

Раздел I. КЛАССИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 1. Общие соображения

При переходе к пределу $\hbar \rightarrow 0$ законы квантовой механики должны переходить в законы механики классической. Принцип соответствия, игравший столь значительную роль при построении новой теории, и был призван обеспечить выполнение этого основного условия.

Классическая механика, следовательно, должна хорошо описывать физические явления во всех случаях, когда величиной кванта действия можно пренебречь. Предметом данной главы является выяснение вопроса о том, при каких условиях и в какой мере это классическое приближение оказывается справедливым.

Одним из проявлений конечной величины кванта действия является существование дискретного спектра собственных значений для некоторых наблюдаемых; интервалы между соседними собственными значениями оказываются порядка \hbar^1). Классическое приближение будет справедливым, если можно пренебречь величиной этих интервалов, что имеет место в случае достаточно больших квантовых чисел. Это условие, основанное на принципе соответствия, было использовано уже в старой квантовой теории при вычислении постоянной Ридберга и выводе правил квантования Бора — Зоммерфельда (см. § 1.13 и § 1.15). Однако указанное условие несомненно не является достаточным: некоторые чисто квантовые эффекты, такие, например, как соотношения неопределенности, никак не связаны с дискретной природой спектров. С более общей точки

1) Так, в атоме водорода $E_n = -\frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{mc^2}{n^2}$, $\Delta E = E_{n+1} - E_n = -\frac{2n+1}{(n+1)^2} E_n$. При $\hbar \rightarrow 0$ расстояние от заданного уровня энергии $E = E_n$ до ближайшего соседнего оказывается равным $\frac{2n+1}{(n+1)^2} E$; при этом предельном переходе $n^2 \hbar^2 = \text{const}$ и, следовательно, $n \rightarrow \infty$ как \hbar^{-1} , поэтому $\Delta E \sim O\left(\frac{1}{n}\right) + O(\hbar)$.

зрения условия применимости классического приближения совпадают с условиями применимости *геометрической оптики*.

Классическое приближение может быть сформулировано двумя различными способами.

Первый способ, интуитивно наиболее ясный, основан на приближенном описании динамического состояния каждой частицы в любой момент времени заданием ее положения и скорости. Если бы постоянная \hbar была равна нулю, то это описание было бы вполне строгим, так как компоненты векторов положения и импульса частицы представлялись бы попарно коммутирующими наблюдаемыми. В действительности коммутаторы отличны от нуля

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (1)$$

что ограничивает точность такого описания, ибо соотношения неопределенности делают невозможным одновременное определение координаты и импульса частицы. Поскольку динамическое состояние системы представляется волновой функцией, самое лучшее, что можно сделать на этом пути — это построить минимизирующий волновой пакет, для которого $\Delta q_i \cdot \Delta p_i = \hbar/2$. В классическом приближении мы приписываем каждой частице координату и импульс, равные средним значениям этих величин в соответствующем квантовом состоянии, полностью пренебрегая всеми флуктуациями около средних значений. Для получения удовлетворительных результатов необходимо:

- а) чтобы указанные средние значения в хорошем приближении следовали классическим законам движения;
- б) чтобы пространственная протяженность волнового пакета была мала по сравнению с характерной длиной рассматриваемой задачи и оставалась таковой с течением времени.

Этот подход станет предметом обсуждения двух последующих параграфов. Мы увидим, что, исключая некоторые особые случаи, сопоставляемый частице волновой пакет с течением времени «расплывается» и через достаточно большой промежуток времени может занимать сколь угодно значительную область пространства. Поэтому полученный классический образ частицы придем только на конечных интервалах времени.

Другой подход основан на отождествлении квантовой системы со статистическим ансамблем классических систем. Точнее, с помощью волновой функции определяется классический статистический ансамбль, плотность которого в каждой точке пространства конфигураций равна плотности вероятности присутствия в данной точке квантовой системы, а затем доказывается, что в пределе $\hbar \rightarrow 0$ эволюция этого ансамбля подчиняется законам классической механики. Этот подход мы рассмотрим в § 4. С математической точки зрения эта формули-

ровка классического приближения²⁾ имеет ряд преимуществ, так как уравнения классической механики при этом подходе получаются как предельный случай уравнения Шредингера; условия применимости этого приближения совпадают с условиями справедливости приближения геометрической оптики.

