X1-056 (2008/11/28)

تقریب ِ شبهِکلاسیک

محمد خرمی mamwad@mailaps.org

با یک‌ی کردن ِ تابعِ‌موج ِ تقریب‌ی در ناحیه یِ کلاسیک‌ی‌مجاز و دور از نقطه‌ها یِ بازگشت، و تابعِ‌موج ِ تقریب‌ی در نزدیک‌ی یِ نقطه‌ها یِ بازگشت، تقریب ِ شبهِ‌کلاسیک و اعتبار ِ آن بررس‌ی می‌شود.

1 تقریب ِ شبهِ‌کلاسیک

معادله یِ شرُدینگر [a] ِ مستقل‌اززمان برا یِ ذره ای به جرم ِ m را در نظر ب‌گیرید که در یک بُعد تحت ِ انرژی‌یِ‌پتانسیل ِ V حرکت می‌کن‌د:

$$\left[\frac{(-\mathrm{i}\,\hbar)^2}{2\,m}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\,\psi(x)=E\,\psi(x), \tag{1}$$

که x مکان، E انرژی، و ψ تابعِ‌موج است. با تعریف ِ تابع ِ W به شکل ِ

$$\psi=:\exp\left(-\frac{W}{\mathrm{i}\,\hbar}\right), \tag{2}$$

معادله یِ (1) می‌شود

$$-\frac{\mathrm{i}\,\hbar}{2\,m}\,\frac{\mathrm{d}^2W}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2\,m}\,\left(\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}x}\right)^2+V=E. \tag{3}$$

این معادله معادله ي هَمیلتِن- یاکُبی [b] است (مثلَن [1]) با یک جمله ي اضافی، که جمله ي اول ِ طرف ِ چپ است. این معادله راه ی برا یِ بسطدادن ِ جواب ِ معادله یِ (1) بر حسب ِ $\hbar$ می‌دهد. ضریب ِ $\hbar^n$ در بسط ِ W بر حسب ِ $\hbar$ را با W_n نمایش می‌دهیم:

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} (\mathrm{i}\,\hbar)^n\, W_n. \tag{4}$$

جواب ِ مرتبه‌یِ‌صفر برا یِ W هم‌ان جواب ِ معادله یِ هَمیلتِن- یاکُبی [b] است:

$$W_0^{\pm}(x) = \int^x \mathrm{d}x'\ p^{\pm}(x'), \tag{5}$$

که

$$p^{\pm}(x) := \pm\sqrt{2\,m\,[E - V(x)]}. \tag{6}$$

هم‌چنین،

$$\frac{\mathrm{d}W_0}{\mathrm{d}x}\,\frac{\mathrm{d}W_1}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{2}\,\frac{\mathrm{d}^2 W_0}{\mathrm{d}x^2}, \tag{7}$$

که نتیجه می‌دهد

$$\begin{aligned} W_1^{\pm} &= c + \frac{1}{2}\,\ln\left(\frac{\mathrm{d}W_0^{\pm}}{\mathrm{d}x}\right), \\ &= c + \frac{1}{2}\,\ln p^{\pm}, \end{aligned} \tag{8}$$

که c یک ثابت است. تابعِ‌موج ِ متناظر با تقریب ِ W تا مرتبه یِ یک نسبت به $\hbar$ را با ψ_{sc} نمایش می‌دهیم. داریم

$$\psi_{\mathrm{sc}}^{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{p^{\pm}(x)}}\ \exp\left[-c - \frac{1}{\mathrm{i}\,\hbar}\int^x \mathrm{d}x'\ p^{\pm}(x')\right], \tag{9}$$

انتظار می‌رود این جواب برا یِ مقدارها یِ کوچک ِ $\hbar$ تقریب ِ خوب ی باشد. به هم‌ین خاطر به این تقریب تقریب ِ شبهِ‌کلاسیک می‌گوییم. معیار ِ کوچک‌بودن ِ $\hbar$ هم این است که در (3) جمله یِ اول ِ طرف ِ چپ خیل ی کوچک‌تر از جمله یِ دوم ِ طرف ِ چپ باشد. این یعنی

$$\hbar\left|\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right| \ll |p|^2. \tag{10}$$

این‌ها را می‌شود در مثلَن [2] یافت.

