Л Е К Ц И Я   12

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В квантовой механике уравнение Шредингера для сколько-нибудь реалистических систем невозможно решить точно, в квадратурах. Поэтому здесь создано большое количество приближенных методов исследования. Мощнейший из них - теорию возмущений - мы рассмотрим позже. А сейчас обсудим квазиклассическое приближение, которое представляет и самостоятельный интерес, так как устанавливает связь квантовой механики и классической. Как мы увидим, квазиклассическое приближение (ККП) справедливо в случаях, когда де-бройлевские длины волн частиц малы по сравнению с характерными масштабами системы. Это аналогично тому, что волновая оптика в пределе малых длин волн переходит в геометрическую.

Рассматриваем стационарное одночастичное уравнение Шредингера в координатном представлении:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

и делаем в нем формальную подстановку (замену функции)

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})}.$$

Учитывая, что

$$\nabla\psi = \frac{i}{\hbar}(\nabla S)A e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})}, \quad \nabla^2\psi = \frac{i}{\hbar}(\nabla^2 S)A e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})} - \frac{1}{\hbar^2}(\nabla S)^2 A e^{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r})},$$

получим для S следующее уравнение:

$$\frac{1}{2\mu}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 S + V - E = 0.$$

Если отбросить второй член, то получим

$$\frac{1}{2\mu}(\nabla S)^2 + V = E.$$

Но это есть не что иное, как классическое *уравнение Гамильтона* - *Якоби* для функции действия S_0 (укороченное). Приближение справедливо при

$$|\nabla S|^2 >> \hbar\,|\nabla^2 S|.$$

Но в классике $\nabla S = \mathbf{p}$, а потому

$$|\boldsymbol{p}^2| >> \hbar\,|\mathrm{div}\,\mathbf{p}(x)|,$$

или, в одномерном случае

$$\mathbf{p}^2 >> \hbar\left|\frac{dp}{dx}\right| \Rightarrow 1 >> \frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| = \left|\frac{d(\frac{\hbar}{p})}{dx}\right| = \left|\frac{d(\frac{\lambda}{2\pi})}{dx}\right| \equiv \left|\frac{d\bar{\lambda}}{dx}\right|,$$

где $\bar{\lambda}$ – де-бройлевская длина волны. Таким образом, переход возможен при условии

$$\left|\frac{d(\frac{\lambda}{2\pi})}{dx}\right| << 1,$$

т.е. когда длина волны де Бройля мало меняется на протяжении системы. Можно сказать и иначе. Учитывая, что

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - V(x))},$$

получим

$$1 >> \left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| = \left|\frac{\mu\hbar}{p^3}\frac{dV}{dx}\right| \Rightarrow \left|\frac{\mu\hbar}{p^3}F\right| << 1.$$

Приближение справедливо, когда сила невелика (потенциальная энергия достаточно плавная функция координат), а импульс не слишком мал. В частности, приближение не работает вблизи точек поворота $E = V(x)$, где $p = 0$, а $\lambda = \propto$. Это будет важно в дальнейшем.

Последующее рассмотрение проводим для одномерного движения, когда уравнение для функции $S(x)$, входящей в волновую функцию

$$\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}S(x)},$$

имеет вид

$$i\hbar S'' - S'^2 + 2\mu(E - V) = 0. \quad (**)$$

Решение этого точного уравнения будем искать в виде ряда по $\hbar$:

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) + \ldots.$$

Этот ряд сходится плохо, и отыскание поправок высшего порядка малости по $\hbar$ затруднено. К тому же разложение разумно (т.е. может получать эффективные результаты) только при обсужденном выше условии. Ограничимся поправками, линейными по $\hbar$, т.е. ищем S в виде

$$S(x) \cong S_0(x) + \hbar S_1(x).$$

Подставляем в (**), отбрасывая члены с $\hbar^2$:

$$2\mu(E - V) - S_0'^2 + \hbar(iS_0'' - 2S_0'S_1') = 0.$$

Это должно быть тождеством, а потому должны равняться нулю отдельно члены без $\hbar$ (с $\hbar^0$) и члены с $\hbar$ ($\hbar^1$):

$$2\mu(E - V) - S_0'^2 = 0, \qquad iS_0'' - 2S_0'S_1' = 0.$$

Собственно говоря, именно это приближение и называется *квазиклассическим*. Оно же именуется методом ВКБ (Вентцеля - Крамерса - Бриллюэна).