Классическое приближение тесно связано с одним методом приближенного решения уравнения Шредингера, известного как метод ВКБ³⁾ и применимого, когда уравнение Шредингера может быть заменено своим классическим пределом всюду, кроме некоторых областей пространства около сингулярных точек. Метод ВКБ излагается во втором разделе этой главы.

§ 2. Теорема Эренфеста

Теорема Эренфеста выражает закон изменения во времени средних значений координат q и сопряженных импульсов p квантовой системы. Теорема утверждает, что уравнения движения этих средних величин формально тождественны уравнениям Гамильтона классической механики, если только все величины, фигурирующие в обеих частях классических уравнений, заменить на соответствующие средние значения.

Теорема Эренфеста непосредственно следует из общего уравнения (V.72), если применить его к переменным положению и импульса.

Пусть q_1, \dots, q_R — координаты (декартовы), p_1, \dots, p_R — сопряженные им импульсы и $H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R)$ — гамильтониан системы. Согласно уравнению (V.72),

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle q_i \rangle = \langle [q_i, H] \rangle, \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle p_j \rangle = \langle [p_j, H] \rangle.$$

Вычисление коммутаторов в правых частях уравнений было проведено в гл. V (уравнения (V.67), (V.68)). Отсюда следует результат⁴⁾:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle q_i \rangle &= \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle & (i = 1, 2, \dots, R), \\ \frac{d}{dt} \langle p_j \rangle &= - \left\langle \frac{\partial H}{\partial q_j} \right\rangle & (j = 1, 2, \dots, R). \end{aligned} \quad (I)$$

²⁾ Существует несколько вариантов указанной формулировки, ибо определение классического статистического ансамбля по заданной волновой функции неоднозначно (см. задачу 4). В § 4 приводится простейший из этих вариантов.

³⁾ Математические приемы метода ВКБ были введены лордом Рэлеем (1912 г.) при решении некоторых проблем распространения волн. Первые применения к задачам квантовой механики принадлежат Г. Джеффрису (1923 г.); в дальнейшем метод был одновременно развит Г. Вентцелем, Г. А. Крамерсом и Л. Бриллюэном (1926 г.).

⁴⁾ С учетом правильного определения операторов $\frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\frac{\partial H}{\partial q_j}$, см. стр. 206.

Следует хорошо понимать связь между системой уравнений (1) и канонической системой Гамильтона. Вообще говоря, нельзя утверждать, что средние значения $\langle q_i \rangle$ и $\langle p_j \rangle$ следуют законом классической механики. Производные по времени *классических* величин q_i и p_j являются вполне определенными функциями $\partial H / \partial p_i$, $-\partial H / \partial q_j$ этих величин; эволюция последних с течением времени полностью определяется заданием их значений в начальный момент. Согласно же уравнениям (1) производные $d\langle q_i \rangle / dt$, $d\langle p_j \rangle / dt$ равны некоторым средним значениям, вычисление которых в общем случае требует знания волновой функции $\Psi(t)$. Средние значения $\langle q_i \rangle$, $\langle p_j \rangle$ следуют законам классической механики только в той мере, в какой можно заменить в правых частях (1) средние значения функций на функции средних значений, именно

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial p_i} H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R) \right\rangle \quad \text{на } \frac{\partial}{\partial p_i} H(\langle q_1 \rangle \dots \langle q_R \rangle; \langle p_1 \rangle \dots \langle p_R \rangle), \quad (2a)$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial q_j} H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R) \right\rangle \quad \text{на } \frac{\partial}{\partial q_j} H(\langle q_1 \rangle \dots \langle q_R \rangle; \langle p_1 \rangle \dots \langle p_R \rangle). \quad (2b)$$

Эта подстановка справедлива только в том случае, если гамильтониан есть полином второго порядка по q и p (свободная частица, гармонический осциллятор, заряженная частица в постоянных электрическом и магнитном полях, см. задачи 1 и 2). Во всех остальных случаях, делая подстановку, мы пренебрегаем флуктуациями q и p около их средних значений.

Рассмотрим в качестве примера случай частицы в потенциальном поле:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

Введем силу

$$\mathbf{F} = -\text{grad } V(r).$$

Уравнения Эренфеста в этом случае таковы:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{F} \rangle$$

или

$$\langle \mathbf{F} \rangle = m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle, \quad (3)$$

что является квантовым аналогом уравнения Ньютона.

