ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



Р4 - 10650

В.К.Игнатович

# НЕРАСПЛЫВАЮЩИЕСЯ ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

1977

P4 - 10650

В.К.Игнатович

# НЕРАСПЛЫВАЮЩИЕСЯ ВОЛНОВЫЕ ПАКЕТЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

*Направлено в "Foundations of Physics"*

Игнатович В.К.

Р4 - 10650

Нерасплывающиеся волновые пакеты в квантовой механике

Построен ненормируемый нерасплывающийся волновой пакет, удовлетворяющий уравнению Шредингера. Рассмотрена модификация уравнения Шредингера, позволяющая получить нормируемый волновой пакет. Произведено обобщение для релятивистской механики.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

P4 - 10650

Ignatovich V.K.

Nonspreading Wave Packets in Quantum Mechanics

A nonspreading unnormalizable packet satisfying the Schrödinger equation is constructed. A modification of the Schrödinger equation is considered giving a normalizable wave packet. The generalization is made for the relativistic mechanics.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977



Широко распространено убеждение, что построить нерасплывающийся волновой пакет, удовлетворяющий уравнению Шредингера, невозможно. Однако ниже будет показано, что если пакетом называть функцию вида

$$\Psi(\vec r, t) = f(\vec r - \vec v t)\, e^{i\vec k \vec r - i\omega t},$$

в которой амплитуда $f$ имеет максимум в точке $\vec r = \vec v t$, но которая необязательно нормируема, то сконструировать такой нерасплывающийся волновой пакет вполне возможно.

В дальнейшем для удобства в качестве временной переменной возьмем комбинацию $\hbar t/m$, которая имеет размерность $см^2$, и именно ее обозначим буквой $t$. При этом функция $\Psi$ преобразуется к виду:

$$\Psi(\vec r, t) = f(\vec r - \vec k t)\, e^{i\vec k \vec r - i\omega t}, \qquad /1/$$

где $k$ - обозначает одновременно и волновой вектор и скорость частицы, описываемой функцией $\Psi$, а $\omega$ - частота, которая в случае $f(r-kt)=\mathrm{const}$ равна $k^2/2$. Если же $f$ - не постоянная, а именно этот случай нас и будет здесь интересовать, то $\omega \neq k^2/2$. Обозначим разность $\omega - k^2/2$ через $s^2/2$ и будем пока считать $s^2 > 0$. Представим амплитуду $f$ интегралом Фурье:

$$f(\vec x) = \int \tilde f(\vec p)\, e^{i\vec p \vec x}\, d^3p.$$

Тогда выражение /1/ можно записать следующим образом:

$$\Psi(\vec r, t) = \int \tilde f(\vec p - \vec k)\, e^{i\vec p \vec r - itp^2/2 + it[(\vec p - \vec k)^2 - s^2]/2}\, d^3p. \qquad /2/$$

Для того чтобы функция $\Psi(r,t)$ удовлетворяла уравнению Шредингера

$$L_{Ш}\Psi = 0, \qquad /3/$$

где

$$L_{Ш} = i\partial_t + \Delta/2, \qquad /4/$$

необходимо, чтобы последнее слагаемое в показателе экспоненты обратилось в нуль. Но при заданных s и k это возможно только в том случае, если $f(\vec{p})$ содержит фактор $\delta(p^2-s^2)$. Пусть, например,

$$\tilde{f}(\vec{p}) = c\,\delta(p^2-s^2), \qquad /5/$$

где c - постоянная, тогда

$$\Psi(\vec{r},t) = 2\pi c\frac{\sin(s|\vec{r}-\vec{k}t|)}{|\vec{r}-\vec{k}t|}e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}, \qquad /6/$$

причем

$$\omega = \frac{1}{2}(k^2+s^2). \qquad /7/$$

Обратим внимание на зависимость $\Psi$ от параметра s. Если принять, что c не зависит от s, то при $s\to\infty$

$$\Psi(\vec{r},t) \underset{s\to\infty}{\longrightarrow} \delta(|\vec{r}-\vec{k}t|)e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}. \qquad /8/$$

Если же положить $c\sim 1/\sqrt{s}$, то

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 \underset{s\to\infty}{\longrightarrow} \delta(|\vec{r}-\vec{k}t|). \qquad /9/$$

Параметр s характеризует ширину волнового пакета. При $s\to 0$ ширина возрастает, и в пределе $s\to 0$ функция $\Psi$ должна переходить в плоскую волну. Такой переход действительно имеет место, если при $s\to 0$ коэффициент c пропорционален $1/s$. Тогда

$$\Psi(\vec{r},t) \underset{s\to 0}{\longrightarrow} e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}. \qquad /10/$$



