

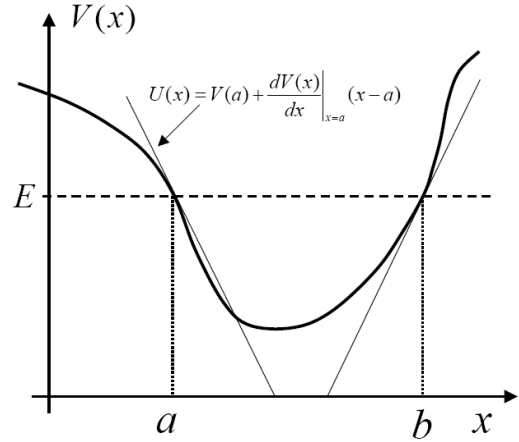
**Reguła kwantyzacji Bohra-Sommerfelda**

Poszukujemy rozwiązań quasiklasycznych jednowymiarowego równania Schrödingera bez czasu

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E \varphi(x),$$

z potencjałem wiążącym przedstawionym na rysunku.

Klasyczny ruch cząstki energii  $E$  polega na oscylacjach pomiędzy punktami  $a$  i  $b$ , zwanymi punktami powrotu. Obszary  $x < a$  i  $b < x$  są niedostępne. Ogólne rozwiązanie quasiklasyczne jest postaci



$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{\chi(x)}} \exp\left[ \mp \frac{1}{\hbar} \int dx' \chi(x') \right], & \text{gd } x < a, \\ \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[ \pm \frac{i}{\hbar} \int dx' p(x') \right], & \text{gd } a < x < b, \\ \frac{C}{\sqrt{\chi(x)}} \exp\left[ \mp \frac{1}{\hbar} \int dx' \chi(x') \right], & \text{gd } b < x, \end{cases}$$

gdzie  $A, B$  i  $C$  są stałymi. Należy określić jak rozwiązania z trzech obszarów „zszyć” w punktach powrotu  $a$  i  $b$ .

Potencjał wokół punktu powrotu zastępujemy potencjałem liniowym

$$U(x) = V(a) + \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=a} (x-a) = V(a) - F(a)(x-a),$$

gdzie  $F(a)$  jest siłą działającą w punkcie powrotu  $a$ . Równanie Schrödingera z potencjałem  $U(x)$  tzn.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(a) - F(a)(x-a) \right) \varphi(x) = E \varphi(x),$$

przybiera postać

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mF(a)}{\hbar^2} (x-a) \right) \varphi(x) = 0,$$

gdź  $V(a) = E$ . Zauważmy, że  $p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))} = \sqrt{2mF(a)(x-a)}$  dla  $x > a$  oraz  $\chi(x) \equiv \sqrt{2m(V(x) - E)} = \sqrt{2mF(a)(a-x)}$  dla  $x < a$ .

## Wykład XV cd.

## Mechanika kwantowa

Dokonujemy zamiany zmiennych  $z = \alpha(x-a)$ ,  $\frac{d}{dx} = \frac{dz}{dx} \frac{d}{dz} = \alpha \frac{d}{dz}$ , co daje

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2mF(a)}{\hbar^2} \frac{z}{\alpha^3} \right) \varphi(z) = 0.$$

Przyjmując, że  $\alpha \equiv (2mF(a)/\hbar^2)^{1/3}$  dostajemy równanie

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + z \right) \varphi(z) = 0,$$

którego przybliżone rozwiązanie dla dużych wartości  $|z|$  mają postać

$$\varphi(z) \approx \begin{cases} \frac{A}{2|z|^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}|z|^{3/2}\right], & \text{gdy } z \rightarrow -\infty, \\ \frac{A}{z^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}z^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right], & \text{gdy } z \rightarrow \infty, \end{cases}$$

gdzie  $A$  jest stałą normalizacyjną.