2 نقطه‌ها یِ بازگشت

روشن است که در نقطه‌ها یِ بازگشت، (10) برقرار نیست، چون در این نقطه‌ها طرف ِ راست ِ (10) صفر می‌شود. پس در اطراف ِ این نقطه‌ها جواب ِ شبهِ‌کلاسیک هم جواب ِ خوب ی نیست. در اطراف ِ یک نقطه یِ بازگشت مثلَن x_1، تقریب ِ دیگر ی به کار می‌بریم. در این ناحیه انرژی یِ پتانسیل را با یک تابع ِ دستِ‌بالاخطی تقریب می‌کن‌یم:

$$V(x) \approx V(x_1) + a_1\,(x - x_1), \tag{11}$$

که

$$a_1 := \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(x_1). \tag{12}$$

داریم

$$V(x_1) = E. \tag{13}$$

به این ترتیب (1) می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + a_1\,(x - x_1)\,\psi(x) = 0. \tag{14}$$

با تغییرِمتغیر ِ

$$u := \left(-\frac{2\,m\,a_1}{\hbar^2}\right)^{1/3}\,(x - x_1), \tag{15}$$

(14) می‌شود

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}^2u} + u\,\psi = 0. \tag{16}$$

این معادله یِ اِیری [c] است (مثلَن [3]). u یِ منفی متناظر است با ناحیه یِ کلاسیک‌ی‌غیرِمجاز، و در این ناحیه تابعِ‌موج باید کوچک شود. پس آن جواب ِ (16) را می‌گیریم که در u ها یِ منفی بزرگ ن‌می‌شود:

$$\psi = c' \,\mathrm{Ai}(-u), \tag{17}$$

که c' یک ثابت است.

3 چسباندن ِ جواب‌ها

وقت ی فضا یِ پیکربندی یک‌بُعدی و انرژی یِ پتانسیل خوش‌رفتار است، ویژه‌مقدارها یِ همیلتن‌ی متناظر با حالت‌ها یِ مقید تبه‌گن نیست‌ند، به هم‌ین خاطر می‌شود تابعِ‌موج‌ها یِ متناظر با این حالت‌ها را حقیق‌ی گرفت (مثلَن [4]). تابعِ‌موج ِ حقیق‌ی را می‌شود از جواب‌ها یِ (9) ساخت (جزئ ِ حقیق‌ی یا جزئ ِ موهوم‌ی یِ این جواب‌ها هم جواب است). به این ترتیب می‌رس‌یم به این جواب برا یِ ناحیه یِ دور از نقطه یِ بازگشت و در ناحیه یِ کلاسیک‌ی‌مجاز.

$$\psi_{\mathrm{sc}}(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p^+(x)}}\,\cos\left[\phi_1 + \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}\mathrm{d}x'\,p^+(x')\right], \tag{18}$$

که c_1 و ϕ_1 ثابت‌ها یی دل‌بخواه اند.

(17) را به ازا یِ u ها یِ بزرگ بررس‌ی می‌کن‌یم. از [3] داریم

$$\mathrm{Ai}(-u) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,u^{-1/4}\,\cos\left(\frac{2}{3}\,u^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \qquad u \gg 1. \tag{19}$$

پس،

$$\psi = \frac{c'}{\sqrt{\pi}}\,u^{-1/4}\,\cos\left(\frac{2}{3}\,u^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), \qquad u \gg 1. \tag{20}$$

حالا ناحیه ای را در نظر ب‌گیریم که در آن هم (10) برقرار است، هم (11) برقرار است، و هم u بزرگ است. (10) می‌شود

$$\frac{\hbar\,m\,|\mathrm{d}V/\mathrm{d}x|}{\{m\,[E - V(x)]\}^{3/2}} \ll 1. \tag{21}$$

با فرض ِ این که (10) برقرار است، (21) می‌شود

$$\frac{\hbar}{\sqrt{-m\,a_1\,(x - x_1)^3}} \ll 1. \tag{22}$$

اما این یعنی

$$u^{-3/2} \ll 1. \tag{23}$$

پس به شرط ِ (11)، برقراری ِ (10) و بزرگ‌بودن ِ u هم‌ارز اند. (11) به معنی ِ این است که از در بسط ِ انرژی ِ پتانسیل می‌شود از جمله‌ها ِ شامل ِ مشتق ِ دوم به بالا چشم پوشید. شرط ِ این که این تقریب خوب باش‌د این است که فاصل‌ه ی ِ x تا x_1 از فاصل‌ه ی ِ نقطه‌ی‌بازگشت ِ بعدی تا x_1 بسیار کوچک‌تر باش‌د. نقطه‌ی‌بازگشت ِ بعدی را با x_2 نشان می‌ده‌یم. به این ترتیب (11) می‌شود

