Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории
Отлично нам расшарил тему на последнем семинаре
Толоконникову Андрею Владимировичу

Толоконников: Давно я не обсирал космологию! В космологии нет эксперимента, только теория. В твёрдом теле как? Есть теория и есть эксперимент. Поэтому там (зацензурено, синоним – врать) нельзя…

Сначала обрисуем проблему (тут будет многобукаф, чтобы точно поняли, в чём проблема).
Было прорешано огромное количество задач на одномерное движение, где потенциал достаточно хороший, чтобы можно найти аналитическое решение. Однако есть задачи, где U(x) имеет достаточно противный вид.
А нам по-прежнему нужно решить ДУ

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi(x) = 0$$

Обозначим $\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)$ как $k^2(x)$. Тогда ДУ перепишется как

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + k^2(x)\Psi(x) = 0$$

Кстати, нюанс: $\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)$ при каких-то x может быть <0, а мы его как $k^2(x)$ обозначили. Дабы не работать с мнимыми числами, рассмотрим два ДУ:

$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + k^2(x)\Psi(x) = 0$ - для тех x, где E>U(x), $k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)}$

$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} = æ^2(x)\Psi(x)$ – для тех x, где E<U(x), $æ(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E)}$

Напомним, что мы знаем U(x), а следовательно, знаем и k(x) с æ(x).

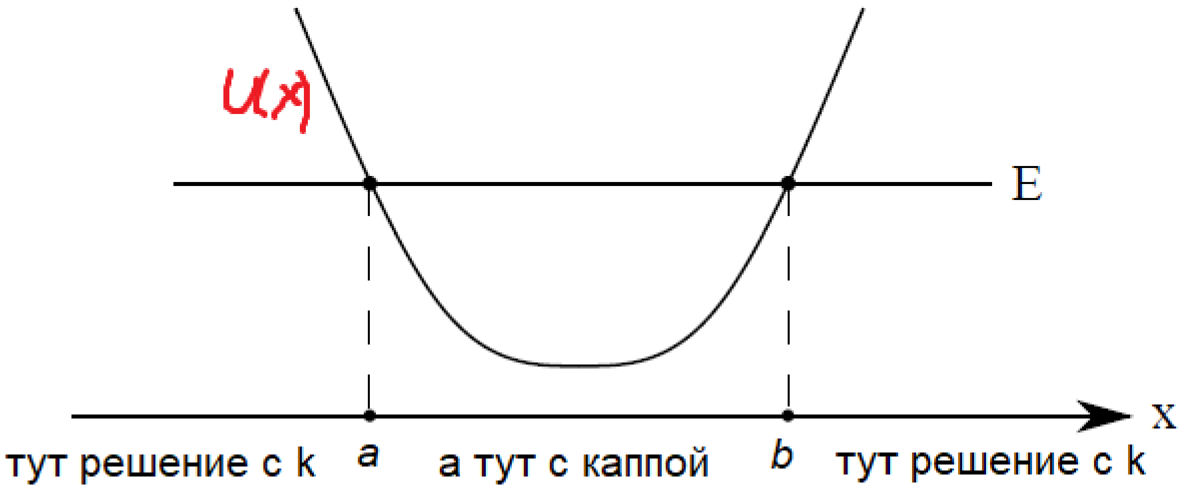
Если эти дифуры приближённо решать (опустим математику), то получаем (и это приближение как раз и называется квазиклассическим):

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k(x)}}e^{-i\int k(x)dx} + \frac{B}{\sqrt{k(x)}}e^{i\int k(x)dx}$$

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{æ(x)}}e^{-\int æ(x)dx} + \frac{B}{\sqrt{æ(x)}}e^{\int æ(x)dx}$$

Строгий вывод рассказывают на лекциях (причём как по квантам, так и по ОММ). Нестрогий вывод (объясняющий зато, почему это приближение называется «квазиклассическим») я дам в следующей методичке. В этой будем решать задачи.

Если во всех точках E или больше U(x), или меньше U(x), то на этом всё, решение получено. Но, как правило, это не так. Типовая ситуация такая:



Точки a и b, где U(x)=E, называются точками поворота (такая терминология пришла из теормеха – там в них частица разворачивалась «моей энергии не хватает, чтобы преодолеть потенциал» и улетала назад. В квантах же она вероятностно экспоненциально проникает ☺)

В этих точках поворота нам предстоит сшивка решений. Отметим, что сшивка втупую «в точках a и b должны совпадать сами ВФ и их производные» не работает. Если мы посмотрим на формулы ещё раз, то при E=U(x) k(x) и æ(x) будут равны 0, а они стоят в знаменателе. Получим 0 в знаменателе, что не есть хорошо.

