ГЛАВА V

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

§ 39. Предельный переход к классической механике

Мы неоднократно отмечали существование принципа соответствия и правила перехода соотношений квантовой механики в формулы классической механики при $\hbar \to 0$. Сейчас мы уточним условия этого перехода и вместе с тем получим важный приближенный метод решения уравнения Шредингера[1]) (метод ВКБ).

Если положить $\hbar = 0$ непосредственно в уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi, \tag{39,1}$$

то оно теряет смысл. Поэтому, чтобы произвести указанный предельный переход, представим волновую функцию ψ в виде

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}. \tag{39,2}$$

Подставляя это выражение в уравнение (39,1), получаем уравнение для функции S:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S + U. \tag{39,3}$$

Формально разложим теперь функцию S по степеням величины $\hbar/i$

$$S = S_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right) S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \ \dots \tag{39,4}$$

Подставляем разложение (39,4) в уравнение (39,3) и приравниваем коэффициенты при одинаковых степенях $\hbar$. С точностью до членов, пропорциональных первой степени величины $\hbar$,

---

[1]) Метод Вентцеля, Крамерса, Бриллюэна. G. Wentzel, Zeits, f. Physik **38**, 518 (1926); L. Brillouin, Comptes Rendus **183**, 24 (1926); J. de Physique **7**, 353 (1926); H. A. Kramers, Zeits, f. Physik **39**, 828 (1926); U. Jeffreys, Proc. London Math. Soc. (2) **23**, 428 (1923).

получаем два уравнения:

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t}=\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2+U, \tag{39,5}$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t}=\frac{1}{m}\nabla S_0\,\nabla S_1+\frac{1}{2m}\Delta S_0. \tag{39,6}$$

Уравнение (39,5) совпадает с уравнением Гамильтона — Якоби классической механики [1]) для функции действия S_0. Для выяснения смысла уравнения (39,6) напишем выражение для плотности вероятности нахождения частицы в данном месте пространства в виде

$$\rho=|\psi|^2=e^{2S_1}. \tag{39,7}$$

Умножая (39,6) на ρ и учитывая, что

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=2\frac{\partial S_1}{\partial t}\rho;\quad \nabla\rho=2\nabla S_1\rho,$$

получаем

$$-\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{m}(\nabla S_0\nabla\rho+\rho\,\Delta S_0)=\operatorname{div}\left(\frac{1}{m}\rho\,\nabla S_0\right). \tag{39,8}$$

Уравнение (39,8), эквивалентное уравнению (39,6), представляет уравнение непрерывности. Оно показывает, что плотность вероятности перемещается в пространстве с такой же скоростью $\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\nabla S_0$ и по той же траектории, по которой перемещается частица в классической механике. Напомним, что, поскольку скорость направлена по нормали к поверхностям $S_0 = \mathrm{const}$, траектории классической частицы ортогональны к поверхностям $S_0=\mathrm{const}$. В квазиклассическом приближении поверхности $S=\mathrm{const}$ естественно назвать поверхностями равной фазы волновой функции.

Найдем теперь волновую функцию стационарных состояний частицы в квазиклассическом приближении, причем мы ограничимся одномерным движением, так что $\psi=\psi(x,t)$. В силу условия стационарности имеем

$$\psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x). \tag{39,9}$$

В соответствии с этим в формулах (39,2) и (39,4) полагаем

$$S_0(x,t)=-Et+S_0'(x), \tag{39,10}$$

тогда как функции S_1, S_2, ... и т. д. можно считать не зависящими от времени.

---

[1]) Об уравнении Гамильтона — Якоби в классической механике см. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, Физматгиз, 1958, стр. 184; Г. Голдстейн, Классическая механика, Гостехиздат, 1957, стр. 296.

Из уравнения (39,5) получаем

$$E = \frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0'}{dx}\right)^2 + U(x), \tag{39,11}$$

откуда

$$S_0'(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - U(x))}\, dx = \pm \int^x p(x)\, dx, \tag{39,12}$$

где

$$p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

Как и следовало ожидать, мы получили обычные формулы классической механики.

