### Периодическое возмущение. Атом в поле электромагнитной волны

Пусть $\widehat{V} = e\widehat{E}(\omega)e^{i\omega t}$. Из формулы (2.40) получаем, что

$$W_{nk} = \frac{e^2}{\hbar^2}\left|\int \overline{\psi}_n E(\omega)\psi_k\, dV\right|^2 \left|\int e^{i\omega t}e^{i\omega_{nk}t}\, dt\right|^2. \tag{2.41}$$

Последний сомножитель в (2.41) не обращается в нуль, если $\omega = -\omega_{nk}$. Получаем, что ненулевая вероятность перехода $W_{nk}$ существует между состояниями при условии $\omega = -\dfrac{E_n - E_k}{\hbar}$ или $E_k - E_n = \hbar\omega$. Этот результат соответствует правилу Бора о поглощении атомом кванта света.

## 6. Квазиклассическое приближение

Пусть $\lambda = \dfrac{\hbar}{p} \ll L$, где $L$ — некая длина, свойственная данной задаче. Такие системы называются *квазиклассическими*.

В уравнении Шредингера

$$\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi + (E - U)\psi = 0 \tag{2.42}$$

сделаем подстановку $\psi = e^{i\frac{\sigma}{\hbar}}$. Получаем

$$\frac{1}{2m}(\nabla\sigma)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\Delta\sigma = E - U. \tag{2.43}$$

При $\hbar \to 0$ можно искать решение в виде ряда

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \ldots \tag{2.44}$$

по степеням $\hbar$.

Рассмотрим одномерный случай. Тогда (2.43) эквивалентно

$$\frac{1}{2m}(\sigma')^2 - \frac{i\hbar}{2m}\sigma'' = E - U(x). \tag{2.45}$$

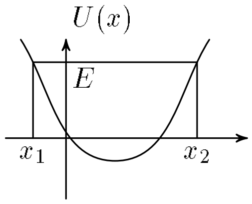



Рис. 2.7.

Подставив (2.44) в (2.45), получаем

$$\begin{cases} \frac{1}{2m}(\sigma_0')^2 = E - U, \\ \sigma_0'\sigma_1' - \frac{1}{2}\sigma_0'' = 0, \\ 2\sigma_0'\sigma_2' + (\sigma_1')^2 + \sigma_1'' = 0, \quad \text{и т. д.} \end{cases} \tag{2.46}$$

Из первого уравнения (2.46) получаем, что

$$\sigma_0 = \pm \int\limits_{x_0}^{x} \sqrt{2m(E - U(x))}\, dx = \pm \int\limits_{x_0}^{x} p(x)\, dx, \tag{2.47}$$

где $p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$ — классический импульс частицы. Это верно, если

$$\frac{\hbar|\sigma_0''|}{(\sigma_0')^2} \ll 1, \quad \frac{\hbar p'}{p^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{p}\right) = \frac{d\lambda}{dx} \ll 1. \tag{2.48}$$

Последнее равенство можно интерпретировать как условие применимости квазиклассического приближения: длина частицы должна мало меняться на расстояниях, сравнимых с этой длиной. Перепишем (2.48), используя классическое равенство $p' = -\frac{m}{p}\frac{dU}{dx}$. Тогда (2.48) эквивалентно

$$\frac{m\hbar}{p^3}\frac{dU}{dx} \ll 1. \tag{2.49}$$

Итак, квазиклассическое приближение неприменимо при очень маленьком импульсе частицы и заведомо неприемлемо вблизи *точек поворота*, т. е.точек $x$, в которых $E = U(x)$.