Pamiętając, że  $z = \alpha(x-a)$ , znajdujemy

$$\frac{2}{3}z^{3/2} = \int_0^z dz' \sqrt{z'} = \alpha \int_a^x dx' \sqrt{\alpha(x'-a)} = \int_a^x dx' \sqrt{\alpha^3(x'-a)} = \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x'),$$

gdzie  $x > a$ . Gdy  $z < 0$  tzn.  $x < a$  mamy

$$\frac{2}{3}(-z)^{3/2} = \int_0^{-z} dz' \sqrt{z'} = -\int_0^z dz' \sqrt{-z'} = -\alpha \int_a^x dx' \sqrt{\alpha(a-x')} = \int_x^a dx' \sqrt{\alpha^3(a-x')} = \frac{1}{\hbar} \int_x^a dx' \chi(x').$$

A zatem rozwiązanie dla przypadku potencjału liniowego zapisujemy jako

$$\varphi(x) \approx \begin{cases} \frac{A}{2\sqrt{\chi(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx' \chi(x')\right], & \text{gdy } x \ll a, \\ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right], & \text{gdy } a \ll x, \end{cases}$$

gdzie  $A$  jest nową stałą normalizacyjną. Widzimy, że te rozwiązania mają taką samą postać jak rozwiązania quasiklasyczne z tym, że dolne granice całkowania są określone. Przyjmujemy jako postulat, że postać rozwiązań dla potencjału liniowego wyznacza sposób „zszywania” rozwiązań quasiklasycznych w punktach powrotu. W ten sposób rozwiązania quasiklasyczne stają się w pełni określone.

## Wykład XV cd.

## Mechanika kwantowa

Rozwiązanie quasiklasyczne dla potencjału przedstawionego na rysunku z punktami powrotu  $a$  i  $b$  ma postać

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{A}{2\sqrt{\chi(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^a dx' \chi(x')\right], & \text{gdy } x < a, \\ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right], & \text{gdy } a < x, \\ \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right], & \text{gdy } x < b, \\ \frac{B}{2\sqrt{\chi(x)}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_b^x dx' \chi(x')\right], & \text{gdy } b < x. \end{cases}$$

Widzimy, że wyrażenia dla  $a < x$  i  $x < b$  muszą być sobie równe, bo odpowiadają temu samemu obszarowi. A zatem musi zachodzić równość

$$A \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right] = B \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right].$$

Ponieważ  $\int_x^b dx' p(x') = \int_a^b dx' p(x') - \int_a^x dx' p(x')$  oraz  $\sin(-\varphi) = \sin(\varphi + \pi)$ , prawą stronę równości przekształcamy

$$B \sin\left[-\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right] = B \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' p(x') - \frac{\pi}{4} + \pi\right]$$

i otrzymujemy

$$A \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') + \frac{\pi}{4}\right] = B \sin\left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' p(x') - \frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' p(x') + \frac{3\pi}{4}\right],$$

co ma postać  $A \sin(\varphi) = B \sin(\varphi + \alpha)$ . Mamy dwa rodzaje rozwiązań tej równości:

1)  $A = B$  i  $\alpha = 2\pi n$ , 2)  $A = -B$  i  $\alpha = 2\pi n + \pi$ , gdzie  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Widzimy więc, że

$$-\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx' p(x') + \frac{\pi}{2} = \begin{cases} 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \dots & \text{gdy } A = B, \\ \pm \pi, \pm 3\pi, \pm 5\pi, \dots & \text{gdy } A = -B. \end{cases}$$

## Wykład XV cd.

## Mechanika kwantowa

Pamiętając, że wartość pędu  $p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))}$  jest nieujemna, ostatecznie znajdujemy tzw. regułę kwantyzacji Bohra-Sommerfelda

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b dx p(x) = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots = \pi \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

gdzie  $n=0,1,2,\dots$  Najczęściej regułę Bohra-Sommerfelda zapisuje się jako

$$\oint dx p(x) = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) = \pi\hbar, 3\pi\hbar, 5\pi\hbar, \dots$$

gdzie  $\oint dx p(x)$  oznacza całkę po pełnym cyklu ruchu klasycznego tzn.

$$\oint dx p(x) \equiv \int_a^b dx p(x) + \int_b^a dx (-p(x)) = 2 \int_a^b dx p(x).$$

Reguła kwantyzacji Bohra-Sommerfelda pojawiła się najpierw jako postulat *Starej teorii kwantów* w roku 1915, a dopiero później, w roku 1926 została wyprowadzona na gruncie mechaniki kwantowej w pracach Wentzela, Kramersa i Brillouina przy wykorzystaniu przybliżenia quasiklasycznego.

