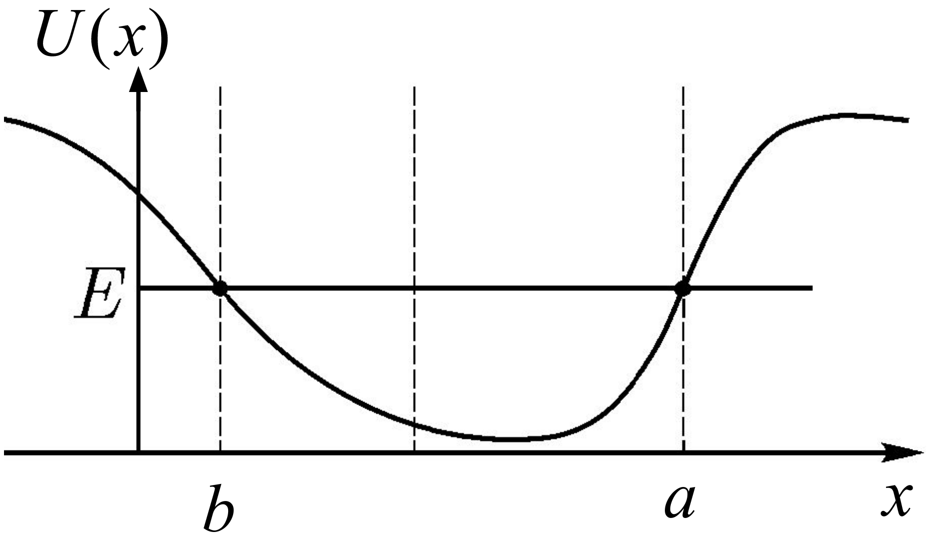
ВКБ-приближение. Общие соотношения



Одномерное уравнение Шрёдингера

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

Длина волны Де-Бройля

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

Характерный масштаб изменения потенциала

$$L \sim \left|a-b\right|$$

«Грубое» условие применимости квазиклассического приближения

$$\lambda\!\!\!^{-}_{eff}=\left(\frac{1}{\hbar}\cdot\sqrt{2m\left(E-U_{eff}\right)}\right)^{-1} \ll L$$

Потенциал мало меняется на расстояниях порядка длины волны!

