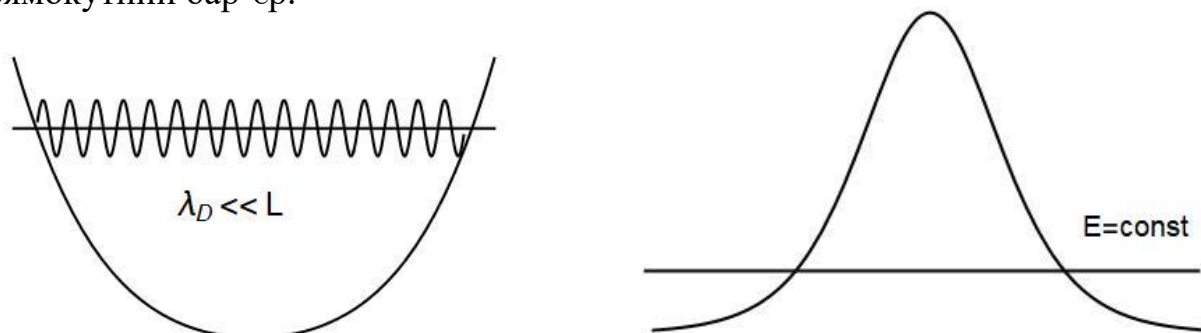


КВАЗИКЛАСИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ.

Розглянемо наближений розв'язок РШ за умови $\lambda_D \ll L$ – довжина хвилі де Бройля мала у порівнянні з лінійними розмірами системи. Наприклад, це дуже широка та глибока потенціальна яма або слабо прозорий (широкий і високий) прямокутний бар'єр.



Властивості квантової системи в цьому випадку близькі до класичних. Квантування проявляється «слабко», але властивості міняються кардинально (квантування рівнів енергії в ямі й тунелювання через класично недоступну область у випадку потенціального бар'єра). Розглянемо розв'язок РШ для спрощення розрахунків на прикладі одномірного стаціонарного РШ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

за умови, що постійна Планка є малим параметром. Розв'язок будемо шукати у вигляді

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)}.$$

Точне РШ прийме вид

$$\frac{1}{2m}(\sigma')^2 - \frac{i\hbar}{2m}\sigma'' = E - U(x), \quad (2)$$

Розв'язок шукаємо методом послідовних наближень

$$\sigma = \sigma_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots$$

$$\frac{1}{2m} \left(\sigma'_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma'_1 \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} (\sigma''_0 + \sigma''_1) \approx E - U(x);$$

$$(\sigma'_0)^2 + 2 \left(\frac{\hbar}{i} \right) \sigma'_0 \sigma'_1 - i\hbar \sigma''_0 \approx 2m[E - U(x)];$$

У нульовому наближенні (2) прийме вигляд

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma_0}{dx} \right)^2 + U(x) = E \quad (3)$$

– це рівняння Гамільтона – Якобі для «скороченої» дії $S_0(\vec{r})$. Таким чином, стаціонарне РШ для частинки в зовнішньому полі за умови $\hbar \rightarrow 0$ переходить у рівняння Гамільтона – Якобі класичної механіки. Це є «класична границя» квантової механіки.

Нестационарне РШ для частинки в зовнішньому полі має своєю класичною границею рівняння Гамільтона – Якобі для функції дії $S(\vec{r}, t)$. (Це ствердження доводити не будемо.).

З (4) одержимо

$$\frac{d\sigma_0}{dx} = \pm \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (5)$$

У класичній механіці в постійному зовнішньому полі $U(x)$ зберігається енергія

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

Класичний імпульс $p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}$. Розв'язок (5) можна представити у вигляді

$$\sigma_0(x) = \pm \int p(x) dx + \text{const.} \quad (6)$$

Перше наближення

$$2\sigma'_0 \sigma'_1 + \sigma''_0 = 0; \quad \frac{d\sigma_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{\sigma''_0}{\sigma'_0}; \quad \sigma'(x) = \pm p(x);$$

$$\frac{d\sigma_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} (\ln p(x));$$

$$\sigma_1(x) = C \ln \left(\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \right). \quad (7)$$

Умова застосовності

$$(\sigma'_0)^2 \gg \left| 2 \left(\frac{\hbar}{i} \right) \sigma'_0 \sigma'_1 - i \hbar \sigma''_0 \right|; \quad p(x)^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|; \quad |p(x)| \gg \left| \frac{\hbar}{p(x)} \frac{dp}{dx} \right|;$$

$$\left| \frac{dp}{dx} \right| \tilde{\lambda} \ll |p(x)|, \quad \tilde{\lambda} = \frac{\hbar}{p(x)}.$$

Тобто зміна імпульсу на відстанях порядку довжини хвилі де Бройля повинна бути багато менше імпульсу. Умова застосовності порушується поблизу класичних точок зупинки, у яких імпульс звертається в нуль.

