1966 г. Август *Том 89, вып. 4*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

530.145

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

КАК КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ПОМОГАЕТ ПОНЯТЬ ВЫВОДЫ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Парадоксальный заголовок заметки — это не ошибка наборщика. В целом, конечно, классическая механика проще квантовой механики, и мы привыкли ценить наглядные классические объяснения квантовомеханических теорий.

Хорошо известны общие теоремы, устанавливающие глубокое сходство между движением квантовомеханического волнового пакета и классическим движением частицы.

Замечу, что иногда классическая механика помогает понять и довольно специальные свойства квантовых систем. (Нижеследующие два примера, таким образом, не относятся прямо к теме заметки, читатель может пропустить их.)

Наличие замкнутых орбит в классической теории обязательно отражается на свойствах соответствующей квантовой системы.

Всякая траектория должна описываться изменением во времени суперпозиции волновых функций. Замкнутая орбита, повторяющаяся без изменения любое число раз, возможна только в том случае, когда между энергиями для различных волновых функций есть определенные соотношения. В квантовой механике в двух случаях центрального поля есть точное вырождение уровней энергии, соответствующих различным значениям орбитального момента. Это кулоновский потенциал, где при данном n вырождены уровни с $0 \leqslant l \leqslant n-1$, и потенциал гармонического осциллятора, где при энергии

$$E=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

вырождены уровни с одинаковой четностью и орбитальным моментом $l=n$, $l=n-2$, $l=n-4$, . . . до $l=0$ или $l=1$. Это квантовомеханическое свойство связано с тем, что в кулоновском поле и в поле гармонического осциллятора классическая механика предусматривает существование замкнутых траекторий: эллипсов с фокусом в центре силы в кулоновском потенциале и эллипсов с центром в точке равновесия в осцилляторе.

На этих орбитах выделены не только величина и направление момента вращения (т. е. нормали к плоскости орбиты).

Выделено еще и направление в плоскости орбиты — большая полуось эллипса. Такими же свойствами обладает суперпозиция системы волновых функций с одинаковой энергией и разными l. Вырождение уровней с разными l оказывается следствием свойств классических орбит.

Но в целом приведенный пример является еще одним случаем, когда классическая механика помогает пониманию квантовых закономерностей.

Где же обещанная нетривиальная помощь, которую квантовая механика сама оказывает классической механике?

Яркий пример представляет собой адиабатическая инвариантность.

Рассмотрим классический осциллятор

$$m\ddot{x}=-k^2x,$$

у которого упругая константа k медленно меняется с течением времени: $k=k(t)$. Это может быть тяжелый маятник с медленно изменяющейся длиной подвеса. Его частота при данном k равна $\omega=k/\sqrt{m}$. Значит, в квантовой теории его энергия принимает значения $n\hbar\omega$, где n — целое число, номер состояния *).

---

*) Если учесть нулевую энергию $\hbar\omega/2$ на степень свободы, то энергия одномерного осциллятора $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, трехмерного $\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$. Для дальнейшего эта поправка несущественна.

Очевидно, при медленном изменении система, находившаяся в n-м квантовом состоянии, останется в n-м состоянии и номер (число) n не изменится. Это — формулировка *адиабатической инвариантности в квантовой механике.*

Она справедлива и при $n = 0$ или $n = 1$ для молекулы и для $n = 10^{30}$ (порядок величины n для маятника стенных часов).

Ясно, что независимо от значения $\hbar$ и конкретной величины n получается при медленном адиабатическом изменении k, что

$$E = \text{const} \cdot \omega.$$

В классической механике доказательство этого равенства сложнее. При произвольном виде потенциала более сложном, чем $k^2x^2/2$, можно применить то же самое рассуждение, только номер уровня n надо будет искать иначе. Ограничимся одномерной задачей. Стационарные волновые функции одномерного финитного движения (т. е. колебаний) вещественны. *Волновая функция n-го состояния имеет n узлов*, т. е. n точек обращения в нуль *). Это значит, что в той области, в которой происходят колебания, укладывается n полуволн.

