15 Przybliżenie semiklasyczne

W rozdziale (??) przybliżyliśmy gładki potencjał przez prostokątną studnię ptencjału, rozciągającą się w przedziale od $-\xi$ do ξ. Przykład studni jest pouczający sam w sobie, jednak jako przybliżenie gładkiego potencjału jest niewątpliwie daleki od ideału. Okazuje się, że można dla praktycznie każdego potencjału wykonać rachunek przybliżony, który pozwala wyliczyć poziomy energetyczne w dużo wiarygodniejszy sposób. Przybliżenie to 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 *przebliżeniem 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.

15.1 Ogólna postać funkcji falowej

Punktem wyjściowym jest zależne od czasu równanie Scrödingera

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi + V(\vec{r})\psi. \tag{15.1}$$

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

$$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{-i(Et-S(\vec{r}))/\hbar}. \tag{15.2}$$

Równanie (15.1) można przepisać jako równanie na fazę S:

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{\nabla}S(\vec{r})\right)^2 - (E - V(\vec{r})) - i\frac{\hbar}{2m}\vec{\nabla}^2 S(\vec{r}) = 0. \tag{15.3}$$

W przypadku jednowymiarowym, do którego się teraz ograniczymy, równanie (15.3) przyjmuje postać:

$$S'^2 - 2m\,(E-V) - i\hbar S'' = 0, \tag{15.4}$$

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

$$S = S_0 + \hbar\, S_1 + \ldots, \tag{15.5}$$

co daje

$$S_0'^2 + 2\hbar\, S_0' S_1' + \ldots - 2m\,(E - V) - i\hbar S_0'' + \ldots = 0. \tag{15.6}$$

Prównując współczynniki przy kolejnych potęgach $\hbar$ otrzymujemy dwa równania:

$$\begin{aligned} S_0' &= \pm\sqrt{2m\,(E-V)}, \\ S_0'' &= -2i\, S_0' S_1'. \end{aligned} \tag{15.7}$$

Jak widać S_0' ma sens *klasycznego* pędu cząstki poruszającej się w potencjale $V(x)$. Pierwsze z równań (15.7) daje się łatwo scałkować:

$$S_0(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m\,(E - V(x'))} + \text{const.}, \tag{15.8}$$

gdzie stała const. związana z dolną granicą całkowania, redefiniuje i tak na razie dowolną stałą A z rówania (15.2) i dlatego może zostać pominięta. Drugie z równań (15.7) daje się też prosto scałkować

$$\frac{S_0''}{S_0'} = \frac{d}{dx} \ln S_0' = -2i\, S_1' \tag{15.9}$$

i dalej

$$S_1(x) = \frac{i}{2} \ln S_0'(x) = \frac{i}{2} \ln p(x). \tag{15.10}$$

Warto zauważyć, że równanie na S_1 nie zależy od znaku S_0 (znak ten upraszcza się w (15.9)), a ewentualna stała addytywna znowu może zostać wciągnięta do A.

Podsumowując, ogólna postać funkcji falowej ψ dana jest jako

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_\pm\, e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E-V(x'))}}\, e^{-\ln \sqrt[4]{2m(E-V(x))}} \\ &= \frac{A_\pm}{\sqrt[4]{2m\,(E - V(x))}}\, e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E-V(x'))}}. \end{aligned} \tag{15.11}$$

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

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\,(E - V(x))} \text{ dla } x_1 < x < x_2 \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\,(V(x) - E)} \text{ dla } x < x_1 \text{ lub } x_2 < x, \end{aligned} \tag{15.12}$$

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

15.2 Postać funkcji falowej

Zapiszmy funkcję (15.11) w obszarach I) i II):

$$\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int_x^{x_1} dx'\, \kappa(x')},$$

$$\psi_{II}^{(1)}(x) = \frac{C_1}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\, k(x')} + \frac{C_2}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{-i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\, k(x')}, \tag{15.13}$$

gdzie dla funkcji ψ_I wybraliśmy znak $-$ w eksponencie, aby znikała dla $x \to -\infty$, 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

$$\psi_{II}^{(2)}(x) = \frac{D_1}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\, k(x')} + \frac{D_2}{\sqrt{\hbar k(x)}} e^{-i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\, k(x')}. \tag{15.14}$$

I wreszcie w obszarze III)

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar \kappa(x)}} e^{-\int\limits_{x_2}^{x} dx'\, \kappa(x')}. \tag{15.15}$$

15.3 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 (15.11) 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

$$\begin{aligned} V(x) &= E - F_1(x - x_1) + \ldots \text{ dla } x \sim x_1, \\ V(x) &= E + F_2(x - x_2) + \ldots \text{ dla } x \sim x_2, \end{aligned} \tag{15.16}$$

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 (15.11) po lewej i po prawej stronie punktów zwrotu. Metoda ta opisana jest w podręczniku Schiffa.