Уравнение нулевого приближения есть уравнение Гамильтона - Якоби, из которого

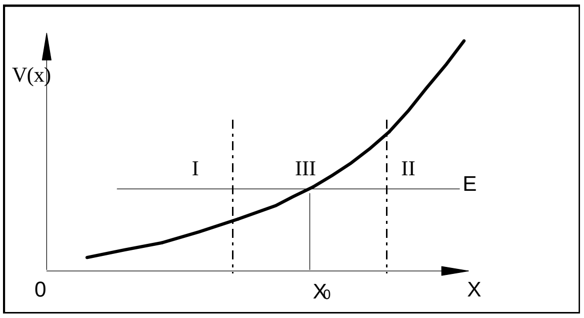
$$S_0' = \pm\sqrt{2\mu(E - V)} = \pm p,$$

где

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - V)}$$

классический импульс.

Итак, в нулевом приближении $\quad S_0(x) = \pm \int\limits_{x_0}^{x} |p(x)|\mathrm{d}x.$



Здесь x_0 - координата некоторой фиксированной точки на прямой. В качестве нее удобно выбирать классическую точку поворота, где

$$E = V(x_0).$$

Заметим, что в классически доступной области I импульс вещественен, а в классически недоступной области II он является чисто мнимым.

Уравнение для S_1 переписываем в виде

$$S_1' = i/2(S_0''/S_0') \equiv i/2(\lg S_0')'.$$

Интегрируя его, находим

$$S_1 = i/2\lg S'_0 = i/2(\lg p)$$

(постоянная интегрирования несущественна, и ее опускаем). Таким образом, в приближении ВКБ

$$S(x) = \pm\int p\mathrm{d}x + i\hbar\ln\sqrt{p}\ ,$$

и

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}}\, e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p dx}\ .$$

Обращаясь к картинке, запишем этот результат отдельно в областях I ($x<x_0$, классически доступная) где импульс вещественен, и II ($x>x_0$, классически недоступная), где импульс мнимый:

$$\text{I.}\ \psi_{\mathrm{I}}(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_0} p(y)dy} + \frac{C_2}{\sqrt{p}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_0} p(y)dy}\ , \qquad p(y) = \sqrt{2\mu(E - V(y))}\ ,$$

или

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = \frac{1}{\sqrt{p}}\,[a\sin(z+\gamma) + b\cos(z+\gamma')], \qquad z(x) \equiv \frac{1}{\hbar}\int\limits_{x}^{x_0} |p(y)\mathrm{d}y|;$$

$$\text{II.}\ \psi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{C_3}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_0} p(y)dy} + \frac{C_4}{\sqrt{p}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_0} p(y)dy}\ , \qquad p(y) = \sqrt{2\mu(E - V(y))} = ip(y),$$

или

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}}\,[Ae^{-|z|} + Be^{|z|}], \qquad |p(y)| = \sqrt{2\mu(\mathrm{V(y) - E})}\ , \qquad |z| \equiv \frac{1}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} |p(y)|\mathrm{d}y.$$

В эти решения входят 6 неизвестных вещественных констант: *a*, *b*, γ, γ', *A*, *B*. Свяжем их между собой, сшивая решения для областей I и II.

