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

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

## § 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).

Согласно правилу (47,5) граничное условие в точке $x = b$ приводит (в области справа от нее) к волновой функции

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right). \tag{48,1}$$

Применив это же правило к области слева от точки $x = a$, получим ту же волновую функцию в виде

$$\psi = \frac{C'}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^a p\,dx - \frac{\pi}{4}\right).$$

Для того чтобы эти два выражения совпадали во всей области, сумма их фаз (которая есть величина постоянная) должна быть целым кратным от $\pi$:

$$\frac{1}{\hbar}\int_b^a p\,dx - \frac{\pi}{2} = n\pi$$

(причем $C = (-1)^n C'$). Отсюда

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint p\,dx = n + \frac{1}{2}, \tag{48,2}$$

где интеграл $\oint p\,dx = 2\int_b^a p\,dx$ взят по полному периоду классического движения частицы. Это и есть условие, определяющее в квазиклассическом случае стационарные состояния частицы. Оно соответствует *правилу квантования Бора — Зоммерфельда* старой квантовой теории.

Величина $I = \frac{1}{2\pi}\oint p\,dx$ называется *адиабатическим инвариантом* (см. I, § 49), так что условие квантования (48,2) можно записать как

$$I(E) = \hbar\,(n + 1/2).$$

В § 41 уже упоминалось, что при достаточно медленном, «адиабатическом», изменении параметров система остается в том же квантовом состоянии, в данном случае в состоянии с некоторым $n$. Мы видим, что в квазиклассическом пределе это утверждение совпадает с классической теоремой о постоянстве адиабатического инварианта при медленном изменении параметров.

Легко видеть, что целое число $n$ равно числу нулей волновой функции, а потому есть порядковый номер стационарного состояния. Действительно, фаза волновой функции (48,1) растет от $-\pi/4$ в точке $x = b$ до $\left(n + \frac{1}{4}\right)\pi$ в точке $x = a$, так что косинус обращается в этом интервале в нуль $n$ раз (вне интервала $b \leqslant x \leqslant a$ волновая функция затухает монотонно, не имея нулей на конечных расстояниях) [1].

Согласно сказанному выше в квазиклассическом случае число $n$ велико. Подчеркнем, однако, что сохранение члена 1/2 рядом с $n$ в (48,2) тем не менее законно: учет следующих поправочных членов в фазе волновых функций привел бы к появлению в правой стороне (48,2) лишь членов $\sim\lambda/L$, малых по сравнению с 1 (см. замечание в конце § 46) [2].

Для нормировки волновой функции достаточно интегрировать $|\psi|^2$ лишь в интервале $b \leqslant x \leqslant a$, так как вне его $\psi(x)$ экспоненциально затухает. Поскольку аргумент косинуса в (48,1) есть быстро меняющаяся функция, можно с достаточной точностью заменить квадрат косинуса его средним значением, т. е. 1/2. Тогда получим

$$\int |\psi|^2 dx \approx \frac{C^2}{2} \int\limits_b^a \frac{dx}{p(x)} = \frac{\pi C^2}{2m\omega} = 1,$$

где $\omega = 2\pi/T$ — частота классического периодического движения. Таким образом, нормированная квазиклассическая функция

$$\psi = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi v}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int\limits_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right). \tag{48,3}$$

Следует помнить, что частота $\omega$ — функция энергии и, вообще говоря, различна для разных уровней.

Соотношение (48,2) можно истолковать еще и другим образом. Интеграл $\oint p\,dx$ есть площадь, охватываемая замкнутой классической фазовой траекторией частицы (т. е. кривой в плоскости $p$, $x$ — фазовом пространстве частицы). Разделив эту площадь на клетки площадью $2\pi\hbar$ каждая, мы получим всего $n$ клеток. Но $n$ есть число квантовых состояний с энергиями, не превышающими заданного ее значения (соответствующего рассматриваемой фазовой траектории). Таким образом, мы можем сказать, что в квазиклассическом случае каждому квантовому состоянию соответствует *клетка* в фазовом пространстве площадью $2\pi\hbar$. Иначе,

[1]) Строго говоря, подсчет числа нулей должен производиться с учетом точного вида волновой функции вблизи точек поворота. Такое исследование подтверждает указанный результат.

[2]) В некоторых случаях точное выражение для уровней энергии $E(n)$ (как функции квантового числа $n$), получающееся из точного уравнения Шредингера, таково, что при $n \to \infty$ оно сохраняет свой вид; примерами являются уровни энергии в кулоновом поле и уровни энергии гармонического осциллятора. Естественно, что в этих случаях правило квантования (48,2), применимое при больших $n$, дает для функции $E(n)$ выражение, совпадающее с точным.