Чтобы среднее положение

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

действительно удовлетворяло классическому уравнению Ньютона, необходимо в уравнении (3) заменить среднее значение силы

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{F}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

на значение $\mathbf{F}(\langle \mathbf{r} \rangle)$ силы в точке $\langle \mathbf{r} \rangle$. Если сила вообще равна нулю (свободная частица) или линейно зависит от радиуса-вектора \mathbf{r} (гармонический осциллятор), то справедливо точное равенство $\langle \mathbf{F} \rangle = \mathbf{F}(\langle \mathbf{r} \rangle)$. Во всех остальных случаях указанная замена оправдана только, если волновая функция остается локализованной в достаточно малой области пространства, где величину силы можно считать практически постоянной.

§ 3. Движение и распыление волновых пакетов

Для того чтобы движение волнового пакета можно было сопоставлять движению классической частицы необходимо, во-первых, чтобы изменения во времени положения пакета в пространстве и его импульса следовали законам классической механики, а во-вторых, чтобы размеры пакета в пространстве были достаточно малыми в любой момент времени. В действительности, как это предсказывает теорема Эренфеста, первое условие редко выполняется без второго; рассмотрим поэтому второе условие.

Основные результаты можно получить, исследуя движение волнового пакета в одном измерении $\psi(q, t)$. Пусть гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q).$$

Выясним, как изменяются во времени средние значения $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$, а также соответствующие дисперсии

$$\chi \equiv (\Delta q)^2 = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2, \quad \omega \equiv (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2.$$

В классическом приближении пакет представляет частицу, имеющую координату и импульс

$$q_{\text{кл}} = \langle q \rangle, \quad p_{\text{кл}} = \langle p \rangle$$

соответственно⁵⁾. Отметим, что энергия этой классической частицы

$$E_{\text{кл}} = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} + V(\langle q \rangle)$$

не равна среднему значению $\langle H \rangle$. Если классическое приближение справедливо, $E_{\text{кл}}$ постоянна во времени вместе с разностью

$$\varepsilon = \langle H \rangle - E_{\text{кл}}. \quad (4)$$

⁵⁾ При рассмотрении волнового пакета в одном измерении в гл. II положение центра пакета определялось из условия стационарности фазы; здесь же применяется среднее значение $\langle q \rangle$. В классическом приближении различие между этими определениями пренебрежимо мало.

Если протяженность пакета $\sqrt{\chi}$ остается малой, естественно заменить функции $V(q)$, $V'(q)$ их разложениями Тейлора около точки $\langle q \rangle$, именно

$$V(q) = V_{\text{кл}} + (q - \langle q \rangle) V'_{\text{кл}} + \frac{1}{2} (q - \langle q \rangle)^2 V''_{\text{кл}} + \dots, \quad (5)$$

$$V'(q) = V'_{\text{кл}} + (q - \langle q \rangle) V''_{\text{кл}} + \frac{1}{2} (q - \langle q \rangle)^2 V'''_{\text{кл}} + \dots \quad (6)$$

Здесь $V_{\text{кл}}$, $V'_{\text{кл}}$, ... равны значениям функций V , V' , ... в точке $q = \langle q \rangle$. Если усреднить обе части равенств (5) и (6), то получится своего рода разложение средних величин в ряд по степеням величины χ :

$$\langle V \rangle = V_{\text{кл}} + \frac{1}{2} \chi V''_{\text{кл}} + \dots, \quad (7)$$

$$\langle V' \rangle = V'_{\text{кл}} + \frac{1}{2} \chi V'''_{\text{кл}} + \dots \quad (8)$$

Используя эти разложения, можно получить общие результаты, не зависящие от конкретной формы потенциала $V(q)$.

Величины $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$ подчиняются уравнениям Эренфеста:

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad (9a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \langle V' \rangle. \quad (9b)$$

Эти уравнения будут тождественны классическим, если правая часть уравнения (9b) может быть заменена первым членом своего разложения (8), т. е. когда можно пренебречь членом $\chi V'''_{\text{кл}}/2$ и членами более высокого порядка малости. Соответствующие члены исчезают, если $V'''(q)$ всюду равно нулю, т. е. если $V(q)$ является полиномом самое большее второго порядка по q и, в частности, при $V(q) = cq^2$ (гармонический осциллятор) или $V(q) = 0$ (свободная частица). В общем случае необходимо, чтобы потенциал $V(q)$ достаточно медленно изменялся на расстояниях порядка $\sqrt{\chi}$, т. е. на расстояниях порядка протяженности волнового пакета, так чтобы влияние V''' и производных более высокого порядка в разложении (8) было достаточно мало.