My postąpimy jednak inaczej: obejdziemy osobliwość funkcji (15.11) po małym okręgu w płaszczyźnie zespolonego x. Jest to metoda opisana w podręczniku Landaua i Lifszica.

Dla x bliskich x_1 zachodzi

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mF_1}\,(x - x_1)^{1/2}, \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mF_1}\,(x_1 - x)^{1/2}. \end{aligned} \tag{15.17}$$

W konsekwencji

$$
\begin{aligned}
\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x') &= \frac{2}{3\hbar}\sqrt{2mF_1}\,(x-x_1)^{3/2}\,, \\
\int\limits_{x}^{x_1} dx'\,\kappa(x') &= \frac{2}{3\hbar}\sqrt{2mF_1}\,(x_1-x)^{3/2}
\end{aligned}
\tag{15.18}
$$

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

$$
x_1 - x = \rho e^{i\varphi},
\tag{15.19}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\int\limits_{x}^{x_1} dx'\,\kappa(x') &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar}\rho^{3/2} \rightarrow \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar}\rho^{3/2}e^{-i\frac{3\pi}{2}} \\
&= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar}(x-x_1)^{3/2}i = i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x')
\end{aligned}
\tag{15.20}
$$

Podobnie czynnik

$$
\begin{aligned}
\sqrt{\hbar\kappa(x)} &= \sqrt[4]{2mF_1}\,(x_1-x)^{1/4} \longrightarrow \sqrt[4]{2mF_1}\,(x-x_1)^{1/4}\,e^{-i\frac{\pi}{4}} \\
&= \sqrt{\hbar k(x)}\,e^{-i\frac{\pi}{4}}.
\end{aligned}
\tag{15.21}
$$

W sumie otrzymujemy, że:

$$
\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}}e^{-\int\limits_{x}^{x_1} dx'\,\kappa(x')} \longrightarrow \frac{A\,e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar k(x)}}e^{-i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x')}.
\tag{15.22}
$$

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

$$
C_2 = \frac{1}{2}A\,e^{i\frac{\pi}{4}}.
\tag{15.23}
$$

Obchodząc osobliwość po dolnym półokręgu otrzymujemy

$$
\begin{aligned}
\int\limits_{x}^{x_1} dx'\,\kappa(x') &= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar}\rho^{3/2} \longrightarrow \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar}\rho^{3/2}e^{i\frac{3\pi}{2}} \\
&= \frac{2\sqrt{2mF_1}}{3\hbar}(x-x_1)^{3/2}(-i) = -i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x')
\end{aligned}
\tag{15.24}
$$

oraz

$$\begin{aligned}\sqrt{\hbar\kappa(x)} &= \sqrt[4]{2mF_1}\,(x_1-x)^{1/4} \longrightarrow \sqrt[4]{2mF_1}\,(x-x_1)^{1/4}\,e^{+i\frac{\pi}{4}} \\ & \sqrt{\hbar k(x)}\,e^{+i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \tag{15.25}$$

Z ròwnań (15.24,15.25) wynika, że

$$\psi_I(x) = \frac{A}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}}\,e^{-\int\limits_x^{x_1} dx'\,\kappa(x')} \longrightarrow \frac{A\,e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar k(x)}}\,e^{i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x')}. \tag{15.26}$$

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

$$C_1 = \frac{1}{2}A\,e^{-i\frac{\pi}{4}}. \tag{15.27}$$

Zanim podstawimy wartości C_1 i C_2 do równania (15.13) 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 (15.13) przy przejściu w stronę przeciwną, to jest z obszaru II do obszaru I. W obszarze II w pobliżu $x = x_1$

$$\pm i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x') \simeq \rho^{3/2}\left(\pm i\cos\frac{3\varphi'}{2} \mp \sin\frac{3\varphi'}{2}\right), \tag{15.28}$$