Длина дебройлевской волны частицы равна $2\pi\hbar/p$, где p — импульс ($p = mv$), а число волн в сантиметре равно $p/2\pi\hbar$.

При колебаниях импульс не остается постоянным, значит, надо интегрировать при подсчете числа волн, укладывающихся на длине, от одной крайней точки до другой:

$$n\,(\text{волн}) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{x_1}^{x_2} p\,dx.$$

Нам нужно найти число узлов, т. е. число полуволн, которое, очевидно, вдвое больше. Принято не просто умножать интегралы на 2, а писать номер уровня в виде

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

где интегрирование проводится по замкнутому циклу. В данном случае цикл — это путь от x_1 до x_2 плюс обратный путь от x_2 до x_1, так что интеграл удваивается.

Итак, адиабатическим инвариантом классической механики при медленном изменении потенциала является величина $\oint p\,dx$, поскольку $\hbar$ и n постоянны.

Я вполне сознаю, что все изложенное выше есть чудовищное искажение исторического хода развития физики.

Адиабатические инварианты классической механики были известны задолго до создания квантовой теории. В «старой» квантовой теории Бора — Зоммерфельда (до работ Гейзенберга и Шрёдингера) использовали классические адиабатические инварианты — именно потому, что их размерность (импульс, умноженный на координату) совпадает с размерностью постоянной Планка. Физики старшего поколения не одобрят мой педагогический замысел.

Но нельзя отрицать, что сегодняшние школьники и студенты знают соотношение Планка между энергией и частотой; они знают о существовании квантовой механики *и о дебройлевской длине волны, и они не знают (по крайней мере до 3—4 курса физфака)* об адиабатических инвариантах.

Адиабатическая инвариантность важна не только для колебательных систем. Важнейшим примером является движение заряженной частицы в магнитном поле; мы ограничимся ссылкой на очень наглядную, ясно изложенную работу Нортропа и Теллера (Phys. Rev. **117**, 215 (1960)).

Отметим для более подготовленного читателя, что квантовые представления позволяют лучше понять также условия применимости и точность выполнения адиабатической инвариантности. Так, в случае гармонического осциллятора воздействие, заключающееся в изменении упругой константы со временем, симметрично по отношению к началу координат (замена x на $-x$). Ясно, что такое воздействие не меняет четности функций, а следовательно, номер уровня n может меняться только на 2; 4... от $n \to n \pm 2 \to n \pm 4$...

Отсюда ясно, что вероятность переходов, т. е. нарушение адиабатической инвариантности (равносильной $n = \text{const}$, см. выше), зависит от фурье-компонент частоты 2ω в законе изменения $k(t)$, поскольку система потребляет энергию порциями при переходах $n \to n \pm 2$. Отсюда следуют оценки зависимости точности инварианта от вида $k(t)$. Здесь же содержится и параметрический резонанс: если $k(t)$ зависит от времени по закону

$$k = k_0 + a\cos(2\omega t),$$

переходы и накачка энергии особенно интенсивны.

*) Заметим, что это необходимо следует из условия, что n-я функция ортогональна всем предыдущим функциям: $(n-1)$-й, $(n-2)$-й вплоть до нулевой функции основного состояния.

Однако пора кончить рассмотрение осциллятора, иначе популярные разъяснения станут сложнее стандартного изложения предмета в классической механике.

Второй важнейший пример, в котором квантовая механика проще классической и помогает пониманию классической механики,— это понятие фазового пространства и теорема Лиувилля, лежащие в основе статистической физики.

В квантовой статистической физике мы «просто» (в принципе просто) подсчитываем число отдельных дискретных квантовых состояний: 1, 2, 3 и т. д.