Если предположить выполнение этих условий (что эквивалентно предположению о быстрой сходимости разложений (7) и (8)), то для постоянной ϵ (см. уравнение (4)) получаем выражение

$$\epsilon \equiv \frac{\omega}{2m} + \langle V \rangle - V_{\text{кл}} \simeq \frac{1}{2m} (\omega + mV'_{\text{кл}}\chi) = \text{const}, \quad (10)$$

связывающее квадраты флуктуаций ω и χ .

Ограничимся исследованием эволюции χ с течением времени. Величина χ есть среднее значение оператора $q^2 - \langle q \rangle^2$, явно зависящего от времени, так как $\langle q \rangle$ есть функция времени. Применяя соотношение (V.72) к этому оператору, получаем после вычислений

$$\frac{d}{dt} \chi = \frac{1}{m} (\langle pq + qp \rangle - 2 \langle p \rangle \langle q \rangle).$$

Повторяя такие же вычисления для $d\chi/dt$, находим

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} = \frac{2\omega}{m^2} - \frac{1}{m} (\langle V'q + qV' \rangle - 2 \langle q \rangle \langle V' \rangle).$$

Заменяя в скобках в правой части уравнения оператор V' на два первых члена его разложения (6), получаем приближенное уравнение

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} \simeq \frac{2}{m^2} (\omega - mV''_{\text{кл}}\chi), \quad (11)$$

которое мы можем записать, учитывая (10), в виде

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} \simeq \frac{4}{m} (\epsilon - V''_{\text{кл}}\chi). \quad (12)$$

Зная дисперсии χ_0 и ω_0 , а также производную $\dot{\chi}_0 \equiv d\chi_0/dt$ в начальный момент t_0 , можно получить дисперсию χ в любой последующий момент времени, решая уравнение (12) (учитывая, конечно, что величина $V''_{\text{кл}}$ может зависеть от времени); после этого дисперсия ω находится из уравнения (10). Можно оценить и ошибку, возникающую при замене $\langle V' \rangle$ на $V'_{\text{кл}}$ в уравнении (9б). Таким образом, присутствуют все необходимые элементы для решения вопроса о возможности сопоставления волнового пакета и классической частицы.

Наиболее интересными примерами являются гармонический осциллятор и свободная частица, так как в этих случаях движение центра пакета совпадает с движением классической частицы. Для гармонического осциллятора ($V = m\omega^2 q^2/2$) среднее значение $\langle q \rangle$ колеблется около нуля с частотой $\omega/2\pi$, а дисперсия χ колеблется около значения $\epsilon/m\omega^2$ с удвоенной частотой (см. задачу 1).

В случае свободной частицы ($V = 0$) среднее значение $\langle q \rangle$ следует закону равномерного прямолинейного движения со скоростью $\langle p \rangle/m$, дисперсия ω остается постоянной ($\omega = \omega_0 = 2m\epsilon$), а для дисперсии χ имеем уравнение $d^2\chi/dt^2 = 2\omega_0/m^2$ (уравнения (11) и (12) в этом случае являются точными). Решая это уравнение, находим

$$\chi = \chi_0 + \dot{\chi}_0 t + \frac{\omega_0}{m^2} t^2. \quad (13)$$

Мы видим, что по истечении достаточно большого промежутка времени дисперсия пакета χ становится сколь угодно большой: волновой пакет для свободной частицы «расплывается».

Явление бесконечного расплывания пакета имеет важное значение, ибо ограничивает тот промежуток времени, в течение которого волновой пакет может быть сопоставлен классической частице. Кроме некоторых специальных случаев (гармонический осциллятор) расплывание пакета происходит всегда, например, в задачах о рассеянии, когда вдали от рассеивающего центра волновой пакет движется как волновой пакет для свободной частицы.

Закон расплывания волнового пакета для свободной частицы упрощается, если предположить, что в начальный момент времени мы имеем так называемый «минимизирующий» пакет,

т. е. пакет, для которого левая часть соотношения неопределенности имеет минимально возможное значение; в этом случае $\omega_0 \chi_0 = \hbar^2/4$ и $\dot{\chi}_0 = 0$ (см. задачу IV. 4). Тогда

$$\chi = \chi_0 + \frac{\omega_0}{m^2} t^2$$

или

$$\Delta q = \left[(\Delta q_0)^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m} t \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (14)$$

Форма члена, вызывающего расплывание, $(\Delta p_0 \cdot t/m)$, подсказывает простой классический образ, позволяющий описать процесс расплывания пакета. Можно представить себе группу частиц, сконцентрированных в начальный момент времени около среднего значения $\langle q_0 \rangle$ в области с размерами Δq_0 , причем скорости частиц также распределены в интервале $\Delta v = \Delta p_0/m$ около групповой скорости пакета $v = \langle p_0 \rangle/m$. Дисперсия по скорости приводит к тому, что частицы, первоначально находившиеся в одной точке, к моменту времени t равномерно распределяются по области $\Delta v \cdot t$; следовательно, первоначальная концентрация не сохраняется, и размеры «сгустка» частиц Δq увеличиваются, следуя закону (14).

