

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

И.В. Копытин, А.С. Корнев, Н.Л. Манаков, М.В. Фролов

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

Курс лекций
Часть 2

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2014

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Квазиклассическое приближение	6
1.1. Связь квантовой механики с классической	6
1.2. Квазиклассическое приближение	8
1.3. Метод ВКБ	10
1.4. Граничные условия в методе ВКБ	13
1.5. Формула квантования Бора–Зоммерфельда. Нормировка квазиклассических волновых функций	16
1.6. Прохождение частицы через потенциальный барьер в квазиклассическом приближении	19
Глава 2. Стационарная теория возмущений	22
2.1. Теория возмущений для изолированного уровня	23
2.2. Теория возмущений при наличии двух близких уровней .	28
2.3. Теория возмущений при наличии вырождения	31
Глава 3. Вариационный метод	33
3.1. Вариационный принцип	33
3.2. Вариационный метод Ритца	35
3.3. Вариационный вывод уравнения Шредингера для стационарных состояний	37
Глава 4. Теория квантовых переходов	38
4.1. Квантовые переходы	38
4.2. Нестационарная теория возмущений	41
4.3. Адиабатическое и внезапное возмущения	42
4.4. Гармонические и постоянные возмущения. «Золотое правило Ферми»	44
Глава 5. Излучение и поглощение света	48
5.1. Гамильтониан взаимодействия квантовой системы с электромагнитным излучением	48
5.2. Дипольное приближение	50

Глава 1

Квазиклассическое приближение

Аналитическое решение стационарного уравнения Шредингера существует лишь для весьма ограниченного круга потенциалов (осцилляторный, кулоновский и некоторые другие), так что в большинстве случаев для определения волновых функций и спектра энергий требуется использование численных методов. Поэтому важным вопросом квантовой теории является развитие методов приближенного решения уравнения Шредингера с той или иной точностью в замкнутом (*аналитическом*) виде, основанного на ряде допущений (приближений), связанных с характером конкретной задачи (или целого класса таких задач). Несмотря на то, что все приближенные методы имеют ограниченную область применимости, зависящую от характера сделанных приближений, они позволяют качественно, а порой и количественно, описать конкретный квантовый процесс. Одним из приближенных методов решения квантовомеханических задач является *квазиклассическое приближение*. Как будет показано ниже, в некоторых случаях (например, при плавном изменении потенциала внешнего поля) поведение квантовой системы определяется классическими законами, а квазиклассическое решение уравнения Шредингера с асимптотической точностью (т. е. решение тем ближе к точному, чем точнее выполняются условия применимости) определяет точное решение. Более того, несмотря на название, квазиклассическое приближение позволяет предсказать ряд эффектов, не имеющих классических аналогов (например, туннельный эффект), а также с экспоненциальной точностью рассчитать их наблюдаемые характеристики.

1.1. Связь квантовой механики с классической

Вначале рассмотрим вопрос о соотношении квантового и классического описания движения микрочастицы и покажем, что классическое описание является предельным случаем квантового.

Рассмотрим средние значения координаты $\langle x \rangle$ и импульса $\langle p \rangle$ квантовой частицы, которая находится в состоянии $\Psi(x, t)$ в поле с потенциальной энергией $V(x)$ (для простоты ограничимся одномерным случаем). Изменение $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$ с течением времени определяется соотноше-

ниями:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle; \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle, \quad (1.1)$$

называемыми *теоремами Эренфеста*¹. Из соотношений (1.1) следует:

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{dV(x)}{dx} \right\rangle \equiv \langle F \rangle, \quad (1.2)$$

где $F \equiv -\frac{dV}{dx}$ — классическая сила, действующая на частицу со стороны поля.

Уравнение (1.2) есть квантовый аналог уравнения Ньютона, однако следует отметить принципиальную разницу между (1.2) и вторым законом Ньютона. Действительно, в законе Ньютона сила, действующая на частицу, вычисляется *локально* в точке $\langle x \rangle$, в которой находится частица, в то время как в «квантовое уравнение Ньютона» (1.2) входит сила, *усредненная по всему пространству*, а не $F(\langle x \rangle)$. Однако, если состояние $\Psi(x, t)$ локализовано в малой области Δ_x , включающей точку $\langle x \rangle$, то соотношение (1.2) можно упростить. Основной вклад в интеграл для среднего значения дает область Δ_x , поэтому, считая $V(x)$ плавной функцией внутри области локализации частицы, разложим производную dV/dx в ряд Тейлора по степеням $x - \langle x \rangle$:

$$\frac{dV}{dx} = \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} + \frac{d^2 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^2} (x - \langle x \rangle) + \frac{1}{2} \frac{d^3 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^3} (x - \langle x \rangle)^2 + \dots, \quad (1.3)$$

где

$$\frac{d^n V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^n} \equiv \left. \frac{d^n V(x)}{dx^n} \right|_{x=\langle x \rangle},$$

и подставим (1.3) в (1.2). Учитывая условия нормировки волновой функции на единицу, а также нулевой вклад линейного по $x - \langle x \rangle$ слагаемого при усреднении (1.3), имеем:

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} - \frac{1}{2} \frac{d^3 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^3} \langle (\Delta x)^2 \rangle + \dots \quad (1.4)$$

Отсюда видно, что условие перехода теоремы Эренфеста (1.2) во второй закон Ньютона определяется неравенством:

$$\left| \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} \right| \gg \left| \frac{d^3 V(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle^3} \right| \Delta_x^2. \quad (1.5)$$

¹ Соотношения (1.1) легко получаются, если воспользоваться определением оператора производной по времени физической величины F : $d\hat{F}/dt = \partial\hat{F}/\partial t + (i/\hbar)[\hat{H}, \hat{F}]$.

Итак, движение «центра масс» пространственного распределения частицы тем лучше описывается уравнением Ньютона, чем слабее потенциал зависит от координаты и чем ближе это распределение к точечному. Следует отметить, что вследствие принципа неопределенности пространственная локализация волновой функции приводит к разбросу значений импульса частицы и, как следствие, к нарушению классического понимания кинетической энергии. Поэтому, помимо соотношения (1.5), должно выполняться равенство:

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + \frac{\langle (\Delta p)^2 \rangle}{2m} \approx \frac{\langle p \rangle^2}{2m}. \quad (1.6)$$

Чтобы выполнялось (1.6), необходимо выполнение условия

$$\langle p \rangle^2 \gg \langle (\Delta p)^2 \rangle. \quad (1.7)$$

Таким образом, *квантовая частица ведет себя подобно классической, если движется в достаточно плавном потенциале с большим импульсом.*

В заключение приведем численную оценку границ применимости классических законов на примере движения частицы массы m по круговой орбите радиуса a вокруг силового центра, создающего потенциал α/r . Подставляя явный вид $V(r) = (m\alpha)/r$ в (1.5), получим:

$$a^2 \gg \langle (\Delta x)^2 \rangle,$$

что вместе с (1.7) дает следующее неравенство

$$a^2 p^2 \gg \langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p^2) \rangle \sim \hbar^2/4.$$

Очевидно, что для макроскопических объектов (для которых $ap/\hbar \gg 1$) данное неравенство выполняется с высокой степенью точности.

1.2. Квазиклассическое приближение

Выясним теперь, как выглядит волновая функция квантовой частицы с массой m в поле $V(\mathbf{r}, t)$ в пределе, когда ее квантовое описание с помощью уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.8)$$

наиболее близко к классическому, и получим более строгое условие применимости квазиклассического подхода. Для этого представим волновую функцию в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t) \right], \quad (1.9)$$