Методические заметки

УДК 530.145.61
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-3-104-112

Вывод нестационарного уравнения Шрёдингера из стационарного

Николай Александрович Винокуров

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

N.A.Vinokurov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0003-1290-4018

Аннотация

Рассмотрен вывод нестационарного уравнения Шрёдингера из стационарного. При этом вместо времени в нестационарное уравнение Шрёдингера входит координата дополнительной степени свободы – часов. Показано, что стандартное нестационарное уравнение Шрёдингера можно получить только для квазиклассических часов. Для выяснения физического смысла полученного таким образом уравнения обсуждаются различные виды часов. Кроме того, выводятся соответствующее уравнение для матрицы плотности и формулы для средних от операторов.

Ключевые слова

уравнение Шрёдингера, часы, квазиклассическое приближение

Для цитирования

Винокуров Н. А. Вывод нестационарного уравнения Шрёдингера из стационарного // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 3. С. 104–112. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-3-104-112

Derivation of the non-stationary Schrödinger equation from the stationary one

Nikolay A. Vinokurov

Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS,
Novosibirsk, Russian Federation

N.A.Vinokurov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0003-1290-4018

Abstract

A derivation of the time-dependent Schrödinger equation from the time-independent one is considered. Instead of time, the coordinate of an additional degree of freedom, the clock, is introduced into the original time-independent Schrödinger equation. It is shown that the standard time-dependent Schrödinger equation can be obtained for the semiclassical clock only. For elucidation of the physical meaning of the equation obtained in this way, various types of clocks are discussed. In addition, the corresponding equation for the density matrix and formulas for the mean values of operators are derived.

Keywords

Schrödinger equation, clock, semiclassical approximation

For citation
Vinokurov N. A. Derivation of the non-stationary Schrödinger equation from the stationary one. *Siberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 3, pp. 104–112 (in Russ.). DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-3-104-112

Введение

В статье «Квантование как задача на собственные значения» [1] Шрёдингер вывел уравнение для нахождения энергетических уровней, стационарное уравнение Шрёдингера (УШ), которое позволило описать спектр излучения атома водорода. После этого с помощью различных усовершенствований гамильтониана стационарного УШ было получено подробное описание спектров излучения и поглощения в разных условиях (например, эффектов Зеемана и Штарка, тонкой и сверхтонкой структуры линий, и др.). При этом проблема измерений при помощи макроскопических приборов практически не касается интерпретации спектров. Поэтому известные замечания [2] о неполноте квантовой механики не относятся к результатам, полученным при помощи стационарного УШ. Кроме того, спектры никак не связаны с интерпретациями квантовой механики и, в частности, с понятием вероятности. Математически это выражается в том, что спектр оператора энергии может быть найден без упоминания о волновой функции, как это и было сделано Паули и Дираком [3; 4]. В этом смысле можно сказать, что правильность стационарного УШ непосредственно подтверждена результатами экспериментов, и эта часть квантовой механики является полной.

Переход от стационарного УШ к нестационарному нетривиален (см., например, [5; 6]). Это отчасти связано с введением в уравнение времени, которое во многих отношениях отличается от координат.

В классической механике время часто заменяется координатой дополнительной степени свободы (часов), а закон движения заменяется описанием траектории в расширенном координатном пространстве, включающем координату часов. При этом динамическая задача сводится к геометрической. Это соответствует обычному восприятию времени, связанному с движением Земли и Солнца. Поэтому представляется естественным рассмотреть такой же подход в квантовой механике, т. е. ввести в стационарное УШ часы.

1. Простейшие часы

Рассмотрим стационарное уравнение Шрёдингера для изолированной консервативной системы, состоящей из некоторой подсистемы с обобщенными координатами $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots q_N)$ и гамильтонианом $H(p_1, p_2, \dots p_N, q_1, q_2, \dots q_N, q_c)$ и часов с гамильтонианом $H_c(p_c)$:

$$(H + H_c)\Psi = E\Psi\,, \tag{1}$$

где Ψ – волновая функция системы, E – полная энергия системы, а в качестве простейших часов используется нерелятивистская частица с координатой («часовой стрелки») q_c и массой M, т. е

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial q_c^2}\,. \tag{2}$$

Тогда

$$\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial q_c^2}\Psi = \left(H - E\right)\Psi. \tag{3}$$

