СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р2 - 4944

В.Н. Стрельцов

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

К ПРЕДЕЛЬНОМУ ПЕРЕХОДУ ОТ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ К КЛАССИЧЕСКОЙ

1970

Р2 - 4944

В.Н. Стрельцов

К ПРЕДЕЛЬНОМУ ПЕРЕХОДУ ОТ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ К КЛАССИЧЕСКОЙ *

* В порядке обсуждения.

Вопрос о предельном переходе от квантовой механики к классике имеет весьма важное значение, т.к. в конечном счете тесно связан с другим важным вопросом – о физической трактовке квантовых величин [x/].

В первом разделе мы рассмотрим предельный переход, связанный с непосредственным переходом к классическому уравнению Гамильтона-Якоби. Затем обсудим вопрос о том, в каком отношении к данному предельному переходу находится другой предельный переход, являющийся прямым следствием теорем Эренфеста. Для этого, в частности, мы рассмотрим условия эквивалентности систем уравнений движения, отвечающих этим двум случаям.

Мы укажем также на возможность введения некоторых новых условий, обеспечивающих данные предельные переходы. Затем на примере гармонического осциллятора детально проследим, когда нарушаются известные и новые условия, и покажем, в частности, что одно из условий, обеспечивающих предельный переход на основании теорем Эренфеста, не может быть в этом случае выполнено в принципе.

§1. Предельный переход от уравнения Шредингера к уравнению Гамильтона-Якоби

Рассмотрим уравнение Шредингера (и комплексно сопряженное ему уравнение):

[x/] Классические величины должны выражаться через квантовые, коль скоро мы считаем, что классическая механика должна рассматриваться как предельный случай квантовой механики.

$$i h \frac{\partial \psi}{\partial t} = [-\frac{h^2}{2\mu} \nabla^2 + U(x, y, z, t)]\, \psi\,, \tag{1.1}$$

$$-i h \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = [-\frac{h^2}{2\mu} \nabla^2 + U(x, y, z, t)]\, \psi^*. \tag{1.1'}$$

Представим далее волновую функцию ψ в виде

$$\psi = exp\,(-iS/h\,), \tag{1.2}$$

где S – комплексная функция. Тогда на основании уравнений (1.1) и (1.1') будем иметь для функций S и S^* следующие два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2\mu} (\nabla S)^2 + U(x, y, z, t) + \frac{ih}{2\mu} \nabla^2 S, \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial S^*}{\partial t} = \frac{1}{2\mu} (\nabla S^*)^2 + U(x, y, z, t) - \frac{ih}{2\mu} \nabla^2 S^*. \tag{1.3'}$$

Обычно в рассматриваемом переходе опираются только на уравнение (1.3), которое по виду отличается последним членом от уравнения Гамильтона-Якоби. При этом говорят (см., например, [1,2]), что для того, чтобы перейти к классике, следует отбросить последний член как малый по сравнению с $1/2\mu(\nabla S)^2$. Далее из условия

$$|(\nabla S)^2| \gg |ih \nabla S| \tag{1.4}$$

получают условие [x]

$$d\lambda / dx \ll 1 \tag{1.4a}$$

применимости рассматриваемого приближенного решения уравнения Шредингера.

Следует, однако, заметить, что если даже условие (1.4) выполнено, мы все же не будем иметь еще перехода к классике (и, в частности, не будем иметь еще условия (1.4а)). Действительно, классическое уравнение

[x] Здесь и в дальнейшем для наглядности на конечном этапе мы будем переходить к случаю одного измерения.

Гамильтона-Якоби - это уравнение для вещественной функции действия. Поэтому наряду с условием (1.4) следует также потребовать, например, выполнения следующего неравенства:

$$|\nabla(Re\, S)| \gg |\nabla(Im\, S)|\,.$$

Более последовательным следует считать такой путь, когда сначала получают уравнение типа уравнения Гамильтона-Якоби для действительной части функции S, а затем уже отбрасывают какие-то члены.

Представим с этой целью функцию S в виде

$$S = S' + i\,S'', \tag{1.2'}$$

где S' и S'' - вещественные функции. Тогда уравнения (3) и (3') запишутся в виде

$$\frac{\partial S'}{\partial t} + i\,\frac{\partial S''}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}(\nabla S')^2 + \frac{i}{\mu}\nabla S'\nabla S'' - \frac{1}{2\mu}(\nabla S'')^2 + U + \frac{ih}{2\mu}\nabla^2 S' - \frac{h}{2\mu}\nabla^2 S',$$

$$\frac{\partial S'}{\partial t} - i\,\frac{\partial S''}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}(\nabla S')^2 - \frac{i}{\mu}\nabla S'\nabla S'' - \frac{1}{2\mu}(\nabla S'')^2 + U - \frac{ih}{2\mu}\nabla^2 S' - \frac{h}{2\mu}\nabla^2 S''.$$