Сшивка производится методами ТФКП и крайне мучительна. Результат таков:
При x>a ВФ, миновав точку поворота в a, равна
$\Psi(x)=\frac{A}{\sqrt{k(x)}}*\cos(\int_a^x k(y)dy-\frac{\pi}{4})$
Есть равносильная запись:
$\Psi(x)=\frac{A}{\sqrt{k(x)}}*\sin(\int_a^x k(y)dy+\frac{\pi}{4})$
Благо что $\sin(x+\frac{\pi}{4})=\cos(x-\frac{\pi}{4})$.
С другой стороны, при x<b, ВФ (идя как бы справа налево), миновав точку поворота в b, равна
$\Psi(x)=\frac{A}{\sqrt{k(x)}}*\cos(\int_x^b k(y)dy-\frac{\pi}{4})$.

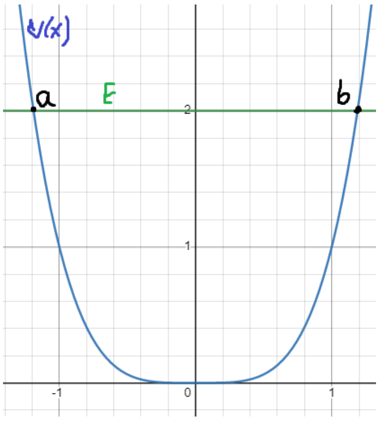
Получается, что $\cos(\int_a^x k(y)dy - \frac{\pi}{4}) = \cos(\int_x^b k(y)dy - \frac{\pi}{4})$. Ну-ка, когда два косинуса равны? Когда или разность их аргументов кратна π, или они противоположны. Получаем правило квантования Зоммерфельда:

$$\boxed{\int_a^b k(x)dx = \pi(n + \frac{1}{2})}$$

Задача. Потенциал имеет вид $U(x)=Cx^4$. Найти энергетический спектр с помощью Бора-Зоммерфельда.

Если бы потенциал был бы вида $U(x)=Cx^2$, то это был бы гармонический осциллятор, где мы всё знаем, потому что он считается аналитически ***точно***. Но у нас $U(x)=Cx^4$. Придётся использовать приближённые методы, в том числе Бора-Зоммерфельда.

Убеждаемся, что потенциал вида «яма»:



Находим точки поворота a и b. В них $U(x)=E$, т.е. $Cx^4=E$. Отсюда получаем, что $a = -\sqrt[4]{E/C}$, $b = \sqrt[4]{E/C}$

Пишем Бора-Зоммерфельда

$$\int_a^b k(x)dx = \pi(n + \frac{1}{2})$$

И поставляем в него a и b:

$$\int_{-\sqrt[4]{E/C}}^{\sqrt[4]{E/C}} k(x)dx = \pi(n + \frac{1}{2})$$

$$\int_{-\sqrt[4]{E/C}}^{\sqrt[4]{E/C}} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)dx} = \pi(n + \frac{1}{2})$$

Получаем уравнение относительно E (решаемое, естественно, численно). У него существует счётное количество корней, которые и образуют энергетический спектр. Т.е. мы как раз получили, что нам нужно – энергетический спектр.

Как правило, именно энергетический спектр нам реально нужен. Об этом хорошо высказался Толоконников: «*Как будем решать задачу со сложным потенциалом U(x)? Сначала вы будете плакать. По крайней, у меня именно так сначала происходит. Потом думать, а нельзя ли там красиво-быстро нашаманить. Нельзя. Потом снова плакать. И наконец – решать численно*». Но численно сложно: нам нужно перебрать множество тысячи E, решить для каждого ДУ, и из них отобрать лишь те, которые удовлетворят нашим ГУ/условиям сшивки (и отсеять 99% Ешек, да и оставшийся 1% будет удовлетворять неточно, в пределах погрешности)… А тут, с помощь Бора-Зоммерфельда, нам надо всего-то лишить численно одно уравнение, а не тысячи. Круто? Круто.