Вдали от точек поворота из второго уравнения (2.46) получаем $\sigma_1' = -\dfrac{\sigma_0''}{2\sigma_0} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{p'}{p}$. Следовательно,

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2}\ln p. \tag{2.50}$$

Подставляя (2.47) и (2.50) в (2.44), получаем

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}(\sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \ldots)} =$$
$$= \begin{cases} \dfrac{c_1}{\sqrt{p}}\exp\left\{\dfrac{i}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} p\,dx\right\} + \dfrac{c_2}{\sqrt{p}}\exp\left\{-\dfrac{i}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} p\,dx\right\}, \\ \dfrac{c_1}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\dfrac{1}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} |p|\,dx\right\} + \dfrac{c_2}{\sqrt{|p|}}\exp\left\{\dfrac{1}{\hbar}\int\limits_{x_0}^{x} |p|\,dx\right\}, \end{cases} \tag{2.51}$$

где первое решение (2.51) задает волновую функцию $\psi(x)$ в классических областях ($U(x) < E$), а второе — в классически недоступных областях ($U(x) > E$). Заметим, что в окрестностях точек возврата потенциал $U(x)$ можно заменить на линейный, для которого существует точное решение — функция Эйри.

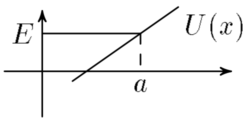
Пусть $U(a) = E$ и область $U(x) > E$ — это $x > a$. Из условий на бесконечности следует, что в этой области

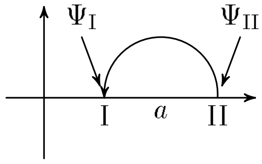
$$\psi(x) = \frac{c}{2\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a}^{x} |p|\,dx\right\}.$$

Возникает вопрос о том, как «сшить» это решение с решением в области $x < a$, если квазиклассика неприменима вблизи точки $x = a$.

Будем рассматривать решение, как функцию комплексного переменного $x$ и обойдем точку $x = a$. Будем совершать обход вокруг точки $x = a$ против часовой стрелки в области, где $E - U(x) = F_0(x - a)$. Можно ограничиться первым членом тейлоровского приближения, но верна квазиклассика.

1) Первое условие выполнено, если $|x - a| \ll L$ — масштаб изменения $U(x)$ $\left(F_0 \equiv \dfrac{dU}{dx}(a)\right)$.




2) Второе условие верно, если выполнено (2.49):

$$\frac{m\hbar}{p^3}\frac{dU}{dx} \ll 1 \quad \text{или} \quad \frac{\hbar}{\sqrt{mF_0}} \ll |x-a|^{3/2}.$$

Из этих условий получаем условие совместности

$$L^{3/2} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{m|F_0|}}. \tag{2.52}$$

Тогда

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{c}{2(2m|F_0|)^{1/4}} \cdot \frac{1}{(x-a)^{1/4}} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int\limits_a^x \sqrt{2m|F_0|(x-a)}\,dx\right\}. \tag{2.53}$$

Проследим за обходом в верхней полуплоскости ($\varphi$ меняется от 0 до $\pi$)

$$\int\limits_a^x \sqrt{x-a}\,dx = \frac{2}{3}(x-a)^{3/2} = \\ = \frac{2}{3}\rho^{3/2}e^{i\frac{3\varphi}{2}} = \frac{2}{3}\rho^{3/2}\left(\cos\frac{3\varphi}{2} + i\sin\frac{3\varphi}{2}\right). \tag{2.54}$$

Подставив (2.54) в (2.53) и сравнив с первым уравнением (2.51), получаем $c_1 = 0$ и $c_2 = \dfrac{1}{2}ce^{-i\pi/4}$.