Складывая и вычитая их, получим

$$\frac{\partial S'}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}(\nabla S')^2 + U - \frac{1}{2\mu}(\nabla S'')^2 - \frac{h}{2\mu}\nabla^2 S'', \tag{1.5}$$

$$\frac{\partial S''}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\nabla S'\nabla S'' + \frac{h}{2\mu}\nabla^2 S'\,. \tag{1.6}$$

Теперь можно уже более корректно свести уравнение (1.5) к уравнению Гамильтона-Якоби для (действительной) функции S'. Это, очевидно, может быть сделано, если выполнено условие

$$|2\mu\, U + (\nabla S')^2| \gg |(\nabla S'')^2 + h\,\nabla^2 S''| \tag{1.7}$$

или, в частности, следующие два условия:

$$|\nabla S'| \gg |\nabla S''| \tag{1.8}$$

и

$$(\nabla S')^2 \gg h\,|\nabla^2 S'')|\,. \tag{1.9}$$

Что касается неравенства (1.8), то оно может быть истолковано так: относительное изменение амплитуды волновой функции $(\exp S''/h)$ на расстояниях порядка длины волны должно быть мало. При этом говорят (см., например, /4/), что в рамках рассматриваемого приближения мы имеем дело с волновыми пакетами, содержащими достаточно длинные цуги волн x/.

Кроме того, отметим, что при данном предельном переходе обычно требуют также выполнения следующего условия:

$$(\nabla S')^2 \gg h\,|\nabla^2 S'| \quad (\partial \lambda / \partial x \ll 1). \tag{1.10}$$

Однако, коль скоро предыдущее рассмотрение не дает в общем-то никаких оснований для его введения, мы вынуждены считать его гипотетическим.

§2. Сравнение двух существующих предельных переходов

На основании уравнения Гамильтона-Якоби для функции действия S', полученного с помощью рассмотренного выше предельного перехода (ГЯ), будем иметь два уравнения движения

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\mu}\left(-\frac{\partial S'}{\partial x}\right), \tag{2.1}$$

$$\mu\,\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x} \tag{2.2}$$

---

x/ Следует, однако, заметить, что рассматриваемое условие (1.8) является необходимым, но недостаточным признаком волнового пакета. Наряду с ним должно быть выполнено требование малости размеров волнового пакета по сравнению с размерами области движения частицы. Поэтому, строго говоря, при малых импульсах даже при выполнении условия (1.8) мы не будем иметь волновых пакетов.

Больше того, условие (1.8) может вообще не выполняться, а рассматриваемое приближение, т.е. переход от уравнения (1.5) к уравнению Гамильтона-Якоби, все же будет иметь место на основании условия (1.7).

и выражение для полной энергии

$$E = \frac{1}{2\mu}\left(\frac{\partial S'}{\partial x}\right)^2 + U(x) \qquad (2.3)$$

(система уравнений ГЯ).

С другой стороны, на основании теорем Эренфеста будем иметь следующую систему равенств:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{\mu}\,\bar{p}_x\,, \qquad (2.4)$$

$$\mu\,\frac{d^2\bar{x}}{dt} = -\,\overline{\frac{\partial U}{dx}}\,, \qquad (2.5)$$

$$E = \frac{1}{\mu}\,\bar{p}_x^{\,2} + \overline{U(x)}\,. \qquad (2.6)$$

Здесь мы также добавили выражение для средней (полной) энергии.

Выполнение условий

$$\left|\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right| \gg \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\right| \overline{\Delta x^2} \qquad (2.7)$$

и

$$\left|\frac{1}{2\mu}\,\bar{p}_x^{\,2} + U(\bar{x})\right| \gg \left|\frac{\overline{\Delta p_x^2}}{2\mu} + \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2}\,\overline{\Delta x^2}\right| \qquad (2.8)$$

должно обеспечивать предельный переход другого типа (Э) от квантовой механики к классической. Если указанные условия выполнены, то уравнения (2.4)–(2.6) могут быть переписаны в виде

$$\left.\begin{aligned} &\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{1}{\mu}\,\bar{p}_x\,,\\ &\mu\,\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = -\,\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\,,\\ &\bar{E} = \frac{1}{2\mu}\,\bar{p}_x^{\,2} + U(\bar{x})\,. \end{aligned}\right\} \qquad (Э)$$

Обсудим теперь вопрос о том, в каком отношении друг к другу находятся полученные таким образом системы уравнений (ГЯ) и (Э).