Представляется чрезвычайно привлекательным положить

$$s = \alpha k, \qquad /11/$$

где $\alpha$ - феноменологический параметр. Если при этом в качестве c взять такую функцию c(s), что

$$c(s) \sim \begin{cases} 1/\sqrt{s}, & s\to\infty \\ 1/s, & s\to 0, \end{cases} \qquad /12/$$

то по мере роста скорости частицы k происходит непрерывный переход от волновой оптики к геометрической. Соотношение /11/ позволяет интерпретировать частоту /7/ как кинетическую энергию

$$\omega = \frac{1}{2}k^2(1+\alpha^2), \qquad /13/$$

но не с массой частицы m, а с перенормированной массой

$$m_0 = \frac{m}{1+\alpha^2}. \qquad /14/$$

Отметим, что волновой пакет /6/ ненормируем. Это не мешает исследованию процессов рассеяния, поскольку норма в них исключается, но затрудняет интерпретацию с точки зрения определения плотности вероятности $\rho = |\Psi|^2$. Можно ли устранить этот недостаток? Ответ на этот вопрос отрицателен. Конечно, при построении пакета /6/ был допущен произвол: во-первых, при конкретном выборе коэффициентов разложения /5/ и, во-вторых, в том, что $s^2$ в соотношении /7/ полагалось положительным. Однако, как будет видно ниже, из всех возможных вариантов только выражение /6/ имеет максимум в точке $\vec{r}=\vec{k}t$ и сферически симметричную вокруг этой точки амплитуду f.

Чтобы избавиться от ненормируемости, необходимо выбрать коэффициенты $\tilde{f}(\vec{p})$ в разложении /2/ существенно отличными от /5/. Но тогда действие оператора Шредингера /4/ на функцию $\Psi$ приведет к выражению

$$L_{\text{Ш}}\Psi = -\frac{1}{2}\int[(\vec{p}-\vec{k})^2 - s^2]\tilde{f}(\vec{p}-\vec{k}) \times$$
$$\times e^{ipr - ip^2t/2 + it[(p-k)^2 - s^2]/2}\, d^3p, \qquad /15/$$

отличающемуся от нуля. Однако если выбрать

$$\tilde{f}(\vec{p}) = \frac{c}{p^2 - s^2 \pm i\epsilon}\,\frac{2}{(2\pi)^3}\,, \qquad /16/$$

то отличие от нуля будет иметь место только в одной точке:

$$L_{\text{Ш}}\Psi = -c\cdot\delta(\vec{r}-\vec{k}t). \qquad /17/$$

Коэффициенты Фурье /16/ не обеспечивают нормируемости функции $\Psi$. Действительно, при положительном $s^2$ имеем

$$\Psi(\vec{r},t) = c\,\frac{e^{\pm is|\vec{r}-\vec{k}t|}}{|\vec{r}-\vec{k}t|}\,e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}\,. \qquad /18/$$

В частности, при $s=0$ выражение /18/ переходит в одно из выражений, предложенных де-Бройлем[1]. Чтобы обеспечить нормируемость, необходимо положить, что $s^2$ отрицательно, т.е.

$$s^2 = -q^2 < 0. \qquad /19/$$

В этом случае нормированная функция $\Psi(\vec{r},t)$ равна:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sqrt{\frac{q}{2\pi}}\,\frac{e^{-q|\vec{r}-\vec{k}t|}}{|\vec{r}-\vec{k}t|}\,e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}, \qquad /20/$$

$$\omega = \frac{1}{2}(k^2 - q^2).$$



Выражение /20/ также было предложено де-Бройлем[1] и независимо исследовано в работе[2], где аналогично /11/ $q$ полагалось равным $\alpha k$, причем постоянная $\alpha$ оценивалась по результатам экспериментов с ультрахолодными нейтронами: $\alpha \approx 10^{-4}$.

Найдем теперь все возможные функции, которые могут быть представлены в виде /1/. Для этого подставим /1/ в уравнение /3/ и найдем уравнение для функции $f(\vec{r}-\vec{k}t)$:

$$[i\partial_t + i\vec{k}\vec{\nabla}_r + \frac{1}{2}(\Delta_r + s^2)]f(\vec{r}-\vec{k}t) = 0. \qquad /21/$$

Здесь $\vec{\nabla}_r$ и $\Delta_r$ обозначают производные по координатам $r$. Введем новую переменную $\vec{\xi} = \vec{r}-\vec{k}t$, тогда уравнение /21/ перепишется в виде:

$$(\Delta^2_\xi + s^2)f(\vec{\xi}) = 0, \qquad /22/$$

общее решение которого представляется рядом

$$f(\xi) = \Sigma q_{\ell M} Y_{\ell M}(\hat{\xi})\, j_\ell(\xi s), \qquad /23/$$