Этот закон, впрочем, может быть записан и в другой форме:

$$\Delta q = \Delta q_0 \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{D\lambda}{(\Delta q_0)^2} \right)^2 \right]^{1/2},$$

где $D \equiv vt$ есть расстояние, проходимое волновым пакетом за время t , а $\lambda = \hbar/mv$ — средняя длина волны. Расплывание волнового пакета свободной частицы пренебрежимо мало, если

$$\sqrt{D\lambda} \ll \Delta q_0. \quad (15)$$

Нетрудно показать, что протяженность пакета Δq всегда превосходит длину $\sqrt{D\lambda}$ (заметим, что $D\lambda = \hbar t/m$).

§ 4. Классический предел уравнения Шредингера

Разберем теперь вторую формулировку классического приближения, упомянутую во введении к этой главе.

Для определенности рассмотрим случай частицы, движущейся в поле потенциала $V(\mathbf{r})$. Выделим модуль и фазу волновой функции:

$$\Psi(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r})}. \quad (16)$$

Подставляя это выражение в уравнение Шредингера и приравнявая действительные и мнимые части, получаем два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta A}{A}, \quad (17)$$

$$m \frac{\partial A}{\partial t} + \nabla A \cdot \nabla S + \frac{A}{2} \Delta S = 0. \quad (18)$$

Эта система вещественных уравнений полностью эквивалентна уравнению Шредингера. Отметим, что уравнение (18) есть ни что иное, как уравнение непрерывности (IV.11). Действительно, плотность вероятности $P(\mathbf{r})$ и плотность потока $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ (см. § IV.2 и § IV.4) выражаются формулами

$$P = A^2, \quad \mathbf{J} = A^2 \frac{\nabla S}{m},$$

а уравнение (18) умножением обеих частей на $2A$ приводится к виду

$$m \frac{\partial}{\partial t} A^2 + \operatorname{div} (A^2 \nabla S) = 0. \quad (19)$$

В классическом приближении мы опускаем член, пропорциональный \hbar^2 в правой части уравнения (17), что дает

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = 0. \quad (20)$$

Таким образом, получаем следующий результат:

В классическом приближении функция Ψ описывает «жидкость» из классических невзаимодействующих частиц массы m (статистический ансамбль), подверженных действию потенциала $V(\mathbf{r})$; плотность и плотность потока этой жидкости в каждой точке пространства в каждый момент времени соответственно равны плотности вероятности P и плотности потока вероятности \mathbf{J} квантовой частицы в этой точке⁶).

Действительно, поскольку верно уравнение непрерывности этой жидкости (уравнение (19)), достаточно показать, что поле скоростей

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{J}}{P} = \frac{\nabla S}{m} \quad (21)$$

⁶) Плотность этого классического статистического ансамбля в фазовом пространстве довольно специфична, так как любой точке конфигурационного пространства соответствует определенный импульс ∇S . Решение S этого уравнения (20) есть функция действия Гамильтона, используемая в формулировке классической механики Гамильтона — Якоби.

жидкости удовлетворяет классическим законам движения жидкости. Но, учитывая определение (21), можно переписать уравнение (20) в виде

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{mv^2}{2} + V = 0.$$

Далее, записывая условие равенства нулю градиента левой части, получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{grad} \right) m\mathbf{v} + \operatorname{grad} V = 0;$$

отсюда следует, что частицы жидкости подчиняются уравнению движения

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = - \operatorname{grad} V,$$

что и требовалось доказать.

Важно подчеркнуть большую общность этого результата, так как он остается справедливым для систем с любым числом измерений. Плотность $P = |\Psi|^2$ есть вполне определенная функция в конфигурационном пространстве; аналогично, \mathbf{J} есть вполне определенное векторное поле в этом пространстве. Читатель без труда повторит доказательство для общего случая.