Что касается системы уравнений (ГЯ), то она справедлива для любого x (скажем, в рамках волнового пакета). В то же время уравнения (Э) описывают только поведение $\bar{x}$ [x/]. Опираясь далее на тот факт, что если уравнения (ГЯ) выполнены для любого x, ограниченного рамками волнового пакета, то они должны быть справедливы, в частности, и для $x = \bar{x}$, мы можем переписать их в виде

$$\left.\begin{aligned} \frac{d\bar{x}}{dt} &= \frac{1}{\mu}\left(-\frac{\partial S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right), \\ \mu\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} &= -\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}, \\ E &= \frac{1}{2\mu}\left(\frac{\partial S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right)^2 + U(\bar{x}). \end{aligned}\right\} \qquad (\text{ГЯ}')$$

Можно ли считать системы уравнений (Э) и (ГЯ') эквивалентными друг другу? С целью ответа на поставленный вопрос на основании (1.2),(1.2') и условия (1.8) представим p_x в виде

$$\bar{p}_x = \int \psi^* \frac{h}{i}\frac{\partial \psi}{\partial x}\,dx = -\int \psi^*\psi\left(\frac{\partial S'}{\partial x} + i\frac{\partial S''}{\partial x}\right)dx \approx -\int \psi^* \frac{\partial S'}{\partial x}\psi\,dx = -\overline{\frac{\partial S'}{\partial x}}.$$

Используя разложение

$$\overline{\frac{\partial S'}{\partial x}} = \frac{\partial S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + \frac{1}{1!}\frac{\partial^2 S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2}(x - \bar{x}) + \frac{1}{2!}\frac{\partial^3 S'(\bar{x})}{\partial x^3}(x - \bar{x})^2 + \dots,$$

получим далее, что

$$\bar{p}_x = -\frac{\partial S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}} - \frac{1}{2!}\frac{\partial^3 S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\overline{\Delta x^2} - \dots$$

Отсюда с очевидностью следует, что рассматриваемые системы уравнений (ГЯ) и (Э) будут полностью эквивалентны друг другу, если выполнено, например, дополнительное условие [xx/]

[x/] В этом смысле систему уравнений (ГЯ) можно считать более общей по сравнению с системой уравнений (Э).

[xx/] В том случае, если заранее выполнено только условие (1.7), наряду с (2.9) следует потребовать выполнения неравенств

$$\left|\frac{\partial S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right| \gg \left|\frac{\partial S''(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right|, \quad \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 S''(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\right|\overline{\Delta x^2}.$$

$$\frac{\partial S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \gg \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 S'(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\right| \overline{\Delta x^2}\ , \tag{2.9}$$

которое мы назовем "условием эквивалентности".

Надо, однако, иметь в виду следующее. Хотя полученные с помощью двух различных предельных переходов системы уравнений, описывающих классическое движение, при условии выполнения (2.9) могут быть приведены к одному и тому же виду, мы все же не будем иметь полной эквивалентности рассмотренных предельных переходов. Дело в том, что условия, обеспечивающие их, будут нарушаться в разных случаях.

§3. Применение предельного перехода второго типа (Э) к случаю гармонического осциллятора

Наше последующее рассмотрение мы проведем на примере одномерного гармонического осциллятора.

Возьмем с этой целью волновую функцию $\psi(x,t)$, описывающую произвольное состояние осциллятора. Она может быть представлена в виде суперпозиции волновых функций $\psi_n(x)$ стационарных состояний:

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n t}{h}\right).$$

Напомним, что в случае осциллятора, да и в ряде других случаев, $\psi_n(x)$ – вещественные функции.

Как известно, для гармонического осциллятора, да и вообще для потенциальной функции вида $U(x) = a + bx + cx^2$, движение центра тяжести волнового пакета будет точно совпадать с классическим движением материальной точки [x/]. Это связано с тем, что в отмеченных случаях выполняется равенство

[x/] С другой стороны, для потенциальных функций вида $U(x) = fx^{-1}$ или $U(x) = gx^3$ в рамках рассматриваемого предельного перехода мы должны констатировать, что классическая механика отказывается служить вблизи точки $x=0$, где нарушается условие (2.7).

$$\overline{\frac{\partial U(x)}{\partial x}} = \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \; .$$

Остановимся теперь на условии (2.8). В частном случае вещественных амплитуд C_n, который приводит к классическому колебательному движению с начальной фазой $\phi = 0$,

$$x_{\text{класс.}} = \bar{x}(t) = a \cos \omega_0 t \; ,$$

данное условие будет иметь вид

$$h\omega_0 \Big(\sum_n \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, C_{n+1} C_n\Big)^2 \gg h\omega_\sigma \Big|\Big(\sum_n \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, C_{n+1} C_n\Big)^2 - \sum_n (2n+1)\, C_n^2\Big| \; . \qquad (2.8')$$

Нетрудно показать, что полученное неравенство никогда не может быть выполнено. Это непосредственно связано с тем, что величина "квантовой" энергии $E_{\text{кв.}} = h\omega_0 \sum_n (2n+1) C_n^2$ оказывается всегда больше величины "классической" энергии $E_{\text{класс.}} = h\omega_0 (\sum_n \sqrt{\frac{n+1}{2}}\, C_{n+1} C_n)^2$. При этом разность отмеченных величин (квантовомеханическая добавка к энергии) оказывается сравнимой с величиной $E_{\text{класс.}}$.