где $Y_{\ell M}$ - шаровые функции, $j_\ell(\xi s)$ - сферические функции Бесселя, а $a_{\ell M}$ - коэффициенты разложения. Из выражения /23/ вытекает, что сферически симметричное решение при $s^2 > 0$ единственно. Соответствующее выражение для $\Psi$ совпадает с /6/. Заметим, что включить в разложение /23/ сферические функции Ханкеля или Неймана нельзя, т.к. эти функции являются решением не уравнения /22/, а уравнения:

$$(\Delta_\xi + s^2)f = \delta(\vec{\xi}). \qquad /24/$$

Если в уравнении /22/ считать $s^2$ отрицательным $|s^2 = -q^2|$, то общее решение запишется в виде ряда по сферическим функциям Бесселя мнимого аргумента. Поскольку эти функции расходятся при $\xi \to \infty$, то, с одной стороны, они не имеют максимума в точке $\vec{r} = \vec{k}t$, а с другой - не поддаются физической интерпретации. Уравнение же /24/ в случае отрицательного $s^2$ имеет решение, убывающее на бесконечности, но сингулярное при $\xi = 0$. Общее решение снова записывается в виде ряда

$$f(\vec{\xi}) = \Sigma\, q_{\ell M} Y_{\ell M}(\hat{\vec{\xi}})\, j_\ell(is\xi) + bK_0^{(1)}(q\xi)\,, \qquad /25/$$

где $K_0^{(1)}(x)$ - сферическая функция Ханкеля мнимого аргумента, убывающая на бесконечности как $e^{-x}$. Нормируемое решение здесь единственно. Оно сферически симметрично, и соответствующая функция $\Psi$ совпадает с /2О/. Однако подчеркнем еще раз, что эта функция является решением не уравнения Шредингера, а уравнения

$$(i\,\partial_t + \frac{1}{2}\Delta)\,\Psi = c\cdot\delta(\vec{r}-\vec{k}t)\,, \qquad /26/$$

где c - постоянная, определяемая нормировкой $\Psi$. Уравнение /26/ выходит за рамки обычной квантовой механики, т.к. оно неоднородно, однако, отдавая дань солитонной моде, укажем, что функция /2О/ является решением следующего нелинейного уравнения:

$$[L_{III} + \frac{2\pi}{c}\,\delta(\vec{V}\ \ \frac{1}{|\psi|})\,]\,\psi = 0\,,$$

где $\delta(\vec{x})$ - $\delta$-функция Дирака.

Представление волновой функции в виде пакета, пусть даже и ненормируемого, позволяет по-новому взглянуть на процессы рассеяния и дает возможность предсказать явления, в которых проявляется такая характеристика частиц, как ширина пакета. Конкретные процессы будут рассмотрены в другой работе, здесь же только рассмотрим принципиальные пути решения задач рассеяния. Поскольку пакет является нестационарным образованием, т.к. его положение меняется в пространстве со временем, то не является стационарной и задача рассеяния даже в не зависящем от времени потенциале. Однако поскольку свободный пакет представляется в виде разложения по плоским волнам, а уравнение Шредингера не затрагивает коэффициентов разложения, то задачу рассеяния можно решать стационарными методами для каждой плоской волны.

В результате расчетов получим, что волновая функция во внешнем поле представляется в виде

$$\Psi(\vec{r},t) = \int \tilde{\delta}(\vec{p}-\vec{k})\, e^{-ip^2 t/2}\, \chi(\vec{p},\vec{r})\, d^3p\,, \qquad /27/$$



где $\chi(\vec{p},\vec{r})$ - решение задачи рассеяния, когда падающая волна имеет вид $\exp(i\vec{p}\vec{r})$. При $t\to-\infty$ имеем $\Psi(\vec{r},t) \to \Psi_0(\vec{r},\vec{k}_0,t)$, где $\Psi_0$ равно /6/ при $k=k_0$, а $k_0$ - скорость налетающей частицы. При $t\to\infty$

$$\Psi(\vec{r},t) = \int g(\vec{r}_1,\vec{k}_1)\,\Psi_0(\vec{r}-\vec{r}_1,\vec{k}_1,t)\,d^3r_1\,d^3k_1\,, \qquad /28/$$

т.е. представляет набор пакетов, рассеянных в момент $t=0$ из точек $\vec{r}_1$ и распространяющихся со скоростями $\vec{k}_1$. Аналогичное построение оказывается возможным также и для пакетов /2О/, если соответствующим образом модифицировать квантовомеханические уравнения для парциальных волн.