число состояний, отнесенное к элементу объема $\Delta p\, \Delta x$ фазового пространства, есть

$$\frac{\Delta p\, \Delta x}{2\pi\hbar}. \tag{48,4}$$

Если ввести вместо импульса волновой вектор $k = p/\hbar$, то это число напишется, как $\Delta k\, \Delta x/2\pi$. Оно совпадает, как и следовало ожидать, с известным выражением для числа собственных колебаний волнового поля (см. II, § 52).

Исходя из правила квантования (48,2) можно выяснить общий характер распределения уровней в энергетическом спектре. Пусть $\Delta E$ есть расстояние между двумя соседними уровнями, т. е. уровнями с отличающимися на единицу квантовыми числами $n$. Поскольку $\Delta E$ мало (при больших $n$) по сравнению с самой энергией уровней, то на основании (48,2) можно написать

$$\Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E}\, dx = 2\pi\hbar.$$

Но $\partial E/\partial p = v$, так что

$$\oint \frac{\partial p}{\partial E}\, dx = \oint \frac{dx}{v} = T.$$

Поэтому получаем

$$\Delta E = \frac{2\pi}{T}\hbar = \hbar\omega. \tag{48,5}$$

Таким образом, расстояние между соседними уровнями оказывается равным $\hbar\omega$. Для целого ряда соседних уровней (разность номеров $n$ которых мала по сравнению с самими $n$) соответствующие частоты $\omega$ можно приближенно считать одинаковыми. Поэтому мы приходим к выводу, что в каждом небольшом участке квазиклассической части спектра уровни расположены эквидистантно, через одинаковые интервалы $\hbar\omega$. Этот результат, впрочем, можно было ожидать заранее, так как в квазиклассическом случае частоты, соответствующие переходам между различными уровнями энергии, должны быть целыми кратными классической частоты $\omega$.

Представляет интерес проследить, во что переходят в классическом пределе матричные элементы какой-либо физической величины $f$. Для этого исходим из того, что среднее значение $\bar{f}$ в некотором квантовом состоянии в пределе должно перейти просто в классическое значение этой величины, если только само состояние в пределе дает движение частицы по определенной траектории. Такому состоянию соответствует волновой пакет (см. § 6), получающийся суперпозицией ряда стационарных состояний с близкими значениями энергии. Волновая функция такого состояния имеет вид

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n,$$

где коэффициенты $a_n$ заметно отличны от нуля только в некотором интервале $\Delta n$ значений квантового числа $n$—таком, что $1 \ll \Delta n \ll n$; числа $n$ предполагаются большими соответственно квазиклассичности стационарных состояний. Среднее значение $f$ равно, по определению,

$$\bar{f} = \int \Psi^* \hat{f} \Psi \, dx = \sum_n \sum_m a_m^* a_n f_{mn} e^{i\omega_{mn} t},$$

или, заменив суммирование по $n$, $m$ суммированием по $n$ и разности $s = m - n$:

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_{n+s}^* a_n f_{n+s,\, n} e^{i\omega s t},$$

где написано $\omega_{mn} = s\omega$ в соответствии с (48,5).

Матричные элементы $f_{nm}$, вычисленные с помощью квазиклассических волновых функций, быстро падают по величине с увеличением разности $m - n$, являясь в то же время медленно меняющимися функциями самого числа $n$ (при заданном $m - n$). Ввиду этого приближенно можно написать

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_n^* a_n f_s e^{i\omega s t} = \sum_n |a_n|^2 \sum_s f_s e^{i\omega s t},$$

где введено обозначение

$$f_s = f_{\bar{n}+s,\, \bar{n}},$$

а $\bar{n}$ — некоторое среднее значение квантового числа в интервале $\Delta n$. Но $\sum_n |a_n|^2 = 1$; поэтому

$$\bar{f} = \sum_s f_s e^{i\omega s t}.$$

Получившаяся сумма имеет вид обычного ряда Фурье. Поскольку $\bar{f}$ должно в пределе совпадать с классической величиной $f(t)$, то мы приходим к результату, что матричные элементы $f_{mn}$ в пределе переходят в компоненты $f_{m-n}$ разложения классической функции $f(t)$ в ряд Фурье.

Аналогично, матричные элементы для переходов между состояниями непрерывного спектра переходят в компоненты разложения $f(t)$ в интеграл Фурье. При этом волновые функции стационарных состояний должны быть нормированы на $\delta$-функцию от энергии, деленной на $\hbar$.

Все изложенные результаты непосредственно обобщаются на системы со многими степенями свободы, совершающие финитное движение, для которого механическая (классическая) задача допускает полное разделение переменных в методе Гамильтона—Якоби (так называемое условно-периодическое движение, см. I, § 52). После разделения переменных для каждой степени свободы задача сводится к одномерной и соответствующие условия квантования имеют вид

$$\oint p_i\, dq_i = 2\pi\hbar\,(n_i + \gamma_i), \tag{48,6}$$

где интеграл берется по периоду изменения обобщенной координаты $q_i$, а $\gamma_i$ — число порядка единицы, зависящее от характера граничных условий для данной степени свободы [1]).

