

14 Przybliżenie semiklasyczne

W tym rozdziale rozważymy rachunek przybliżony, który opiera się na rozwinięciu funkcji falowej w szereg potęg stałej Plancka. Zakłada się przy tym jawnie, że \hbar jest małym parametrem (co to znaczy „mały” parametr wymaga oczywiście uściślenia). Gdyby \hbar było równe zeru, odtworzylibyśmy mechanikę klasyczną. Ograniczenie się do kilku pierwszych potęg \hbar jest stąd nazywane *przeblizeniem semiklasycznym*. W literaturze znane jest ono także po nazwę przybliżenia WKB od nazwisk jego twórców: Wentzla, Kramersa i Brillouina.

Warto też pamiętać, że uzyskane tą metodą wyrażenia na kwantyzację energii, były znane wcześniej jako warunki kwantyzacji Bohra-Sommerfelda. Warunki te we wczesnym okresie rozwoju mechaniki kwantowej usiłowano zgadnąć na podstawie pewnych założeń; tu wyprowadzimy je ściśle.

14.1 Ogólna postać funkcji falowej

Punktem wyjściowym jest zależne od czasu równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r})\psi. \quad (14.1)$$

Ponieważ interesuje nas stan związany o zadanej energii E funkcję ψ zapiszemy w postaci:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(Et - S(\vec{r}))/\hbar}. \quad (14.2)$$

Równanie (14.1) można przepisać jako równanie na fazę S :

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{\nabla} S(\vec{r}) \right)^2 - (E - V(\vec{r})) - i \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 S(\vec{r}) = 0. \quad (14.3)$$

W przypadku jednowymiarowym, do którego się teraz ograniczymy, równanie (14.3) przyjmuje postać:

$$S'^2 - 2m(E - V) - i\hbar S'' = 0, \quad (14.4)$$

gdzie prim oznacza różniczkowanie po x .

Przybliżenie, które teraz zrobimy, polega na rozwinięciu fazy S w potęgi \hbar . Warto w tym miejscu zauważyć, że rozwinięcie to ma nieco inny charakter niż rozwinięcie omawiane w rozdziale 13, ze względu na to, że \hbar jest parametrem wymiarowym. W praktyce ograniczymy się do pierwszej potęgi \hbar :

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \dots, \quad (14.5)$$

co daje

$$S_0'^2 + 2\hbar S_0' S_1' + \dots - 2m(E - V) - i\hbar S_0'' + \dots = 0. \quad (14.6)$$

Próbnując współczynniki przy kolejnych potęgach \hbar otrzymujemy dwa równania:

$$\begin{aligned} S_0' &= \pm \sqrt{2m(E - V)}, \\ S_0'' &= -2i S_0' S_1'. \end{aligned} \quad (14.7)$$

Jak widać S'_0 ma sens *klasycznego* pędu cząstki poruszającej się w potencjale $V(x)$. Pierwsze z równań (14.7) daje się łatwo scałkować:

$$S_0(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} + \text{const.}, \quad (14.8)$$

gdzie stała const. związana z dolną granicą całkowania, redefiniuje i tak na razie dowolną stałą A z równania (14.2) i dlatego może zostać pominięta. Drugie z równań (14.7) daje się też prosto scałkować

$$\frac{S''_0}{S'_0} = \frac{d}{dx} \ln S'_0 = -2i S'_1 \quad (14.9)$$

i dalej

$$S_1(x) = \frac{i}{2} \ln S'_0(x) = \frac{i}{2} \ln p(x). \quad (14.10)$$

Warto zauważyć, że równanie na S_1 nie zależy od znaku S_0 (znak ten upraszcza się w (14.9)), a ewentualna stała addytywna znowu może zostać wciągnięta do A .

Podsumowując, ogólna postać funkcji falowej ψ dana jest jako

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_{\pm} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E-V(x'))}} e^{-\ln \sqrt[4]{2m(E-V(x))}} \\ &= \frac{A_{\pm}}{\sqrt[4]{2m(E-V(x))}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E-V(x'))}}. \end{aligned} \quad (14.11)$$

Ponieważ wielkość $E - V(x)$ może przyjmować wartości ujemne i dodatnie, warto wprowadzić oznaczenia

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))} \text{ dla } x_1 < x < x_2 \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)} \text{ dla } x < x_1 \text{ lub } x_2 < x, \end{aligned} \quad (14.12)$$

gdzie $x_{1,2}$ są klasycznymi punktami zwrotu.