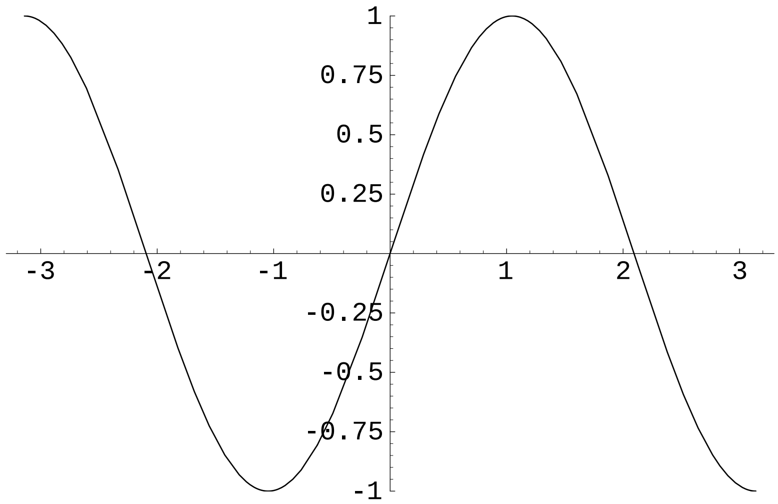
przy czym φ' zmienia się od 0 do π dla przejścia górą lub 0 do $-\pi$ dla przejścia dołem. Rozważmy przejście górą. Decydujący jest tu czynnik:

$$\sin\frac{3\varphi'}{2}, \tag{15.29}$$

który na początku maleje dla części proporcjonalnej do C_1(znak + w eksponencie), natomiast 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 wrazu eksponencjalnie małego na tle członu wiodącego. Dla przejścia dołem sytuacja się odwraca i „gubi" się człon proporcjonalny do C_2.

Podstawiając (15.23) i (15.27) do równania (15.13) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\psi_{II}^{(1)}(x) &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}}\frac{1}{2}\left(e^{i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x')-i\frac{\pi}{4}} + e^{-i\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x')+i\frac{\pi}{4}}\right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}}\cos\left(\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x') - \frac{\pi}{4}\right)\end{aligned} \tag{15.30}$$



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

$$\begin{aligned}\psi_{III}(x) &= \frac{B}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}}e^{-\int\limits_{x_2}^{x} dx'\,\kappa(x')}, \\ \psi_{II}^{(2)}(x) &= \frac{D_1}{\sqrt{\hbar k(x)}}e^{i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x')} + \frac{D_2}{\sqrt{\hbar k(x)}}e^{-i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x')}. \end{aligned} \tag{15.31}$$

W tym obszarze

$$\begin{aligned}k(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mF_2}\,(x_2-x)^{1/2}, \\ \kappa(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mF_2}\,(x-x_2)^{1/2}. \end{aligned} \tag{15.32}$$

Sparametryzujmy

$$x - x_2 = \rho\, e^{i\varphi}, \tag{15.33}$$

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

$$\begin{aligned}(x-x_2)^{3/2} &= \rho^{3/2} \longrightarrow \rho^{3/2}e^{\pm i\frac{3\pi}{2}} = \mp i(x_2-x)^{3/2}, \\ (x_2-x)^{1/4} &= \rho^{1/4} \longrightarrow \rho^{1/4}e^{\pm i\frac{\pi}{4}} = e^{\pm i\frac{\pi}{4}}(x_2-x)^{1/4}, \end{aligned} \tag{15.34}$$

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

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}}e^{-\int\limits_{x_2}^{x} dx'\,\kappa(x')} \longrightarrow \frac{B\,e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}}e^{i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x')}, \tag{15.35}$$

natomiast dla przejścia dołem

$$\psi_{III}(x) = \frac{B}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-\int\limits_{x_2}^{x} dx'\,\kappa(x')} \longrightarrow \frac{B\, e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{\hbar\kappa(x)}} e^{-i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x')}, \tag{15.36}$$

co implikuje

$$D_1 = \frac{1}{2} B\, e^{-i\frac{\pi}{4}},\ D_2 = \frac{1}{2} B\, e^{i\frac{\pi}{4}}. \tag{15.37}$$

Podobnie jak w przypadku (15.30) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \psi^{(2)}_{II}(x) &= \frac{B}{\sqrt{\hbar k(x)}} \frac{1}{2} \left(e^{i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x') - i\frac{\pi}{4}} + e^{-i\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x') + i\frac{\pi}{4}} \right) \\ &= \frac{B}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos\left(\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x') - \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \tag{15.38}$$

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.