Подстановка

$$\Psi = \psi\left(\mathbf{q}, q_c\right)\exp\frac{i\sqrt{2ME}q_c}{\hbar} \tag{4}$$

дает

$$i\hbar\sqrt{\frac{2E}{M}}\frac{\partial}{\partial q_c}\psi + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial q_c^2}\psi = H\psi, \tag{5}$$

или

$$i\hbar\sqrt{\frac{2E}{M}}\frac{\partial}{\partial q_c}\left(\psi - \frac{i\hbar}{2\sqrt{2ME}}\frac{\partial}{\partial q_c}\psi\right) = H\psi. \tag{6}$$

При

$$\left|\frac{\partial}{\partial q_c}\ln\psi\right| << \frac{2\sqrt{2ME}}{\hbar}, \tag{7}$$

т. е. при достаточно большом импульсе часов, можно пренебречь вторым членом в левой части (5) и получить нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\sqrt{\frac{2E}{M}}\frac{\partial}{\partial q_c}\psi = H\psi \tag{8}$$

с «временем»

$$t = q_c\sqrt{\frac{M}{2E}}, \tag{9}$$

соответствующим скорости движения часов $\sqrt{2E/M}$. Если в качестве часов берется частица с достаточно большой энергией, то эта скорость почти совпадает со скоростью частицы. Условие (7) значит, что локализация часов Δq_c должна существенно превышать их дебройлевскую длину волны, т. е. часы должны быть квазиклассическими («макроскопическими»). При этом полная волновая функция Ψ (4) является произведением плавной амплитуды Ψ и быстро осциллирующей функции координаты часов. Если в качестве часов использовать жесткий ротатор, то координатой q_c будет угол поворота, вместо массы надо подставить момент инерции, а скорость движения часов $\sqrt{2E/M}$ станет угловой частотой вращения ω.

2. Продольное движение как часы

Наглядным примером замены времени на координату «часов» является параксиальное движение нерелятивистской частицы с большой энергией вдоль оси z [2]. Гамильтониан имеет вид

$$H_{tot} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + U\left(x, y, z\right) + \frac{p_z^2}{2m} = H\left(p_x, p_y, x, y, z\right) + \frac{p_z^2}{2m}. \tag{10}$$

При этом вместо (3) имеем

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = \left(H - E\right)\Psi, \tag{11}$$

а замена (4) при достаточно большом продольном импульсе $\sqrt{2mE}$ дает вместо (8)

$$i\hbar\sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{\partial}{\partial z}\psi = H\psi, \tag{12}$$

что отличается от формулы (45.8) из [2] только тем, что в H входит не только потенциальная, но и кинетическая энергия поперечных степеней свободы.

Такая неявная замена времени на квазиклассическое значение продольной координаты всегда делается при описании дифракции электрона на щелях (включая модификации, например, опыт Ааронова – Бома) и опыта Штерна – Герлаха [2; 5–7]. Это естественно, так как экраны и отклоняющие магниты неподвижны, а направление движения частиц и проекция их импульса на продольную координату считаются заданными.

В теории дифракции уравнение типа (12) называется параболическим уравнением [8]. Оно выводится из трехмерного уравнения Гельмгольца для параксиального распространения коротковолнового излучения. Одним из способов его вывода является замена функции Грина уравнения Гельмгольца (поля точечного источника) $\exp\left(ik\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right)\Big/\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ на его приближение $\exp\left[ikz+ik\left(x^2+y^2\right)\big/\left(2z\right)\right]\Big/z$ при $\sqrt{x^2+y^2} << z$, т. е. использование приближения дифракции Френеля.

Заметим, что, преобразуя стационарное УШ (1), мы рассмотрели стационарную задачу рассеяния, когда заданы специфические граничные условия на удаленной замкнутой поверхности. При этом движение системы считалось параксиальным относительно координаты, выбранной в качестве часов, а «направление времени» задается выбором знака импульса степени свободы с высокой энергией, используемой в качестве часов.

