ГЛАВА VII

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ СЛУЧАЙ

§ 46. Волновая функция в квазиклассическом случае

Если дебройлевские длины волн частиц малы по сравнению с характеристическими размерами L, определяющими условия данной конкретной задачи, то свойства системы близки к классическим. (По аналогии с тем, как волновая оптика переходит в геометрическую при стремлении длины волны к нулю.)

Произведем теперь более подробное исследование свойств *квазиклассических* систем. Для этого в уравнении Шредингера

$$\sum_a \frac{\hbar^2}{2m_a} \Delta_a \psi + (E - U)\psi = 0$$

сделаем формальную подстановку

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma}. \tag{46,1}$$

Для функции σ получаем уравнение

$$\sum_a \frac{1}{2m_a} (\nabla_a \sigma)^2 - \sum_a \frac{i\hbar}{2m_a} \Delta_a \sigma = E - U. \tag{46,2}$$

Соответственно тому, что система предполагается почти классической по своим свойствам, будем искать σ в виде ряда

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \cdots, \tag{46,3}$$

расположенного по степеням $\hbar$.

Начнем с рассмотрения наиболее простого случая — одномерного движения одной частицы. Уравнение (46,2) сводится тогда к уравнению

$$\frac{1}{2m}\sigma'^2 - \frac{i\hbar}{2m}\sigma'' = E - U(x) \tag{46,4}$$

(где штрих означает дифференцирование по координате x).

В первом приближении пишем $\sigma = \sigma_0$ и опускаем в уравнении член, содержащий $\hbar$:

$$\frac{1}{2m}\sigma_0'^2 = E - U(x).$$

Отсюда находим

$$\sigma_0 = \pm\int\sqrt{2m[E-U(x)]}\,dx.$$

Подынтегральное выражение представляет собой не что иное, как классический импульс $p(x)$ частицы, выраженный в функции от координаты. Определив функцию $p(x)$ со знаком $+$ перед корнем, будем иметь

$$\sigma_0 = \pm\int p\,dx, \quad p = \sqrt{2m(E-U)}, \tag{46,5}$$

что и следовало ожидать в соответствии с предельным выражением (6,1) для волновой функции [1]).

Сделанное в уравнении (46,4) пренебрежение законно только в том случае, если второй член в левой стороне равенства мал по сравнению с первым, т. е. должно быть $\hbar\,|\sigma''/\sigma'^2| \ll 1$ или

$$\left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{\sigma'}\right)\right| \ll 1.$$

В первом приближении имеем, согласно (46,5), $\sigma' = p$, так что полученное условие можно написать в виде

$$\left|\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx}\right| \ll 1, \tag{46,6}$$

где $\lambda\!\!\!^{-} = \lambda/2\pi$, а $\lambda(x) = 2\pi\hbar/p(x)$ — дебройлевская длина волны частицы, выраженная как функция от x с помощью классической функции $p(x)$. Таким образом, мы получили количественное *условие квазиклассичности* — длина волны частицы должна мало меняться на протяжении расстояний порядка ее самой. Приближение становится неприменимым в тех областях пространства, где это условие не выполняется.

Условие (46,6) можно написать и в ином виде, заметив, что

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-U)} = -\frac{m}{p}\frac{dU}{dx} = \frac{mF}{p},$$

---

[1]) Как известно, $\int p\,dx$ есть не зависящая от времени часть действия. Полное механическое действие S частицы есть $S = -Et \pm \int p\,dx$. В σ_0 член $-Et$ отсутствует в соответствии с тем, что мы рассматриваем не зависящую от времени волновую функцию ψ.

где $F = -dU/dx$ есть классическая сила, действующая на частицу во внешнем поле. Вводя эту силу, находим

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3} \ll 1. \tag{46,7}$$

Отсюда видно, что квазиклассическое приближение становится неприменимым при слишком малом импульсе частицы. В частности, оно заведомо неприменимо вблизи *точек поворота*, т. е. вблизи тех точек, в которых частица, согласно классической механике, остановилась бы, после чего начала бы двигаться в обратном направлении. Эти точки определяются из равенства $p(x) = 0$, т. е. $E = U(x)$. При $p \to 0$ дебройлевская длина волны стремится к бесконечности и ясно, что во всяком случае не может считаться малой.

Подчеркнем, однако, что условие (46,6) или (46,7) само по себе может оказаться недостаточным для допустимости квазиклассического приближения. Дело в том, что оно получено путем оценки различных членов в дифференциальном уравнении (46,4), причем отбрасываемый член содержит старшую производную. Между тем в действительности надо требовать малости последовательных членов разложения в решении этого уравнения, и она может не обеспечиваться малостью отбрасываемого члена в уравнении. Так, если в решении для $\sigma(x)$ содержится член, возрастающий с координатой x по закону, близкому к линейному, то малость второй производной в уравнении не мешает тому, что на достаточно больших расстояниях этот член может «набрать» большую величину. Такая ситуация возникает, вообще говоря, когда поле простирается на расстояния, большие по сравнению с характерной длиной L, на которой оно испытывает заметное изменение (см. ниже замечание в связи с формулой (46,11)); квазиклассическое приближение оказывается тогда неприменимым для прослеживания за поведением волновой функции на больших расстояниях.