Когда Ψ представляет стационарное состояние с энергией E ,

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -E,$$

уравнения (17) и (18) сводятся к

$$(\nabla S)^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{\nabla A}{A}, \quad (22)$$

$$\operatorname{div}(A^2 \nabla S) = 0. \quad (23)$$

В классическом приближении мы опускаем правую часть уравнения (22) и вновь приходим к доказанному выше результату. В этом случае Ψ описывает стационарное течение жидкости классических частиц.

Оптическая аналогия более наглядна, чем аналогия гидродинамическая, в особенности для стационарных решений. Поскольку скорости частиц пропорциональны градиенту S , траектории частиц ортогональны поверхностям равных фаз $S = \text{const}$. В оптике последние являются волновыми поверхностями, а траектории частиц совпадают с оптическими лучами⁷⁾. Классиче-

⁷⁾ В присутствии векторного потенциала электромагнитного поля \mathbf{A} определение (21) классической скорости должно быть изменено следующим образом: $\mathbf{v} = \frac{1}{m} \left(\nabla S - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)$. При этом доказанная выше теорема остается верной. Понятия волновой поверхности и лучей остаются в силе, но лучи более не ортогональны волновым поверхностям; эта ситуация аналогична геометрической оптике в анизотропных средах.

ское приближение таким образом совпадает с приближением геометрической оптики: здесь в качестве следствия уравнения Шредингера мы вновь получаем тот постулат, на котором была основана теория волн вещества.

Оптическая аналогия оказывается чрезвычайно полезной при проверке условий справедливости классического приближения. Пусть приведенная длина волны λ является заданной функцией точки r

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}}.$$

Тогда уравнение (22) можно записать в форме

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \left(1 + \lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \right). \quad (22')$$

Классическое приближение требует, чтобы условие

$$\lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \ll 1 \quad (24)$$

выполнялось во всем пространстве; точнее говоря, области, в которых данное условие не выполняется, должны быть настолько малы, чтобы уравнение (22) можно было заменить приближенным уравнением

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \quad (25)$$

почти всюду. Последнее уравнение есть уравнение волновых поверхностей геометрической оптики.

Если $V = 0$ во всем пространстве, то λ является постоянной, и частное решение уравнения (25) может быть записано в виде $S = \mathbf{p}r + \text{const}$, где \mathbf{p} — заданный вектор длины \hbar/λ (семейство функций этого типа образует полный интеграл уравнения в частных производных первого порядка (25)). В этом случае волновые поверхности суть плоскости, перпендикулярные \mathbf{p} , а лучи — прямые, параллельные \mathbf{p} . В общем случае, конечно, волновые поверхности и лучи криволинейны.

Рис. 23. Семейство траекторий (с заданной энергией E), связанных с волновой поверхностью (S_0) в приближении геометрической оптики: $(\nabla S)^2 = \hbar^2/\lambda^2$.

При заданной энергии E уравнение волновой поверхности $S(x, y, z) = S_0$ определяет одно и только одно решение уравнения (25). Его можно построить следующим образом. Поверхности (S_0) сопоставляется двухпараметрическое семейство траекторий классической частицы, соответствующих энергии E , которые ортогональны (S_0) и всем другим волновым поверхностям (рис. 23). Чтобы найти значение S на каждой из этих поверхностей, рассмотрим одну из траекторий (T) . Каждая точка на (T) определяется криволинейной координатой s ; начало отсчета $s = 0$ совпадает с точкой пересечения (T) и (S_0) .

Согласно уравнению (25)

$$S(s) = S_0 + \int_0^s \frac{\hbar}{\lambda} ds.$$

Таким образом, S оказывается определенной во всем пространстве, но тогда и задание A на поверхности (S_0) определяет функцию A во всем пространстве единственным образом. Уравнение (23) связывает только значения $A(s)$, взятые вдоль одной траектории, оно может быть записано в виде:

$$\frac{\hbar}{\lambda} \frac{d}{ds} (A^2) + A^2 \cdot \Delta S = 0.$$

Функции λ и ΔS вполне определены вдоль рассматриваемой траектории, поэтому это уравнение однозначно определяет функцию $A(s)$ при любых s , если задано значение $A(0)$ на пересечении траектории (T) и поверхности (S_0).

Зная решения A и S в классическом приближении, можно оценить возмущение, вносимое присутствием члена $\hbar^2 \Delta A / A$ в точном уравнении (22). Это возмущение зависит не только от «оптических» свойств среды, в которой распространяется волна, но также и от формы рассматриваемого решения волнового уравнения.