3. Более общая одномерная квазиклассическая система

Приведенный выше вывод легко обобщить. Считая в уравнении (1) гамильтониан исходной системы H малым возмущением, можно записать квазиклассическое решение невозмущенного уравнения в виде

$$\left[p_0\left(q_c\right)\right]^{-1/2}\exp\left[i\int_0^{q_c} p_0\left(q\right)dq\Big/\hbar\right],$$

где $H_c\left(p_0,q_c\right)=E$, и, сделав замену

$$\Psi = \frac{\psi\left(\mathbf{q},q_c\right)}{\sqrt{p_0\left(q_c\right)}}\exp\frac{i\int_0^{q_c} p_0\left(q\right)dq}{\hbar}, \tag{13}$$

получить для

$$H_c = \sum_{n=0}^{\infty} h_n\left(q_c\right)\left(-i\hbar\right)^{2n}\frac{\partial^{2n}}{\partial q_c^{2n}} \tag{14}$$

$$\begin{gathered}H_c\Psi \approx \left\{E - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial p_0\left(q_c\right)}{\partial q_c}p_0\frac{\partial}{\partial p_c}\left[\frac{1}{p_c}\frac{\partial H\left(p_c,q_c\right)}{\partial p_c}\right]\right\}\frac{\psi}{\sqrt{p_0\left(q_c\right)}}\exp\frac{i\int_0^{q_c} p_0\left(q\right)dq}{\hbar} - \\ - \frac{i\hbar}{\sqrt{p_0\left(q_c\right)}}\exp\frac{i\int_0^{q_c} p_0\left(q\right)dq}{\hbar}\frac{\partial H\left(p_c,q_c\right)}{\partial p_c}\frac{\partial\psi}{\partial q_c}\end{gathered} \tag{15}$$

и

$$H\psi=\sqrt{p_0\left(q_c\right)}\exp\frac{-i\int_0^{q_c}p_0\left(q\right)dq}{\hbar}\left(E-H_c\right)\exp\frac{i\int_0^{q_c}p_0\left(q\right)dq}{\hbar}\frac{\psi}{\sqrt{p_0\left(q_c\right)}}\approx$$
$$\approx i\hbar\left.\frac{\partial H\left(p_c,q_c\right)}{\partial p_c}\right|_{p_c=p_0\left(q_c\right)}\frac{\partial\psi}{\partial q_c}+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial p_0\left(q_c\right)}{\partial q_c}p_0\frac{\partial}{\partial p_c}\left[\frac{1}{p_c}\frac{\partial H_c\left(p_c,q_c\right)}{\partial p_c}\right]\psi . \tag{16}$$

Если скорость часов меняется достаточно медленно, то, пренебрегая вторым членом в правой части (16), получим

$$H\psi\approx i\hbar\left.\frac{\partial H_c\left(p_c,q_c\right)}{\partial p_c}\right|_{p_c=p_0\left(q_c\right)}\frac{\partial\psi}{\partial q_c}. \tag{17}$$

Заметим, что для квадратичного по импульсу гамильтониана часов $H_c=p_c^2/\left(2M\right)+U\left(q_c\right)$ второй член в правой части (16) равен нулю и

$$H\psi\approx i\hbar\sqrt{2\frac{E-U\left(q_c\right)}{M}}\frac{\partial\psi}{\partial q_c}=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\tau}, \tag{18}$$

т. е. часы идут неравномерно, но для удобства можно ввести специальную переменную

$$\tau=\sqrt{\frac{M}{2}}\int\frac{dq_c}{\sqrt{E-U\left(q_c\right)}}. \tag{19}$$

4. Гармонический осциллятор

Для часов в виде гармонического осциллятора можно записать их гамильтониан $H_c=p_c^2/\left(2M\right)+M\omega^2q_c^2/2$ в представлении когерентных состояний (см., например, [9]).

Вводя повышающий

$$a^+=\frac{q_c\sqrt{M\omega}-ip_c/\sqrt{M\omega}}{\sqrt{2\hbar}} \tag{20}$$

и понижающий

$$a=\frac{q_c\sqrt{M\omega}+ip_c/\sqrt{M\omega}}{\sqrt{2\hbar}} \tag{21}$$

операторы, получим $\left[a,a^+\right]=1$ и

$$H_c=\frac{\hbar\omega}{2}\left(a^+a+aa^+\right)=\hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right). \tag{22}$$

Пусть α – собственное значение понижающего оператора a. Тогда в представлении когерентных состояний (α-представлении)

$$a^+=-\frac{\partial}{\partial\alpha}, \tag{23}$$

а

$$H_c = -\hbar\omega\left(\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{2}\right). \tag{24}$$

