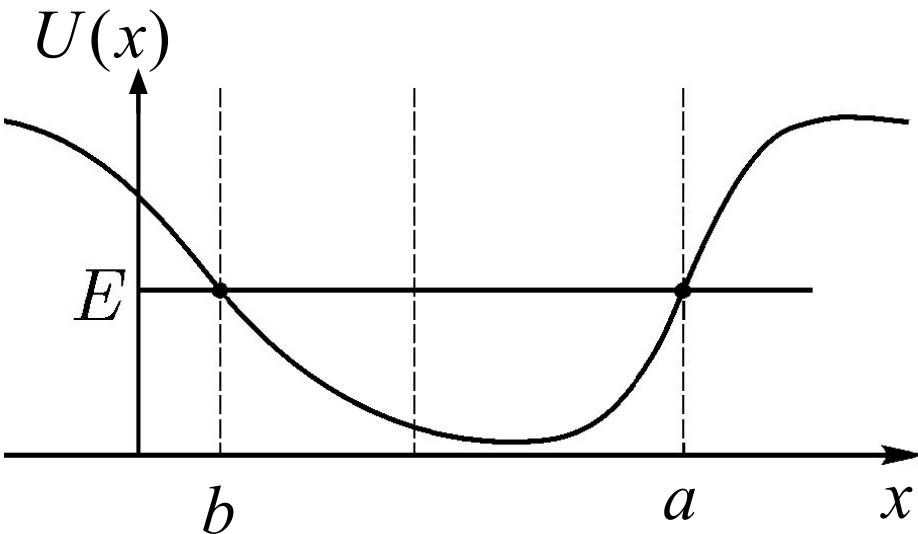
ВКБ-приближение. Общие соотношения

Одномерное уравнение Шрёдингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)]\psi(x) = 0$$

Длина волны Де-Бройля

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{p(x)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - U(x))}}$$



Характерный масштаб изменения потенциала

$$L \approx |a - b|$$

«Грубое» условие применимости квазиклассического приближения

$$\lambda_{eff} = \left(\frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(E - U_{eff})} \right)^{-1} \approx L$$

Потенциал мало меняется на расстояниях порядка длины волны!

Если бы потенциал не зависел от координат, то решением УШ была бы плоская волна:

$$\psi(x) = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)}, \quad \sigma(x) = p \cdot x = \sqrt{2m(E - U)} \cdot x$$

В случае слабой пространственной неоднородности потенциала решение УШ ищем в виде:

$$\psi(x) = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)}$$

где показатель экспоненты имеет вид разложения по степеням постоянной Планка

$$\sigma(x) = \sigma_0(x) + \frac{\hbar}{i} \cdot \sigma_1(x) + \dots$$

Получить уравнения для функций $\sigma_0(x)$, $\sigma_1(x)$ и решить их?

Исходное уравнение для показателя экспоненты

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{i}{\hbar} \cdot \sigma'' - \frac{1}{\hbar^2} \cdot (\sigma')^2 \right] + [E - U(x)] = 0$$

