91-269

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-91-269

В.И.Горделий, А.Е.Савельев*

О СВЯЗИ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ, ФИЗИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

*Казахский химико-технологический институт, Чимкент

1991

Горделий В.И., Савельев А.Е. P17-91-269

О связи классической механики, физической кинетики и квантовой теории

Уравнение Шредингера обобщено к учету взаимодействия частиц с вакуумом. Обобщенное уравнение Шредингера оказалось в однозначном соответствии с классической механикой и физической кинетикой. Принципиально все результаты, следующие из исходного уравнения Шредингера, воспроизводятся. Найдено аналитическое решение обобщенного уравнения Шредингера при условиях: 1) потенциал внешних сил, действующих на частицу, имеет первые непрерывные производные по всем переменным и во всем пространстве; 2) уравнение Гамильтона-Якоби классической механики допускает существование идеального решения, т.е. зависимости скорости частицы только от времени. Аналитическое решение обобщенного уравнения Шредингера оказалось когерентным. Свойства когерентности волновой функции не зависят от симметрий, которыми может характеризоваться гамильтониан, определяющий движение частицы.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод Т.А. Филимонычевой

Gordeliy V.I., Savel'ev A.E. P17-91-269

About the Connection of Classical Mechanics, Physical Kinetics and Quantum Theory

The Schrödinger equation has been generalized to consideration of the particles interaction with vacuum. The generalized Schrödinger ratio turned out to be a one-to-one correspondence between classical mechanics and physical kinetics. It is important that all results which follow from the Schrödinger equation are reproduced. The analytical solution of the generalized Schrödinger equation was found under the next conditions: 1) the potential external forces exerted over all parameters and with the whole space; 2) classical mechanics Hamilton-Yacobi's equation has an ideal solution, i.e. the dependence of particle velocity on time only. The analytical solution of the generalized Schrödinger equation turned out to be coherent. The coherent properties of a wave function do not depend on symmetries by which the Hamiltonian determining the particle motion can be characterized.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991

Всякая теория, претендующая на большую общность, должна содержать в себе предшествующую теорию, проверенную опытом, как свои частные или предельные случаи. Квантовая механика считается более общей по сравнению с классической. Естественно ожидать тогда, что уравнения классической механики должны следовать из уравнения Шредингера. Однако этой очевидности не существует, ибо уравнение Шредингера находится лишь в приближенном соответствии с уравнением Гамильтона-Якоби. Действительно, при переходе к так называемому "квазиклассическому" приближению, для получения уравнения Гамильтона-Якоби, из одночастичного уравнения Шредингера отбрасывается член, содержащий постоянную Планка во второй степени /1/. Такое отбрасывание нельзя рассматривать как предельный переход формально при $\hbar\to 0$, ибо в этом "предельном" случае само уравнение Шредингера полностью теряет смысл.

С другой стороны, уравнение Шредингера находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными, например, по возбужденным состояниям атомов. Уже этого факта достаточно, чтобы считать уравнение Шредингера в большой степени адекватным реальности. Тем не менее, учитывая сказанное, необходимо признать, что в квантовой теории существует некоторый дефицит информации о поведении частицы, движение которой описывает уравнение Шредингера.

Исходя из этого, рассмотрим уравнение Шредингера для одной частицы, считая его приближенное соответствие с уравнением Гамильтона-Якоби недостаточным. Для устранения приближенности в соответствии этих уравнений примем следующие предположения:

1. Движение частицы в квантовой механике представляет собой непрерывный гауссовско-марковский процесс.

2. Частица движется по непрерывной траектории, согласно уравнениям классической механики, но каждая такая траектория реализуется лишь с некоторой конечной вероятностью, поскольку возможны переходы с одной непрерывной траектории на другую.

Как видно, предположения 1 -2 имеют большое сходство с исходными гипотезами физической кинетической теории. Однако гипотезы физической кинетики имеют отношение к системам частиц, содержащим большое их число, а предположения 1 -2 имеют отношение непосредственно к одной частице. Последующее рассмотрение покажет, что в предположениях 1 -2 нет ничего удивительного, поскольку выявит причину их реализации.

