Решение. 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*).

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

Мы ограничимся здесь выводом квазиклассического выражения угловой функции лишь для наиболее важного в применениях случая состояний с равным нулю магнитным квантовым числом ($m = 0$) [1]). Эта функция совпадает с точностью до постоянного множителя с полиномом Лежандра $P_l(\cos\theta)$ (см. (28,8)) и удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2P_l}{d\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta\frac{dP_l}{d\theta} + l(l+1)P_l = 0. \tag{49,1}$$

Подстановкой

$$P_l(\cos\theta) = \frac{\chi(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}} \tag{49,2}$$

оно приводится к уравнению

$$\chi'' + \left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{4\sin^2\theta}\right]\chi = 0, \tag{49,3}$$

не содержащему первой производной и по виду аналогичному одномерному уравнению Шредингера.

В уравнении (49,3) роль «дебройлевской длины волны» играет

$$\lambda\!\!\!^{-} = \left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{4\sin^2\theta}\right]^{-1/2}.$$

Требование малости производной $d\lambda\!\!\!^{-}/dx$ (условие (46,6)) приводит к неравенствам

$$\theta l \gg 1, \quad (\pi-\theta)l \gg 1 \tag{49,4}$$

(условия квазиклассичности угловой части волновой функции). При больших l эти условия выполняются почти во всем интервале значений θ, за исключением лишь области углов, очень близких к нулю или к π.

При выполнении условия (49,4) в (49,3) можно пренебречь вторым членом в квадратных скобках по сравнению с первым:

$$\chi'' + \left(l+\frac{1}{2}\right)^2\chi = 0.$$

Решение этого уравнения:

$$\chi \equiv \sqrt{\sin\theta}\,P_l(\cos\theta) = A\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta + \alpha\right] \tag{49,5}$$

(A, α — постоянные).

---

[1]) Противоположный случай, $m = l$, в пределе должен соответствовать движению по классической орбите, лежащей в экваториальной плоскости $\theta = \pi/2$. Действительно,

$$P_l^l(\cos\theta) = \mathrm{const}\cdot\sin^l\theta;$$

при $l \to \infty$ эта функция (а с нею и $|\psi|^2$) стремится к нулю при всех $\theta \neq \pi/2$.

Для углов $\theta \ll 1$ в уравнении (49,1) можно положить $\operatorname{ctg}\theta \approx 1/\theta$; заменяя также приближенно $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$, получим уравнение

$$\frac{d^2P_l}{d\theta^2}+\frac{1}{\theta}\frac{dP_l}{d\theta}+\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 P_l=0,$$

которое имеет решением функцию Бесселя нулевого порядка

$$P_l(\cos\theta)=J_0\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta\right], \qquad \theta\ll 1. \tag{49,6}$$

Постоянный множитель положен равным единице, так как при $\theta=0$ должно быть $P_l=1$. Приближенное выражение (49,6) для P_l справедливо при всех углах $\theta \ll 1$. В частности, его можно применить и для углов в области $1/l \ll \theta \ll 1$, где оно должно совпадать с выражением (49,5), справедливым при всех $\theta \gg 1/l$. При $\theta l \gg 1$ бесселеву функцию можно заменить ее асимптотическим выражением для больших значений аргумента, и мы получим

$$P_l \approx \sqrt{\frac{2}{\pi l}}\,\frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\theta}}$$

(в коэффициенте можно пренебречь 1/2 по сравнению с l). Сравнивая с (49,5), находим, что $A=\sqrt{2/\pi l}$, $\alpha=\pi/4$. Таким образом, получаем окончательно следующее выражение для $P_l(\cos\theta)$, применимое в квазиклассическом случае [1]:

$$P_l(\cos\theta)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi l}}\,\frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\sin\theta}}. \tag{49,7}$$

Нормированная же сферическая функция Y_{l0} получается отсюда в виде (ср. (28,8))

$$Y_{l0}\approx\frac{i^l}{\pi}\,\frac{\sin\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\sin\theta}}. \tag{49,8}$$

Перейдем к радиальной части волновой функции. В § 32 было показано, что функция $\chi(r)=rR(r)$ удовлетворяет уравнению, тождественному одномерному уравнению Шредингера с потенциальной энергией

$$U_l(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}.$$

[1]) Обратим внимание на то, что именно в результате замены $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$ мы получили выражение, умножающееся на $(-1)^l$ при замене θ на $\pi-\theta$, как и должно быть для функции $P_l(\cos\theta)$.

