УДК 530.145.61:532.511

КООРДИНАТЫ ЭЙЛЕРА И УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Балданова Д.М., Балданов М.М., Танганов Б.Б.
Восточно-Сибирский государственный технологический университет, Улан-Удэ

Показывается возможность получения уравнения Шредингера в различных условиях в координатах Эйлера.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, координаты Эйлера, оператор Гамильтона, волновая функция.

История становления квантовой механики опубликована в статьях ее основателей [1]. В работе [1, С. 623] при получении уравнения для атома водорода Э. Шредингер исходит из уравнения Гамильтона в частных производных:

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E,$$

где $q(x, y, z)$ - координата; ψ - волновая функция; $\frac{\partial S}{\partial q} = p$ - импульс, в котором S есть функция действия; E - энергия.

Далее им приведено уравнение в виде:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2}\left[E + \frac{e^2}{r}\right]\cdot\psi = 0. \quad (1)$$

Это уравнение сам Э. Шредингер называет [1, С.626] эйлеровским дифференциальным уравнением. Никаких комментариев и ссылок по этому поводу он не приводит. Введение Э. Шредингером в уравнение (1) вместо постоянной K величины $K = \frac{h}{2\pi}$ позволило получить уравнение вида:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{e^2}{r}\right]\cdot\psi = 0. \quad (2)$$

В таком виде уравнение (2) называют стационарным уравнением Шредингера.

Как видно, основой приведенного уравнения (1) является волновая функция

$$\psi(t, p, q),$$

где t, p, q можно назвать координатами Эйлера: t – время или временной масштаб события, $q(x, y, z)$ – пространственный масштаб и $p(p_x, p_y, p_z)$ - импульс или энергетический эффект, сопровождающий данное явление.

В настоящем сообщении рассматривается возможность получения различных вариантов уравнения Шредингера в зависимости от бесконечно малого изменения волновой функции $\psi(t, p, q)$ в форме ее дифференциала:

$$d\psi(t,p,q) = \frac{\partial\psi}{\partial t}dt + \frac{\partial\psi}{\partial p}dp + \frac{\partial\psi}{\partial q}dq\,. \tag{3}$$

Откуда следует, что

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{dq}{dt}\frac{\partial\psi}{\partial q} + \frac{dp}{dt}\frac{\partial\psi}{\partial p}\,. \tag{4}$$

Из курса механики известно, что:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \upsilon \text{ - скорость;}$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \text{ - сила,}$$

где H – функция Гамильтона, равная $H = \frac{p^2}{2m} + U$, в которой U - потенциальная энергия. Учитывая данные выражения, уравнение (4) можно записать в виде:

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial\psi}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial\psi}{\partial p}\,. \tag{5}$$

Также из курса механики известно выражение, которое представляет собой классическую скобку Пуассона:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial\psi}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial\psi}{\partial p}\right) = [H,\psi],$$

Следовательно, выражение (5) можно представить в упрощенном виде:

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + [H,\psi]\,. \tag{6}$$

Если волновая функция ψ не зависит явно от времени, т.е. $\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0$, в этом случае, дальнейшее упрощение выражения (6) приводит к виду:

$$\frac{d\psi}{dt} = [H,\psi]\,. \tag{7}$$

Введение же в приведенное выражение (7) оператора Гамильтона $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{q})$ вместо функции Гамильтона H дает возможность получения упрощенного уравнения Шредингера в виде:

$$\frac{d\psi}{dt} = \left[\hat{H}, \psi\right] = 0, \tag{8}$$

а это есть, по-существу, стационарное уравнение Шредингера.

Как показано, оператор Гамильтона $\hat{H}$ определяется операторами импульса $\hat{p}$ и $U(\hat{q})$. Следовательно, возникает необходимость установления видов $\hat{p}$ и $\hat{q}$. Обычно, во многих изданиях по квантовой механике эти величины постулируются, т.е. даются без выводов и доказательств. Для решения данной задачи можно использовать для волновой функции $\psi(t, p, q)$, так называемые Фурье – преобразования [2, С.630-631]:

$$\psi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi(q)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}pq} dq\,; \tag{9}$$

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{+\frac{i}{\hbar}pq} dp\,. \tag{10}$$

Дифференциалы левых и правых частей уравнений (9) и (10) позволяет устранить непростые интегралы в правых частях данных равенств:

$$d\psi(p) = \frac{\psi(q)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}pq} dq\,; \tag{11}$$

$$d\psi(q) = \frac{\psi(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{+\frac{i}{\hbar}pq} dp\,. \tag{12}$$

Дифференцирование уравнения (11) по импульсу p и уравнения (12) по координате q приводит к следующим равенствам:

$$\frac{\partial}{\partial p} d\psi(p) = \frac{\psi(q)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}pq} dq \cdot \left(-\frac{i}{\hbar} q\right); \tag{13}$$

$$\frac{\partial}{\partial q} d\psi(q) = \frac{\psi(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{+\frac{i}{\hbar}pq} dp \left(+\frac{i}{\hbar} p\right). \tag{14}$$

