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 коэффициентами в (47,1) и (47,2) может быть найдена сравнением с асимптотическими выражениями (24,5) и (24,6) указанного точного решения по обе стороны от точки поворота. При этом надо заметить, что из (47,3) следует $p(x) = \sqrt{2mF_0(x-a)}$, так что интеграл

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx = \frac{2}{3\hbar}\sqrt{2mF_0}(x-a)^{3/2}$$

совпадает с выражением в аргументе exp или sin в (24,5) или (24,6). В этих рассуждениях существенно, что область применимости разложения (47,3) и область квазиклассичности частично перекрываются: если движение квазиклассично почти во всей области поля (что и предполагается), то существуют значения $|x-a|$ настолько малые, что допустимо разложение (47,3), и в то же время настолько большие, что удовлетворяется условие квазиклассичности и применимы асимптотики (24,5), (24,6) [1].

Методически более поучителен, однако, другой способ, позволяющий вообще избежать необходимости прибегать к точному решению. Для этого надо рассматривать формально $\psi(x)$ как функцию комплексного переменного x и произвести переход от положительных к отрицательным $x-a$ по пути, целиком расположенному вдали от точки $x=a$, так что на всем этом пути формально удовлетворяется условие квазиклассичности (*A. Zwaan*, 1929). При этом снова рассматриваем такие значения $|x-a|$, для которых в то же время допустимо разложение (47,3), так что волновая функция (47,1) принимает вид

$$\psi(x) = \frac{C}{2(2m|F_0|)^{1/4}}\frac{1}{(x-a)^{1/4}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_a^x\sqrt{2m|F_0|(x-a)}\,dx\right\}. \tag{47,4}$$

Проследим сначала за изменением этой функции при обходе вокруг точки $x=a$ справа налево по полуокружности (радиуса ρ) в верхней полуплоскости комплексного x. На этой полуокружности

$$x-a=\rho e^{i\varphi},\quad \int_a^x\sqrt{x-a}\,dx = \frac{2}{3}\rho^{3/2}\left(\cos\frac{3\varphi}{2}+i\sin\frac{3\varphi}{2}\right),$$

причем фаза φ меняется от 0 до π. При этом экспоненциальный

[1]) Действительно, разложение (47,3) применимо при $|x-a| \ll L$, где L — характерное расстояние изменения поля $U(x)$. Условие же квазиклассичности (46,7) требует $|x-a|^{3/2} \gg \hbar/\sqrt{m|F_0|}$. Оба эти условия совместны, поскольку квазиклассичность движения вдали от точки поворота (т. е. при $|x-a| \sim L$) означает, что $L^{3/2} \gg \hbar/\sqrt{m|F_0|}$.

множитель в (47,4) сначала (при $0 < \varphi < 2\pi/3$) возрастает по модулю, а затем падает по модулю до 1. В конце перехода показатель экспоненты становится чисто мнимым, равным

$$-\frac{i}{\hbar}\int_a^x \sqrt{2m|F_0|(a-x)}\,dx = -\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x)\,dx.$$

В предэкспоненциальном же множителе в (47,4) в результате обхода

$$(x-a)^{-1/4} \to (a-x)^{-1/4}e^{-i\pi/4}.$$

Таким образом, вся функция (47,4) переходит во второй член в (47,2) с коэффициентом $C_2 = \frac{1}{2}Ce^{-i\pi/4}$.

Тот факт, что путем обхода через верхнюю полуплоскость оказалось возможным определить лишь коэффициент C_2 в (47,2), имеет простое объяснение. Если проследить за изменением функции (47,2) при обходе по той же полуокружности в обратном направлении (слева направо), то мы увидим, что в начале обхода первый член быстро становится экспоненциально малым по сравнению со вторым. Но квазиклассическое приближение не дает возможности заметить экспоненциально малые члены в ψ «на фоне» большого основного члена, что и является причиной «потери» первого члена в (47,2) при произведенном обходе.

Для определения же коэффициента C_1 надо произвести обход справа налево по полуокружности в нижней полуплоскости комплексного x. Аналогичным образом найдем, что при этом функция (47,4) переходит в первый член в (47,2) с коэффициентом $C_1 = \frac{1}{2}Ce^{i\pi/4}$.

Таким образом, волновой функции (47,1) при $x > a$ соответствует при $x < a$ функция

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx + \frac{\pi}{4}\right).$$

Полученное правило соответствия можно записать в виде, не зависящем от того, с какой именно стороны от точки поворота лежит классически недоступная область

$$\underset{\text{при } U(x) > E}{\frac{C}{2\sqrt{|p|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right\}} \to \underset{\text{при } U(x) < E}{\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right| - \frac{\pi}{4}\right\}} \qquad (47,5)$$

(*H. A. Kramers*, 1926).

Подчеркнем лишний раз очевидное из вывода обстоятельство, что это правило связано с определенным граничным условием, поставленным с одной из сторон от точки поворота, и в этом смысле должно применяться лишь в определенном направлении. Именно, правило (47,5) получено при граничном условии $\psi \to 0$ в глубь классически недоступной области и должно применяться для перехода от последней к классически разрешенной области (как и указано в (47,5) стрелкой) [1].

Если классически доступная область ограничена (при $x = a$) бесконечно высокой потенциальной стенкой, то граничное условие для волновой функции при $x = a$ есть $\psi = 0$ (см. § 18). Квазиклассическое приближение при этом применимо вплоть до самой стенки и волновая функция

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx\right) \quad \text{при } x < a,$$
$$\psi = 0 \quad \text{при } x > a. \qquad (47,6)$$

§ 48. Правило квантования Бора — Зоммерфельда

Состояния, относящиеся к дискретному спектру энергии, квазиклассичны при больших значениях квантового числа n — порядкового номера состояния. Действительно, это число определяет число узлов собственной функции (см. § 21). Но расстояние между соседними узлами совпадает по порядку величины с дебройлевской длиной волны. При больших n это расстояние мало, так что длина волны мала по сравнению с размерами области движения.

Выведем условие, определяющее квантовые уровни энергии в квазиклассическом случае. Для этого рассмотрим финитное одномерное движение частицы в потенциальной яме; классически доступная область $b \leqslant x \leqslant a$ ограничена двумя точками поворота [2].

---

[1]) Переход же в обратном направлении теряет смысл в том отношении, что уже небольшое изменение волновой функции справа в (47,5) может привести к появлению экспоненциально возрастающего члена в функции слева.

[2]) В классической механике в таком поле частица совершала бы периодическое движение с периодом (время движения от точки b до a и обратно)

$$T = 2\int_b^a \frac{dx}{v} = 2m\int_b^a \frac{dx}{p}$$

(v — скорость частицы).