Принимая положения 1 -2, найдем, при каких условиях уравнение Шредингера окажется в однозначном соответствии с теоремой Лиувилля и его уравнением в одночастичном представлении, и уравнениями классической механики. Запишем уравнение Шредингера для одной частицы:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2}+U_0(t,\vec r)\psi;\quad k=1,2,3. \tag{1}$$

Здесь $\hbar$ - постоянная Планка; ψ - волновая функция частицы, m - ее масса; U_0 - потенциал действующих на частицу сил; по индексу k, как и в дальнейшем, подразумевается суммирование; радиус - вектор положения частицы

$$\vec r=\vec i_k x_k,$$

t - время; $\vec i_k$ - орты в декартовой системе координат. Поскольку x_k, t - действительные переменные, а ψ, согласно (1), - комплексная функция, ее удобно представить в комплексной ψ-плоскости в виде

$$\psi=g e^{i\varphi}, \tag{2}$$

$$\psi=\psi_1+i\psi_2,\ |\psi|^2=\psi_1^2+\psi_2^2=\psi^*\psi=g^2=f,\qquad \varphi=\arg\psi. \tag{3}$$

Здесь g, φ, f - действительные функции переменных x_k и t. Функция f представляет собой плотность вероятности найти частицу в точке $\vec r$ и в момент времени t.

Подставляя функцию (2) в уравнение (1), найдем:

$$i\hbar\frac{\partial g}{\partial t}-\hbar g\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2}-\frac{\hbar^2}{2m}i\frac{\partial}{\partial x_k}\left(g\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}\right)-$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}i\frac{\partial g}{\partial x_k}\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}+\frac{\hbar^2}{2m}g\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}\right)^2+U_0 g, \tag{4}$$

где опущен общий множитель $e^{i\varphi}$. Разделяя мнимую и действительную части уравнения (4), запишем два уравнения:

$$-\hbar g\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2}+\frac{\hbar^2}{2m}g\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}\right)^2+U_0 g, \tag{5}$$

$$\hbar\frac{\partial g}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x_k}\left(g\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial g}{\partial x_k}\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}. \tag{6}$$

Введем обозначение

$$\hbar\varphi=S; \tag{7}$$

тогда уравнения (5)-(6) запишутся в форме:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2+U_0-\frac{\hbar^2}{2mg}\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2}=0, \tag{8}$$

$$\frac{\partial g}{\partial t}=-\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial g}{\partial x_k}\frac{\partial S}{\partial x_k}+g\frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2}\right)-\frac{1}{2m}\frac{\partial g}{\partial x_k}\frac{\partial S}{\partial x_k}. \tag{9}$$

Снова вводя обозначение

$$u_k=\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x_k}, \tag{10}$$

и домножая уравнение (9) на g, запишем его в виде:

$$-\frac{\partial g^2}{\partial t}=\frac{\partial g^2}{\partial x_k}u_k+g^2\frac{\partial u_k}{\partial x_k},$$

или, вспоминая определение (3) функции f, найдем:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_k}(u_k f)=0. \tag{11}$$

Поскольку $f(\vec{r},t)$ есть плотность вероятности найти частицу в точке $\vec{r}$ и в момент времени t, то, принимая предположения 1 -2, можно считать, что u_k - компоненты скорости частицы, даваемые соотношением (10). Отсюда следует, что S должно быть отождествлено с действием частицы, согласно классической механике. Рассмотрим теперь уравнение (8). Как было отмечено выше, рассматривая переход к классической механике, т.е. квазиклассическое приближение квантовой механики, последний член в уравнении (8) отбрасывают, поскольку он пропорционален квадрату постоянной Планка. Таким образом и получается приближенное соответствие квантовой теории с классической механикой, ибо оставшееся уравнение совпадает с классическим уравнением Гамильтона-Якоби.