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

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

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

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

где показатель экспоненты имеет вид разложения по степеням постоянной Планка

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

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

Исходное уравнение для показателя экспоненты

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

Нулевое приближение

$$\left(\sigma_0'\right)^2 = 2m\left[E - U\left(x\right)\right]$$

Решение

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

Потенциал не зависит от координат

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

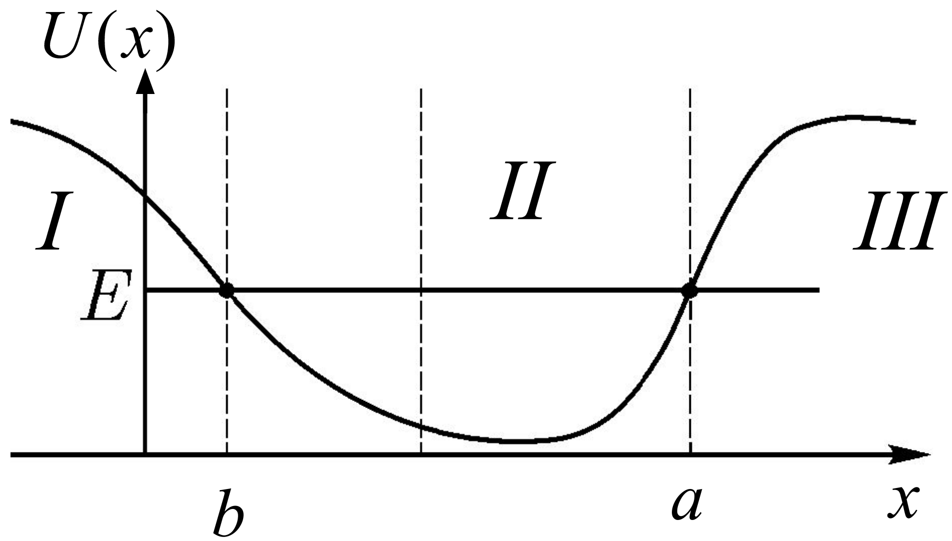
Первое приближение

$$\frac{1}{2m}\cdot\left(\sigma_0'\right)^2+\frac{\hbar}{im}\cdot\sigma_0'\sigma_1'-\frac{i\hbar}{2m}\cdot\sigma_0''=\left[E-U\left(x\right)\right]$$

$$\sigma_1'=-\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'}=-\frac{p'}{2p}$$

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

Квазиклассическая волновая функция



I, III - классически запрещённая области

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

II - классически разрешённая область

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

Условие применимости

$$\hbar\left|\sigma_0''\right| \ll \left(\sigma_0'\right)^2$$

Переписать условие применимости через параметры частицы и потенциала?

Цепочка неравенств

$$\boxed{\hbar\left|\sigma_0''\right| \ll \left(\sigma_0'\right)^2}$$

«Конструктивная» запись условия применимости

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

$$\boxed{\left|p'\right| = \frac{m\left|F\right|}{p}}$$

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

«Физическая» запись условия применимости

$$\boxed{\left|\left(\frac{\hbar}{\sigma_0'}\right)'\right| = \left|\frac{d\lambdabar(x)}{dx}\right| \sim \frac{\lambdabar_{eff}}{L} \ll 1}$$

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

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

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

Решение УШ – функции Эйри. Асимптотика в.ф.

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

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

Условие применимости линейного разложения для потенциала вблизи точки остановки

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

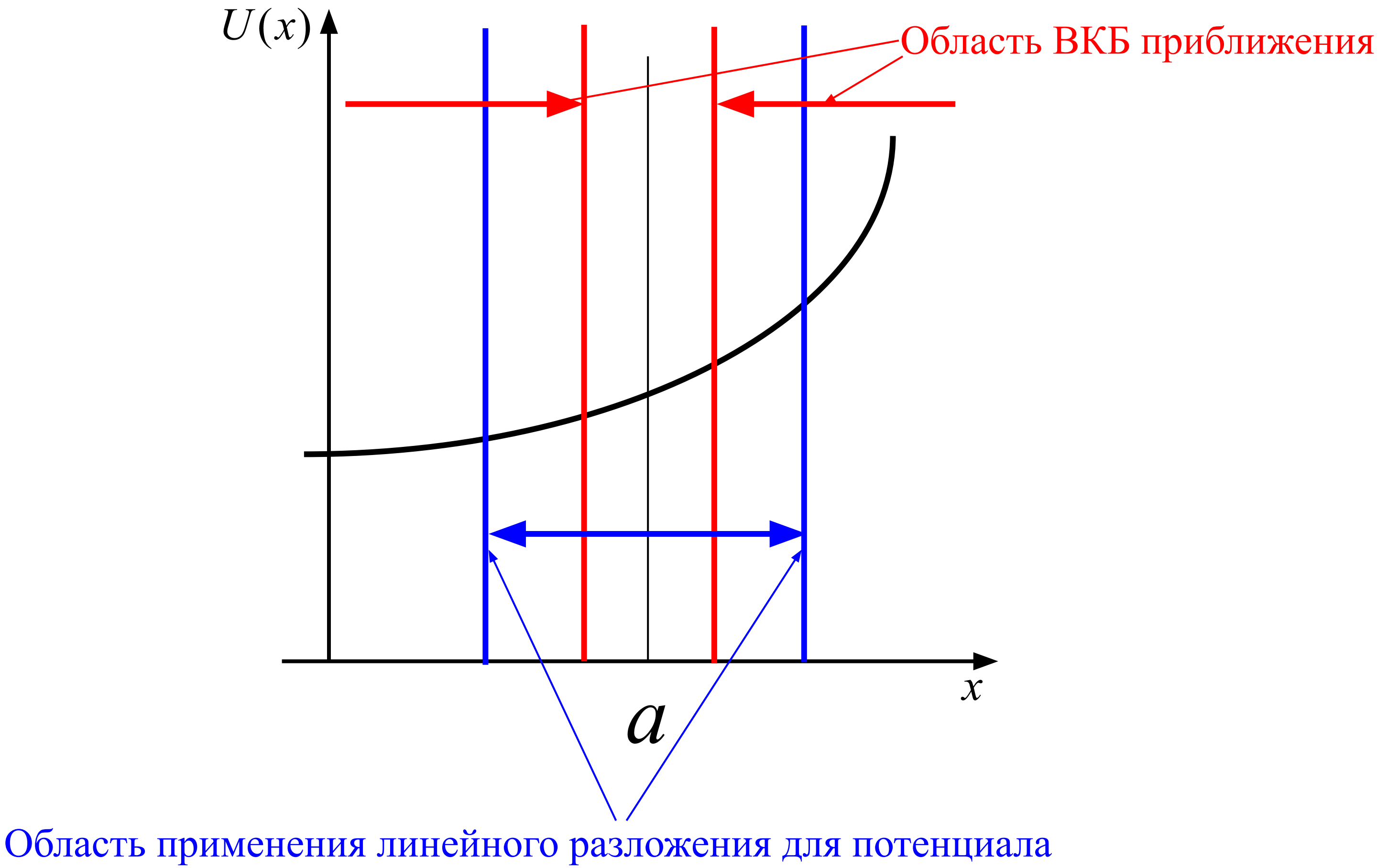
Область применимости асимптотического разложения для функции Эйри