Если их энергия одинакова, состояния равновероятны, в противном случае вероятности состояний пропорциональны $\exp(-E_n/kT)$. Выражаясь учено, в ограниченном объеме (потенциальном ящике) собственные состояния гамильтониана образуют счетное множество, в отличие от континуума состояний, рассматриваемых в классической механике и классической статистической физике. Именно этим обусловливается принципиальная простота квантовой статистики по сравнению с классической. Поэтому и оказывается полезно ввести квантовые представления для лучшего понимания классической статистики.

Фазовый объем V_f классической статистики есть величина, пропорциональная числу квантовых состояний:

$$N=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p\, d^3x=\frac{V_f}{(2\pi\hbar)^3};$$

формула написана для одной частицы в трехмерном пространстве.

Наиболее просто формула доказывается для потенциального ящика в виде параллелепипеда со сторонами X, Y, Z. Каждый уровень соответствует целому числу полуволн; значит, допустимые значения импульса частицы

$$p_x=n_x\frac{\pi\hbar}{X},\qquad p_y=n_y\frac{\pi\hbar}{Y},\qquad p_z=n_z\frac{\pi\hbar}{z};$$

каждый уровень соответствует точке в пространстве импульсов, и легко подсчитать, например, число таких точек для области

$$E=\frac{p^2}{2m}<E_1;$$

получим

$$N=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{4\pi}{3}p_1^3\;XYZ=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}V_f,$$

где $p_1^2/2m=E$ (при подсчете учитываем, что $n_x>0$, $n_y>0$, $n_z>0$; выше речь шла о модуле p_x, p_y, p_z).

Мы получили соотношение между объемом в фазовом пространстве и числом состояний.

Дальше нужно только знать, что при больших N эта величина аддитивна, число уровней в двух ямах, взятых вместе и даже соединенных между собой, равно сумме $N=N_1+N_2$ чисел уровней в каждой яме. Значит, если соотношение между N и V_f найдено для прямоугольной ямы, из многих прямоугольных ям можно сконструировать любую зависимость потенциальной энергии от координаты $U(r)$. Следовательно, теорема Лиувилля имеет простой и наглядный смысл: сохраняется в ходе движения число состояний, занятых системой.

Частный случай теоремы: представим себе ферми-газ при абсолютном нуле; N частиц занимают N различных квантовых уровней *); при энергии $E<E_f$, где E_f — ферми-энергия, уровни заняты, при $E>E_f$ уровни пустые.

Будем воздействовать какими-то силами на систему частиц: уровни изменятся; может быть, уровни, занятые частицами, больше не будут наинизшими. Пример — все импульсы увеличиваются на одинаковую величину $\mathbf{p}_0$. Однако по-прежнему N частиц занимают компактную группу N уровней. Энтропия была и осталась равной нулю.

В самом деле, энтропия — это мера беспорядка. Заполненные на 100% уровни, так же как и пустые уровни, не вносят вклада в энтропию; вклад дают лишь уровни, где, может быть, есть, а может быть, и нет частицы: вероятность p такая, что $0<p<1$. При этом для энтропии неважно, какие уровни заняты — нижние (по энергии) или какие-то другие. Важно лишь, является ли распределение частиц предельно резким (область с $p=1$ и область с $p=0$, $s=0$) или размытым; если есть область с $0<p<1$, то $S=-k\Sigma\, p\ln p>0$, где k — константа Больцмана.

Адиабатическая инвариантность классической механики связана с адиабатическим изменением квантового уровня, причем частица остается все на том же уровне, и такое поведение квантовой системы оказалось в свою очередь связанным с термодинамическим понятием адиабатического процесса, при котором сохраняется энтропия.

Так квантовые представления помогают связать воедино и лучше понять сложные закономерности классической механики и классической статистической физики.

П. Парадоксов

*) Мы отвлекаемся от того, что при спине $^1/_2$ на каждом пространственном уровне 2 частицы.