

10 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 *przybliżeniem semiklasycznym*. W literaturze znane jest ono także po nazwą 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.

10.1 Rozwinięcie fazy w potęgi \hbar

Punktem wyjściowym jest zależne od czasu równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r})\psi. \quad (10.14)$$

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

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(Et - S(\vec{r}))/\hbar}. \quad (10.15)$$

Równanie (10.14) można przepisać jako równanie na fazę S :

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{\nabla} S(\vec{r}) \right)^2 - (E - V(\vec{r})) - i \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 S(\vec{r}) = 0. \quad (10.16)$$

W przypadku jednowymiarowym, do którego się teraz ograniczymy, równanie (10.16) przyjmuje postać:

$$S'^2 - 2m(E - V) - i\hbar S'' = 0, \quad (10.17)$$

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 perturbacyjne, ze względu na to, że \hbar jest parametrem wymiarowym. W praktyce ograniczymy się do pierwszej potęgi \hbar :

$$S = S_0 + \hbar S_1 + \dots, \quad (10.18)$$

co daje

$$S_0'^2 + 2\hbar S_0' S_1' + \dots - 2m(E - V) - i\hbar S_0'' + \dots = 0. \quad (10.19)$$

Próbnując współczynniki przy kolejnych potęgach \hbar otrzymujemy dwa równania:

$$\begin{aligned} S_0' &= \pm \sqrt{2m(E - V)}, \\ S_0'' &= -2i S_0' S_1'. \end{aligned} \quad (10.20)$$

Jak widać S'_0 ma sens *klasycznego pędu* cząstki poruszającej się w potencjale $V(x)$. Pierwsze z równań (10.20) daje się łatwo scałkować:

$$S_0(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))} + \text{const.}, \quad (10.21)$$

gdzie stała const. związana z dolną granicą całkowania, redefiniuje i tak na razie dowolną stałą A z równania (10.15) i dlatego może zostać pominięta. Drugie z równań (10.20) daje się też prosto scałkować

$$\frac{S''_0}{S'_0} = \frac{d}{dx} \ln S'_0 = -2i S'_1 \quad (10.22)$$

i dalej

$$S_1(x) = \frac{i}{2} \ln S'_0(x) = \frac{i}{2} \ln p(x). \quad (10.23)$$

Warto zauważyć, że równanie na S_1 nie zależy od znaku S_0 (znak ten upraszcza się w (10.22)), a ewentualna stała addytywna znowu może zostać wciągnięta do A .

Podsumowując, ogólnie funkcja falowa ψ dana jest jako suma dwóch członów

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(x) &= A_{\pm} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))}} e^{-\ln \sqrt[4]{2m(E - V(x))}} \\ &= \frac{A_{\pm}}{\sqrt[4]{2m(E - V(x))}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E - V(x'))}}. \end{aligned} \quad (10.24)$$

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

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V(x))} \text{ dla } x_1 < x < x_2 \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V(x) - E)} \text{ dla } x < x_1 \text{ lub } x_2 < x, \end{aligned} \quad (10.25)$$

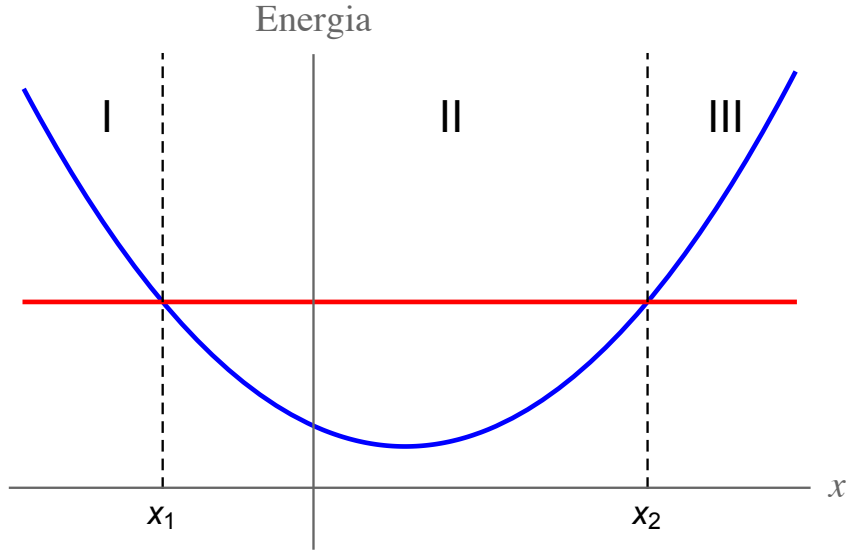
gdzie $x_{1,2}$ są klasycznymi punktami zwrotu.