Но здесь есть значительная трудность. В точке поворота $p(x_0)=0$, и квазиклассическое приближение здесь не работает (см. выше), т.е. выписанные функции не являются решениями задачи даже приближенно. Способ таков: вводим промежуточную область III, в которой решаем уравнение Шредингера точно, и именно это решение его концами сшиваем с соответствующими квазиклассическими решениями. Область III считаем весьма узкой, что позволяет аппроксимировать потенциал $V(x)$ линейной функцией, разлагая его в ряд Тейлора:

$$V(x) \cong V(x_0) + (x - x_0)V'(x) \equiv E + \frac{\alpha\hbar^2}{2\mu}(x-x_0), \qquad \alpha = \frac{2\mu}{\hbar^2}V'(x).$$

Тогда точное (в смысле не квазиклассическое) уравнение Шредингера в области III будет записываться как

$$\psi''(x) - \alpha\,(x-x_0)\,\psi(x) = 0.$$

После замены переменной

$$\eta = \alpha^{1/3}(x-x_0)$$

оно примет вид

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} - \eta\psi = 0.$$

Это есть *уравнение Эйри*, и оно имеет два независимых решения:

$$u_1(\eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\left[e^{t\eta-\frac{1}{3}t^2} + \sin(t\eta + \frac{1}{3}t^3)\right]dt, \quad u_2(\eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\left[\cos(t\eta + \frac{1}{3}t^3)\right]dt.$$

Теперь будем сшивать решения по границам областей I - III и III - II.

1. При $x>x_0$ за счет $\hbar^2$ в знаменателе α имеем $\eta>>1$, и для функций Эйри можно воспользоваться известными из справочников асимптотическими выражениями (кстати, они получаются методом перевала):

$$u_1 \approx \eta^{-\frac{1}{4}}e^{\frac{2}{3}\eta^{\frac{3}{2}}}, \; u_2 = |\eta|^{-\frac{1}{4}}\sin(\frac{2}{3}|\eta|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}).$$

2. При $x<x_0$ по тем же причинам $\eta<<-1$, и асимптотики таковы:

$$u_1 \approx |\eta|^{-\frac{1}{4}}\cos(\frac{2}{3}|\eta|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}), \quad u_2 \approx \frac{1}{2}\eta^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{2}{3}\eta^{\frac{3}{2}}}.$$

Первую асимптотику будем сшивать с $\psi_{II}(x)$, а вторую - с $\psi_I(x)$.
(а) В области I $x=x_0-\varepsilon$ ($\varepsilon>0$, $\varepsilon \to 0$) подставляем в $p(x)$ потенциал

$$V(x) = \frac{\alpha\hbar^2}{2\mu}(x_0-x)$$

разлагаем в ряд Тейлора и вычисляем

$$z = \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_0} p(y)\mathrm{d}y \cong 2/3\;\eta^{3/2}.$$

(б) В области II $x=x_0+\varepsilon$, и аналогичные выкладки дают

$$|z| \cong 2/3\,\eta^{3/2}.$$

Теперь, задавшись решением в I, сшиваем его с асимптотикой (2), находим асимптотику того же решения в (1) и сшиваем с решением II. Решая возникающие алгебраические уравнения, получим

$$A = a/2, \quad B = b, \quad \gamma = \gamma' = \frac{\pi}{4}.$$

В итоге получим следующее квазиклассическое решение:

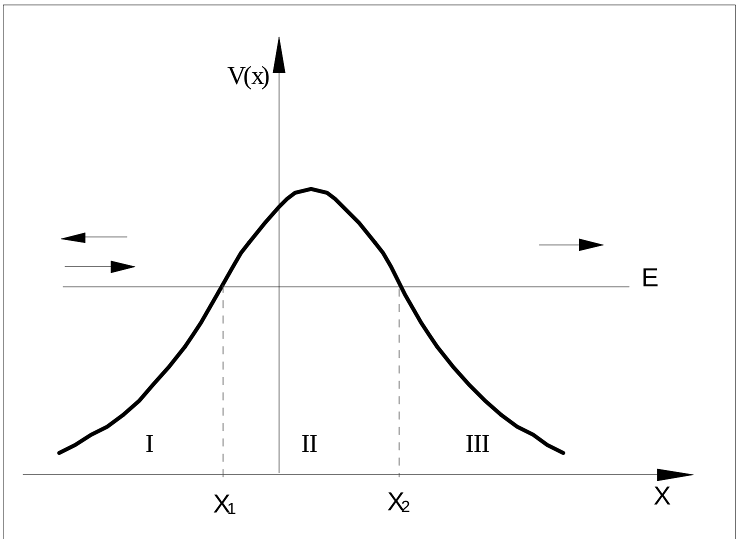
$$\psi(x) = a\psi_1(x) + b\psi_2(x),$$

где

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}}\sin(z+\dfrac{\pi}{4}), x < x_0 \\ \dfrac{1}{2|p|}e^{-|z|}, x > x_0 \end{cases}; \qquad \psi_2(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos(z+\dfrac{\pi}{4}), x < x_0 \\ \dfrac{1}{\sqrt{p}}e^{|z|}, x > x_0, x > x_0 \end{cases}$$

При этом константы a и b находятся из общих граничных условий (скажем, ограниченность на бесконечности) и условий нормировки. Полученные решения справедливы, вообще говоря, только вне ε- окрестности точки поворота. Но если на интервале 2ε укладывается много длин волн де Бройля, то выражениями можно пользоваться во всей области.

КОЭФФИЦИЕНТ ПРОХОЖДЕНИЯ



В качестве примера применения метода ВКБ вычислим коэффициент прохождения частицы через барьер произвольной формы (а не прямоугольной). При этом считаются выполненными условия квазиклассичности, т.е. барьер - достаточно плавный. Это значит, помимо всего прочего, что он широкий, и что энергия много меньше высоты барьера. Идея: задаем волновую функцию в области I в виде суперпозиции падающей и отраженной волн, «протягиваем» ее по полученному рецепту в область II, а затем по несколько модифицирован-ному рецепту в область III и требуем, чтобы там не было отраженной волны.

I. $\psi_{\text{I}}(x) = \dfrac{a}{\sqrt{p}}[\sin(z+\dfrac{\pi}{4}) + \dfrac{b}{\sqrt{p}}\cos(z+\dfrac{\pi}{4})] \equiv \dfrac{B_0}{\sqrt{p}}e^{-i(z+\frac{\pi}{4})} + \dfrac{B_1}{\sqrt{p}}e^{i(z+\frac{\pi}{4})} \equiv \psi_{\text{пад}}(x) + \psi_{\text{отр}}(x).$

$$z = \frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1} p(y)\mathrm{d}y, \quad B_0 = 1/2(b+ia), \quad B_1 = 1/2(b-ia)$$

II. $$\psi_{II}(x) = \frac{a}{2\sqrt{|p|}}e^{-|z|} + \frac{b}{\sqrt{|p|}}e^{|z|},$$

$$|z| = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} |p(y)\mathrm{d}y|, \quad |p| = \sqrt{2\mu(V-E)};$$

$$|z| = \gamma - |\tilde{z}|, \gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}|p(y)|dy, |\tilde{z}| = \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}|p(y)|dy$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{a}{2\sqrt{|p|}}e^{-\gamma}e^{|\tilde{z}|} + \frac{b}{\sqrt{p}}e^{\gamma}e^{-|\tilde{z}|} = \frac{\tilde{a}}{2\sqrt{|p|}}e^{-|\tilde{z}|} + \frac{\tilde{b}}{\sqrt{|p|}}e^{|\tilde{z}|},$$

$$\tilde{a} = 2be^{\gamma}, \tilde{b} = \frac{a}{2}e^{-\gamma}$$

III. $$\psi_{III}(x) = \frac{\tilde{B}_0}{\sqrt{p}}e^{-i(\tilde{z}+\frac{\pi}{4})} + \frac{\tilde{B}_1}{\sqrt{p}}e^{i(\tilde{z}+\frac{\pi}{4})},$$

$$\tilde{B}_0 = \frac{1}{2}(\tilde{b} + i\tilde{a}), \tilde{B}_1 = \frac{1}{2}(\tilde{b} - i\tilde{a}).$$