14.2 Postać funkcji falowej

Zapiszmy funkcję (14.11) w obszarach I i II):

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{A}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int^x dx' \kappa(x')}, \\ \psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{C_1}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i \int^{x_1} dx' k(x')} + \frac{C_2}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{-i \int^{x_1} dx' k(x')}, \end{aligned} \quad (14.13)$$

gdzie dla funkcji ψ_I wybraliśmy znak "–" w eksponencie, aby zniknęła dla $x \rightarrow -\infty$, a czynnik 2 w normalizacji został dodany dla późniejszej wygody. Index (1) przy funkcji

ψ_{II} oznacza, że w całce po dx' za dolną granicę wybraliśmy x_1 . Zauważmy, że funkcję falową w obszarze *II*) możemy zapisać inaczej

$$\psi_{II}^{(2)}(x) = \frac{D_1}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x')} + \frac{D_2}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x')}. \quad (14.14)$$

I wreszcie w obszarze *III*)

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar \kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')}. \quad (14.15)$$

14.3 Warunki zszycia

Wyprowadzoną w poprzednim paragrafie postać funkcji falowej użyjemy do opisu cząstki w trzech obszarach *I*) na lewo od punktu zwrotu x_1 , *II*) między punktami zwrotu $x_1 < x < x_2$ i *III*) na prawo od punktu x_2 . Zauważmy, że przybliżenie (14.11) nie stosuje się w punktach zwrotu i w pewnych otoczeniach wokół punktów zwrotu. Ponieważ, aby uzyskać funkcję falową dla wszystkich x -ów, musimy dokonać zszycia fragmentów funkcji falowej zadanych w poszczególnych obszarach, zachodzi potrzeba zastosowania jakiegoś innego przybliżenia, słusznego w punktach zwrotu i w najbliższym ich otoczeniu. Najprostszym rozwiązaniem jest przybliżenie potencjału przez linię prostą

$$\begin{aligned} V(x) &= E - F_1(x - x_1) + \dots \text{ dla } x \sim x_1, \\ V(x) &= E + F_2(x - x_2) + \dots \text{ dla } x \sim x_2, \end{aligned} \quad (14.16)$$

gdzie $F_{1,2} > 0$. W tym przybliżeniu równanie Schrödingera redukuje się do równania Bessela i można go dokładnie rozwiązać. Otrzymane w ten sposób rozwiązanie można następnie zszyć z funkcją falową (14.11) po lewej i po prawej stronie punktów zwrotu. Metoda ta opisana jest w podręczniku Schiffa.

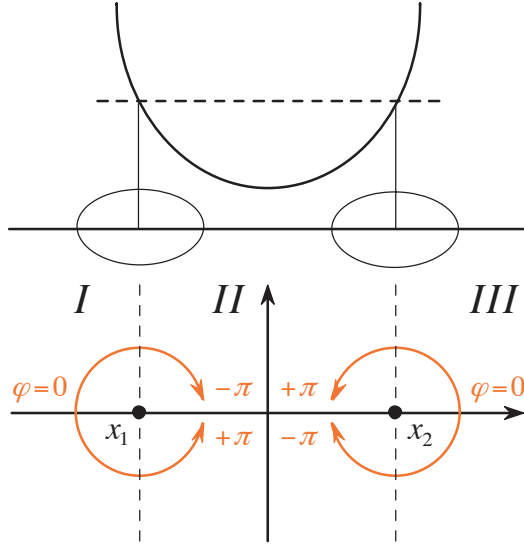
My postąpimy jednak inaczej: obejdziemy osobliwość funkcji (14.11) po małym okręgu w płaszczyźnie zespolonego x . Jest to metoda opisana w podręczniku Landaua i Lifszica.

Dla x bliskich x_1 zachodzi

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_1} (x - x_1)^{1/2}, \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_1} (x_1 - x)^{1/2}. \end{aligned} \quad (14.17)$$

W konsekwencji

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^x dx' k(x') &= \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_1} (x - x_1)^{3/2}, \\ \int_x^{x_1} dx' \kappa(x') &= \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_1} (x_1 - x)^{3/2} \end{aligned} \quad (14.18)$$



Rysunek 1: Analityczne przedłużenie funkcji falowej w metodzie WKB.