Перейдем к вычислению следующего члена в разложении (46,3). Члены первого порядка по $\hbar$ в уравнении (46,4) дают $\sigma_0'\sigma_1' + \sigma_0''/2 = 0$, откуда

$$\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'} = -\frac{p'}{2p}.$$

Интегрируя, находим

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2}\ln p \tag{46,8}$$

(постоянную интегрирования опускаем).

Подставляя полученное выражение в (46,1), (46,3) получим волновую функцию в виде

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int p\,dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int p\,dx\right). \tag{46,9}$$

Множитель $1/\sqrt{p}$ в этой функции допускает простое истолкование. Вероятность нахождения частицы в точках с координатами между x и $x+dx$ определяется квадратом $|\psi|^2$, т. е. в основном пропорциональна $1/p$. Это как раз то, что и следовало ожидать для «квазиклассической частицы», поскольку при классическом движении время, проводимое частицей на отрезке dx, обратно пропорционально скорости (или импульсу) частицы.

В *классически недоступных* участках пространства, где $E < U(x)$, функция $p(x)$ — чисто мнимая, так что показатели вещественны. Общий вид решения волнового уравнения в этих областях

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int |p|\, dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int |p|\, dx\right). \quad (46,10)$$

Следует, однако, иметь в виду, что точность квазиклассического приближения не дает права сохранять в волновой функции экспоненциально малые члены «на фоне» экспоненциально больших, и в этом смысле одновременное сохранение обоих членов в (46,10), как правило, недопустимо.

Хотя обычно нет необходимости в использовании членов более высоких порядков малости в волновой функции, получим здесь еще и следующий член разложения (46,3), имея в виду отметить некоторые моменты, относящиеся к точности квазиклассического приближения.

Члены порядка $\hbar^2$ в уравнении (46,4) дают

$$\sigma_0'\sigma_2' + \frac{1}{2}\sigma_1'^2 + \frac{1}{2}\sigma_1'' = 0,$$

откуда (подставляя (46,5) и (46,8) для σ_0 и σ_1)

$$\sigma_2' = \frac{p''}{4p^2} - \frac{3p'^2}{8p^3}.$$

Интегрируя (причем первый член интегрируется по частям) и вводя силу $F = pp'/m$, получим

$$\sigma_2 = \frac{mF}{4p^3} + \frac{m^2}{8}\int \frac{F^2}{p^5}\, dx.$$

Волновая функция в рассматриваемом приближении имеет вид

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma} = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma_0 + \sigma_1}(1 - i\hbar\sigma_2)$$

или

$$\psi = \frac{\mathrm{const}}{\sqrt{p}}\left[1 - \frac{im\hbar}{4}\frac{F}{p^3} - \frac{i\hbar m^2}{8}\int \frac{F^2}{p^5}\, dx\right] e^{\frac{i}{\hbar}\int p\, dx}. \quad (46,11)$$

Появление мнимых поправочных членов в предэкспоненциальном множителе эквивалентно появлению вещественной поправки в фазе волновой функции $\left(\text{т. е. добавки к интегралу } \frac{1}{\hbar}\int p\,dx \text{ в ее экспоненте}\right)$. Эта поправка оказывается пропорциональной $\hbar$, т. е. имеющей порядок величины $\lambda\!\!\!^{-}/L$.

Второй и третий члены в квадратной скобке в (46,11) должны быть малы по сравнению с 1. Для первого из них это условие совпадает с (46,7), но во втором оценка интеграла приводит к условию (46,7), лишь если F^2 достаточно быстро стремится к нулю на расстояниях $\sim L$.

§ 47. Граничные условия в квазиклассическом случае

Пусть $x = a$ есть точка поворота (так что $U(a) = E$), и пусть $U > E$ при всех $x > a$, так что область справа от точки поворота классически недоступна. Волновая функция должна затухать в глубь этой области. В достаточном удалении от точки поворота она имеет вид

$$\psi = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right) \quad \text{при } x > a, \tag{47,1}$$

соответствующий первому члену в (46,10). Слева же от точки поворота волновая функция должна изображаться вещественной комбинацией (46,9) двух квазиклассических решений уравнений Шредингера:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right) \quad \text{при } x < a. \tag{47,2}$$

Для определения коэффициентов в этой комбинации надо проследить за изменением волновой функции от положительных $x - a$ (где справедливо выражение (47,1)) к отрицательным $x - a$. При этом, однако, приходится пройти через область вблизи точки остановки, где квазиклассическое приближение неприменимо и необходимо рассматривать точное решение уравнения Шредингера. При малых $|x - a|$ имеем

$$E - U(x) \approx F_0(x - a), \quad F_0 = -\left.\frac{dU}{dx}\right|_{x=a} < 0; \tag{47,3}$$

другими словами, в этой области мы имеем дело с задачей о движении в постоянном поле. Точное решение уравнения Шредингера для этой задачи было найдено в § 24, и связь между коэффи-