10.2 Postać funkcji falowej

Podzielimy teraz obszar zmiennej x na trzy obszary, tak jak pokazano to na rysunku. Zapiszmy funkcję (10.24) w obszarach I i II :

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{A}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_x^{x_1} dx' \kappa(x')}, \\ \psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{C_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int_{x_1}^x dx' k(x')} + \frac{C_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int_{x_1}^x dx' k(x')}, \end{aligned} \quad (10.26)$$

gdzie dla funkcji ψ_I wybraliśmy znak "−" w eksponencie, aby znikająca dla $x \rightarrow -\infty$, a czynnik 2 w normalizacji został dodany dla późniejszej wygody. Współczynnik $1/\sqrt{\hbar}$



Rysunek 1: Definicja obszarów zmiennej x w odniesieniu od *klasycznych punktów zwrotu* x_1 oraz x_2 .

został wciągnięty do definicji stałych mnożących eksponenty. 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

$$\psi_{II}^{(2)}(x) = \frac{D_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x')} + \frac{D_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x')}. \quad (10.27)$$

I wreszcie w obszarze *III*

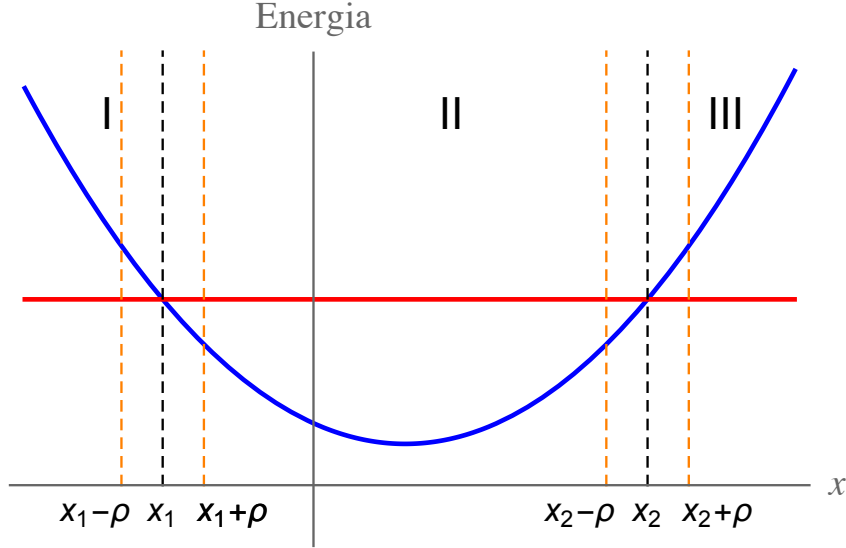
$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')}. \quad (10.28)$$

10.3 Warunki zszycia w punkcie x_1

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 (10.24) nie stosuje się w punktach zwrotu i w pewnych otoczeniach wokół punktów zwrotu gdyż $k(x)$ i $\kappa(x)$ dążą do zera dla $x \rightarrow x_{1,2}$. 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 $x_{1,2} \pm \rho$. Najprostszym rozwiązaniem jest przybliżenie potencjału przez linię prostą

$$\begin{aligned} V(x) &= E - F_1(x - x_1) + \dots \text{ dla } x \sim x_1, \\ V(x) &= E + F_2(x - x_2) + \dots \text{ dla } x \sim x_2, \end{aligned} \quad (10.29)$$

gdzie stałe $F_{1,2} > 0$. 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 (10.24) po lewej i po prawej stronie punktów zwrotu. Metoda ta opisana jest w podręczniku Schiffa.



Rysunek 2: Definicja obszarów zmiennej x w odniesieniu od *klasycznych punktów zwrotu* x_1 oraz x_2 z uwzględnieniem infinitesimalnego otoczenia punktów zwrotu, gdzie przybliżenie (10.26), (10.27) i (10.28) nie stosuje się.

