УДК 530.21

В.В.Архипов, А.С.Кудусов, А.Ж.Кыстаубаева

Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова
(E-mail: midav_73@mail.ru)

Классический предел для квантовой задачи надбарьерного отражения

В статье исследована проблема существования классического предела в квантовых задачах со ступенчатым потенциалом. В качестве конкретных примеров рассмотрены две задачи на потенциальный барьер. Показано, что отказ от стандартных требований непрерывности и гладкости волновых функций в случае кусочно-постоянного потенциала приводит к решению, имеющему хорошее согласие с классическим пределом. В качестве альтернативных граничных условий использованы условия непрерывности потока вероятности.

Ключевые слова: потенциальная ступенька, кусочно-постоянный потенциал, надбарьерное отражение, коэффициенты отражения и прохождения, принцип соответствия, классический предел.

В статье мы предлагаем исследование проблемы классического предела для квантовомеханических задач со ступенчатым потенциалом. Этот предел, хорошо определяемый для туннельного эффекта, исчезает для эффекта надбарьерного отражения. Это можно было бы рассматривать как свидетельство неприменимости квантовой механики к макромиру, но таких ограничений в самой теории не существует. То есть квантовая механика является более общей и точной теорией, чем классическая механика, и её неприменяемость к макросистемам объясняется, кроме сложности математического аппарата, только малостью квантовых поправок в сравнении с измеряемыми величинами.

Чтобы разобраться с тем, в каком месте появляется нарушение принципа соответствия Бора, мы проанализировали две стандартные одномерные задачи: потенциальную ступеньку и сглаженную потенциальную ступеньку.

Прямоугольная потенциальная ступенька

Приведем стандартное решение задачи на прямоугольную потенциальную ступеньку вида, показанного на рисунке. В случае, если энергия налетающих слева частиц E меньше величины барьера, то коэффициент отражения обращается в 1, что соответствует классической физике. Нас интересует случай $E > U_0$, когда согласно квантовой теории должен наблюдаться эффект надбарьерного отражения.

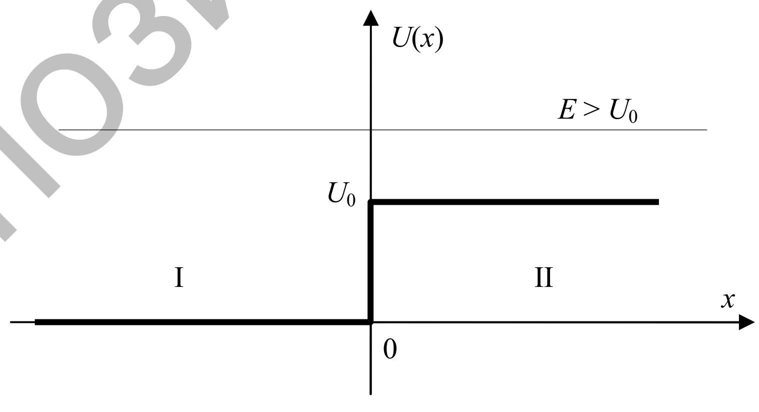

Рисунок. Прямоугольная потенциальная ступенька. Исследуется случай $E > U_0$

Итак, решение уравнения Шредингера для области слева приводит к волновой функции налетающих на барьер частиц с энергией E в виде обычной монохроматической волны:

$$\psi_f = A_1 \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right], \tag{1}$$

где

$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ и } \omega=\frac{E}{\hbar}. \tag{2}$$

Отраженная волна, соответственно, имеет вид

$$\psi_r = B\exp\left[i\left(kx+\omega t\right)\right]. \tag{3}$$

Волна, прошедшая в область II:

$$\psi_p = A_2\exp\left[i\left(k'x-\omega t\right)\right], \tag{4}$$

где

$$k'=\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}. \tag{5}$$

Сшивая решения на границе областей в точке $x=0$, согласно стандартным условиям непрерывности и гладкости ($\psi_I=\psi_f+\psi_r$, $\psi_{II}=\psi_p$)