$$|x - x_1| \ll |x_2 - x_1|. \tag{24}$$

شرط ِ این که x ی باش‌د که هم (22) را بر آورَد و هم (24) را، این است که

$$\frac{m\,|a_1|\,|x_2 - x_1|^3}{\hbar^2} \gg 1. \tag{25}$$

فرض کن‌یم این شرط برقرار است. در این صورت طرف‌ها ی ِ راست ِ (18) و (20) برابر اند و برا ی ِ محاسبه ی ِ p^+ هم می‌شود تقریب ِ دستِ‌بالاخطی ِ انرژی ِ پتانسیل را به کار برد. نتیجه می‌شود

$$p^+(x) = |2\,\hbar\,m\,a_1|^{1/3}\,u^{1/2}. \tag{26}$$

از این‌جا

$$\psi_{\rm sc}(x) = c''\,u^{-1/4}\,\cos\left[\phi_1 - \frac{2}{3}\,{\rm sgn}(a_1)\,u^{3/2}\right], \tag{27}$$

که sgn تابع ِ علامت و c'' یک ثابت است. از برابری ِ طرف ِ راست ِ این رابطه با طرف ِ راست ِ (20) نتیجه می‌شود

$$\phi_1 = n_1\,\pi + \frac{\pi}{4}\,{\rm sgn}(a_1), \tag{28}$$

که n_1 یک عدد صحیح است.

رابطه ی ِ (28) را برا ی ِ دو نقطه ی ِ بازگشت ِ x_1 و x_2 به کار می‌بریم، که $[x_1, x_2]$ یک ناحیه ی ِ کلاسیک‌ی‌مجاز است. چون در این ناحیه انرژی بزرگ‌تر از انرژی ِ پتانسیل است، مشتق ِ انرژی ِ پتانسیل در x_1 منفی و در x_2 مثبت است. پس،

$$\phi_1 = n_1\,\pi - \frac{\pi}{4},$$

$$\phi_2 = n_2\,\pi + \frac{\pi}{4}. \tag{29}$$

ضمنًا با همان استدلال ی که به (18) انجامید، معلوم می‌شود دور از نقطه‌ها یِ بازگشت و در ناحیه یِ کلاسیک‌ی‌مجاز،

$$\psi_{\rm sc}(x) = \frac{c_2}{\sqrt{p^+(x)}}\,\cos\left[\phi_2 + \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}{\rm d}x'\;p^+(x')\right], \tag{30}$$

شرط ِ سازگاری یِ این با (18) می‌شود

$$\left[\phi_2 + \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}{\rm d}x'\;p^+(x')\right] - \left[\phi_1 + \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}{\rm d}x'\;p^+(x')\right] = k\,\pi, \tag{31}$$

که k عدد ی صحیح است. از این‌جا نتیجه می‌شود

$$\int_{x_1}^{x_2}{\rm d}x\;p^+(x) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\,\pi\,\hbar, \tag{32}$$

که n یک عدد ِ صحیح است. (32) را چن‌ین هم می‌نویس‌ند.

$$\oint{\rm d}x\;p(x) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\,h. \tag{33}$$

این همان شرط ِ کوانتش ِ بُر ـ زُمِرفِلد [d] است. طرف ِ چپ ِ رابطه تابع ِ E است: E، هم در p ظاهر می‌شود و هم در نقطه‌ها یِ بازگشت. به این ترتیب، (33) مقدار ِ E را بر حسب ِ عدد ِ کوانتم‌ی یِ n به دست می‌دهد.

شرط ِ (25) را هم می‌شود بر حسب ِ n نوشت. با استفاده از تقریب ِ دستِ‌بالاخطی یِ V، طرف ِ چپ ِ (32) را می‌شود تخمین زد. نتیجه این است که

$$\int_{x_1}^{x_2}{\rm d}x\;p^+(x) \sim \sqrt{m\,|a|\,(x_2 - x_1)^3}. \tag{34}$$

به این ترتیب (25) هم‌ارز می‌شود با

$$n \gg 1. \tag{35}$$

یعنی تقریب ِ شبهِکلاسیک برا یِ عددها یِ کوانتم‌ی یِ بزرگ معتبر است.

4 مرجع‌ها

[1] Herbert Goldstein, Charles Poole, & John Safko; "Classical mechanics", 3rd edition (Addison Wesley, 2002) chapter 10

[2] Jun John Sakurai; "Modern quantum mechanics", (Addison Wesley, 1995) chapter 2

[3] Milton Abramowitz & Irene A. Stegun; "Handbook of mathematical functions", (Dover, 1970) section 10.4

[4] Ramamurti Shankar; "Principles of quantum mechanics", 2nd edition (Plenum, 1994) chapter 5

5 اسم‌ها یِ خاص

[a] Schrödinger

[b] Hamilton-Jacobi

[c] Airy

[d] Bohr-Sommerfeld