My postąpimy jednak inaczej: obejdziemy osobliwość funkcji (10.24) po małym okręgu o promieniu ρ w płaszczyźnie zespolonego x . Jest to metoda opisana w podręczniku Landaua i Lifszica.

Dla x bliskich x_1 zachodzi

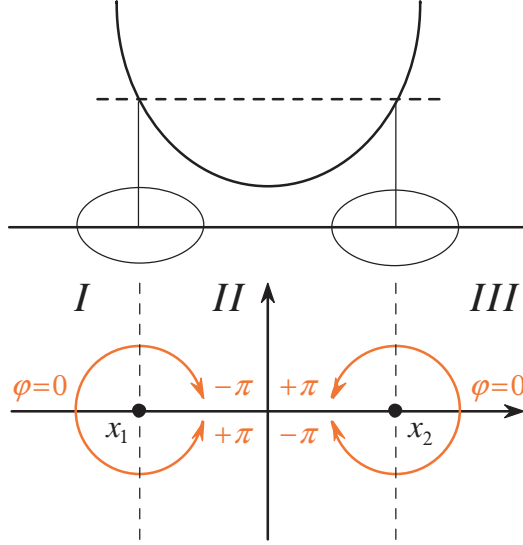
$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_1} (x - x_1)^{1/2}, \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_1} (x_1 - x)^{1/2}. \end{aligned} \quad (10.30)$$

W konsekwencji

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^x dx' k(x') &= \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_1} (x - x_1)^{3/2}, \\ \int_x^{x_1} dx' \kappa(x') &= \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_1} (x_1 - x)^{3/2}. \end{aligned} \quad (10.31)$$

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

$$x_1 - x = \rho e^{i\varphi}, \quad (10.32)$$



Rysunek 3: Analityczne przedłużenie funkcji falowej w metodzie WKB.

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

$$\begin{aligned} \int_x^{x_1} dx' \kappa(x') &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} \rightarrow \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} e^{-i\frac{3\pi}{2}} \\ &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} (x - x_1)^{3/2} i = i \int_{x_1}^x dx' k(x') \end{aligned} \quad (10.33)$$

Podobnie czynnik

$$\begin{aligned} \sqrt{\kappa(x)} &= \sqrt[4]{2mF_1} (x_1 - x)^{1/4} \rightarrow \sqrt[4]{2mF_1} (x - x_1)^{1/4} e^{-i\frac{\pi}{4}} \\ &= \sqrt{k(x)} e^{-i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \quad (10.34)$$

W sumie otrzymujemy, że:

$$\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_x^{x_1} dx' \kappa(x')} \rightarrow \frac{A e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{k(x)}} e^{-i \int_{x_1}^x dx' k(x')}. \quad (10.35)$$

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

$$C_2 = \frac{1}{2} A e^{i\frac{\pi}{4}}. \quad (10.36)$$

Obchodząc osobliwość po **dolnym półokręgu** otrzymujemy

$$\begin{aligned} \int_x^{x_1} dx' \kappa(x') &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} \longrightarrow \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} \rho^{3/2} e^{i\frac{3\pi}{2}} \\ &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar} (x - x_1)^{3/2} (-i) = -i \int_{x_1}^x dx' k(x') \end{aligned} \quad (10.37)$$

oraz

$$\begin{aligned} \sqrt{\kappa(x)} &= \sqrt[4]{2mF_1} (x_1 - x)^{1/4} \longrightarrow \sqrt[4]{2mF_1} (x - x_1)^{1/4} e^{+i\frac{\pi}{4}} \\ &= \sqrt{k(x)} e^{+i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \quad (10.38)$$

Z równań (10.37) oraz (10.38) wynika, że

$$\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_x^{x_1} dx' \kappa(x')} \longrightarrow \frac{A e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{k(x)}} e^{i \int_{x_1}^x dx' k(x')}. \quad (10.39)$$

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

$$C_1 = \frac{1}{2} A e^{-i\frac{\pi}{4}}. \quad (10.40)$$

Podstawiając (10.36) i (10.40) do równania (10.26) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \frac{1}{2} \left(e^{i \int_{x_1}^x dx' k(x') - i\frac{\pi}{4}} + e^{-i \int_{x_1}^x dx' k(x') + i\frac{\pi}{4}} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_{x_1}^x dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (10.41)$$