Точно так же, продолжая через нижнюю полуплоскость, получаем $c_1 = \frac{c}{2} e^{i\frac{\pi}{4}}$.

$$\psi_{\mathrm{II}} = \frac{c}{2\sqrt{|p|}} \exp\left\{ -\frac{1}{\hbar} \int\limits_a^x |p|\, dx \right\},$$

$$\psi_{\mathrm{I}} = \frac{c}{\sqrt{p}} \cos\left\{ \frac{1}{\hbar} \int\limits_a^x p\, dx + \frac{\pi}{4} \right\}.$$

В случае сшивания решений слева направо ($U(x)$ имеет вид, показанный на рис. 2.8) получаются следующие решения:

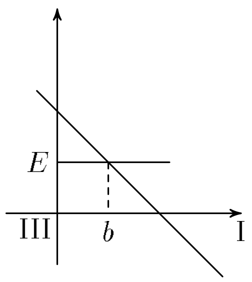



Рис. 2.8.

$$\psi_{\mathrm{III}} = \frac{c}{2\sqrt{|p|}} \exp\left\{ -\frac{1}{\hbar} \int\limits_b^x |p|\, dx \right\},$$

$$\psi_{\mathrm{I}} = \frac{c}{\sqrt{p}} \cos\left\{ \frac{1}{\hbar} \int\limits_b^x p\, dx - \frac{\pi}{4} \right\}.$$

## Правило квантования Бора—Зоммерфельда

Применим полученные в предыдущем параграфе результаты для получения правил квантования Бора—Зоммерфельда.

$$\psi_{\mathrm{I}} = \frac{c}{\sqrt{p}} \cos\left\{ \frac{1}{\hbar} \int\limits_a^x p\, dx + \frac{\pi}{4} \right\} =$$

$$= \frac{\widetilde{c}}{\sqrt{p}} \cos\left\{ \frac{1}{\hbar} \int\limits_b^x p\, dx - \frac{\pi}{4} \right\} =$$

$$= \frac{c}{\sqrt{p}} \cos\left\{ \frac{1}{\hbar} \int\limits_b^x p\, dx - \frac{1}{\hbar} \int\limits_b^a p\, dx + \frac{\pi}{4} \right\}.$$

Следовательно, $\frac{1}{\hbar}\int_b^a p\,dx = \frac{\pi}{2} + \pi n$ и $\widetilde{c} = (-1)^n c$, или

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint\limits_{\gamma} p\,dx = n + \frac{1}{2}, \tag{2.55}$$

где контур $\gamma$ имеет вид, показанный на рис. 2.9.

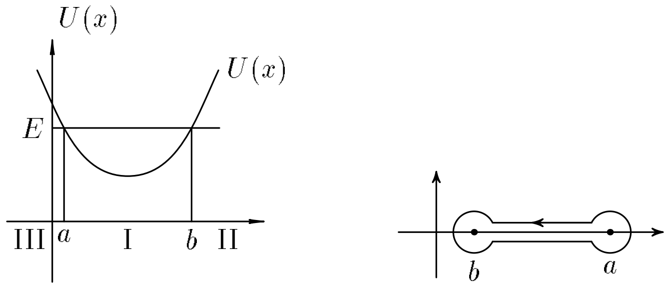



Рис. 2.9.

Уравнение (2.55) называется *условием квантования Бора–Зоммерфельда* и является уравнением на собственные значения $E$.

Условие квазиклассики обычно эквивалентно условию $n \gg 1$, но для некоторых потенциалов это условие выполняется начиная с $n = 1$.

Остановимся еще на условии нормировки.

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2\,dx \approx \int\limits_b^a |\psi|^2\,dx = |c|^2 \int\limits_b^a \frac{dx}{2p} = \frac{c^2}{2m}\int\limits_b^a dt = \frac{c^2}{2m}\frac{T}{2},$$

где $T$ — период колебания классической частицы в поле с данным потенциалом и энергией $E$.

## Прохождение через барьер

Пусть потенциал имеет вид, показанный на рис. 2.10.

Напишем квазиклассическое решение в различных областях.

III) $x > b$.

$$\psi_{\text{III}} = \frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int\limits_b^x p\,dx + \frac{i\pi}{4}\right\}.$$

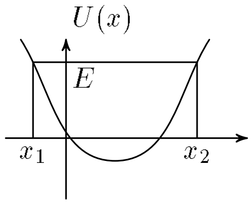



Рис. 2.10.