Наближений розв'язок РШ із урахуванням нульового й першого наближень (6) і (7) має вигляд

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right] + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right], \quad E > U(x) \quad (8)$$

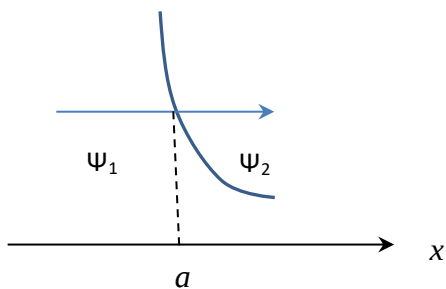
у класично доступній області та

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx \right] + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx \right], \quad E < U(x). \quad (9)$$

у класично недоступній області, у якій повна енергія менше потенціальної, а імпульс – уявний, тому $|p(x)| = \sqrt{2m[U(x) - E]}$.

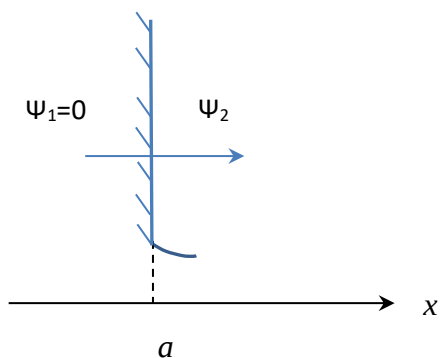
ПРАВИЛО КВАНТУВАННЯ БОРА – ЗОМЕРФЕЛЬДА

Умова квазикласичності порушується поблизу точок зупинки. Поблизу від таких точок хвильовими функціями (8) і (9) користуватися не можна. Розв'язки потрібно «зшити» так, щоб ХФ залишалася безперервною. Якщо потенціальна енергія в поблизу від точки зупинки змінюється плавно і її розкладання в ряд Тейлора має доданок, лінійний по $x - a$, можна «зшивку» виконати через розв'язок РШ із потенціальною енергією $U(x) \approx U(a) + U'(a)(x - a)$. Точні розв'язки для такої потенціальної енергії – функції Ейрі. Відомі асимптотики функції Ейрі для великих значень аргументу порівнюємо з (8), (9) та знаходимо такі комбінації двох лінійно незалежних рішень (8) та (9), які б співпадали асимптотиками функції Ейрі. Приведемо без висновку умови такої «зшивки» для розв'язків 8) та (9) при переході із класично недоступної області в класично доступну область



$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx\right] \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4}\right].$$

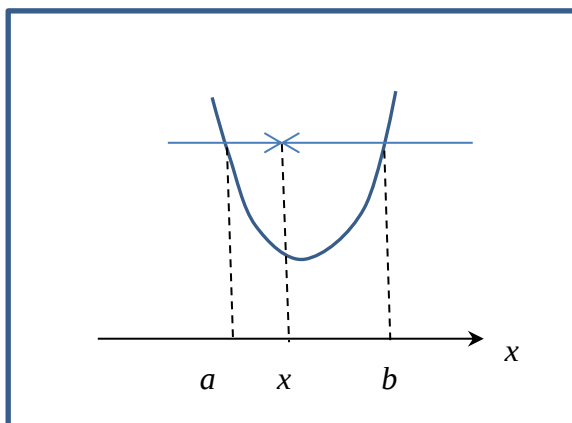
Для вертикальної стінки умова квазикласичності виконується до самої границі, а квантова частинка не може подолати нескінченний потенціал, тому умова «зшивки» інша



$$0 \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx\right] \quad (11)$$

Правило квантування Бора – Зомерфельда

Знайдемо квазикласичну ХФ частинки, яка здійснює фінітний рух у потенціальній ямі за умови «гладких» стінок (10). Перехід із класично недоступної області ліворуч-праворуч і праворуч ліворуч у довільну точку x в середині ями



$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx\right] \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx}_{\alpha} + \frac{\pi}{4}\right] = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin\left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx}_{\beta} + \frac{\pi}{4}\right] \leftarrow \frac{C'}{2\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx\right].$$