Przechodząc od obszaru I do II napotyka się na osobliwość związaną z zerem $\kappa(x)$. Aby ją ominąć przyjmujemy

$$x_1 - x = \rho e^{i\varphi}, \quad (14.19)$$

przy czym $\varphi = 0$ dla $x < x_1$ i zmienia się od 0 do $-\pi$, jeżeli poruszamy się od I do II po małym okręgu o promieniu ρ zgodnie z ruchem wskazówek zegara aż do $x > x_1$, lub od 0 do π , jeżeli poruszamy się po dolnym półokręgu w stronę przeciwną niż wskazówki zegara. Przechodząc po górnym półokręgu mamy zatem

$$\begin{aligned} \int_x^{x_1} dx' \kappa(x') &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} \rightarrow \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} e^{-i\frac{3\pi}{2}} \\ &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} (x - x_1)^{3/2} i = i \int_{x_1}^x dx' k(x') \end{aligned} \quad (14.20)$$

Podobnie czynnik

$$\begin{aligned} \sqrt{\hbar\kappa(x)} &= \sqrt[4]{2mF_1} (x_1 - x)^{1/4} \rightarrow \sqrt[4]{2mF_1} (x - x_1)^{1/4} e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ &= \sqrt{\hbar k(x)} e^{-i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \quad (14.21)$$

W sumie otrzymujemy, że:

$$\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_x^{x_1} dx' \kappa(x')} \rightarrow \frac{A e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar k(x)}} e^{-i\int_{x_1}^x dx' k(x')}. \quad (14.22)$$

Widzimy, że dokonując obejścia osobliwości po górnym półokręgu odtwarzamy tylko jeden fragment funkcji falowej w obszarze II , przy czym zachodzi

$$C_2 = \frac{1}{2}A e^{i\frac{\pi}{4}}. \quad (14.23)$$

Obchodząc osobliwość po dolnym półokręgu otrzymujemy

$$\begin{aligned} \int_x^{x_1} dx' \kappa(x') &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} \longrightarrow \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} e^{i\frac{3\pi}{2}} \\ &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} (x - x_1)^{3/2} (-i) = -i \int_{x_1}^x dx' k(x') \end{aligned} \quad (14.24)$$

oraz

$$\frac{\sqrt{\hbar\kappa(x)}}{\sqrt{\hbar k(x)}} = \frac{\sqrt[4]{2mF_1} (x_1 - x)^{1/4}}{\sqrt[4]{2mF_1} (x - x_1)^{1/4}} e^{+i\frac{\pi}{4}} \quad (14.25)$$

Z równań (14.24,14.25) wynika, że

$$\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_x^{x_1} dx' \kappa(x')} \longrightarrow \frac{A e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i \int_{x_1}^x dx' k(x')}. \quad (14.26)$$

Zatem obchodząc osobliwość po dolnym półokręgu odtworzyliśmy drugi składnik funkcji falowej w obszarze II , przy czym

$$C_1 = \frac{1}{2}A e^{-i\frac{\pi}{4}}. \quad (14.27)$$

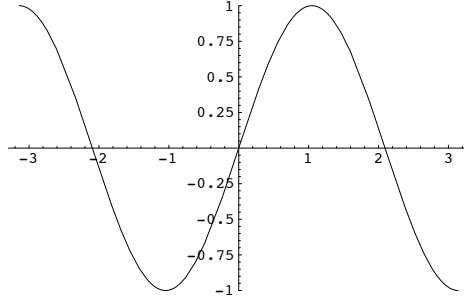
Zanim podstawimy wartości C_1 i C_2 do równania (14.13) spróbujmy zastanowić się, dlaczego obchodząc osobliwość górą lub dołem odtwarzamy tylko jeden fragment funkcji falowej w obszarze II . W tym celu warto prześledzić zmianę pełnej funkcji falowej (14.13) przy przejściu w stronę przeciwną, to jest z obszaru II do obszaru I . W obszarze II w pobliżu $x = x_1$

$$\pm i \int_{x_1}^x dx' k(x') \simeq \rho^{3/2} \left(\pm i \cos \frac{3\varphi'}{2} \mp \sin \frac{3\varphi'}{2} \right), \quad (14.28)$$

przy czym φ' zmienia się od 0 do π dla przejścia górą lub 0 do $-\pi$ dla przejścia dołem. Rozważmy przejście górą. Decydujący jest tu czynnik:

$$\sin \frac{3\varphi'}{2}, \quad (14.29)$$

który na początku maleje dla części proporcjonalnej do C_1 (znak + w eksponencie), nato-