Нулевое приближение

$$(\sigma'_0)^2 = 2m[E - U(x)]$$

Решение

$$\sigma_0(x) = \pm \sqrt{2m} \int dx \sqrt{E - U(x)} = \pm \int p(x) dx$$

Потенциал не зависит от координат

$$\sigma_0(x) = \pm p \cdot x$$

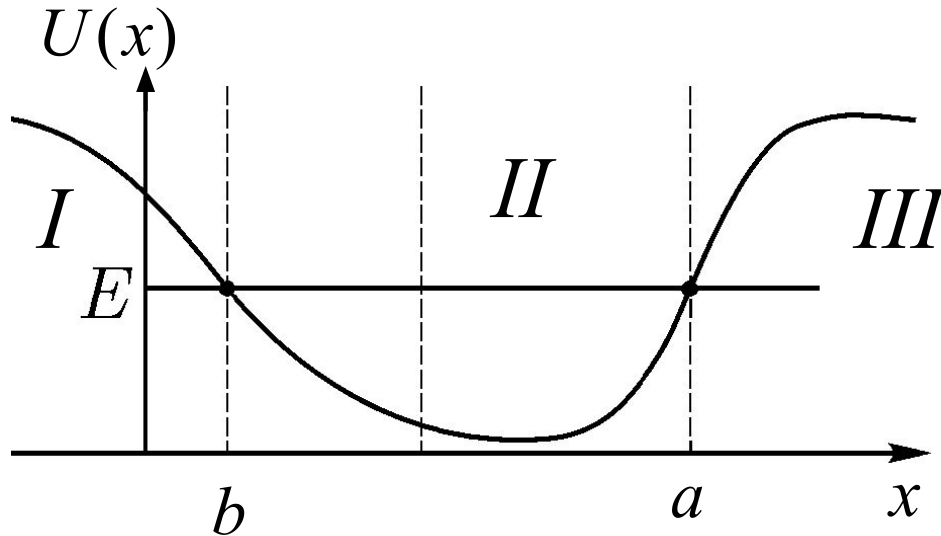
Первое приближение

$$\frac{1}{2m} \cdot (\sigma'_0)^2 + \frac{\hbar}{im} \cdot \sigma'_0 \sigma'_1 - \frac{i\hbar}{2m} \cdot \sigma''_0 = [E - U(x)]$$

$$\sigma'_1 = -\frac{\sigma''_0}{2\sigma'_0} = -\frac{p'}{2p}$$

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2} \cdot \ln p$$

Квазиклассическая волновая функция



I, III - классически запрещённая области

$$I - \psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^b |p| dx}, \quad III - \psi(x) = \frac{C_3}{\sqrt{|p|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx}$$

II - классически разрешённая область

$$\psi(x) = \frac{C_2}{\sqrt{p}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx} + \frac{C_2'}{\sqrt{p}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int p dx}$$

Условие применимости

$$\hbar |\sigma_0''| \hbar (\sigma_0')^2$$

Переписать условие применимости через параметры частицы и потенциала?

Цепочка неравенств

$$\boxed{\boxed{|\sigma_0''|} \boxed{(\sigma_0')^2}}$$

«Конструктивная» запись условия применимости

$$\boxed{\boxed{\left| \left(\frac{1}{\sigma_0'} \right)' \right|} \boxed{\left| \frac{\boxed{p'}}{p^2} \right|} \boxed{1}}$$

$$\boxed{\boxed{|p'|} \boxed{\frac{m|F|}{p}}}$$

$$\boxed{\left| \frac{\boxed{m|F|}}{p^3} \right| \boxed{1}}$$

«Физическая» запись условия применимости

$$\boxed{\left| \left(\frac{\boxed{\lambda}}{\sigma_0'} \right)' \right| = \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \boxed{\frac{\lambda_{eff}}{L}} \boxed{1}}$$

Де-Бройлеровская длина волны частицы мало меняется на расстояниях порядка её самой!

Условия сшивки в области точек остановки

В точках остановки импульс обращается в нуль и условие квазиклассичности нарушается!

УШ в окрестности точки остановки

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - |F| (x-a) \psi(x) = 0, \quad U(x) \approx E + \left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=a} (x-a)$$

$$p^2 = 2m(E - U(x)) \approx 2mU'(x)(x-a) \Rightarrow p^2 = -2mF(x-a)$$

Решение УШ – функции Эйри. Асимптотика в.ф.

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{(2mF/\hbar^2)^{1/12} (a-x)^{1/4}} \cdot \sin\left(\frac{2}{3} \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/2} (a-x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & x < a \\ \frac{C}{2(2m|F|/\hbar^2)^{1/12} (x-a)^{1/4}} \cdot \exp\left(-\frac{2}{3} \left(\frac{2m|F|}{\hbar^2}\right)^{1/2} (x-a)^{3/2}\right), & x > a \end{cases}$$

Вопрос: можно ли использовать асимптотику функций Эйри в области применимости квазиклассики?