Имея в виду цель, поставленную выше, - найти точное соответствие квантовой теории с классической механикой и кинетической теорией при условии выполнения предположений 1 -2, последний член в уравнении (8) отбрасывать не будем, а попытаемся выяснить его смысл. Прежде всего, легко видеть, что если потребовать, чтобы в уравнении Шредингера (1) потенциал V_0 имел вид

$$V_0=U(\vec{r},t)+\frac{\hbar^2}{2mg}\cdot\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2}, \tag{12}$$

то уравнение (8) перейдет точно в уравнение Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2+U(\vec{r},t)=0. \tag{13}$$

В соотношении (12) и уравнении (13) потенциал U - обычно определяемый в классической механике потенциал сил, действующих на частицу. Для выяснения смысла второго члена в соотношении (12) необходимо найти решение уравнения (11).

Пусть уравнение (13) имеет идеальное решение, соответствующее (10), в виде $u_k = u_k(t)$, т.е. скорость частицы зависит только от времени.

Тогда уравнение (11) перейдет в частичное уравнение Лиувилля в одночастичном представлении:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+u_k\frac{\partial f}{\partial x_k}=0. \tag{14}$$

Соответствие уравнений (11) и (14) представляет собой простейший случай теоремы Лиувилля. Начальное условие для уравнения (14), согласно предположениям 1 -2, можно записать в форме

$$f\big|_{t=s}=\prod_{k=1}^{3}\frac{1}{\sqrt{\pi 2\sigma_k^2}}\cdot exp\left[-\frac{(x_k'')^2}{2\sigma_k^2}\right], \tag{15}$$

где

$$x_k\big|_{t=s}=x_k'',\ \sigma_k>0,\ t\geqslant s.$$

Когда реализуются предположения 1 -2, частица имеет непрерывную траекторию и можно записать

$$x_k=x_k''+\int_s^t u_k(\tau)d\tau. \tag{16}$$

Таким образом, следует ожидать, что решением уравнения (14) будет функция

$$f=\prod_{k=1}^{3}\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}}\cdot exp\left[-\frac{(x_k-\int_s^t u_k(\tau)d\tau)^2}{2\sigma_k^2}\right]. \tag{17}$$

Действительно, подстановка функции (17) в уравнение (14) обращает его в тождество.

Решение уравнения (1) с потенциалом (12) теперь можно записать в виде:

$$\psi=ge^{i\varphi}=\sqrt{f}\,e^{i\frac{S}{\hbar}}, \tag{18}$$

где S - решение уравнения Гамильтона-Якоби (13), а f - решение уравнения Лиувилля (14) в виде (17). Решение (18) в более подробной записи приобретает форму

$$\psi=e^{\frac{iS}{\hbar}}\prod_{k=1}^{3}(\pi 2\sigma_k^2)^{-1/4}exp\left[-\frac{(x_k-\int_s^t u_k(\tau)d\tau)^2}{4\sigma_k^2}\right]. \tag{19}$$

Наконец, учитывая изотропию пространства и полагая

$$\sigma_k=\sigma,\ \chi=2\sigma^2, \tag{20}$$

запишем окончательно:

$$\psi=e^{i\frac{S}{\hbar}}\prod_{k=1}^{3}(\pi\chi)^{-1/4}exp\left[-\frac{(x_k-\int_s^t u_k(\tau)d\tau)^2}{2\chi}\right]=$$

$$= e^{\frac{iS}{\hbar}} (\pi\chi)^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec r - \int\limits_s^t \vec u(\tau)\,d\tau)^2}{2\chi}\right]. \tag{21}$$

Вычислим теперь второй член в потенциале (12). Поскольку, согласно (18)-(21),

$$g = (\pi\chi)^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec r - \int\limits_s^t \vec u\,d\tau)^2}{2\chi}\right], \tag{22}$$