15.4 Warunki kwantowania Bohra-Sommerfelda

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

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}_{II}(x) &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos\left(\int\limits_{x_1}^{x} dx'\,k(x') - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos\left(-\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x') + \frac{\pi}{4} + \int\limits_{x_1}^{x_2} dx'\,k(x') - \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar k(x)}} \cos\left(\int\limits_{x}^{x_2} dx'\,k(x') - \frac{\pi}{4} - \int\limits_{x_1}^{x_2} dx'\,k(x') + \frac{\pi}{2} \right). \end{aligned} \tag{15.39}$$

Porównując (15.39) z (15.38) otrzymujemy

$$\int\limits_{x_1}^{x_2} dx'\,k(x') - \frac{\pi}{2} = n\pi \text{ i } B = (-)^n A. \tag{15.40}$$

Pierwsze z równań (15.40) stanowi treść reguły kwantyzacji Bohra-Sommerfelda, którą zwyczajowo zapisuje się w postaci całki okrężnej po okresie ruchu z wyrażenia na pęd klasyczny:

$$\oint dx'\,p(x') = 2\pi\hbar \left(\frac{1}{2} + n \right) \tag{15.41}$$

15.4.1 Oscylator harmoniczny

Warto w charakterze przykładu rozpatrzeć oscylator harmoniczny, dla którego

$$p(x) = \sqrt{2m}\left(E - \frac{1}{2}\omega^2 m\, x^2\right)^{1/2} = \sqrt{2mE}\left(1 - \frac{\omega^2 m}{2E}x^2\right)^{1/2}, \tag{15.42}$$

zaś punkty zwrotu

$$x_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}. \tag{15.43}$$

Wprowadzając nową zmienną

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega^2 m}{2E}}x,\ -1 < \xi < 1,\ dx = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}d\xi \tag{15.44}$$

wyliczmy całkę

$$\oint dx'\, p(x') = 2\int\limits_{x_1}^{x_2} dx'\, p(x') = 4\frac{E}{\omega}\int\limits_{-1}^{1} d\xi\,\sqrt{1-\xi^2} = 2\pi\frac{E}{\omega}, \tag{15.45}$$

gdzie skorzystaliśmy z wartości całki

$$\int\limits_{-1}^{1} d\xi\,\sqrt{1-\xi^2} = \frac{\pi}{2}. \tag{15.46}$$

Warunek Bohra-Sommerfelda (15.41) daje zatem dla oscylatora harmonicznego

$$\frac{E}{\omega} = \hbar\left(\frac{1}{2} + n\right), \tag{15.47}$$

co jest identyczne z dokładnym wynikiem.

15.4.2 Nieskończona studnia potencjału

Dla nieskończonej studni potencjału

$$V(x) = \left\{\begin{array}{ccc} 0 & \text{dla} & -a < x < a \\ \infty & \text{dla} & x < -a,\ a < x \end{array}\right. \tag{15.48}$$

zachodzi

$$k(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}, \tag{15.49}$$

a funkcja falowa ma postać

$$\psi_{II}(x) = \frac{C_1}{\sqrt[4]{2mE}}\, e^{\,i\int\limits_{-a}^{x} dx'\, k(x')} + \frac{C_2}{\sqrt[4]{2mE}}\, e^{\,-i\int\limits_{-a}^{x} dx'\, k(x')}. \tag{15.50}$$

Ponieważ $\psi_{II}(-a) = 0$, stąd

$$C_1 = -C_2 \equiv \frac{C}{2i}. \tag{15.51}$$

A zatem

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{2mE}} \sin\left(\int_{-a}^{x} dx'\, k(x')\right). \tag{15.52}$$

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

$$\int_{-a}^{a} dx'\, k(x') = n\pi. \tag{15.53}$$

Podstawiając za $k(x')$ wyrażenie (15.49) otrzymujemy

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2mE} = n\pi, \tag{15.54}$$

co daje skwantowaną energię

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{8a^2m}\, n^2, \tag{15.55}$$

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

15.5 Warunki stosowalności przybliżenia semiklasycznego

Warunkiem stosowalności rozwinięcia (15.5) jest aby

$$\hbar S_1 \ll S_0. \tag{15.56}$$

Jednak, zarówno S_0 jak i S_1 są funkcjami x, przy czym S_0 jest funkcją monotoniczną. Zamiast badać równanie (15.56) przyjęło się badać stosunek pochodnych.

$$\left|\frac{\hbar S_1'}{S_0'}\right| = \left|\frac{k'}{2k^2}\right| \ll 1. \tag{15.57}$$

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

$$\frac{\lambda}{4\pi}\left|\frac{dk}{dx}\right| \ll k, \tag{15.58}$$

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 (15.58) 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 $k \to 0$ a $\lambda \to \infty$.