Но в области III не должно быть отраженной волны (по постановке задачи - частицы падают из $-\infty$, частично отражаются, а частично уходят на $+\infty$). Поэтому

$$\tilde{B}_0 = 0 \Rightarrow \tilde{b} = -i\tilde{a} \Rightarrow \tilde{b} = \tilde{B}_1. \quad \tilde{B}_1 = \tilde{b} = \frac{a}{2}e^{-\gamma};$$

$$\tilde{a} \equiv 2be^{\gamma} = i\tilde{b} = i\frac{a}{2}e^{-\gamma} \Rightarrow b = \frac{ia}{4}e^{-2\gamma};$$

$$B_0 = 1/2\,(b+ia) = \frac{ia}{2}(1/4\,e^{-2\gamma}+1)$$

$$B_1 = 1/2\,(b-ia) = \frac{ia}{2}(1/4\,e^{-2\gamma}-1).$$

Таким образом, все коэффициенты выражаются через a, который можно (но в данной задаче не нужно) найти из условия нормировки:

$$b = \frac{ia}{4}e^{-2\gamma}, B_0 = \frac{ia}{2}(\frac{1}{4}e^{-2\gamma}+1), B_1 = \frac{ia}{2}(\frac{1}{4}e^{-2\gamma}-1),$$

$$\tilde{B}_0 = 0, \tilde{B}_1 = \frac{a}{2}e^{-\gamma}.$$

Здесь следует выделить B_0 (коэффициент при падающей волне) и $\widetilde{B}_1$ (коэффициент при отраженной волне). Вводим коэффициенты прохождения и отражения

$$D = \frac{|j_{прош}|}{|j_{пад}|}, \qquad R = \frac{|j_{отр}|}{|j_{пад}|},$$

где токи выражаются через соответствующие волновые функции:

$$j = \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi - \psi^*\frac{d\psi}{dx}\right).$$

Подставляя найденные коэффициенты получим

$$D = \frac{|\widetilde{B}_1|^2}{|B_0|^2} = \frac{\frac{a^2}{4}e^{-2\gamma}}{\frac{a^2}{4}\left(\frac{1}{4}e^{-2\gamma}+1\right)^2} = \frac{1}{\left(e^{\gamma}+\frac{1}{4}e^{-\gamma}\right)^2},$$

$$R = \frac{|B_1|^2}{|B_0|^2} = \frac{\frac{a^2}{4}\left(\frac{1}{4}e^{-2\gamma}-1\right)^2}{\frac{a^2}{4}\left(\frac{1}{4}e^{-2\gamma}+1\right)^2} = \frac{\left(e^{\gamma}-\frac{1}{4}e^{-\gamma}\right)^2}{\left(e^{\gamma}+\frac{1}{4}e^{-\gamma}\right)^2}$$

Но здесь произошло некоторое превышение точности. В частности, $D+R\neq 1$, в противоречии с сохранением вероятности (куда делись частицы?). Однако нужно учесть, что

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{2\mu(V(x)-E)} >> 1.$$

Тогда равенство $D+R=1$, будет выполняться с точностью до слагаемых типа exp(-2γ) и exp(-4γ), которые тем самым нужно отбросить. Их нужно отбросить и в выражении для D, для которого окончательно получаем

$$D = e^{-2\gamma} = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu(V(x)-E)}dx\right\}.$$

Это весьма важная формула, и она часто применяется - например, при анализе альфа-распада ядер, механизм которого, как известно, туннельный.