Условие применимости линейного разложения для потенциала вблизи точки остановки

$$\frac{|F(x-a)|}{E} \ll 1$$

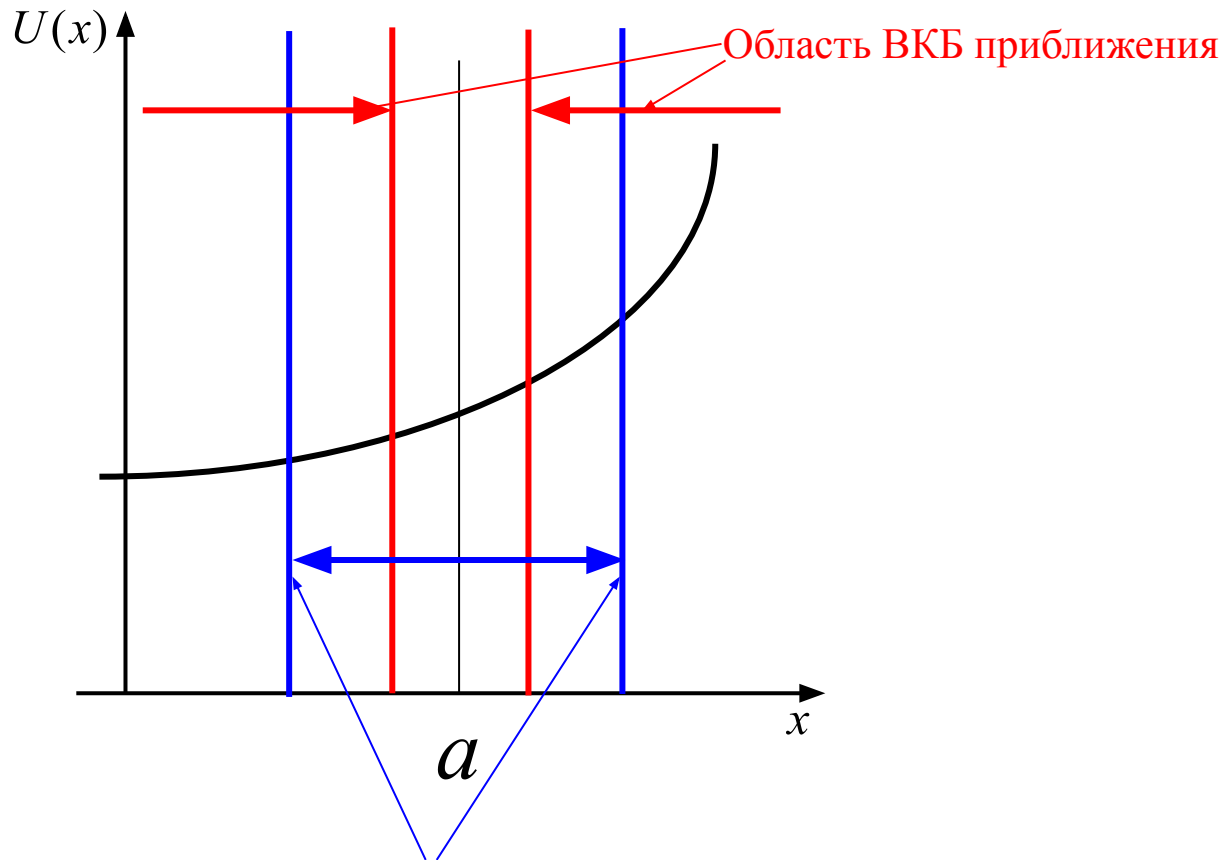
Область применимости асимптотического разложения для функции Эйри

$$\left(\frac{m|F|}{\hbar^2} \right)^{1/3} |x-a| \ll 1$$

Комбинируем неравенства

$$\frac{|F|}{E} \left(\frac{m|F|}{\hbar^2} \right)^{-1/3} \ll \left(\frac{\hbar m|F|}{p^3} \right)^{2/3} \ll 1$$

Графическая иллюстрация пересечения областей применимости квазиклассики и линейного разложения для потенциала



Область применения линейного разложения для потенциала

Найти правила «перехода» через точки поворота?

Указание: в квазиклассических формулах воспользоваться формулой для импульса в точке остановки

$$p^2 = -2mF(x - a)$$

Правила «перехода» через точки остановки для потенциала типа «корыто»

«Переход» через правую точку остановки из области **III** в область **II**

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_2}{\sqrt{p}} \cdot \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4}\right), & x < a \\ \frac{C_2}{2\sqrt{|p|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx}, & x > a \end{cases}$$

«Переход» через левую точку остановки из области **I** в область **II**

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_1}{2\sqrt{|p|}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^b |p| dx}, & x < b \\ \frac{C_1}{\sqrt{p}} \cdot \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{\pi}{4}\right), & x > b \end{cases}$$