Как вы уже поняли, для решения задач полезно запоминать Бора-Зоммерфельда в формулировке, где k(x) расписано как $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))}$:

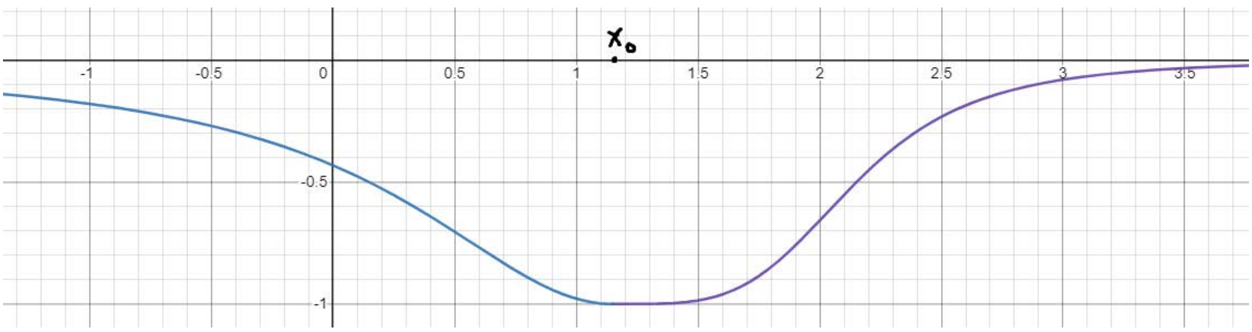
$$\int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))}dx = \pi(n+\frac{1}{2})$$

Ну-ка, ещё одна задача для закрепления с потенциалом вида «яма»:

$U(x)=-\frac{1}{1+(x-x_0)^2}$, $x<=x_0$

$U(x)=-\frac{1}{1+(x-x_0)^4}$, $x>=x_0$

Рисуем потенциал, убеждаемся, что он вида «яма»



Для каждого значения E нам нужно найти две точки поворота – слева и справа. В них U(x)=E. Ищем, например, левую точку:

$$-\frac{1}{1+(a-x_0)^2}=E$$
$$-\frac{1}{E}=1+(a-x_0)^2$$
$$-\frac{1}{E}-1=(a-x_0)^2$$
$$a=x_0-\sqrt{-\frac{1}{E}-1}$$

Пусть вас не пугает радикал, кажущийся отрицательным – Е в связанном состоянии как раз отрицательно (см. рисунок), а $-\frac{1}{E}$ тогда положительно. Аналогично для правой точки поворота

$$b=x_0+\sqrt[4]{-\frac{1}{E}-1}$$

Подставляем найденные a и b в потенциал Бора-Зоммерфельда:

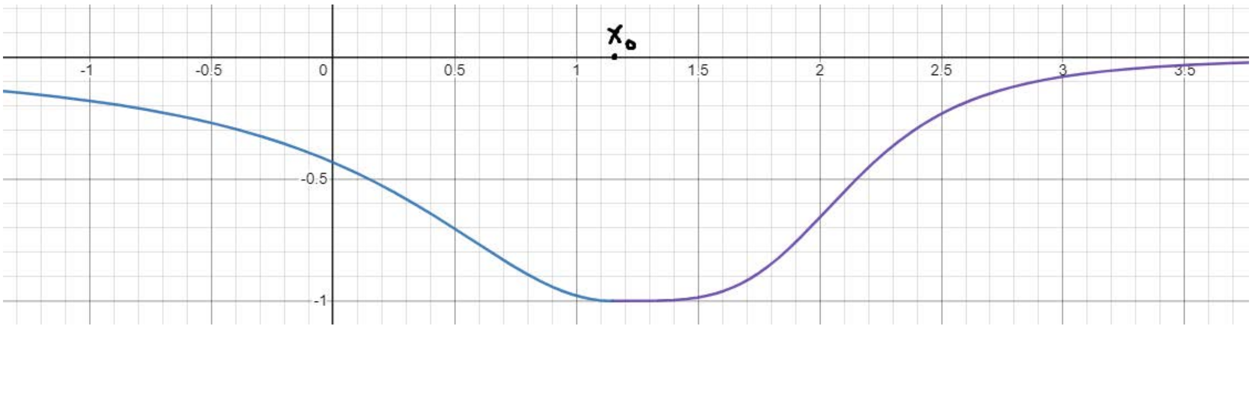
$$\int_{x_0-\sqrt{-\frac{1}{E}-1}}^{x_0+\sqrt[4]{-\frac{1}{E}-1}}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))dx}=\pi(n+\frac{1}{2})$$