### Dygresja

Jak pamiętamy, w nieskończenie wysokiej studni, występują stany cząstki odpowiadające całkowitej wielokrotności połówek fali de Broglie'a. Można by więc oczekiwać, że podobny sens ma reguła Bohra-Sommerfelda. Tak jednak nie jest. Jeśli pęd wyrazić przez długość fali de Broglie'a  $p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ , to mamy

$$\oint \frac{dx}{\lambda(x)} = \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

A więc nie występują tutaj parzyste wielokrotności połówek fali. Nie może to jednak bardzo zaskakiwać, gdyż przybliżenie quasiklasyczne nie stosuje się do nieskończenie wysokiej studni ze względu na gwałtowny skok potencjału.

**Zastosowanie reguły Bohra-Sommerfelda****Oscylator harmoniczny**

Mamy cząstkę o energii  $E$ , poruszającą się w potencjale  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ , więc

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))} = \sqrt{2m\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)} = m\omega\sqrt{x_0^2 - x^2},$$

gdzie  $\pm x_0$  są punktami powrotu, przy czym  $x_0^2 = \frac{2E}{m\omega^2}$ .

Reguła Bohra-Sommerfelda orzeka, że

$$\int_{-x_0}^{x_0} dx p(x) = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Obliczamy lewą stronę

$$\int_{-x_0}^{x_0} dx p(x) = m\omega \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{x_0^2 - x^2} = m\omega x_0^2 \int_{-1}^1 dt \sqrt{1-t^2} = \frac{4E}{\omega} \int_0^1 dt \sqrt{1-t^2} = \frac{E\pi}{\omega}.$$

Ostatnią całkę wyliczamy podstawiając  $t = \sin \varphi$ ,

$$\int_0^1 dt \sqrt{1-t^2} = \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos \varphi \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = \int_0^{\pi/2} d\varphi \cos^2 \varphi = \frac{\pi}{4}.$$

A więc zgodnie z regułą Bohra-Sommerfelda

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

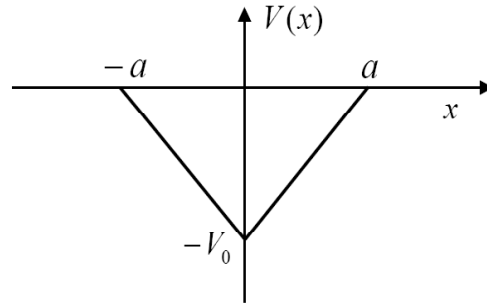
co pokrywa się ze ścisłym wynikiem wyprowadzonym w wykładzie VI. Trochę to zaskakuje, gdyż można było oczekiwać, że reguła Bohra-Sommerfelda da dokładny wynik tylko dla dużych  $n$ , kiedy dobrze działa przybliżenie quasiklasyczne. Dla dużych  $n$  bowiem, długość fali de Broglie'a jest mała w porównaniu z charakterystycznym rozmiarem układu identyfikowanym tutaj jako  $2x_0$ . Reguła Bohra-Sommerfelda działa więc lepiej niż można się było spodziewać.

## Wykład XV cd.

## Mechanika kwantowa

### Potencjał „trójkątny”

Rozważamy cząstkę o energii  $E \leq 0$ , poruszającą się w potencjale pokazanym na rysunku



$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < -a \\ V_0 \frac{|x|}{a} - V_0, & -a \leq x \leq a \\ 0, & a < x \end{cases}$$

Dla  $-a \leq x \leq a$  znajdujemy

$$p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V(x))} = \sqrt{2m\left(E + V_0 - V_0 \frac{|x|}{a}\right)} = \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} \sqrt{x_0 - |x|},$$

gdzie punktami powrotu są  $-x_0$  i  $x_0 \equiv \frac{E + V_0}{V_0} a$ .

Reguła Bohra-Sommerfelda orzeka, że

$$\int_{-x_0}^{x_0} dx p(x) = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Obliczywszy lewą stronę jako

$$\begin{aligned} \int_{-x_0}^{x_0} dx p(x) &= 2 \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} \int_0^{x_0} dx \sqrt{x_0 - x} = 2 \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} \int_0^{x_0} dx \sqrt{x} \\ &= 2 \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} \frac{2}{3} x_0^{3/2} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} \left( \frac{E + V_0}{V_0} a \right)^{3/2}, \end{aligned}$$

znajdujemy

$$\frac{4}{3} \sqrt{\frac{2mV_0}{a}} \left( \frac{E + V_0}{V_0} a \right)^{3/2} = \pi \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

co daje

$$E_n = \left[ \frac{3\pi}{4} \frac{V_0 \hbar}{\sqrt{2m} a} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3} - V_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$