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

Комбинируем неравенства

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

Графическая иллюстрация пересечения областей применимости квазиклассики и 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***

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

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

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

Правила квантования Бора-Зоммерфельда

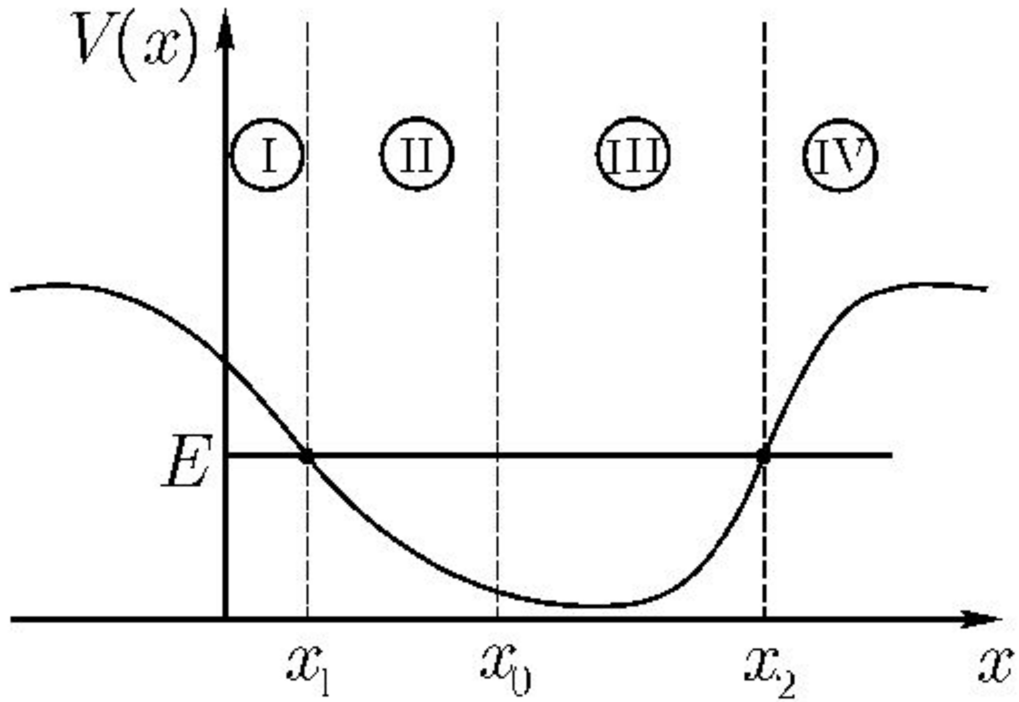
Условия сшивки в классически разрешённой области ***II***

$$\psi_{x<a}\left(x_0\right)-\psi_{x>b}\left(x_0\right)=0$$

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

Записать явный вид условий сшивки в квазиклассическом приближении?