Rysunek 2: Funkcja $\sin 3\varphi'/2$.

miast rośnie dla części proporcjonalnej do C_2 (znak $-$ w eksponencie). Stąd przy obejściu górą człon proporcjonalny do C_1 „gubi” się na tle rosnącego członu proporcjonalnego do C_2 . Przybliżenie semiklasyczne nie pozwala na utrzymanie wrażeń eksponencjalnie małego na tle członu wiodącego. Dla przejścia dołem sytuacja się odwraca i „gubi” się człon proporcjonalny do C_2 .

Podstawiając (14.23) i (14.27) do równania (14.13) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \frac{1}{2} \left(e^{i \int_{x_1}^x dx' k(x') - i \frac{\pi}{4}} + e^{-i \int_{x_1}^x dx' k(x') + i \frac{\pi}{4}} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos \left(\int_{x_1}^x dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right)\end{aligned}\quad (14.30)$$

Spróbujmy teraz powtórzyć to samo rozumowanie dla obszaru wokół punktu x_2 . Przyjmijmy funkcje falowe w postaci:

$$\begin{aligned}\psi_{III}(x) &= \frac{B}{2\sqrt{\hbar \kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')}, \\ \psi_{II}^{(2)}(x) &= \frac{D_1}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x')} + \frac{D_2}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x')}.\end{aligned}\quad (14.31)$$

W tym obszarze

$$\begin{aligned}k(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_2} (x_2 - x)^{1/2}, \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_2} (x - x_2)^{1/2}.\end{aligned}\quad (14.32)$$

Sparametryzujemy

$$x - x_2 = \rho e^{i\varphi},\quad (14.33)$$

przy czym φ zmienia się od 0 do π lub $-\pi$, jeśli poruszamy się po górnym względnie dolnym półokręgu przechodząc z obszaru $III \rightarrow II$. Ponieważ

$$\begin{aligned}(x - x_2)^{3/2} &= \rho^{3/2} \rightarrow \rho^{3/2} e^{\pm i \frac{3\pi}{2}} = \mp i (x_2 - x)^{3/2}, \\ (x_2 - x)^{1/4} &= \rho^{1/4} \rightarrow \rho^{1/4} e^{\pm i \frac{\pi}{4}} = e^{\pm i \frac{\pi}{4}} (x_2 - x)^{1/4},\end{aligned}\quad (14.34)$$

gdzie górny (dolny) znak odpowiada przejściu po górnym (dolnym) półokręgu. Zatem dla przejścia górą mamy

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')} \rightarrow \frac{B e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x')}, \quad (14.35)$$

natomiast dla przejścia dołem

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')} \rightarrow \frac{B e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x')}, \quad (14.36)$$

co implikuje

$$D_1 = \frac{1}{2} B e^{-i\frac{\pi}{4}}, \quad D_2 = \frac{1}{2} B e^{i\frac{\pi}{4}}. \quad (14.37)$$

Podobnie jak w przypadku (14.30) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\psi_{II}^{(2)}(x) &= \frac{B}{\sqrt{\hbar k(x)}} \frac{1}{2} \left(e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x') - i\frac{\pi}{4}} + e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x') + i\frac{\pi}{4}} \right) \\ &= \frac{B}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right).\end{aligned}\quad (14.38)$$

Na koniec warto jeszcze wspomnieć o warunkach zszycia dla potencjałów typu nieskończonej studni. Dla takich potencjałów przybliżenie semiklasyczne w obszarze II stosuje się aż do samego punktu zwrotu, zaś na zewnątrz funkcja falowa jest po prostu równa tożsamościowo zeru.