то

$$\frac{\partial g}{\partial x_k} = -\frac{g}{\chi}(x_k - \int\limits_s^t u_k\,d\tau),$$
$$\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2} = g\left[\frac{1}{\chi^2}(\vec r - \int\limits_s^t \vec u\,d\tau)^2 - \frac{3}{\chi}\right]. \tag{23}$$

Таким образом, второй член в (12) принимает вид

$$U_v = \frac{\hbar^2}{2mg}\cdot\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2} = \frac{\hbar^2}{2m\chi^2}(\vec r - \int\limits_s^t \vec u(\tau)\,d\tau)^2 - \frac{3\hbar^2}{2m\chi}. \tag{24}$$

Найдем размерность и вид χ в стандартных обозначениях. Потенциал (24) имеет вид движущегося со скоростью $\vec u$ осцилляторного потенциала. В соответствии с этим запишем:

$$\frac{m\omega_0^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2m\chi^2}. \tag{25}$$

Отсюда находим

$$\chi = \frac{\hbar}{m\omega_0}, \tag{26}$$

где m - масса частицы, ω_0 - циклическая частота колебаний. Постоянный член в (24) равен

$$\frac{3\hbar^2}{2m\chi} = \frac{3}{2}\hbar\omega_0. \tag{27}$$

Несколько ниже рассмотрим смысл потенциала (24).

Теперь вернемся к уравнению Шредингера (1). Подставляя в него потенциал (12), запишем:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2} + \left[U(\vec r,t) + \frac{\hbar^2}{2mg}\cdot\frac{\partial^2 g}{\partial x_k^2}\right]\psi. \tag{28}$$

Таким образом, уравнение Шредингера формально оказалось нелинейным. Однако, учитывая (24)-(27), его снова можно записать в линейном виде:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2} + U\psi + U_v\psi, \tag{29}$$

где

$$U_v = \frac{m\omega_0^2}{2}(\vec r - \int\limits_s^t \vec u(\tau)\,d\tau)^2 - \frac{3}{2}\hbar\omega_0. \tag{30}$$

Покажем, что функция (21) удовлетворяет уравнению (29), если действие S удовлетворяет уравнению Гамильтона-Якоби (13). Производя соответствующие дифференцирования и принимая во внимание, что решение (21) получено в предположении $u_k = u_k(t)$, найдем с помощью прямой подстановки (21) в (29):

$$i\hbar\left[\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{\chi}(\vec r - \int\limits_s^t \vec u\,d\tau)\vec u\right] =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{i\,2m}{\hbar\chi}\cdot\vec u(\vec r - \int\limits_s^t \vec u\,d\tau) - \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2 + \right. \tag{31}$$
$$\left. + \frac{1}{\chi^2}(\vec r - \int\limits_s^t \vec u\,d\tau)^2 - \frac{3}{\chi}\right] + U + U_v,$$

где общий множитель ψ опущен. Учитывая значение U_v в виде (24), видим, что уравнение (31) точно совпадает с уравнением (13). Этот результат можно сформулировать следующим образом: волновая функция (21) тождественно удовлетворяет уравнению Шредингера (29), если действие частицы S является решением уравнения (13), допускающим существование идеального решения $\vec u = \vec u(t)$, т.е. зависимости скорости частицы только от времени; кроме того, необходимо, чтобы потенциал U имел первые непрерывные производные по динамическим переменным. Поскольку потенциал U_v имеет вид (24), то принцип суперпозиции квантовой теории сохраняется.