10.4 Uwaga dotycząca obchodzenia osobliwości po dwóch konturach

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 (10.26) przy przejściu w stronę przeciwną, to jest z obszaru II do obszaru I . W obszarze II w pobliżu $x = x_1$

$$\pm i \int_{x_1}^x dx' k(x') \simeq \rho^{3/2} \left(\pm i \cos \frac{3\varphi'}{2} \mp \sin \frac{3\varphi'}{2} \right), \quad (10.42)$$

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 $\pm \sin \frac{3\varphi'}{2}$:

$$\psi_{II}^{(1)}(x) \sim C_1 e^{-\rho^{3/2} \sin \frac{3\varphi'}{2}} + C_2 e^{+\rho^{3/2} \sin \frac{3\varphi'}{2}}, \quad (10.43)$$

który na początku maleje dla części proporcjonalnej do C_1 , natomiast rośnie dla części proporcjonalnej do C_2 . 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 .

10.5 Warunki zszycia w punkcie x_2

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

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= \frac{B}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')}, \\ \psi_{II}^{(2)}(x) &= \frac{D_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x')} + \frac{D_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x')}. \end{aligned} \quad (10.44)$$

W tym obszarze

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_2} (x_2 - x)^{1/2}, \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mF_2} (x - x_2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (10.45)$$

Sparametryzujemy

$$x - x_2 = \rho e^{i\varphi}, \quad (10.46)$$

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

$$\begin{aligned} (x - x_2)^{3/2} &= \rho^{3/2} \rightarrow \rho^{3/2} e^{\pm i \frac{3\pi}{2}} = \mp i (x_2 - x)^{3/2}, \\ (x_2 - x)^{1/4} &= \rho^{1/4} \rightarrow \rho^{1/4} e^{\pm i \frac{\pi}{4}} = e^{\pm i \frac{\pi}{4}} (x_2 - x)^{1/4}, \end{aligned} \quad (10.47)$$

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

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')} \rightarrow \frac{B e^{-i \frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x')}, \quad (10.48)$$

natomiast dla **przejścia dołem**

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\int_{x_2}^x dx' \kappa(x')} \rightarrow \frac{B e^{i \frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\kappa(x)}} e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x')}, \quad (10.49)$$

co implikuje

$$\begin{aligned} D_1 &= \frac{1}{2} B e^{-i\frac{\pi}{4}} && \text{dla przejścia górą,} \\ D_2 &= \frac{1}{2} B e^{i\frac{\pi}{4}} && \text{dla przejścia dołem.} \end{aligned} \quad (10.50)$$

Podobnie jak w przypadku (10.41) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \psi_{II}^{(2)}(x) &= \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \frac{1}{2} \left(e^{i \int_x^{x_2} dx' k(x') - i\frac{\pi}{4}} + e^{-i \int_x^{x_2} dx' k(x') + i\frac{\pi}{4}} \right) \\ &= \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (10.51)$$

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.

10.6 Warunki kwantowania Bohra-Sommerfelda

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

$$\begin{aligned} \psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_{x_1}^x dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(- \int_x^{x_2} dx' k(x') + \frac{\pi}{4} + \int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{4} - \int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') + \frac{\pi}{2} \right). \end{aligned} \quad (10.52)$$

Porównując (10.52) z (10.51) otrzymujemy

$$\int_{x_1}^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{2} = n\pi \quad \text{i} \quad B = (-)^n A \quad (10.53)$$

ponieważ $\cos(\varphi - n\pi) = (-)^n \cos(\varphi)$.