Полученные выражения с учетом уравнений (11) и (12) можно представить в упрощенных формах:

$$\frac{\partial}{\partial p} d\psi(p) = -\frac{i}{\hbar} q \cdot d\psi(p)\,; \tag{15}$$

$$\frac{\partial}{\partial q} d\psi(q) = +\frac{i}{\hbar} p \cdot d\psi(q)\,. \tag{16}$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\partial}{\partial p} = -\frac{i}{\hbar} q\,; \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial q} = +\frac{i}{\hbar}\, p\,. \tag{18}$$

Далее, в правую часть выражений (17) и (18) введем обозначения $q = \hat{q}$ и $p = \hat{p}$ соответственно. Это и есть искомые операторы импульса и координаты, которые называют эрмитовыми [4, С.42, 63]:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}; \tag{19}$$

$$\hat{q} = +i\hbar\frac{\partial}{\partial p}. \tag{20}$$

Следовательно, оператор Гамильтона в уравнении (8) имеет вид:

$$\hat{H} = -i\hbar\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2} + U(q)\,. \tag{21}$$

Отсюда вытекает условие эрмитовости [4, С.42, 63]:

$$\int \varphi\cdot\hat{p}_x\;\psi\cdot dx = i\hbar\int\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}dx = i\hbar\int\psi\cdot\hat{p}_x\cdot\varphi\cdot dx\,. \tag{22}$$

Данное выражение показывает, что результат дифференцирования функций по двум различным переменным не зависит от порядка дифференцирования, или иначе функции φ и ψ коммутативны [3, С.67, 73]:

$$\begin{cases} \hat{p}_x\cdot\hat{p}_y - \hat{p}_y\cdot\hat{p}_x = 0 \\ \hat{p}_x\cdot\hat{p}_z - \hat{p}_z\cdot\hat{p}_x = 0 \\ \hat{p}_y\cdot\hat{p}_z - \hat{p}_z\cdot\hat{p}_y = 0 \end{cases}. \tag{23}$$

Тогда как координата и соответствующая ей составляющая импульса не коммутируют в отличие от выражения (23):

$$\begin{cases} \hat{x}\cdot\hat{p}_x - \hat{p}_x\cdot\hat{x} = \dfrac{\hbar}{i} \\ \hat{y}\cdot\hat{p}_y - \hat{p}_y\cdot\hat{y} = \dfrac{\hbar}{i} \\ \hat{z}\cdot\hat{p}_z - \hat{p}_z\cdot\hat{z} = \dfrac{\hbar}{i} \end{cases}. \tag{24}$$

Так же, значение оператора Гамильтона $\hat{H}$ позволяет перейти к так называемым перестановочным соотношениям Иордана-Борна. Так, согласно Дираку [1, С.617], разность гейзенберговских произведений двух квантовых величин x и y равна скобке Пуассона этих величин, умноженной на $\dfrac{ih}{2\pi}$:

$$(xy - yx) = \frac{ih}{2\pi}\left[\hat{H}, \psi\right] \qquad (25)$$

Теперь, если же волновая функция ψ зависит явно от времени, т.е. $\frac{\partial \psi}{\partial t} \neq 0$, то получаем нестационарное уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \left[\hat{H}, \psi\right] = 0\,. \qquad (26)$$

Далее использование скобки Пуассона из перестановочного соотношения Иордана-Борна (25) в полученном уравнении позволяет получить выражение (26) в виде:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\hat{H}, \psi\right]. \qquad (27)$$

Согласно Дираку [5. С.37], поскольку уравнение (27) содержит два неизвестных, то оно не имеет решения даже для атома водорода. В последующие годы при изучении уравнения (27) физики нашли способ решения в виде двух задач:

1. Первая колебательная задача состоит в постулировании содержания волновой функции ψ и использовании матрицы силовых полей, дающих экспериментально энергии;

2. Вторая задача состоит в постулировании энергии и дальнейшем нахождении функции ψ.

Использование в первой колебательной задаче волновой функции Слейтера-Зинера и потенциалов ионизаций атомов ионов позволило нам теоретически рассчитать ионные радиусы элементов в хорошем соответствии с эмпирически и полуэмпирическими значениями радиусов ионов по Полингу, Гольдшмидту Белову-Бокию, Мелвину-Хьюзу и Ингольду [6].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Успехи физических наук. – М.: Наука. - 1977. – Т. 122. – Вып. 4. – С. 561-623, 625, 574, 611, 621.

2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Наука. – 1976. – 664 с.

3. Шпольский Э.В. Атомная физика: учебное пособие. - М.: Наука. – 1984. – Т. 2. – 440 с.

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука. – 1989. – Т.3 – 768 с.

5. Дирак П.А.М. Пути физики / Под. Ред. Г. Хора, Дж. Шепанского. - М.: Энергоатомиздат. – 1983. – 88 с.

6. Балданов М.М., Балданова Д.М., Жигжитова С.Б., Танганов Б.Б. Константа экранирования Слейтора-Зинера и радиусы одноатомных ионов // Известия вузов. Физика.- 2006.- Т. 49. - №3.- С.59-67.

EILER`S COORDINATES AND EQUATION OF SHREDINGER

Baldanova D.M., Baldanov M.M., Tanganov B.B.
East-Siberian state technological university, Ulan-Ude

It is shown the possibility of Shredinger`s equation receiving in the different conditions of Eiler`s coordinates.

Keywords: equation of Shredinger, coordinates of Eiler, operator of Gamilton, wave function.