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0),\ \left.\frac{\partial\psi_I}{\partial x}\right|_{x=0}=\left.\frac{\partial\psi_{II}}{\partial x}\right|_{x=0}, \tag{6}$$

получаем условия на амплитуды волновых функций:

$$B=\frac{k-k'}{k+k'}A_1,\ A_2=\frac{2k}{k+k'}A_1. \tag{7}$$

Токи вероятности $\mathbf{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right)$, соответствующие падающей, отраженной и прошедшей волнам, будут иметь вид

$$j_f=\frac{k\hbar}{m}\left|A_1\right|^2;\ j_r=-\frac{k\hbar}{m}\left|B\right|^2;\ j_p=\frac{k'\hbar}{m}\left|A_2\right|^2. \tag{8}$$

Коэффициенты отражения от барьера и прохождения, определяемые выражениями

$$R=\left|\frac{j_r}{j_f}\right|;\ D=\left|\frac{j_p}{j_f}\right|, \tag{9}$$

после последовательных подстановок (2) и (5) в (7) и затем в (8), принимают вид

$$R=\frac{\left(\sqrt{E}-\sqrt{R-U_0}\right)^2}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{R-U_0}\right)^2};\ D=\frac{4\sqrt{E(E-U_0)}}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{R-U_0}\right)^2}. \tag{10}$$

Нетрудно увидеть, что найденные коэффициенты не имеют ожидаемого классического предела:

$$R\big|_{\hbar\to 0}\to 0,\ D\big|_{\hbar\to 0}\to 1.$$

То есть даже для макрообъектов формулы (10) приводят к нетривиальному результату, что не согласуется с реальным положением вещей.

Альтернативное решение

Слабым звеном в приведенной выше цепочке рассуждений являются условия «сшивки» решений для волновой функции (6). Действительно, требования непрерывности и гладкости представляются несколько необоснованными. Многие классические учебники по квантовой механике просто оставляют этот вопрос без объяснений. В [1] (п. 96 и дополнение VIII) имеется вывод условий (6), исходя из непрерывности тока вероятности, но, к сожалению, он не безупречен и является, скорее, некоторым обоснованием. В действительности, разрыв потенциала допускает существование ненепрерывных и негладких решений, не противоречащих требованию непрерывности тока вероятности, т.е. закону сохранения числа частиц.

Действительно, попытаемся «сшить решения» (1), (3) и (4), наложив требования непрерывности тока и существования «правильного» классического предела. Потребуем

$$j_f+j_r=j_p.$$

Из (2) и (5), (8) и (9) получаем систему условий:

$$\sqrt{E}\left(\left|A_1\right|^2-\left|B\right|^2\right)=\sqrt{E-U_0}\left|A_2\right|^2;$$

$$R=\frac{\left|B\right|^2}{\left|A_1\right|^2}\xrightarrow{\hbar\to 0}0;\; D=\sqrt{\frac{E-U_0}{E}}\frac{\left|A_2\right|^2}{\left|A_1\right|^2}\xrightarrow{\hbar\to 0}1. \qquad (11)$$

Если предположить, что амплитуды не зависят от $\hbar$, то приходим к классическим выражениям для коэффициентов отражения и прохождения

$$R=0;\; D=1$$

и к скачкообразному изменению плотности вероятности слева и справа от барьера:

$$\left|\psi_I\right|^2=\left|A\right|^2;\; \left|\psi_{II}\right|^2=\sqrt{\frac{E}{E-U_0}}\left|A\right|^2.$$

Этот скачок, на самом деле, как это отмечено выше, не имеет противоречий с формализмом квантовой механики и прекрасно согласуется с аналогичной классической задачей. Действительно, если на ступеньку налетает слева поток частиц с энергией E и некоторой линейной плотностью, то справа, вследствие замедления частиц, мы будем иметь в $\sqrt{\frac{E}{E-U_0}}$ более плотный поток.