Существенно рассмотреть уравнение (29) в том случае, когда $U \equiv 0$. В этом случае частица считается свободной. Для такой "свободной" частицы уравнение (29) принимает вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2} + U_v\psi, \tag{32}$$

где значение U_v задано формулами (24) или (30). Поскольку на частицу не действуют внешние силы, то потенциал U_v нельзя понять иначе, как модель взаимодействия частицы с вакуумом. Решением уравнения (32) по-прежнему остается функция (21). В данном случае частица, согласно (13), движется равномерно и прямолинейно; переходя в систему покоя частицы, или, что то же самое, полагая $\vec u = 0$, получим из (21):

$$\psi = \psi_0 = e^{i\frac{S_0}{\hbar}}\cdot(\pi\chi)^{-3/4} e^{-\frac{r^2}{2\chi}}, \tag{33}$$

т.е. обычную волновую функцию осциллятора, соответствующую его основному (нормальному) состоянию; ни в каком другом состоянии частица в данном случае быть не может $(U \equiv 0)$. Действие, соответствующее (33), можно записать как

$$S_0 = -E_0 t. \tag{34}$$

Подставляя в (32) функцию

$$\psi_0 = e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \cdot g_0, \quad g_0 = (\pi X)^{-3/4} e^{-\frac{\vec{r}^2}{2X}}, \tag{35}$$

найдем

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m g_0} \cdot \frac{\partial^2 g_0}{\partial X_k^2} + U_V. \tag{36}$$

Вспоминая теперь формулу (24), где в данном случае следует заменить g на g_0, найдем, что $E_0 = 0$. Таким образом, в отличие от обычного осциллятора, имеющего энергию основного состоянии $3/2\,\hbar\omega_0$, осциллятор (32) имеет нулевую энергию основного состояния, что и учитывает постоянный член в (30). Это обстоятельство находится в полном соответствии с классической механикой, с точки зрения которой частица свободна.

Если в уравнении (29) отбросить член, содержащий потенциал U_V, как это делается при переходе к квазиклассическому приближению в квантовой теории, то уравнение Шредингера приобретает свой прежний вид, и тем самым все результаты квантовой теории сохраняются. Однако, если принять уравнение (29) как адекватное реальности, то этот член отбросить принципиально невозможно. Это формально можно увидеть, если перейти к пределу в (30) и (21) при $\omega_0 \to 0$:

$$\lim_{\omega_0 \to 0} U_V = 0, \quad \lim_{\omega_0 \to 0} X = \lim_{\omega_0 \to 0} \frac{\hbar}{m\omega_0} = \infty,$$
$$\lim_{\omega_0 \to 0} \psi = e^{\frac{iS}{\hbar}} \cdot \lim_{X \to \infty} (\pi X)^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u}\, d\tau)^2}{2X}\right] \equiv 0. \tag{37}$$

Отсюда видно, что частицы, которая не взаимодействует с вакуумом, в природе не существует.

Проведенное выше рассмотрение и, в частности, свободного движения частицы, позволяет дополнить информацию, содержащуюся в предположениях 1 -2. Это дополнение можно сформулировать следующим образом:

3. Частица хаотически взаимодействует с вакуумом, что вполне соответствует предположению 1. Взаимодействие частицы с вакуумом может быть изображено модельным потенциалом вида (30), в котором постоянный член фиксирует интенсивность обмена энергией частицы с вакуумом (глубина "энергетического погружения" частицы в вакуум). Среднее значение энергии, которой обменивается частица с вакуумом, равно нулю. В силу изотропии пространства то же самое можно сказать и о количестве движения (импульсе) частицы. Значения энергии и импульса, даваемые уравнением Гамильтона-Якоби, характеризуют движение центра инерции ансамбля состо-

яний частицы, представленного волновой функцией вида (21). Все это можно считать соответствующим соотношению неопределенности Гайзенберга, но не в его экстремальной формулировке.

Одним из самых существенных свойств волновой функции (21) является ее когерентность. Она представляет собой нерасползающийся пакет волн, дающий конечную амплитуду вероятности обнаружить частицу в любой точке пространства и в любой момент времени. В отличие от существующей когерентной квантовой теории, функция (21) не нуждается в том, чтобы гамильтониан удовлетворял специальным требованиям динамической симметрии, которые определяются, например, группами Ли /2/.