Pierwsze z równań (10.53) stanowi treść reguły kwantyzacji Bohra-Sommerfelda, którą zwyczajowo zapisuje się w postaci całki okrężnej po okresie ruchu z wyrażenia na pęd klasyczny:

$$\oint dx' p(x') = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (10.54)$$

W przypadku jednowymiarowym

$$\oint dx' \dots = 2 \int_{x_1}^{x_2} dx' \dots$$

10.6.1 Oscylator harmoniczny

Warto w charakterze przykładu rozpatrzeć oscylator harmoniczny, dla którego

$$p(x) = \sqrt{2m} \left(E - \frac{1}{2} \omega^2 m x^2 \right)^{1/2} = \sqrt{2mE} \left(1 - \frac{\omega^2 m}{2E} x^2 \right)^{1/2}, \quad (10.55)$$

zaś punkty zwrotu

$$x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}. \quad (10.56)$$

Wprowadzając nową zmienną

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega^2 m}{2E}} x, \quad -1 < \xi < 1, \quad dx = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} d\xi \quad (10.57)$$

wyliczmy całkę

$$\oint dx' p(x') = 2 \int_{x_1}^{x_2} dx' p(x') = 4 \frac{E}{\omega} \int_{-1}^1 d\xi \sqrt{1 - \xi^2} = 2\pi \frac{E}{\omega}, \quad (10.58)$$

gdzie skorzystaliśmy z wartości całki

$$\int_{-1}^1 d\xi \sqrt{1 - \xi^2} = \frac{\pi}{2}. \quad (10.59)$$

Warunek Bohra-Sommerfelda (10.54) daje zatem dla oscylatora harmonicznego

$$\frac{E}{\omega} = \hbar \left(\frac{1}{2} + n \right), \quad (10.60)$$

co jest identyczne z dokładnym wynikiem.

10.6.2 Nieskończona studnia potencjału

Dla nieskończonej studni potencjału

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } -a < x < a \\ \infty & \text{dla } x < -a, a < x \end{cases} \quad (10.61)$$

zachodzi

$$k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad (10.62)$$

a funkcja falowa ma postać

$$\psi_{II}(x) = \frac{C_1}{\sqrt[4]{2mE/\hbar^2}} e^{i \int_{-a}^x dx' k(x')} + \frac{C_2}{\sqrt[4]{2mE/\hbar^2}} e^{-i \int_{-a}^x dx' k(x')}. \quad (10.63)$$

Ponieważ $\psi_{II}(-a) = 0$, stąd

$$C_1 = -C_2 \equiv \frac{C}{2i}. \quad (10.64)$$

A zatem

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{2mE/\hbar^2}} \sin \left(\int_{-a}^x dx' k(x') \right). \quad (10.65)$$

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

$$\int_{-a}^a dx' k(x') = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (10.66)$$

Podstawiając za $k(x')$ wyrażenie (10.62) otrzymujemy

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE} = n\pi, \quad (10.67)$$

co daje skwantowaną energię

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8a^2 m} n^2, \quad (10.68)$$

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

Wynik (10.66) można zrozumieć intuicyjnie w następujący sposób. Ponieważ funkcja falowa musi być zero w obszarach klasycznie zabronionych, 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 (10.66) 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 $\xi = \xi' = 1/2$.

10.6.3 Potencjał i twarda ściana

Rozważmy teraz przypadek, kiedy w punkcie $x = 0$ potencjał jest nieskończony a dla $x > 0$ jest równy $V(x)$, przy czym dla wygody $V(0) = 0$. Warunki zszycia WKB nie stosują się dla $x = 0$, gdzie funkcja falowa znika dla $k \neq 0$. Zatem w obszarze $0 < x < x_2$ funkcja falowa ma postać:

$$\psi_{II}^{(1)}(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(\int_0^x dx' k(x') \right), \quad (10.69)$$

natomiast funkcja falowa przedłużona z obszaru $x_2 < x$ ma dalej postać

$$\begin{aligned} \psi_{II}^{(2)}(x) &= \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(\int_x^{x_2} dx' k(x') + \frac{\pi}{4} \right), \end{aligned} \quad (10.70)$$

gdzie skorzystaliśmy z własności $\cos(\varphi - \pi/2) = \sin \varphi$. Warto teraz skorzystać z tożsamości $\sin(\varphi) = \sin(-\varphi + \pi)$, co daje

$$\psi_{II}^{(2)}(x) = \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(- \int_x^{x_2} dx' k(x') + \frac{3\pi}{4} \right). \quad (10.71)$$

Przepiszmy argument funkcji sinus ze wzoru (10.71)

$$- \int_x^{x_2} dx' k(x') + \frac{3\pi}{4} = - \int_0^{x_2} dx' k(x') + \frac{3\pi}{4} + \int_0^x dx' k(x'). \quad (10.72)$$