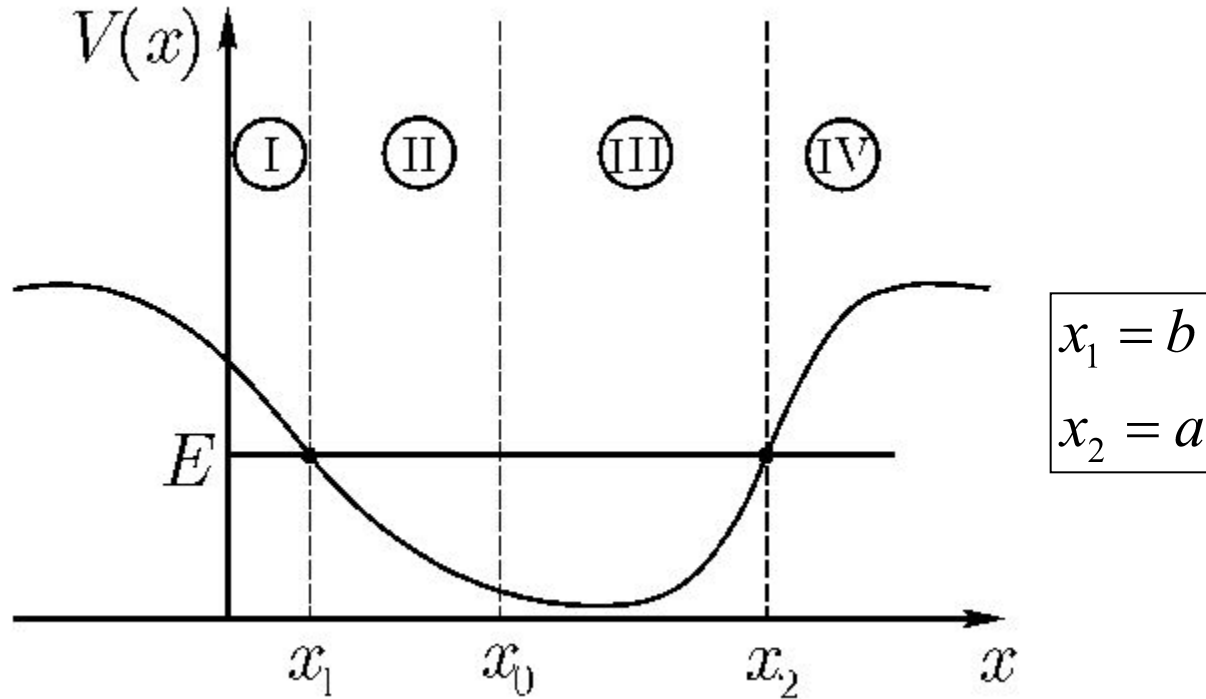
Правила квантования Бора-Зоммерфельда

Условия сшивки в классически разрешённой области //

$$\begin{aligned} \psi_{x < a}(x_0) - \psi_{x > b}(x_0) &= 0 \\ \left[\frac{d\psi_{x < a}(x)}{dx} - \frac{d\psi_{x > b}(x)}{dx} \right]_{x=x_0} &= 0, x_0 \in [b, a] \end{aligned}$$

Записать явный вид условий сшивки в квазиклассическом приближении?

Условия сшивки в классически разрешённой области //



$$\begin{cases} \frac{C_2}{\sqrt{p(x_0)}} \cdot \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^a p dx + \frac{\pi}{4}\right) - \frac{C_1}{\sqrt{p(x_0)}} \cdot \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \\ -\frac{C_2 \sqrt{p(x_0)}}{\hbar} \cdot \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^a p dx + \frac{\pi}{4}\right) - \frac{C_1 \sqrt{p(x_0)}}{\hbar} \cdot \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \end{cases}$$

Правила квантования Бора-Зоммерфельда

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^a p dx + \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4}\right) + \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^{x_0} p dx + \frac{\pi}{4}\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^a p dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0$$

Или

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^a p dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0 \Rightarrow \int_b^a p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Какое условие на величину n ?

Интегралы по траекториям
(факультативно, подробности в книге Р.Фейнман, А.Хибс «Квантовая механика и интегралы по траекториям»)

Качественные наводящие соображения

Амплитуда вероятности обнаружить частицу, находящуюся в квантовом состоянии n в точке с координатой x :

$$\langle x | n \rangle = \Psi_n(x)$$

Амплитуда вероятности обнаружить частицу, находящуюся в момент времени t_0 в точке с координатой x_0 , в точке с координатой x в момент времени t :

$$\langle x(t) | x(t_0) \rangle = G(x, t | x_0, t_0)$$

В квазиклассическом приближении

$$\langle x(t) | x(t_0) \rangle = G(x, t | x_0, t_0) \times \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\int_{x_0}^x p dx - E(t - t_0) \right]\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot S(x, t | x_0, t_0)\right)$$