Для получения большей информации об адекватности уравнения (29) необходимо найти квантовые состояния некоторой конкретной системы и сравнить их с теми, которые определяются исходным уравнением Шредингера. Имея в виду эту цель, рассмотрим уравнение (29) в одномерном случае для осцилляторного потенциала внешних сил:

$$U = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \tag{38}$$

В этом случае уравнение (29) принимает вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi +$$
$$+\left[\frac{m\omega_0^2}{2}\left(x - \int_s^t u(\tau)\,d\tau\right)^2 - \frac{\hbar\omega_0}{2}\right]\psi. \tag{39}$$

Решением уравнения (39) будет функция (21) в одномерном случае

$$\psi(x,t) = e^{\frac{iS}{\hbar}} \cdot (\pi X)^{-1/4} \exp\left[-\frac{\left(x - \int_s^t u(\tau)\,d\tau\right)^2}{2X}\right]. \tag{40}$$

Найдем теперь действие системы S и скорость частицы $u(\tau)$. В данном случае проще исходить непосредственно из уравнения Ньютона

$$m\frac{du}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}, \tag{41}$$

в котором

$$\frac{\partial U}{\partial x} = m\omega^2 x, \quad u = \frac{dx}{dt}, \quad \frac{du}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2}, \tag{42}$$

и уравнение (41) записывается в форме

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -m\omega^2 x. \tag{43}$$

Общее решение уравнения (43) удобнее записать в виде действительной функции

$$x = a\,\mathrm{Cos}(\omega t + \alpha), \tag{44}$$

где произвольные постоянные a и α - действительные величины. Согласно (42) и (44) скорость частицы

$$u(t)=\frac{dx}{dt}=-a\omega \sin(\omega t+\alpha). \tag{45}$$

Полагая начало отсчета времени $S=0$, примем в качестве начального условия

$$x/_{t=0}=0, \tag{46}$$

или, согласно (44),

$$x/_{t=0}=a\cos\alpha=0.$$

Отсюда находим

$$\alpha=(2n+1)\frac{\pi}{2},\ n=0,1,2,\ldots \tag{47}$$

Началу отсчета времени $t=0$ сопоставим значение $n=0$, т.е. положим $\alpha=\frac{\pi}{2}$. Тогда, согласно (45), запишем:

$$u/_{t=0}=-a\omega\sin\frac{\pi}{2}=-a\omega=u_0. \tag{48}$$

Классическая энергия частицы

$$E=\frac{mu^2}{2}+U(x). \tag{49}$$

Согласно (38), (46) и (48),

$$E/_{t=0}=E_0=\frac{mu_0^2}{2}=\frac{m}{2}a^2\omega^2, \tag{50}$$

т.е.

$$a=\sqrt{\frac{2E_0}{m\omega^2}}.$$

Таким образом, $E=E_0$ здесь выступает как произвольный параметр, заменяющий постоянную a.

Действие системы в данном случае можно представить в виде

$$S=\int p\,dx-Et, \tag{51}$$

что эквивалентно соотношениям

$$\frac{\partial S}{\partial t}=-E,\ \frac{\partial S}{\partial x}=p. \tag{52}$$

Подстановка (51)-(52) в уравнение Гамильтона-Якоби (13) в одномерном случае дает соотношение

$$E=\frac{p^2}{2m}+U, \tag{53}$$

совпадающее с (49). Записывая из (53)

$$p=\sqrt{2m(E-U)},$$

вычислим интеграл

$$S_0=\int\sqrt{2m\left(E-\frac{m\omega^2}{2}x^2\right)}\,dx. \tag{54}$$

Интеграл (54) приводится к интегралам стандартного вида /3/. Опуская громоздкости вычислений, учитывая, что действие определено с точностью до произвольной постоянной, а также формулу (51), запишем:

$$S=\frac{x}{2}\sqrt{-m^2\omega^2x^2+2mE}-$$
$$-\frac{E}{\omega}\arcsin\left[-\frac{m\omega x}{\sqrt{2mE}}\right]-Et. \tag{55}$$