Поэтому мы можем применить полученные в предыдущих параграфах результаты, понимая под потенциальной энергией функцию $U_l(r)$.

Наиболее прост случай $l = 0$. Центробежная энергия отсутствует, и если поле $U(r)$ удовлетворяет необходимому условию (46,6), то радиальная волновая функция будет квазиклассической во всем пространстве. При $r = 0$ должно быть $\chi = 0$, поэтому квазиклассическая функция $\chi(r)$ определяется в соответствии с формулами (47,6).

Если же $l \neq 0$, то условию (46,6) должна удовлетворять также и центробежная энергия. В области небольших r, где центробежная энергия порядка величины полной энергии, длина волны $\lambdabar = \hbar/p \sim r/l$ и условие (46,6) дает $l \gg 1$. Таким образом, если l невелико, в области небольших r условие квазиклассичности нарушается центробежной энергией. Можно легко убедиться в том, что мы получим правильное значение фазы квазиклассической волновой функции $\chi(r)$, если будем вычислять ее по формулам одномерного движения, заменив в потенциальной энергии $U_l(r)$ коэффициент $l(l+1)$ на $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ [1]):

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}. \tag{49,9}$$

Вопрос о применимости квазиклассического приближения к кулонову полю $U = \pm\alpha/r$ требует особого рассмотрения. Из всей области движения наиболее существенна часть, соответствующая расстояниям r, при которых $|U| \sim |E|$, т. е. $r \sim \alpha/|E|$. Условие квазиклассичности движения в этой области сводится к требованию малости длины волны $\lambdabar \sim \hbar/\sqrt{2m|E|}$ по сравнению с размерами $\alpha/|E|$ области; это дает

$$|E| \ll \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}, \tag{49,10}$$

т. е. абсолютное значение энергии должно быть мало по сравнению с энергией частицы на первой боровской орбите. Условие (49,10) можно написать также и в виде

$$\frac{\alpha}{\hbar v} \gg 1, \tag{49,11}$$

где $v \sim \sqrt{|E|/m}$ — скорость частицы. Обратим внимание на то, что это условие обратно условию (45,7) применимости теории возмущений к кулонову полю.

---

[1]) Так, в простейшем случае свободного движения ($U = 0$) фаза функции, вычисленной по формуле (48,1) с U_l из (49,9), при больших r совпадает, как и следовало, с фазой функции (33,12).

Что касается области малых расстояний ($|U(r)| \gg E$), то в кулоновом поле отталкивания она вообще не представляет интереса, поскольку при $U > E$ квазиклассические волновые функции затухают экспоненциально. В поле же притяжения при малых l возможно проникновение частицы в область, где $|U| \gg |E|$, так что возникает вопрос о границах применимости здесь квазиклассического приближения. Воспользуемся общим условием (46,7), положив в нем

$$F = -\frac{dU}{dr} = -\frac{\alpha}{r^2}, \quad p \approx \sqrt{2m|U|} \sim \sqrt{\frac{m\alpha}{r}}.$$

В результате найдем, что область применимости квазиклассического приближения ограничивается расстояниями

$$r \gg \hbar^2/m\alpha, \tag{49,12}$$

т. е. расстояниями, большими по сравнению с «радиусом» первой боровской орбиты.

Задача

Определить поведение волновой функции вблизи начала координат, если при $r \to 0$ поле обращается в бесконечность, как $\pm\alpha/r^s$ с $s > 2$.

Решение. При достаточно малых r длина волны

$$\lambdabar \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m|U|}} \sim \frac{\hbar r^{s/2}}{\sqrt{m\alpha}},$$

так что

$$\frac{d\lambdabar}{dr} \sim \frac{\hbar}{\sqrt{m\alpha}} r^{\frac{s}{2}-1} \ll 1;$$

таким образом выполняется условие квазиклассичности. В поле притяжения $U_l \to -\infty$ при $r \to 0$. Область вблизи начала координат в этом случае классически доступна и радиальная волновая функция $\chi \sim 1/\sqrt{p}$, откуда

$$\psi \sim r^{\frac{s}{4}-1}.$$

В поле отталкивания область малых r классически недоступна. В этом случае волновая функция при $r \to 0$ экспоненциально стремится к нулю. Опуская множитель при экспоненциальной функции, имеем

$$\psi \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{r_0}^{r} p\,dr\right|\right) \quad \text{или} \quad \psi \sim \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\alpha}}{(s-2)\hbar} r^{-\left(\frac{s}{2}-1\right)}\right].$$