Отраженная волна, при сделанном выше предположении о характере амплитуд волновых функций, полностью исчезает, и, таким образом, исчезает эффект надбарьерного отражения. На самом деле, требование (11) можно выполнить бесконечным числом способов, например, положив $B\propto\hbar$ и $A_2\propto 1-\hbar$. Для однозначного выбора условия непрерывности тока вероятности оказывается недостаточно.

Сглаженная потенциальная ступенька

Рассмотрим задачу на сглаженную потенциальную ступеньку, решение которой подробно разобрано в [2]. Потенциал имеет вид

$$U(x)=\frac{1}{2}U_0\left(1+\operatorname{th}\frac{x}{2a}\right).$$

Коэффициент отражения

$$R=\frac{\operatorname{sh}\left(\dfrac{\pi a\sqrt{2m}(\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0})}{\hbar}\right)}{\operatorname{sh}\left(\dfrac{\pi a\sqrt{2m}(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0})}{\hbar}\right)}.$$

Легко заметить, что при $a\to 0$, т.е. при переходе к прямоугольной ступеньке, это выражение переходит к стандартному виду, приведенному в (10). С другой стороны, это выражение имеет классический предел. Действительно, при $\hbar\to 0$ мы получаем неопределенность типа ∞/∞, которая легко устраняется после упрощения до

$$R\big|_{\hbar\to 0}=\left.\frac{\exp\left(-\dfrac{\pi a\sqrt{2m}\sqrt{E-U_0}}{\hbar}\right)}{\exp\left(\dfrac{\pi a\sqrt{2m}\sqrt{E-U_0})}{\hbar}\right)}\right|_{\hbar\to 0}=0.$$

Коэффициент прохождения, соответственно, $D=1-R=1$.

Заключение

Таким образом, требование существования классического предела, или выполнения принципа соответствия, оказывается невыполнимым для кусочно-постоянного потенциала, когда производная волновой функции или сама волновая функция может иметь разрыв. Требования непрерывности и гладкости волновой функции не имеют жесткого обоснования. Замена их более мягким, но твердо обоснованным условием непрерывности потока вероятности оказывается недостаточным для однозначного определения решения.

Есть некоторые основания считать, что попытка совмещения двух условий — разрывности потенциала и принципа соответствия — вступает в противоречие с принципом неопределенности, что и приводит к физически противоречивым решениям.

Список литературы

1 *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. — М.: Наука, 1983. — 664 с.
2 *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974. — Т. 1. — 341 с.

В.В.Архипов, А.С.Кудусов, А.Ж.Қыстаубаева

Тосқауыл үстіңгі шағылудың кванттық есебі үшін классикалық шек

Мақалада классикалық шектің кванттық есептерде сатылы потенциалмен болу мәселесі зерттелді. Нақты мысалдар ретінде потенциалды тосқауыл бар екендігіне екі есеп қарастырылды Үзіліссіздіктің стандартты талабынан және үзікті-тұрақты потенциал жағдайында толқындық функцияның тегістігінен бас тартқан жағдайда классикалық шекпен жақсы келісімге ие болатын шешімге алып келді. Балама шекті шарттар ретінде ықтималдықтар ағынының үзіліссіздік шарттары қолданылды.

V.V.Arkhipov, A.S.Kudusov, A.Zh.Kistaubaeva

Classical limit for the quantum problem of over-barrier reflection

In the work the question of existing of a classical limit is investigated for quantum problems with stepped potentials. As concrete examples two problems on potential barriers are considered. It is shown that rejection of standard conditions on a wave function of continuity and smoothness lead to a solution such is well agreed with classical limit in the case of the piecewise constant potential. As alternative border conditions the current continuously is used.

References

1 Blokhintsev D.I. *Foundations of Quantum Mechanics*, Moscow: Nauka, 1983, 664p.
2 Flügge S. *Practical Quantum Mechanics*, Moscow: Mir, 1974, 1, 341 p.