Рівність можлива за умови $C' = \pm C$ й

$$\sin \alpha \mp \sin \beta = 0;$$

$$\alpha + \beta = \pi(n+1),$$

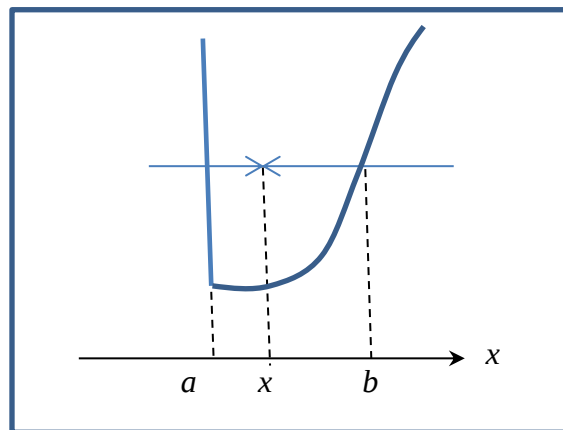
$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx + \frac{\pi}{2} = \pi(n+1), \quad n=0,1,2,\dots$$

Якщо розглядати інтеграл в останньому виразі від a до b як інтеграл від b до a з імпульсом $p < 0$, то

$$\int_a^b p dx - \int_b^a p dx = 2 \int_a^b p dx = \oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Криволінійний інтеграл є не що інше, як адіабатичний інваріант. Таким чином, у **квазикласичному наближенні при фінітному русі адіабатичні інваріанти квантуються**. Іншими словами квантується площа траєкторії руху частинки у фазовому просторі. Фазовий простір – це $6N$ -мірний простір координат і імпульсів системи з $3N$ ступенями свободи. Для частинки з одним ступенем свободи фазовий простір двовимірний.

Якщо одна зі стінок ями вертикальна,



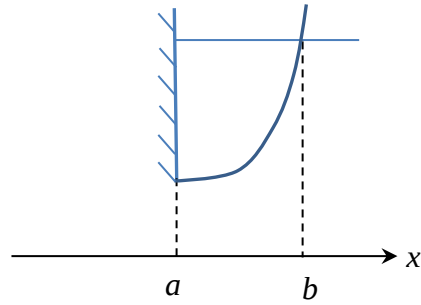
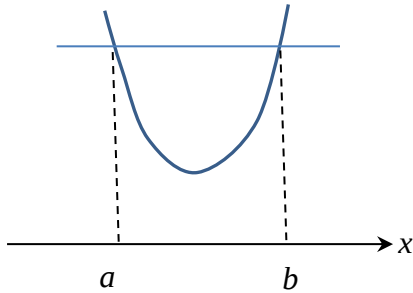
то умова «зшивки» прийме вид

$$0 \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx}_{\alpha}\right] = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin\left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx}_{\beta} + \frac{\pi}{4}\right] \leftarrow \frac{C'}{2\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx\right].$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx + \frac{\pi}{4} = \pi(n+1), \quad n=0,1,2,\dots$$

$$\int_a^b p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right) \text{ або } \oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right).$$

Знайшли правило квантування Бора – Зомерфельда



$$\int_a^b p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right);$$

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

$$\int_a^b p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right);$$

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

Умову квазикласичності можна записати ще й так $n \gg 1$ – квантові числа повинні приймати великі значення.

Знайдемо у квазикласичному наближенні рівні енергії лінійного осцилятора

Для осцилятора зручно скористатися формулою $\oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Енергія класичного осцилятора зберігається $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$.

Траєкторія руху у фазовому просторі є еліпсом

$$\frac{p^2}{(\sqrt{2mE})^2} + \frac{x^2}{(\sqrt{2E/m\omega^2})^2} = 1.$$

с півосьми $\sqrt{2E/m\omega^2}$ й $\sqrt{2mE}$. Його площа

$$S_{\text{ellipse}} = \pi \sqrt{2E/m\omega^2} \cdot \sqrt{2mE} = \frac{2\pi E}{\omega} = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Вираз для рівнів енергії осцилятора у квазикласичному наближенні співпадає з точним результатом

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Квазикласичне наближення для рівнів енергії одноелектронного атома та для нескінченно глибокої прямокутної ями також співпадають з відповідними точними рівнями енергії.

Наприклад, для нескінченно глибокої ями ширини a правило квантування буде таким (з обох боків виконується умова «зшивання» (11))

$$\int_0^a p dx = \pi \hbar (n + 1). \quad (12)$$

В середині ями потенціальна енергія дорівнює нулю, а класичний імпульс зберігається та дорівнює $p = \sqrt{2mE}$. Маємо

$$\sqrt{2mE} \int_0^a dx = \pi \hbar (n + 1); \quad \sqrt{2mE} a = \pi \hbar (n + 1);$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n + 1)^2}{2ma^2}.$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n + 1)^2}{2ma^2}. \quad (13)$$

Формула (13) співпадає з точним результатом.