С учетом (24) вместо (3) получим

$$\hbar\omega\frac{\partial}{\partial\ln\alpha}\Psi = \left(H - E - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\Psi, \tag{25}$$

и подстановка

$$\Psi = \psi(\mathbf{q}, q_c)\alpha^{-E/(\hbar\omega)-1/2} \tag{26}$$

дает

$$\hbar\omega\frac{\partial}{\partial\ln\alpha}\psi = H\psi. \tag{27}$$

При выводе (27) предполагалось, что H не зависит от q_c. Учитывая, что в представлении Гейзенберга скорость изменения оператора a для гармонического осциллятора равна

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar}[H_c, a] = -i\omega a, \tag{28}$$

можно ввести переменную $\tau = i\ln\alpha/\omega$. Тогда (27) принимает стандартный вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\tau} = H\psi. \tag{29}$$

Уравнение (29) является точным. При этом переменная τ, описывающая состояние часов, является комплексной.

5. Смешанные состояния

При использовании проекционных операторов или, в более общем случае, матриц плотности R стационарное УШ сводится к условию коммутации

$$R(H + H_c) = (H + H_c)R, \tag{30}$$

или

$$[H, R] = -[H_c, R] \tag{31}$$

Правую часть (31) можно записать в координатном представлении [2]:

$$[H, R] = -\left\{H_c\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_c}, q_c\right) - H_c^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_c'}, q_c'\right)\right\}R(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'). \tag{32}$$

Взяв для простоты гамильтониан часов (2) и сделав аналогичную (4) замену, выделяющую быстро осциллирующий множитель,

$$R(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c') = \exp\frac{i\sqrt{2ME}(q_c - q_c')}{\hbar}R_s(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'), \tag{33}$$

получим

$$\left[H, R_s\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right)\right] =$$

$$= \exp\frac{i\sqrt{2ME}\left(q_c' - q_c\right)}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial q_c^2} - \frac{\partial^2}{\partial q_c'^2}\right)\left\{\exp\frac{i\sqrt{2ME}\left(q_c - q_c'\right)}{\hbar} R_s\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right)\right\} \approx . \quad (34)$$

$$i\hbar\sqrt{\frac{2E}{M}}\left\{\frac{\partial}{\partial q_c} R_s\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right) + \frac{\partial}{\partial q_c'} R_s\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right)\right\}$$

При $q_c = q_c'$, т. е. для диагональных по q_c элементов матрицы плотности R из (34) получаем обобщение нестационарного УШ (8) на случай смешанных состояний:

$$i\hbar\sqrt{\frac{2E}{M}}\frac{\partial}{\partial q_c}\rho\left(\mathbf{q}, \mathbf{q}', q_c\right) = \left[H, \rho\left(\mathbf{q}, \mathbf{q}', q_c\right)\right], \quad (35)$$

где $\rho\left(\mathbf{q}, \mathbf{q}', q_c\right) = R_s\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c\right)$.

6. Интерпретация полученных уравнений

В соответствии со стандартной интерпретацией волновой функции и статистического оператора, среднее значение величины, представляемой функцией $\varphi\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right)$, дается формулой (2.1) из [2]:

$$\langle\varphi\rangle = \int \varphi\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right) R\left(\mathbf{q}, q_c, \mathbf{q}', q_c'\right) d\mathbf{q}\, dq_c\, d\mathbf{q}'\, dq_c'. \quad (36)$$

Например, при $\varphi = \delta\left(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0\right)\delta\left(q_c - q_{c0}\right)\delta\left(\mathbf{q}' - \mathbf{q}_0\right)\delta\left(q_c' - q_{c0}\right)$ (36) дает вероятность нахождения системы в точке $\mathbf{q}_0$ при показаниях часов q_{c0}:

$$\langle\varphi\rangle = R\left(\mathbf{q}_0, q_{c0}, \mathbf{q}_0, q_{c0}\right) = \rho\left(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_0, q_{c0}\right). \quad (37)$$

Для получения среднего значения оператора $f(\mathbf{p},\mathrm{q})$ при показаниях часов q_c следует использовать

$$\varphi = \delta\left(\mathbf{q} - \mathbf{q}'\right)\delta\left(q_c - q_{c0}\right)\delta\left(q_c' - q_{c0}\right) f\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}, \mathbf{q}\right). \quad (38)$$