Классическое приближение применимо, вообще говоря, если «поперечные» размеры волны всюду велики по сравнению с λ и если

$$|\text{grad } \lambda| \ll 1 \quad (26)$$

во всяком случае в тех областях пространства, где плотность A^2 существенно отлична от нуля.

Эти условия получаются путем следующих полуколичественных рассуждений. Как указывает оптическая аналогия, кривизна световых лучей, т. е. траекторий частиц, должна быть мала в масштабах длины волны. Но радиус кривизны R связан со скоростью частиц v и поперечной составляющей силы — $(\text{grad } V)_\perp$ соотношением

$$\frac{mv^2}{R} = |(\text{grad } V)_\perp|.$$

Необходимо поэтому, чтобы

$$\frac{\lambda}{R} = \frac{\lambda |(\text{grad } V)_\perp|}{mv^2} = \frac{m\lambda^2}{\hbar^2} |(\text{grad } V)_\perp| \ll 1.$$

Учитывая выражение для λ как функции потенциала V , это условие можно записать так:

$$|(\text{grad } \lambda)_\perp| \ll 1$$

Таким образом, кривизна волновых поверхностей должна быть мала по сравнению с $1/\lambda$ (кроме, может быть, некоторых ограниченных областей пространства вблизи фокальных поверхностей). Это в общем случае достигается если и траектории обладают тем же свойством при надлежащем выборе поверхности (S_0). Аналогичным образом относительное изменение A на каждой волновой поверхности должно быть пренебрежимо малым на расстояниях порядка λ ; иначе говоря, «поперечные размеры» волны должны быть большими

по сравнению с λ . Если эти условия выполнены, то функция $A(s)$ вдоль траектории (T) приближенно дается соотношением

$$A(s) \simeq A(0) \sqrt{\frac{\lambda(s)}{\lambda(0)}},$$

что после небольшого вычисления дает

$$\lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \simeq \frac{\lambda^2}{A} \frac{d^2 A}{ds^2} \simeq \frac{1}{4} \left[2\lambda \frac{d^2 \lambda}{ds^2} - \left(\frac{d\lambda}{ds} \right)^2 \right].$$

Чтобы это выражение было мало, нужно, чтобы $d\lambda/ds$ и $\lambda d^2\lambda/ds^2$ были значительно меньше 1; практически второе условие выполнено всегда, когда выполнено первое, т. е. когда составляющая $\text{grad } \lambda$ вдоль траектории

$$|(\text{grad } \lambda)_\parallel| \ll 1.$$

§ 5. Кулоновское рассеяние. Формула Резерфорда

В качестве приложения рассмотрим кратко классическую теорию кулоновского рассеяния и условия ее применимости.

Это задача о рассеянии частиц с массой m кулоновским потенциалом $V = \frac{Ze^2}{r}$, где r — расстояние частицы от силового центра C ; этой частицей может быть, например, протон с зарядом e , который движется в кулоновском поле ядра с зарядом Ze (отталкивающий потенциал). Теория применима также и в том случае, когда заряды имеют противоположные знаки (притягивающий потенциал). Поэтому мы будем рассматривать постоянную Ze^2 как алгебраическую величину, обладающую некоторым знаком.

Пусть E — энергия частицы:

$$E = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{mv_0^2}{2};$$

задается также направление движения падающей частицы и прицельный параметр (прицельное расстояние) b , что фиксирует начальные условия движения. Положим

$$a = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{E}. \quad (27)$$

Известно, что траектория является ветвью гиперболы (рис. 24) с фокусом C , полуосью $OA = |a|$ и фокальным расстоянием $OC = \sqrt{a^2 + b^2}$. Угол отклонения дается соотношением

$$b = |a| \text{ctg } \frac{\theta}{2} \quad (28)$$

(знак отклонения зависит от знака потенциала, но абсолютное значение угла зависит только от абсолютного значения потенциала).

На практике важное значение имеет величина $d\sigma/d\Omega$, называемая дифференциальным эффективным сечением. Предположим, что силовой центр бомбардируется пучком частиц одной энергии E и одного направления движения; мы желаем знать число частиц, рассеиваемых в некотором телесном угле (Ω , $\Omega + d\Omega$). Тогда $d\sigma/d\Omega$, по определению, есть число частиц, рассеиваемых в этом направлении на единицу телесного угла в единицу времени, когда распределение частиц в первоначальном пучке равномерно, а поток постоянен во времени и равен единице, т. е. если через всякую поверхность, далекую от C и перпендикулярную направлению движения, проходит одна частица в единицу времени и на единицу поверхности.