Для определения дискретных стационарных состояний системы уделим некоторое внимание периодичности движения. При каждом фиксированном E_0 должно иметь место соотношение

$$\int_0^{\frac{1}{2}nT}u(t)dt=0;\ n=0,1,2,\ldots, \tag{56}$$

где T - период колебаний. Из (56) с помощью (45) найдем

$$a\cos\left(\frac{\omega nT}{2}+\frac{\pi}{2}\right)=0,$$

т.е.

$$\frac{\omega nT}{2}+\frac{\pi}{2}=(2n+1)\frac{\pi}{2},$$

или

$$T=\frac{2n\pi}{\omega n}=\frac{2\pi}{\omega},$$

что совпадает с обычным определением периода колебаний.

В одномерном случае траекторию частицы можно считать однозначной. Исходя из этого, потребуем, чтобы выполнялось соотношение

$$\psi/_{t=0}=\psi/_{t=T}. \tag{57}$$

Вычисляя значения волновой функции (40) с учетом (55), найдем

$$\psi/_{t=0}=(\pi x)^{-1/4}e^{i\frac{Ek\pi}{\hbar\omega}},\ k=0,1,2,\ldots, \tag{58}$$

$$\psi/_{t=T}=(\pi x)^{-1/4}e^{i\frac{Ek\pi}{\hbar\omega}}\cdot e^{-i\frac{E2\pi}{\hbar\omega}}. \tag{59}$$

Подставляя (58)-(59) в (57), запишем соотношения

$$\exp\left[-i\frac{E2\pi}{\hbar\omega}\right]=\cos\frac{E2\pi}{\hbar\omega}-i\sin\frac{E2\pi}{\hbar\omega}=1,$$
$$\cos\frac{E2\pi}{\hbar\omega}=1,\quad \sin\frac{E2\pi}{\hbar\omega}=0. \tag{60}$$

Отсюда следует

$$\frac{E2\pi}{\hbar\omega}=2n\pi,\quad E=n\hbar\omega,\ n=0,1,2,\ldots \tag{61}$$

Состояния, соответствующие уравнению Шредингера в его исходном виде для одномерного осциллятора, даются соотношением

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\ldots \tag{62}$$

Таким образом, квантовые состояния одномерного осциллятора, описываемого уравнением (39) (частный случай уравнения (29)), совпадают с таковыми для исходного уравнения Шредингера $(U_v \equiv 0)$ с точностью до начала отсчета $(\hbar\omega/2)$. Это вполне естественно, поскольку частица, взаимодействуя с вакуумом, "погружена" в него энергетически, согласно соотношениям (24) и (30). Существенно отметить здесь, что уравнения Гамильтона-Якоби и Лиувилля в проведенном выше рассмотрении не являются просто следствиями квантовой теории, а представляют собой вместе с уравнением Шредингера в виде (29) замкнутую систему уравнений, дающую полное описание физической системы.

Рассмотрим уравнение (29) для стационарных состояний. В этом случае, поскольку энергия сохраняется, действие системы

$$S = S_o - Et, \tag{63}$$

где S_o зависит только от координат частицы $\vec{r}$. Учитывая (63), функцию (21) можно записать в виде

$$\psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi_o(\vec{r},t). \tag{64}$$

Здесь

$$\psi_o = e^{i\frac{S_o}{\hbar}} \cdot g(\vec{r},t), \tag{65}$$

а функция g задана формулой (22). Подставляя функцию (64) в уравнение (29), найдем:

$$E\psi_o + i\hbar\frac{\partial\psi_o}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_o}{\partial x_k^2} + (U+U_v)\psi_o. \tag{66}$$

Домножим теперь уравнение (66) на ψ_o^* и проинтегрируем по пространственным переменным:

$$E\int\psi_o^*\psi_o\, d^3\vec{r} + i\hbar\int\psi_o^*\frac{\partial\psi_o}{\partial t}\, d^3\vec{r} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi_o^*\frac{\partial^2\psi_o}{\partial x_k^2}\, d^3\vec{r} + \int\psi_o^*(U+U_v)\psi_o\, d^3\vec{r}. \tag{67}$$