Там, где $U(x) \to 0$, $\psi_{\mathrm{II}} \to e^{i\frac{px}{\hbar}}$. $E - U(x) = F_0 \cdot (x - b)$, $F_0 > 0$.

II) $a < x < b$. Продолжаем $\psi_{\mathrm{III}}$ в область II:

$$\psi_{\mathrm{III}} = \frac{c}{\sqrt{2mF_0}} \frac{1}{(x-b)^{1/4}} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF_0} \int\limits_b^x \sqrt{x-b}\, dx + \frac{i\pi}{4} \right\} =$$

$$= \frac{c}{\sqrt{2mF_0}} \frac{1}{(b-x)^{1/4}} \exp\left\{ \frac{1}{\hbar} \int\limits_b^x |p|\, dx \right\}.$$

Мы воспользовались тем, что $\int\limits_b^x \sqrt{x-b}\, dx = \frac{2}{3}\rho^{3/2}\Big(-\sin\frac{3\varphi}{2} + i\cos\frac{3\varphi}{2}\Big)$ и сократили $e^{i\frac{\pi}{4}}$ в числителе и в знаменателе. Получаем

$$\psi_{\mathrm{II}} = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{ \int\limits_b^x |p|\, dx \right\}.$$

I) $x < a$. Продолжим решение $\psi_{\mathrm{II}}$ в эту область.

**Задача.** Проверьте, что получится ответ

$$\psi_{\mathrm{I}} = \frac{c e^{\frac{1}{\hbar}\int\limits_b^a |p|\, dx}}{\sqrt{p}} \left\{ \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int\limits_a^x p\, dx \right\} + \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \int\limits_a^x p\, dx \right\} \right\} \tag{2.56}$$

Первый член в формуле (2.56) представляет для больших по модулю отрицательных $x$

$$\exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int\limits_a^x p\, dx \right\} \underset{x \to -\infty}{\sim} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

отраженную от барьера волну, а второй

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_a^x p\,dx\right\}\underset{x\to-\infty}{\sim} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

падающую на барьер волну.

Тогда решение $\psi_{\text{III}}$ — это прошедшая сквозь барьер волна (туннельный эффект).

Пусть падающая волна имеет вид $e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, отраженная $Ae^{-\frac{ipx}{\hbar}}$, а прошедшая $Be^{\frac{ipx}{\hbar}}$. *Коэффициентом отражения* называется величина $\dfrac{|A|^2}{|A|^2+|B|^2}$, а *коэффициентом прохождения* — величина $D=\dfrac{|B|^2}{|A|^2+|B|^2}$.

## 7. Уравнение Дирака. Релятивистская теория электрона

Уравнение $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\sum\frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}$ инвариантно относительно преобразований Галилея, но релятивистски неинвариантно. Это видно хотя бы из того, что $t$ и $x_i$ входят несимметрично.

Пусть $(x^0=ct, x^1, x^2, x^3)$ — 4-вектор.

$$\psi=\psi(x^0,x^1,x^2,x^3) \text{ и } \hat{p}_0=i\hbar\frac{\partial}{\partial x^0}, hatp_k=i\hbar\frac{\partial}{\partial x^k}, hatp_\mu=i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

— тоже 4-векторы.

Классический релятивистски инвариантный гамильтониан свободной частицы имеет вид $H=\text{const}\sqrt{m^2c^2+p^2}$, поэтому квантование дает уравнение

$$[\hat{p}_0-(m^2c^2+\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2)^{1/2}]\psi=0. \tag{2.57}$$

Домножив на сопряженное значение, получим уравнение, более симметричное относительно $p_0$ и $p_k$:

$$[\hat{p}_0^2-m^2c^2-\hat{p}_1^2-\hat{p}_2^2-\hat{p}_3^2]\psi=0. \tag{2.58}$$