14.4 Warunki kwantowania Bohra-Sommerfelda

Funkcje $\psi_{II}^{(1)}$ i $\psi_{II}^{(2)}$ muszą być sobie równe. Przepiszmy $\psi_{II}^{(1)}$ w nieco innej formie

$$\begin{aligned}\psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos \left(\int_{x_1}^x dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos \left(- \int_x^{x_2} dx' k(x') + \frac{\pi}{4} + \int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{4} - \int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') + \frac{\pi}{2} \right).\end{aligned}\quad (14.39)$$

Porównując (14.39) z (14.38) otrzymujemy

$$\int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{2} = n\pi \text{ i } B = (-)^n A. \quad (14.40)$$

Pierwsze z równań (14.40) stanowi treść reguły kwantyzacji Bohra-Sommerfelda, którą zwyczajowo zapisuje się w postaci całki okrężnej po okresie ruchu z wyrażenia na pęd klasyczny:

$$\oint dx' p(x') = 2\pi\hbar \left(\frac{1}{2} + n \right) \quad (14.41)$$

14.4.1 Oscylator harmoniczny

Warto w charakterze przykładu rozpatrzyć oscylator harmoniczny, dla którego

$$p(x) = \sqrt{2m} \left(E - \frac{1}{2}\omega^2 m x^2 \right)^{1/2} = \sqrt{2mE} \left(1 - \frac{\omega^2 m}{2E} x^2 \right)^{1/2}, \quad (14.42)$$

zaś punkty zwrotu

$$x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}. \quad (14.43)$$

Wprowadzając nową zmienną

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega^2 m}{2E}} x, \quad -1 < \xi < 1, \quad dx = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} d\xi \quad (14.44)$$

wyliczmy całkę

$$\oint dx' p(x') = 2 \int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') = 4 \frac{E}{\omega} \int_{-1}^1 d\xi \sqrt{1 - \xi^2} = 2\pi \frac{E}{\omega}, \quad (14.45)$$

gdzie skorzystaliśmy z wartości całki

$$\int_{-1}^1 d\xi \sqrt{1 - \xi^2} = \frac{\pi}{2}. \quad (14.46)$$

Warunek Bohra-Sommerfelda (14.41) daje zatem dla oscylatora harmonicznego

$$\frac{E}{\omega} = \hbar \left(\frac{1}{2} + n \right), \quad (14.47)$$

co jest identyczne z dokładnym wynikiem.

14.4.2 Nieskończona studnia potencjału

Dla nieskończonej studni potencjału

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } -a < x < a \\ \infty & \text{dla } x < -a, a < x \end{cases} \quad (14.48)$$

zachodzi

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad (14.49)$$

a funkcja falowa ma postać

$$\psi_{II}(x) = \frac{C_1}{\sqrt[4]{2mE}} e^{i \int_{-a}^x dx' k(x')} + \frac{C_2}{\sqrt[4]{2mE}} e^{-i \int_{-a}^x dx' k(x')}. \quad (14.50)$$

Ponieważ $\psi_{II}(-a) = 0$, stąd

$$C_1 = -C_2 \equiv \frac{C}{2i}. \quad (14.51)$$

A zatem

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{2mE}} \sin \left(\int_{-a}^x dx' k(x') \right). \quad (14.52)$$

Z kolei warunek $\psi_{II}(a) = 0$ implikuje warunek kwantowania

$$\int_{-a}^a dx' k(x') = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (14.53)$$

Podstawiając za $k(x')$ wyrażenie (14.49) otrzymujemy

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE} = n\pi, \quad (14.54)$$

co daje skwantowaną energię

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8a^2 m} n^2, \quad (14.55)$$

co pokrywa się z wynikiem dokładnym. Warto zauważyć, że $n = 0$ nie jest dozwolone, gdyż mielibyśmy wtedy do czynienia z funkcją tożsamościowo równą zero.

Wynik (14.53) można zrozumieć intuicyjnie w następujący sposób. Ponieważ funkcja falowa musi być zero w obszarach klasycznie zaobronionych, na odcinku $[x_1 = -a, x_2 = a]$ musi się zmieścić całkowita liczba *połówek* długości fali. Dla skończonych potencjałów funkcja falowa nie znika w punktach zwrotu. W przypadku rozwiązania symetrycznego o najniższej energii funkcja falowa nie powinna mieć zera między punktami zwrotu, więc odcinek $[x_1, x_2]$ powinien być krótszy od połówki długości fali. Dla wyższych stanów

wzbudzonych na tym odcinku powinno się mieścić mniej niż n połówek fali. Stąd warunek (14.53) przyjmuje postać

$$\int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') = (n - \xi)\pi, \quad n = 1, 2, \dots$$

lub

$$\int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') = (n + \xi')\pi, \quad n = 0, 1, \dots,$$

gdzie ξ i $\xi' = 1 - \xi$ są liczbami ułamkowymi. Z dokładnej procedury opisanej w tym rozdziale wynika, że $\xi = \xi' = 1/2$.