$S(x, t | x_0, t_0)$ - классическое действие

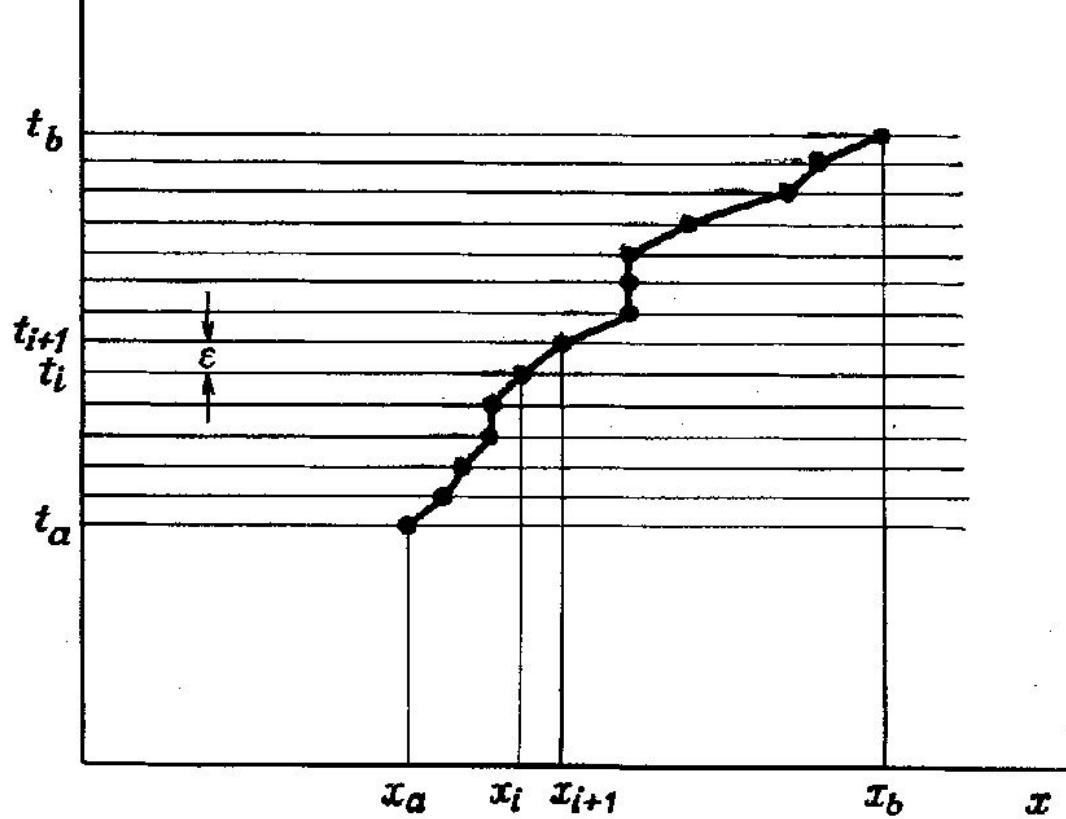
Условие полноты

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1$$

Амплитуда вероятности обнаружить частицу, находящуюся в момент времени t_0 в точке с координатой x_0 , в точке с координатой x в момент времени t :

$$\langle x(t) | x(t_0) \rangle = \iint \dots \int \langle x(t) | x(t_m) \rangle dx_m \langle x(t_m) | x(t_{m-1}) \rangle dx_{m-1} \dots \langle x(t_2) | x(t_1) \rangle dx_1 \langle x(t_1) | x(t_0) \rangle, x_m \equiv x(t_m)$$

$$\langle x(t_n) | x(t_{n-1}) \rangle \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot S(x_n, x_{n-1})\right)$$



Ф и г. 2.3. Сумма по всем траекториям.

Она определяется как предел, в котором траектория первоначально задается лишь координатами x для большого числа фиксированных моментов времени, разделенных очень малыми интервалами длины ε . Тогда сумма по траекториям равна интегралу по всем этим выбранным координатам. Наконец для определения меры берется предел при $\varepsilon \rightarrow 0$.

$$K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \int \dots \int e^{(i/\hbar)S[b, a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A}$$

$$K(b, a) = \langle x_b | x_a \rangle, \quad A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right)^{1/2} \quad K(b, a) = \int_a^b e^{(i/\hbar)S[b, a]} \mathcal{D}x(t)$$