Тогда

$$\begin{aligned}\langle\varphi\rangle &= \int \delta\left(\mathbf{q} - \mathbf{q}'\right) f\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}, \mathbf{q}\right) R\left(\mathbf{q}, q_{c0}, \mathbf{q}', q_{c0}\right) d\mathbf{q}\, d\mathbf{q}' = \\ &= \int \delta\left(\mathbf{q} - \mathbf{q}'\right) f\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}, \mathbf{q}\right) \rho\left(\mathbf{q}, \mathbf{q}', q_{c0}\right) d\mathbf{q}\, d\mathbf{q}' = \mathrm{Sp}\left(f\rho\right).\end{aligned} \quad (39)$$

Заключение

Таким образом, время вводится в стационарное уравнение Шрёдингера через показания квазиклассических часов. Это, возможно, указывает на квазиклассический характер понятия времени и, в частности, на квазиклассический характер нестационарного УШ. С точки зрения стандартной квантовой механики, последнее утверждение вполне естественно, так как время не является квантовомеханической наблюдаемой.

Можно сказать, что волновая функция (4) описывает «относительное состояние» [10] подсистемы с координатами **q** при измеренном значении показаний часов q_c. При этом из-за квазиклассичности часов измерения дают результат с малой неопределенностью и заметного «ветвления миров» не происходит.

Технически приведенный вывод нестационарного УШ практически повторяет, как уже отмечалось в п. 3, вывод параболического уравнения теории дифракции из уравнения Гельмгольца. Эта аналогия поясняет его область применимости.

Список литературы

1. **Schrödinger E.** Quantisierung als eigenwertproblem // Annalen der physik. 1926. No. 79. P. 361-376.
2. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
3. **Pauli W.** Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik // Zeitschrift fur Physik. 1926. No. 36. P. 336–363.
4. **Dirac P. A. M.** The fundamental equations of quantum mechanics // Proc. of the Royal Society of London. 1926. No. A 109. Pp. 642–653.
5. **Бом Д.** Квантовая теория. М.: Наука, 1965.
6. **Peres A.** Quantum theory: Concepts and Methods. New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow: Kluwer Academic Publishers, 2002.
7. **Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.** Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1966.
8. **Вайнштейн Л. А.** Электромагнитные волны. М.: Радио и связь, 1988.
9. **Глаубер Р.** Оптическая когерентность и статистика фотонов // Квантовая оптика и квантовая радиофизика / Под ред. О. В. Богданкевича и О. Н. Крохина. М.: Мир, 1966. С. 91.
10. **Everett H. III.** «Relative State» Formulation of Quantum Mechanics // Rev. Mod. Phys. 1957. No. 29, iss. 3. P. 454–462.

References

1. **Schrödinger E.** Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen der physic*, 1926, no. 79, pp. 361–376.
2. **Landau L. D., Lifshitz E. M.** Quantum mechanics. Oxford, Pergamon Press, 1991.
3. **Pauli W.** Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik. *Zeitschrift fur Physik*, 1926, no. 36, pp. 336–363.
4. **Dirac P. A. M.** The fundamental equations of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London*, 1926, no. A 109, pp. 642–653.
5. **Bohm D.** Quantum theory. N.-Y., Prentice-Hall Inc., 1952.
6. **Peres A.** Quantum theory: Concepts and Methods. New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow, Kluwer Academic Publishers, 2002.
7. **Feynman R. P., Leighton R. B., Sands M.** The Feynman Lectures on Physics. Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1965.
8. **Vainshtein L. A.** Electromagnetic waves. Moscow, Radio and Communication, 1988.
9. **Glauber R.** In Quantum optics and electronics (Eds C. DeWitt, A. Blandin, C. Cohen-Tannoudji). New York, London, Paris, Gordon and Breach, Science Publishers, 1965.
10. **Everett H. III.** "Relative State" Formulation of Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Phys*, 1957, no. 29, iss. 3, pp. 454–462.

Информация об авторе

Николай Александрович Винокуров, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН

Information about the Author

Nikolay A. Vinokurov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Corresponding Member of RAS

Статья поступила в редакцию 05.10.2023; одобрена после рецензирования 27.10.2023; принята к публикации 27.10.2023

The article was submitted 05.10.2023; approved after reviewing 27.10.2023; accepted for publication on 27.10.2023