Но коль скоро это так, мы вынуждены поставить под сомнение правомерность самого предельного перехода типа (Э), непосредственно опирающегося на данное условие.

§4. Применение предельного перехода первого типа (ГЯ) к случаю гармонического осциллятора

Перейдем теперь к рассмотрению условий, обеспечивающих предельный переход первого типа.

Что касается частного условия (1.8), которое трактуется как требование малости относительного изменения амплитуды на расстояниях порядка длины волны, то в частном случае вещественных C_n оно может быть переписано в виде

$$|i'r - r'i| \gg |i'i + r'r| \; . \qquad (1.8')$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$r = Re\,\psi\,(x,t) = C_0\,\psi_0\,(x)\cos\frac{1}{2}\,\omega_0 t + C_1\,\psi_1\,(x)\cos\frac{3}{2}\,\omega_0 t + \ldots,$$

$$i = -Im\,\psi\,(x,t) = C_0\,\psi_0\,(x)\sin\frac{1}{2}\,\omega_0 t + C_1\,\psi_1\,(x)\sin\frac{3}{2}\,\omega_0 t + \ldots,$$

$$r' = \frac{\partial}{\partial x}[Re\,\psi\,(x,t)] = C_0\,\psi_0'\,(x)\cos\frac{1}{2}\,\omega_0 t + C_1\,\psi_1'\,(x)\cos\frac{3}{2}\,\omega_0 t + \ldots \text{ и т.д.}$$

Нетрудно видеть, что указанное условие будет нарушаться в точках поворота (для которых $\partial S'/\partial x = 0$), когда $\omega_0 t = 0$ или π . В этом случае будем иметь $i = i' = 0$ или $r = r' = 0$. Заметим также, что возможно нарушение неравенства (1.8') и в промежуточном случае $\omega_0 t = \frac{\pi}{2}$ при условии, что четные коэффициенты $C_0, C_2, \ldots$ будут значительно больше своих нечетных собратьев , или для $x = 0$.

Первый результат будет справедлив и для гипотетического условия (1.10).

Если мы будем, как, впрочем, этого и требует логика вещей, использовать вместо условия (1.8) более общее условие (1.7), которое перепишем в виде

$$\left|\frac{\mu^2\omega_0^2}{\hbar^2}\, x^2 (i^2 + r^2) + (i'r + ir')^2\right| \gg$$
$$\gg \left|[i''i + r''r + (i')^2 + (r')^2](i^2 + r^2) - (i'i + r'r)^2\right|,$$

то увидим, что в отмеченных точках, оно нарушаться не будет.

В заключение нам хотелось бы сделать такое замечание общего характера. Когда мы совершаем предельный переход к классике по второму пути (Э), то мы переходим к средним значениям координат и импульсов. В то же время в рамках предельного перехода первого типа (ГЯ) смысл (принимаемые значения) указанных величин остается неизменным.

Таким образом, можно утверждать, что в рамках разных предельных переходов смысл (по крайней мере одной из канонически сопряженных величин) должен быть различен.

По нашему же мнению, должна существовать однозначная связь между классическими и квантовыми величинами. Иными словами, классические величины должны однозначным образом выражаться через соответствующие квантовые. Но если это так, то один из рассмотренных выше предельных переходов следует отбросить. С учетом того факта, что для предельного перехода типа (Э) в некоторых случаях одно из условий (см. §3) не может быть выполнено в принципе, мы, по-видимому, вынуждены отдать предпочтение предельному переходу типа (ГЯ).

Для окончательного решения этого вопроса необходимо специальное исследование.

Автор благодарен В.Г. Барышевскому, В.Л. Любошицу, М.И. Подгорецкому и В.Д. Рябцову за внимание к работе и критические замечания.

Литература

1. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. ГИФМЛ, М., стр.195, 1963.*
2. *Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики. ГИВШ, М., стр.118, 1961.*
3. *В. Паули. Общие принципы волновой механики. ГИТТЛ, М–Л, стр. 151, 1947.*
4. *П.А.М. Дирак. Принципы волновой механики. ГИФМЛ, М., стр. 176, 1960.*

Рукопись поступила в издательский отдел
25 февраля 1970 года.