В общем случае произвольного (не условно-периодического) многомерного движения формулировка квазиклассических условий квантования требует более глубоких рассуждений [2]). Понятие же о «клетках» в фазовом пространстве применимо (в квазиклассическом приближении) всегда в одинаковом виде. Это ясно из отмеченной выше его связи с числом собственных колебаний волнового поля в заданном объеме пространства. В общем случае системы с $s$ степенями свободы на элемент объема фазового пространства приходится

$$\Delta N = \frac{\Delta q_1 \ldots \Delta q_s \Delta p_1 \ldots \Delta p_s}{(2\pi\hbar)^s} \tag{48,7}$$

квантовых состояний [3]).

**Задачи**

1. Определить (приближенно) число дискретных уровней энергии частицы, движущейся в поле $U(\mathbf{r})$, удовлетворяющем условию квазиклассичности.

---

[1]) Так, для движения в центрально-симметричном поле

$$\oint p_r\, dr = 2\pi\hbar\left(n_r + \frac{1}{2}\right),$$

$$\oint p_\theta\, d\theta = 2\pi\hbar\left(l - m + \frac{1}{2}\right), \quad \oint p_\varphi\, d\varphi = 2\pi\hbar m$$

(где $n_r = n - l - 1$ — радиальное квантовое число). Последнее равенство связано просто с тем, что $p_\varphi$ есть $z$-компонента момента, равная $\hbar m$.

[2]) См. *J. B. Keller*, Annals of Physics 4, 180 (1958).

[3]) В частности, для одной частицы $d^3p/(2\pi\hbar)^3$ есть число состояний, приходящихся на интервал $d^3p$ значений импульса в единичном объеме пространства. Этим объясняется совпадение двух истолкований нормировки плоской волны (15,8), отмеченное в примечании на стр. 64.

Р е ш е н и е. Число состояний, «приходящихся» на объем фазового пространства, соответствующий импульсам в интервале $0 \leqslant p \leqslant p_{\max}$ и координатам частицы в элементе объема $dV$, равно

$$\frac{\frac{4\pi}{3} p_{\max}^3 \, dV}{(2\pi\hbar)^3}.$$

При заданном $\mathbf{r}$ частица может обладать (в своем классическом движении) импульсом, удовлетворяющим условию $E = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \leqslant 0$. Подставляя $p_{\max} = \sqrt{-2mU(\mathbf{r})}$, получим полное число состояний дискретного спектра

$$\frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \int (-U)^{3/2} \, dV,$$

где интегрирование производится по той области пространства, в которой $U < 0$. Этот интеграл расходится (число уровней бесконечно), если $U$ убывает на бесконечности, как $r^{-s}$ с $s < 2$ в согласии с результатами § 18.

2. То же в квазиклассическом центрально-симметричном поле $U(r)$ (*В. Л. Покровский*).

Р е ш е н и е. В центрально-симметричном поле число состояний не совпадает с числом уровней энергии ввиду вырождения последних по направлениям момента. Искомое число можно найти, заметив, что число уровней с заданным значением момента $M$ совпадает с числом уровней (невырожденных) для одномерного движения в поле с потенциальной энергией $U_{eff} = U(r) + M^2/2mr^2$. Максимальное возможное значение импульса $p_r$ при данном $r$ и энергиях $E \leqslant 0$ есть $p_{r\,\max} = \sqrt{-2mU_{eff}}$. Поэтому число состояний (т. е. число уровней) равно

$$\int \frac{dr\,dp_r}{2\pi\hbar} = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} \int \sqrt{-U - \frac{M^2}{2mr^2}} \, dr.$$

Искомое полное число дискретных уровней получается отсюда интегрированием по $dM/\hbar$ (заменяющим в квазиклассическом случае суммирование по $l$) и равно

$$\frac{m}{4\hbar^2} \int (-U) \, r \, dr.$$

## § 49. Квазиклассическое движение в центрально-симметричном поле

При движении в центрально-симметричном поле волновая функция частицы распадается, как мы знаем, на угловую и радиальную части. Рассмотрим сначала первую из них.

Зависимость угловой волновой функции от угла $\varphi$ (определяющаяся квантовым числом $m$) настолько проста, что вопрос о нахождении для нее приближенных формул вообще не возникает. Что же касается зависимости от полярного угла $\theta$, то, согласно общему правилу, она квазиклассична, если соответствующее ей квантовое число $l$ велико (более точная формулировка этого условия будет дана ниже).