Условия сшивки в классически разрешённой области *II*



$$\boxed{\begin{aligned} x_1 &= b \\ x_2 &= a \end{aligned}}$$

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

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

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

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:

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

В квазиклассическом приближении

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

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

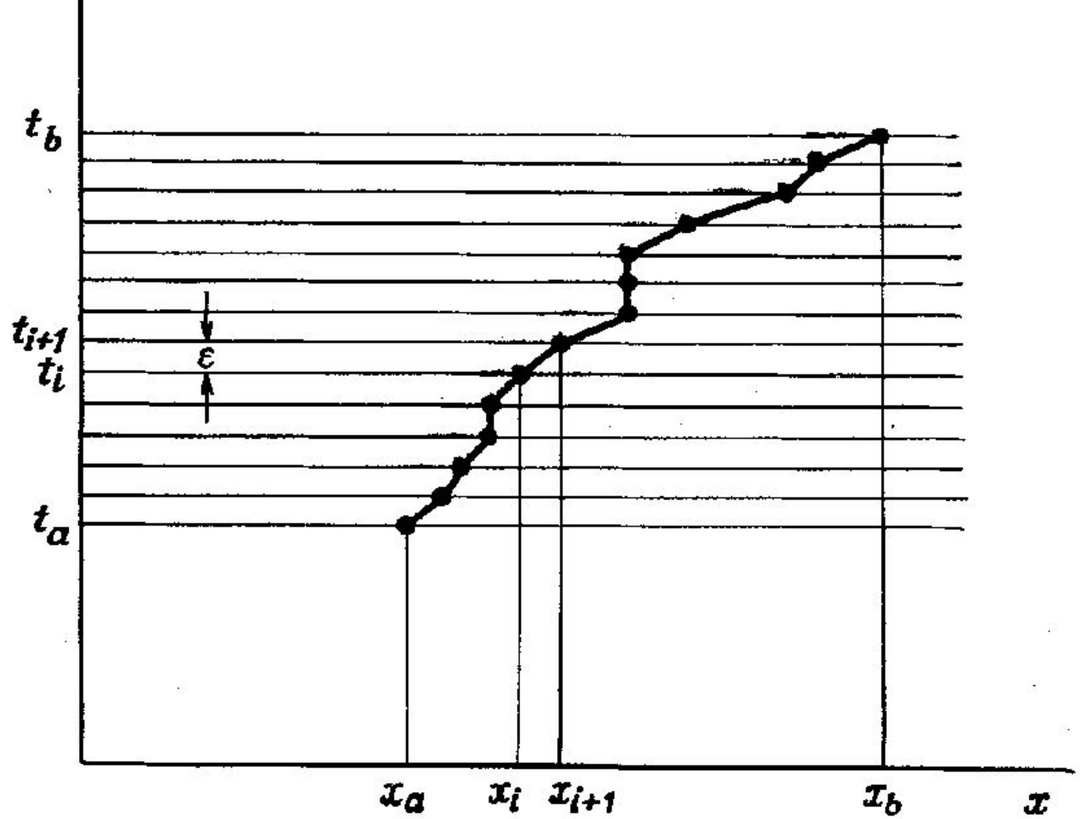
Условие полноты

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

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:

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

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



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 $\varepsilon \to 0$.

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

$$K(b,a) = \langle x_b | x_a \rangle, \quad A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right)^{1/2}$$

$$K(b, a) = \int_a^b e^{(i/\hbar) S[b, a]} \mathcal{D} x(t)$$