Осталось расписать U(x). Осторожно: он задан кусочно. Придётся разбить на два интеграла:

$$\int_{x_0-\sqrt{-\frac{1}{E}-1}}^{x_0}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{1+(x-x_0)^2}\right)}dx$$
$$+\int_{x_0}^{x_0+\sqrt[4]{-\frac{1}{E}-1}}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{1+(x-x_0)^4}\right)}dx=\pi(n+\frac{1}{2})$$

И вновь его численное решение даёт энергетический спектр.

Отметим, что при E>0 (напомним вид потенциала)



состояние уже не связанное, а свободное – в виде волны (у которой вблизи x_0 чуть изменится длина). Там уже никакого дискретного спектра нет, есть непрерывный. При Е от -1 до 0 спектр дискретный (определяемый страшным уравнением выше), а Е<-1 быть, конечно, не может (значение Е не может быть меньше минимального значения U(x)).

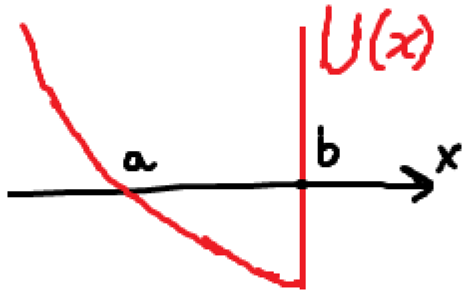
Я сознательно дал такие сложные потенциалы U(x), приводящие к таким стрёмным интегралам. На зачёте вам дадут потенциалы попроще (например, гармонический осциллятор), где интегралы будут попроще и считаться аналитически. Например, для гармонического осциллятора (U=$\frac{kx^2}{2}$) будет

$$\int_{-\sqrt{2E/k}}^{\sqrt{2E/k}} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{kx^2}{2}\right)}dx = \pi(n+\frac{1}{2})$$

И этот интеграл считается: константы выносится, и в итоге мы придём к интегралу $\int\sqrt{1-x^2}dx = \int \cos t\, dsint = \int \cos^2 t\, dt = \frac{1}{2}\int(cos2t+1)dt = \frac{t}{2} + \frac{sin2t}{4} = \frac{arcsinx}{2} + \frac{sin2(arcsinx\ )}{4}$, который берётся.

Только вот для гармонического осциллятора Бор-Зоммерфельд имеет приблизительно 0% смысла, потому что для него есть точное решение. Но на зачёте вам дадут скорее его, потому что там интеграл считается, а для более сложных потенциалов, где Бор-Зоммерфельд оправдан, будут несчитаемые интегралы, что отпугнёт давать такое на зачёт.

Однако есть ямы, где Бор-Зоммерфельд не работает (!!!). Это ямы, где одна из стенок не гладкая (т.е. не пологая), а вертикальная. Вот такие:



Это будет связано с тем, что справа будет вместо условия сшивки условие Ψ(b)=0.

Значит, в области x>=a

Ψ(x)=$\frac{C}{k(x)}$*cos($\int_a^x k(y)dy$-$\frac{\pi}{4}$).

Т.к. Ψ(b)=0, то cos($\int_a^b k(x)dx$-$\frac{\pi}{4}$)=0. Когда cos α=0? Когда α=π(n+$\frac{1}{2}$). Получаем

$$\int_a^b k(x)dx - \frac{\pi}{4} = \pi(n + \frac{1}{2})$$

$$\boxed{\int_a^b k(x)dx = \pi(n + \frac{3}{4})}$$

или, иначе записывая,

$$\int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))}dx = \pi(n + \frac{3}{4})$$

Модифицированное условие Бора-Зоммерфельда – не с ½, а с ¾.