Из уравнения (39,6) мы можем теперь определить функцию S_1. Учитывая, что она постоянна во времени, находим

$$\frac{dS_0'}{dx}\frac{dS_1}{dx} + \frac{1}{2}\frac{d^2S_0'}{dx^2} = 0 \tag{39,13}$$

или

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2}\frac{\dfrac{d^2S_0'}{dx^2}}{\dfrac{dS_0'}{dx}} = -\frac{1}{2p}\frac{dp}{dx}. \tag{39,14}$$

Интегрируя, получаем

$$S_1 = -\frac{1}{2}\ln p \tag{39,15}$$

(постоянную интегрирования мы учтем непосредственно в выражении для волновой функции).

Из определения (39,2) и из полученных выражений (39,10) и (39,15) легко найдем волновую функцию частицы с точностью до членов первого порядка по степеням $\hbar/i$:

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx}, \quad E > U, \tag{39,16}$$

$$\psi(x) = \frac{C_1'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|\,dx} + \frac{C_2'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p(x)|\,dx}, \quad E < U. \tag{39,16'}$$

Характер полученной волновой функции существенно зависит от знака разности $(E - U)$. Если $E > U$, то импульс является вещественным. Это отвечает движению частицы в области, дозволенной по классической механике. При этом волновая функция имеет характер осциллирующей функции. Период осцилляции тем меньше, чем больше величина импульса p. Множитель $\frac{1}{\sqrt{p}} \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$ имеет простой смысл. Вероятность нахождения частицы в области от x до $x+dx$ пропорциональна времени пребывания частицы в этой области $|\psi(x)|^2\,dx \sim \frac{dx}{v} \sim dt$, т. е. получается тот же результат, что и в классической механике. Совершенно иной характер имеет волновая функция в области недозволенных энергий, при $E < U$. Здесь импульс становится мнимым, а волновая функция превращается в сумму экспоненциальных выражений. В точке $E = U$ (именуемой точкой поворота) $p = 0$ и полученное выражение для волновой функции теряет смысл.

Как ясно из последующего, вблизи точки поворота квазиклассическое приближение становится неприменимым. Между тем, не зная волновую функцию в точке поворота, нельзя произвести смыкание волновой функции на границе дозволенной и недозволенной области. Иными словами, нельзя определить постоянные, фигурирующие в осциллирующем и экспоненциальном выражениях, без чего квазиклассические волновые функции не имеют никакой практической ценности. Однако прежде чем перейти к расчету волновой функции в точке поворота, следует выяснить, почему в этой точке квазиклассическое решение теряет смысл. Для этого оценим пределы применимости полученных выражений (39,16) и (39,16′). Прежде всего заметим, что при подстановке в уравнение (39,3) $S = S_0$ мы опустили, как малый, член $\frac{i\hbar}{2m}\Delta S_0$. Чтобы это было справедливо, должно выполняться неравенство

$$\left|\frac{i\hbar}{2m}\Delta S_0\right| \ll \frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2, \tag{39,17}$$

или, учитывая, что $\nabla S_0 = \boldsymbol{p}$,

$$\hbar\,|\nabla \boldsymbol{p}| \ll \boldsymbol{p}^2. \tag{39,18}$$

Для одного измерения последнее неравенство перепишется в виде

$$\hbar\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll p^2. \tag{39,19}$$

Вводя вместо импульса p волновое число k и соответствующую длину волны $\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{1}{k}$, имеем

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 1. \tag{39,20}$$

Таким образом, мы видим, что уравнение Шредингера сводится к уравнениям (39,5), (39,6) при выполнении условия (39,20). Именно, для применимости квазиклассического приближения необходимо, чтобы длина волны де Бройля достаточно медленно изменялась в пространстве от точки к точке. Иными словами, относительное изменение волнового числа на протяжении длины волны должно быть мало по сравнению с единицей $\lambda\!\!\!{}^{-}\frac{1}{k}\left|\frac{dk}{dx}\right| \ll 1$. Отметим также, что и относительное изменение производной от волнового числа k на протяжении длины волны де Бройля для частицы должно быть мало. Действительно, при получении уравнений (39,5), (39,6) мы воспользовались также условием

$$\hbar\,|\Delta S_1| \ll |\Delta S_0|. \tag{39,21}$$

Учитывая одномерность задачи и вводя волновое число k, перепишем это неравенство в виде

$$\left|\frac{d^2k}{dx^2}\right|\lambda\!\!\!{}^{-} \ll \left|\frac{dk}{dx}\right|. \tag{39,22}$$