Porównując ten wzór z (10.69) otrzymujemy warunek kwantyzacji

$$\int_0^{x_2} dx' k(x') - \frac{3\pi}{4} = n\pi, \quad (10.73)$$

co można przepisać jako

$$\oint dx' p(x') = 2\hbar\pi \left(n + \frac{3}{4} \right). \quad (10.74)$$

10.7 Warunki stosowalności przybliżenia semiklasycznego

Wydawałoby się, że warunkiem stosowalności rozwinięcia (10.18) jest aby

$$|\hbar S_1| \ll |S_0|. \quad (10.75)$$

Jednak, zarówno S_0 jak i S_1 są funkcjami x , przy czym S_0 jest funkcją monotoniczną i warunek ten jest zależny od x . Zauważmy, że moduł w równaniu (10.75) jest konieczny, gdyż S_1 jest urojone (pamiętajmy, że równanie na S_1 nie zależy od znaku klasycznego pędu). Dodatkowo człony $S_{0,1}$ mają zupełnie różne znaczenie fizyczne: S_0 jest fazą funkcji falowej, a S_1 odpowiada za jej amplitudę. Dlatego za warunek stosowalności przybliżenia WKB przyjęło się żądać, aby zmiany amplitudy funkcji falowej otrzymanej w przybliżeniu WKB były znacznie wolniejsze niż zmiany fazy. Innymi słowy, aby funkcja falowa na małych odcinkach x była w przybliżeniu funkcją falową o stałej amplitudzie.

Zatem zamiast badać równanie (10.75) badamy stosunek pochodnych:

$$\left| \frac{\hbar S_1'}{S_0'} \right| = \left| \frac{k'}{2k^2} \right| \ll 1. \quad (10.76)$$

Ostatni wzór bierze się stąd, że

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

i

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

Warto wzór (10.76) przepisać w nieco innej formie, zauważając, że długość fali de Broglie'a $\lambda = 2\pi/k$:

$$\frac{\lambda}{4\pi} \left| \frac{dk}{dx} \right| \ll k, \quad (10.77)$$

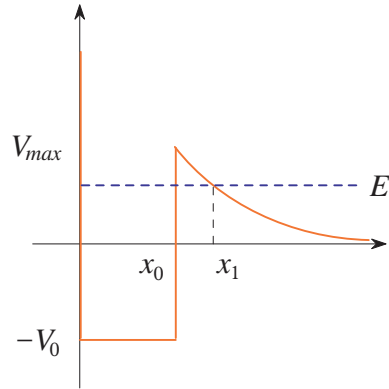
co oznacza, że zmiana k na odcinku $\lambda/4\pi$ jest mała w porównaniu z k . Innymi słowy *względna* zmiana k na odległości rzędu $\lambda/4\pi$ jest mniejsza (silnie) od 1. Ponieważ za zmianę k z x odpowiedzialny jest potencjał $V(x)$, to warunek (10.77) oznacza w praktyce, że potencjał jest na tyle 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 $\lambda \rightarrow \infty$.

10.8 Przejście przez barierę

Rozpatrzmy przypadek cząstki poruszającej się w potencjale pokazanym na rysunku.

Ponieważ w obszarze $x_0 < x < x_1$ formalnie pęd cząstki jest urojony funkcja falowa na brzegu bariery będzie miała postać

$$\psi(x_1) = \psi(x_0) e^{-\int_{x_0}^{x_1} dx \kappa(x)} = \psi(x_0) e^{-\frac{\gamma}{2}}. \quad (10.78)$$



Rysunek 4: Tunelowanie

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

$$v = \frac{p}{m} = \sqrt{\frac{2(E + V_0)}{m}}. \quad (10.79)$$

Częstość uderzeń w barierę w punkcie x_0 wynosi

$$\nu = \frac{v}{2x_0}. \quad (10.80)$$

Przy każdym uderzeniu prawdopodobieństwo ucieczki wynosi

$$P = e^{-\gamma}. \quad (10.81)$$

Prawdopodobieństwo ucieczki na jednostkę czasu (tempo rozpadu lub po angielsku *decay rate*) wynosi

$$R = P\nu = \sqrt{\frac{E + V_0}{2m}} \frac{1}{x_0} e^{-\gamma} \quad (10.82)$$

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).