До сих пор все рассуждения проводились только для нерелятивистского уравнения Шредингера. Посмотрим теперь, можно ли найти аналогичное решение пакетного типа для релятивистского уравнения Клейна-Гордона, которое будет записываться следующим образом:

$$[\partial_t^2 - \Delta + 1\,]\,\Psi = 0. \qquad /29/$$

Здесь время t и координаты $\vec{r}$ сделаны безразмерными с помощью единиц $t_0 = h/m_0c^2$ и $r_0 = h/m_0c$, $m_0$ - масса частицы. Будем искать решение этого уравнения в виде

$$\Psi = f(\vec{r}-\vec{\beta}t)\,e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}\,, \qquad /3О/$$

где $\vec{\beta} = \vec{v}/c$, $\vec{v}$ - скорость частицы. Подставим /3О/ в /29/ и найдем уравнение для $f(\vec{\xi})$, где $\vec{\xi} = \vec{r}-\vec{\beta}t$:

$$[k^2 - \omega^2 + 1 + 2i\omega(\vec{\beta}\vec{\nabla}) - 2i(\vec{k}\vec{\nabla}) + (\vec{\beta}\vec{\nabla})^2 - \Delta]\,f(\vec{\xi}) = 0. \qquad /31/$$

Потребуем, чтобы линейные производные взаимно скомпенсировались. Это возможно только, если $\vec{k} = \rho\vec{\beta}$, $\omega=\rho$, а $\rho$ - некий параметр пропорциональности между $\vec{k}$ и $\vec{\beta}$. Обозначим $k^2-\omega^2+1=1-\rho^2(1-\beta^2)=-s^2$, тогда уравнение приведется к виду

$$[\Delta^2 - (\vec{\beta}\vec{\nabla})^2 + s^2\,]\,f(\xi) = 0\,. \qquad /32/$$

Выберем систему координат таким образом, чтобы $\vec{\beta}$ было параллельно оси $z$, и перейдем к новым переменным $\xi_z = \xi_z / \sqrt{1-\beta^2}$. В результате уравнение /32/ сведется к виду /22/, общее решение которого дается выражением /23/. Частное решение, сферически симметричное в координатах $\xi'$, равно $j_0(\xi' s)$. Прежде чем выписывать окончательное выражение для $\Psi$, примем, что

$$\rho = \sqrt{\frac{1+a^2}{1-\beta^2}}\ , \qquad /33/$$

где $a$ - некоторый параметр. Перейдем теперь к естественным размерным $\vec{r}$ и $t$. Тогда для функции $\Psi$ получим следующее выражение

$$\Psi = C\,\frac{\sin sR}{R}\,e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}\ , \qquad /34/$$

$$R = \sqrt{x^2+y^2+\frac{(z-vt)^2}{(1-\beta^2)}}\ ;\quad k = \frac{mv}{\sqrt{1-\beta^2}}\,\frac{1}{\hbar}\ ,$$

где

$$\omega = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\,\frac{1}{\hbar}\ ,\qquad s = a\,\frac{m_0 c}{\hbar} \qquad /35/$$

и масса частицы $m_0$ связана с массой, входящей в выражение для $k$ и $\omega$, соотношением:

$$m_0 = \frac{m}{\sqrt{1+a^2}}\ . \qquad /36/$$

Функция /34/ снова имеет вид пакета, но ненормируемого. Если же соотношение между массами взять в ином виде:

$$m_0 = \frac{m}{\sqrt{1-a^2}} \qquad /37/$$

и считать, что уравнение для свободной частицы имеет вид типа /24/, то волновая функция может быть записана следующим образом:



$$\Psi = C\,\frac{e^{-sR}}{R}\,e^{i\vec{k}\vec{r}-i\omega t}\ . \qquad /38/$$

Пакеты /34/ и /38/ обладают тем свойством, что при постоянном параметре $a$ ширина пакета $s^{-1}$ тоже постоянна, поэтому нет непрерывного перехода от волновой оптики к геометрической. Чтобы такой переход имел место, необходимо предположить, что $a$ зависит от скорости. Например, пусть

$$a = a_0\,\beta\ . \qquad /39/$$

Тогда, с одной стороны, мы имеем желаемый переход, а с другой - при $\beta \to 0$ имеется переход к нерелятивистскому случаю.

Автор благодарен В.И.Лущикову, Ю.Н.Покотиловскому и А.В.Стрелкову за интерес к работе и неоднократные обсуждения, а также Г.Г.Бунатяну, Э.Капусцику и М.И.Широкову - за полезные замечания.

*Литература*

1. *Broglie L. de. Nonlinear wave mechanics. Elsevier, Amsterdam, 1960.*
2. *Ignatovich V.K. JINR, E4-8039, Dubna, 1975.*

Рукопись поступила в издательский отдел
10 мая 1977 года.