При движении частицы в потенциальном поле $U(x)$ удобно выразить волновое число через потенциальную энергию по формуле

$$k = \frac{p}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)}$$

и представить условие (39,20) в виде

$$\left|\frac{m\hbar}{p^3}\frac{dU}{dx}\right| \ll 1 \tag{39,23}$$

или

$$\frac{m}{\hbar^2}\left|\lambda\!\!\!{}^{-3}\frac{dU}{dx}\right| \ll 1. \tag{39,24}$$

Пользуясь (39,22), можно написать соответствующее неравенство и для второй производной от функции U. Отсюда видно, что квазиклассическое приближение справедливо:

1) когда длина волны де Бройля достаточно мала (т. е. частица является достаточно быстрой);

2) при достаточно медленном изменении потенциальной энергии от точки к точке, когда на длине порядка $\lambda\!\!\!{}^{-}$ не происходит заметного изменения импульса частицы.

Из (39,23) становится ясно, почему квазиклассическое выражение для волновой функции теряет смысл в точке поворота. Уже вблизи точки поворота импульс частицы становится малым и квазиклассическое приближение оказывается неприменимым.

Формулировки «достаточно мала» и «достаточно медленно» в 1) и 2) должны подчеркнуть то обстоятельство, что поскольку в критерии (39,20) — (39,24) входит масса частицы и конкретная характеристика поля — величина dU/dx, то в разных полях и для разных частиц квазиклассическое приближение будет справедливо при движении с различными энергиями. Для качественных оценок можно переписать (39,20) в упрощенном виде. Именно, считая, что изменение длины волны происходит в области действия силового поля, имеющего конечную протяженность a, можно вместо (39,20) записать:

$$\lambda\!\!\!^{-} \ll a$$

или

$$E \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \tag{39,25}$$

Для α-частиц ($m = 6{,}7\cdot 10^{-24}$ *г*) с энергией $E = 1$ *Мэв*, пролетающих через атомную оболочку ($a \sim 10^{-8}$ *см*), неравенство (39,25) выполняется в хорошем приближении. Напротив, для тех же α-частиц с энергией 10 *Мэв*, испытывающих непосредственное соударение с ядром ($a \sim 10^{-13}$ *см*), квазиклассическое рассмотрение неприменимо. В области существенно больших энергий применение квазиклассического приближения оказывается возможным и при рассмотрении некоторых процессов, связанных с ядерными соударениями.

§ 40. Решение уравнения Шредингера вблизи точки поворота

Вернемся теперь к рассмотрению поведения волновой функции вблизи точки поворота.

Идея этого рассмотрения заключается в следующем: поскольку вблизи точки поворота квазиклассическое приближение оказывается неудовлетворительным, необходимо найти решение уравнения Шредингера, не используя это приближение. Возможность получения такого решения при произвольном виде потенциальной энергии связана с тем, что выражение для потенциальной энергии вблизи точки поворота допускает весьма существенное упрощение (см. ниже). Если искомое решение найдено, то следует определить его асимптотическое поведение на больших расстояниях по обе стороны от точки поворота, в тех областях, где уже справедливо квазиклассическое приближение. Потребовав совпадения квазиклассического решения с полученным асимптотическим выражением, мы сможем определить соответствующие постоянные.

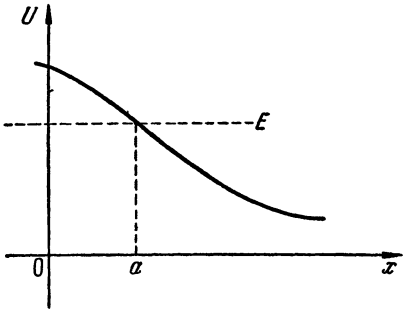

Рис. 12.

Переходя к реализации этой программы, заметим, что около точки поворота (рис. 12) можно разложить потенциальную