Интегралы, входящие в левую часть (67), вычисляются с помощью функции (65):

$$\int\psi_o^*\psi_o\, d^3\vec{r} = \int d^3\vec{r}\, e^{-i\frac{S_o}{\hbar}} g\, e^{i\frac{S_o}{\hbar}} g = \int g^2 d^3\vec{r} = 1; \tag{68}$$

$$\int\psi_o^*\frac{\partial\psi_o}{\partial t}\, d^3\vec{r} = \int g\frac{\partial g}{\partial t}\, d^3\vec{r} = \frac{1}{2}\int\frac{\partial g^2}{\partial t}\, d^3\vec{r} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int g^2 d^3\vec{r} = 0. \tag{69}$$

Таким образом, (67) можно записать в виде:

$$E = \int\psi_o^*\hat{H}_o\psi_o\, d^3\vec{r}, \tag{70}$$

где оператор энергии

$$\hat{H}_o = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + U + U_v. \tag{71}$$

Соотношения (70)-(71) констатируют тот факт, что уравнение (29) приводит к определению средней энергии для любого стационарного состояния, которое общепринято в квантовой теории. Поскольку определение вида (70) хорошо выверено на практике, то уже этого факта достаточно, чтобы уравнение (29) считать вполне адекватным реальности.

Как показывает все проведенное выше рассмотрение, столь гармоничное сочетание исходных принципов классической механики, физической кинетики и квантовой теории обусловлено единственной причиной - обобщением уравнения Шредингера к учету взаимодействия частиц с вакуумом. Физическая суть взаимодействия частицы с вакуумом фиксирована формулировками 1 -3. Эти формулировки, как видно, диалектически сочетают учет хаотичности и детерминированности в движении частицы, что позволяет записать уравнения вида (1), (28) и (29).

Нет сомнения, что изложенная здесь теория понуждает к дальнейшему ее обобщению и развитию, ибо в связи с уравнениями (1), (28) и (29) возникает целый комплекс вопросов. Не перечисляя их, отметим только, что этим вопросам следует уделить особое внимание. Тем не менее, можно считать, что уже проведенного здесь рассмотрения вполне достаточно для того, чтобы уравнение (29) и его решение (21) применять на практике.

Имеет смысл отметить некоторые аспекты теории, имеющие целью применение на практике. Волновая функция (21) позволяет построить корректную теорию проницаемостей потенциальных барьеров. При этом речь может идти не только о проницаемости одного барьера, а о проникновении частицы сквозь цепочку барьеров, имеющих различные высоты и формы. Это обстоятельство может иметь прямое отношение к описанию, например, эффектов Джозефсона в сверхпроводниках. В теории сверхтекучести и в теории сверхпроводимости уже давно назрела необходимость в строгом построении макроскопической волновой функции, которая бы учитывала как движения отдельных частиц, так и коллективные эффекты. На первом этапе построения такой волновой функции уравнение (29) и его решение (21) следует обобщить к описанию систем взаимодействующих частиц, представляющих собой бозе-системы. Далее, конечно, необходимо обобщить рассмотрение к учету спинов частиц и таких эффектов, как образование куперовских пар. При этом можно надеяться, что построенная таким образом макроскопическая волновая функция сохранит свойства когерентности, которыми характеризуется функция (21).

В заключение авторы считают своим долгом выразить искреннюю благодарность доктору физико-математических наук, профессору Переломову А.М. (ИТЭФ, Москва) за глубокое обсуждение и поддержку предлагаемой вниманию читателя работы.

Литература

1. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. - М.: Гос. изд. физ.-мат. лит. , 1963.
2. Переломов А.М. Обобщенные когерентные состояния и их применения. - - М.: Наука , 1987.
3. Градштейн И.С. и Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. - М.: Гос. изд. физ.-мат. лит. , 1962.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 июня 1991 года.