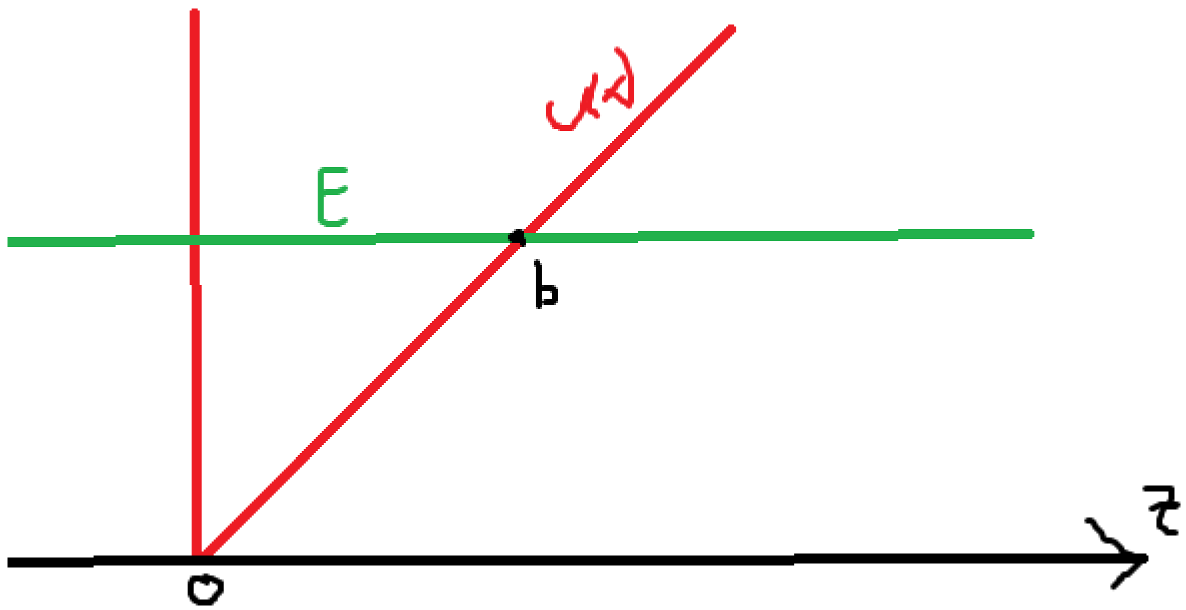
Решим задачу с Парфёновского зачёта:

45. Пользуясь правилом Бора-Зоммерфельда, найти спектр энергий
   а) линейного гармонического осциллятора;
   б) частицы в однородном поле тяжести над абсолютно отражающей поверхностью;

Поинт намбер ван: понять, какой будет потенциал. Такой:

U=mgz, z>0

U=∞, z<0



Как мы видим, одна из стенок ямы вертикальная, а значит, подрубаем модифицированного Бора-Зоммерфельда, с ¾:

$$\int_0^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - mgz)}dz = \pi(n + \frac{3}{4})$$

Надо определить правую точку поворота: E=mgb=> b=$\frac{E}{mg}$. Получаем

$$\int_0^{\frac{E}{mg}} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - mgz)}dz = \pi(n + \frac{3}{4})$$

Как насчёт того, чтобы взять интеграл?

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \int_0^{\frac{E}{mg}} \sqrt{1 - \frac{mgz}{E}}dz = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$\frac{E}{mg}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} * \int_0^{\frac{E}{mg}} \sqrt{1 - \frac{mgz}{E}}d\frac{mgz}{E} = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$\frac{E}{mg\hbar}\sqrt{2mE}\int_0^1 \sqrt{1 - t}\,dt = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$-\frac{E}{mg\hbar}\sqrt{2mE}\int_0^1 \sqrt{1 - t}\,d(1 - t) = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$-\frac{E}{mg\hbar}\sqrt{2mE}\int_1^0 \sqrt{u}\,du = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$\frac{E}{mg\hbar}\sqrt{2mE}\int_0^1 \sqrt{u}\,du = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$\frac{E}{mg\hbar}\sqrt{2mE} * \frac{2u^{3/2}}{3}|\text{от 0 до 1} = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$\frac{E}{mg\hbar}\sqrt{2mE} * \frac{2}{3} = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$\frac{E^{3/2}}{3g\hbar}\sqrt{\frac{8}{m}} = \pi(n + \frac{3}{4})$$

$$E^{3/2} = 3\pi g\hbar\sqrt{\frac{m}{8}}\left(n + \frac{3}{4}\right)$$

$$E = \left(3\pi g\hbar\sqrt{\frac{m}{8}}\left(n + \frac{3}{4}\right)\right)^{2/3}$$

Ура, победа.