14.5 Warunki stosowalności przybliżenia semiklasycznego

Warunkiem stosowalności rozwinięcia (14.5) jest aby

$$\hbar S_1 \ll S_0. \quad (14.56)$$

Jednak, zarówno S_0 jak i S_1 są funkcjami x , przy czym S_0 jest funkcją monotoniczną. Zamiast badać równanie (14.56) przyjęło się badać stosunek pochodnych.

$$\left| \frac{\hbar S_1'}{S_0'} \right| = \left| \frac{k'}{2k^2} \right| \ll 1. \quad (14.57)$$

Ostatni wzór bierze się stąd, że

$$\hbar \frac{dS_1}{dx} = \frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dx} \ln p(x) = \frac{i\hbar}{2} \frac{p'}{p} = \frac{i\hbar}{2} \frac{k'}{k}$$

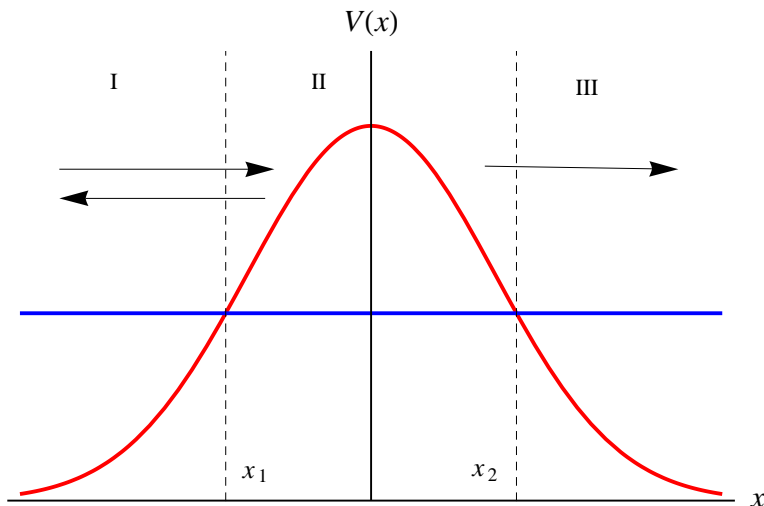
i

$$S_0' = p = \hbar k.$$

Warto wzór (14.57) przepisać w nieco innej formie, zauważając, że długość fali de Broglie'a $\lambda = 2\pi/k$:

$$\frac{\lambda}{4\pi} \left| \frac{dk}{dx} \right| \ll k, \quad (14.58)$$

co oznacza, że zmiana k na odcinku $\lambda/4\pi$ jest mała w porównaniu z k . Innymi słowy *względna* zmiana k na odległości rzędu $\lambda/4\pi$ jest mniejsza (silnie) od 1. Ponieważ za zmianę k z x odpowiedzialny jest potencjał $V(x)$, to warunek (14.58) oznacza w praktyce, że potencjał jest na tyle wolno zmienny, że pęd cząstki jest prawie stały, przy zmianie x o kilka długości fali de Broglie'a. Widać stąd, że przybliżenie WKB załamuje się w pobliżu punktów zwrotu gdzie $k \rightarrow 0$ a $\lambda \rightarrow \infty$.



Rysunek 3: Przejście przez barierę.