Выберем первоначальное направление пучка в качестве полярной оси и обозначим через θ и φ сферические углы направления движения рассеянной частицы; при этом θ есть введенный выше угол отклонения, связанный с прицельным параметром соотношением (28). Элемент телесного угла в направлении (θ, φ) равен $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. Число $d\sigma$ частиц, рассеиваемых в единицу времени в этом телесном угле, равно числу падающих частиц, пересекающих в единицу времени поверхность $b db d\varphi$, т. е. поскольку первоначальный падающий поток равен 1

$$d\sigma = b db d\varphi = b \frac{db}{d\theta} d\theta d\varphi = \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} d\Omega.$$

Заменяя в этом уравнении величины b и $db/d\theta$ их выражениями, вычисленными с помощью соотношения (28), получаем формулу Резерфорда⁸⁾

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{(Ze^2)^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (29)$$

Нам остается обосновать применение классического приближения. Заметим, что характерной длиной задачи здесь является $|a|$. Кроме того, длина волны частицы

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{p_0} \left(1 - \frac{2a}{r}\right)^{-1/2}$$

⁸⁾ Эта формула, которой мы обязаны Резерфорду, имела большое историческое значение, так как на ней была основана интерпретация его знаменитых опытов по рассеянию α -частиц.

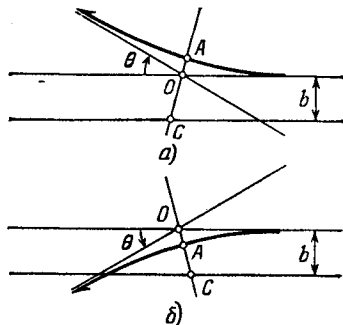


Рис. 24. Траектория (жирная линия) частицы в кулоновском поле: а) отталкивающий потенциал; б) притягивающий потенциал.

по порядку величины равна своему первоначальному значению $\lambda_0 = \hbar/mv_0$. Отношение двух величин имеет порядок

$$\gamma = \frac{|a|}{\lambda_0} = \frac{|Ze^2|}{\hbar v_0}. \quad (30)$$

Можно ожидать, что классическое приближение справедливо, когда

$$\gamma \gg 1. \quad (31)$$

Вясним, в какой мере выполняется условие (26). Имеем

$$|\text{grad } \lambda| = \left| \frac{d\lambda}{dr} \right| = \frac{1}{\gamma} \frac{a^2}{\sqrt{r(r-2a)^3}} \ll 1;$$

$|\text{grad } \lambda|$ тем больше, чем меньше r . Поскольку классическая траектория тем ближе подходит к рассеивающему центру, чем больше угол отклонения, мы делаем вывод, что классическое приближение оправдано для малых углов отклонения (т. е. для больших прицельных параметров), но отказывается служить при больших углах отклонения. Чтобы получить количественную оценку, рассмотрим выражение для максимума $|\text{grad } \lambda|$ (т. е. его значения на вершине гиперболической траектории) как функции θ ; вычисление дает

$$|\text{grad } \lambda|_{\text{max}} = \frac{F(\theta)}{\gamma}, \quad F(\theta) = \text{tg } \frac{\theta}{2} \frac{\sin \frac{\theta}{2}}{1 - (\text{sign } a) \sin \frac{\theta}{2}}$$

(здесь $\text{sign } a \equiv |a|/a$). Когда θ увеличивается от 0 до π , функция $F(\theta)$ увеличивается от 0 до $+\infty$. Пусть угол θ_c определяется равенством

$$F(\theta_c) = \gamma.$$

Классическое приближение справедливо при $\theta < \theta_c$ и неприменимо при $\theta > \theta_c$. Заметим, что θ_c тем ближе к π , чем больше γ , в согласии с грубой оценкой, сделанной выше.

Раздел II. МЕТОД ВКБ⁹⁾

§ 6. Основная идея метода

Как и всякий квазиклассический метод, метод ВКБ основан на разложении всех величин по степеням постоянной \hbar и пренебрежении членами более высокого порядка. Таким образом,

⁹⁾ Более подробное изложение метода см. в работах *R. E. Langer*, Phys. Rev. **51**, 669 (1937); *W. H. Furry*, Phys. Rev. **71**, 360 (1947). См. также *Ф. М. Морс* и *Г. Фешбах*, Методы теоретической физики, ИЛ, 1960, т. II, стр. 90 и далее.