14.6 Przejście przez barierę

Rozważmy teraz rozpraszanie na potencjale pokazanym na rysunku 3 zakładając, że fala padająca nadbiega z lewej strony. Zatem po prawej stronie

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i \int_{x_2}^x dx' k(x') + i \frac{\pi}{4}}, \quad (14.59)$$

gdzie fazę $i\pi/4$ wybraliśmy dla późniejszej wygody. Przybliżając potencjał przez linię prostą

$$E - V(x) = F_2(x - x_2), \quad F_2 > 0$$

mamy (patrz wzór (14.28)):

$$i \int_{x_2}^x dx' k(x') = \sqrt{2mF_2} \rho^{3/2} \left(i \cos \frac{3\varphi}{2} - \sin \frac{3\varphi}{2} \right),$$

$$\sqrt{k(x)} = \sqrt[4]{2mF_2} \rho^{1/4} e^{i\varphi/4}$$

gdzie φ zmienia się od 0 do π dla przejścia górą lub 0 do $-\pi$ dla przejścia dołem. Rozważmy przejście górą, gdzie funkcja ψ_{III} najpierw maleje, a potem rośnie (decyduje tu czynnik $-\sin 3\varphi/2$). Wówczas

$$i \int_{x_2}^x dx' k(x') \rightarrow \int_x^{x_2} dx' \kappa(x'),$$

$$\sqrt{k(x)} \rightarrow \sqrt{\kappa(x)} e^{i\pi/4}.$$

Gdybyśmy przeszli dołem

$$i \int_{x_2}^x dx' k(x') \rightarrow - \int_x^{x_2} dx' \kappa(x')$$

dając czynnik eksponencjalnie mały, który w przybliżeniu semiklasycznym zaniedbujemy. Tak więc

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{\int_x^{x_2} dx' \kappa(x')} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{x_1} e^{-\int_{x_1}^x dx' \kappa(x')}. \quad (14.60)$$

Zauważmy, że czynnik

$$\frac{C}{\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_{x_1}^x dx' \kappa(x')}$$

odpowiada czynnikowi

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')}$$

ze wzoru (14.31). Wiemy już, jak taki czynnik przedłuża się analitycznie do obszaru klasycznie dozwolonego. Mamy więc, przez analogię ze wzorem (14.38)

$$\psi_I(x) = \frac{C}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{\int_{x_1}^{x_2} dx' \kappa(x')} \left(e^{-i \int_x^{x_1} dx' k(x') + i \frac{\pi}{4}} + e^{i \int_x^{x_1} dx' k(x') - i \frac{\pi}{4}} \right) \quad (14.61)$$

gdzie pierwszy wyraz w nawiasie odpowiada fali padającej, a drugi odbitej. Ze wzoru (14.61) wynika, że współczynnik odbicia jest równy $R = 1$. Natomiast współczynnik przejścia jest równy

$$T = e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} dx' \kappa(x')}.$$

Nie powinno nas niepokoić, że $T + R \neq 1$, gdyż T jest eksponencjalnie małe, „prawie” równe zero (klasyczne prawdopodobieństwo przejścia przez barierę wynosi dokładnie 0).

14.7 Przejście przez barierę cząstki uwięzionej w potencjale

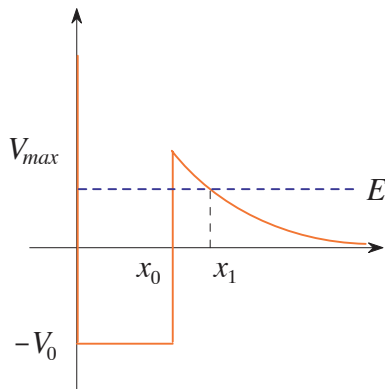
Rozpatrzmy przypadek cząstki uwięzionej w potencjale pokazanym na rysunku.

Ponieważ w obszarze $x_1 < x < x_2$ formalnie pęd cząstki jest urojony funkcja falowa na zewnątrz bariery będzie miała postać

$$\psi(x_1) = \psi(x_0) e^{-\int_{x_0}^{x_1} dx \kappa(x)} = \psi(x_0) e^{-\frac{\gamma}{2}}. \quad (14.62)$$

Średni czas życia można oszacować semiklasycznie w następujący sposób. Wewnątrz studni cząstka ma prędkość

$$v = \frac{p}{m} = \sqrt{\frac{2(E + V_0)}{m}}. \quad (14.63)$$



Rysunek 4: Tunelowanie

Częstość uderzeń w barierę w punkcie x_0 wynosi

$$\nu = \frac{v}{2x_0}. \quad (14.64)$$

Przy każdym uderzeniu prawdopodobieństwo ucieczki wynosi

$$P = e^{-\gamma}. \quad (14.65)$$

Prawdopodobieństwo ucieczki na jednostkę czasu wynosi

$$R = P\nu = \sqrt{\frac{E + V_0}{2m}} \frac{1}{x_0} e^{-\gamma} \quad (14.66)$$

a średni czas życia (pozostawania w studni)

$$\tau = \frac{1}{R}.$$

Analogicznie cząstka z zewnątrz może wpaść do studni. (Wg R. Shankar, „Mechanika Kwantowa”, PWN 2006).

15 Metoda wariacyjna

Metoda wariacyjna sprowadza się do „zgadnięcia” funkcji falowej, która najlepiej przybliży funkcję falową stanu podstawowego. Dla dowolnej unormowanej funkcji ψ zachodzi nierówność:

$$E_0 \leq \int dx \psi^* \hat{H} \psi. \quad (15.67)$$

Dowód nierówności (15.67) korzysta z faktu, że każdą funkcję można rozwinąć w bazie funkcji własnych hamiltonianu \hat{H} :

$$\hat{H} u_n = E_n u_n, \quad \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n, \quad (15.68)$$

przy czym warunek unormowania ψ sprowadza się do

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad (15.69)$$

Wyliczmy teraz całkę występującą w równaniu (15.67):

$$\begin{aligned} \int dx \psi^* \hat{H} \psi &= \sum_{m=0}^{\infty} c_m^* \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int dx u_m^* \hat{H} u_n \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} c_m^* \sum_{n=0}^{\infty} c_n E_n \int dx u_m^* u_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \\ &= E_0 \end{aligned} \quad (15.70)$$

Tak więc obliczenie energii stanu podstawowego sprowadza się do znalezienie minimum wyrażenia $\int dx \psi^* \hat{H} \psi$ ze względu na (unormowaną) funkcję ψ :

$$E_0 = \min_{\psi} \int dx \psi^* \hat{H} \psi. \quad (15.71)$$

W praktyce zakłada się jawną postać funkcji ψ zależną od jednego lub kilku parametrów i minimalizuje się całkę (15.71) ze względu na te parametry. Oczywiście wybranie tej tak zwanej *funkcji próbnej* jest arbitralne i zależy od intuicji i doświadczenia rachunkowego.

W charakterze przykładu rozpatrzmy oscylator harmoniczny

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (15.72)$$

Jako funkcję próbną przyjmijmy unormowaną (w kwadracie) funkcję Gaussa

$$\psi(x, \alpha) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}. \quad (15.73)$$

Działanie hamiltonianu (15.72) na funkcję (15.73) sprowadza się do policzenia drugiej pochodnej z ψ :

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x, \alpha) = -a(1 - ax^2) \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \quad (15.74)$$

i wykonania całki:

$$\begin{aligned}
 E(\alpha) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\hbar^2}{2m} \alpha(1 - \alpha x^2) + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right] e^{-\alpha x^2} \\
 &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \frac{\alpha \hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left[\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} \right] \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\alpha x^2} \\
 &= \frac{\alpha \hbar^2}{2m} + \left[\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} \right] \frac{1}{2\alpha} \\
 &= \frac{\alpha \hbar^2}{4m} + \frac{m\omega^2}{4\alpha}.
 \end{aligned} \tag{15.75}$$

Różniczkując (15.75) po α i przyrównując pochodną do zera otrzymujemy

$$\frac{d}{d\alpha} E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{4\alpha^2} = 0 \rightarrow \alpha_{\min} = \frac{m\omega}{\hbar}. \tag{15.76}$$

Podstawiając tę wartość α do wzoru na $E(\alpha)$ otrzymujemy:

$$E(\alpha_{\min}) = \frac{1}{2} \hbar \omega, \tag{15.77}$$

co jest dokładnym wzorem na energię stanu podstawowego oscylatora. Oczywiście wiąże się to z tym, że funkcja Gaussa (15.73) z $\alpha = \alpha_{\min}$ jest dokładną funkcją własną stanu podstawowego.

Znając dokładną funkcję własną stanu podstawowego u_0 , można przy pomocy metody wariacyjnej znaleźć funkcję własną i energię pierwszego stanu wzbudzonego. W tym celu należy funkcję próbną ψ wybrać tak, aby była ortogonalna do u_0 .