Физика

УДК 530.182, PACS 03.65.Ca

Об уравнении для плотности вероятности

С. В. Копылов

Кафедра физики
Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ)
ул. Б. Семёновская, д. 38, Москва, Россия, 107023

В работе рассмотрено стационарное уравнение Шрёдингера с действительным решением, зависящим от пространственных координат. Ставится задача получения дифференциального соотношения для квадрата такой волновой функции. Посредством вычленения из тождества собственно уравнения Шрёдингера формулируется дифференциальное уравнение для физически интерпретируемой величины — плотности вероятности (квадрата волновой функции стационарного уравнения Шрёдингера). В качестве примера рассмотрен одномерный случай, допускающий простое аналитическое решение. Показано, что полученное решение является квадратом решения соответствующего линейного дифференциального уравнения, как это и должно было быть по построению нелинейного дифференциального уравнения для плотности вероятности. В последнем разделе работы рассмотрен несколько более общий, не стационарный случай, — потенциал, содержащий в качестве слагаемого компонент, зависящий от времени. Потенциалы такого вида встречаются в нестационарной теории возмущений. Показано, что константа при разделении переменных остаётся действительной, и тем самым для дифференциального уравнения, соответствующего пространственным переменным, рассмотренная схема остаётся аналогичной описанной выше для стационарного уравнения.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, стационарный, плотность вероятности, действительный, нелинейный.

1. Введение

В уравнении Шрёдингера: $\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$, с Гамильтонианом $\hat{H} = -\hbar^2/2m\nabla^2 + U$, при $U = \mathrm{const}(t)$ переменные разделяются. То есть $\Psi(\bar{x},t)$ можно представить в виде $\Psi(\bar{x},t) = \varphi(\bar{x})\exp(-iEt/\hbar)$. Здесь E — полная энергия, а $\varphi(\bar{x})$ удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера: $\hat{H}\varphi = E\varphi$. При этом U становится потенциальной энергией. Ниже мы строим дифференциальное уравнение для плотности вероятности: $\varphi(\bar{x})^2$.

2. Уравнение для φ^2

Волновая функция $\Psi(\bar{x},t)$ – это новый объект, который вводится в физику квантовой теорией. Однако интерпретацию получает не сам этот объект, а квадрат его модуля $\Psi(\bar{x},t)\Psi(\bar{x},t)^* = |\Psi(\bar{x},t)|^2$, который интерпретируется как плотность вероятности. В случае стационарного уравнения Шрёдингера имеем: $|\Psi(\bar{x},t)|^2 = |\varphi(\bar{x})|^2 = \varphi(\bar{x})^2$, поскольку $\varphi(\bar{x})$ функция действительная. Поскольку, как упоминалось выше, функция $\varphi(\bar{x})$ удовлетворяет уравнению $(\hat{H} - E)\varphi = 0$, а интерпретацию получает φ^2, представляет интерес записать уравнение для φ^2.

Перепишем стационарное уравнение Шрёдингера в виде

$$((\hbar^2/2m)\Delta + (E - U))\varphi = 0.$$

Или, что тоже самое:

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 + A)\varphi = 0, \tag{1}$$

здесь $A = 2m/\hbar^2(E - U)$.

Чтобы получить уравнение для φ^2, подействуем на φ^2 оператором $\Delta + A$. Получаем:

$$(\Delta + A)\varphi^2 \equiv 2(\partial_x\varphi)^2 + 2(\partial_y\varphi)^2 + 2(\partial_z\varphi)^2 + 2\varphi(\Delta + A)\varphi - A\varphi^2. \qquad (2)$$

Поскольку согласно (1) $(\Delta + A)\varphi = 0$, то

$$(\Delta + A)\varphi^2 = 2(\partial_x\varphi)^2 + 2(\partial_y\varphi)^2 + 2(\partial_z\varphi)^2 + 2\varphi(\Delta + A)\varphi - A\varphi^2.$$

Учитывая, что

$$\partial_x(\varphi^2) = 2\varphi\partial_x\varphi \to \partial_x\varphi = \partial_x(\varphi^2)/2\varphi,$$

для предыдущего уравнения имеем

$$(\Delta + A)\varphi^2 = 1/2\varphi^2((\partial_x\varphi^2)^2 + (\partial_y\varphi^2)^2 + (\partial_z\varphi^2)^2) - A\varphi^2,$$

или

$$2W(\Delta + 2A)W - ((\partial_x)^2 + (\partial_y)^2 + (\partial_z)^2) = 0, \qquad (3)$$

где $W = \varphi^2$. Таким образом, плотность вероятности W описывается нелинейным дифференциальным уравнением (3) в отличие от линейного уравнения (1) для φ.

3. О решениях уравнения для W

Рассмотрим уравнение (3) в простейшем, т.е. одномерном случае, при $A = 0$. Имеем $\partial_x^2 W - (\partial_x W)^2/2W = 0$. Согласно [1] уравнение вида $y''_x x = (y'_x)^2\xi(x)/y$ заменой $w(x) = xy'_x/y$ приводится к уравнению Бернулли $xw'_x = w + [\xi(x) - 1]w^2$. В нашем случае $\xi(x) = 1/2$.

Уравнение Бернулли $y'_x = f(x)y + g(x)y^\alpha$ [2] заменой $u(x) = y^{1-\alpha}$ приводится к линейному уравнению вида $u'_x = (1 - \alpha)f(x)u + (1 - \alpha)g(x)$. Вводя

$$F(x) = (1 - \alpha)\int f(x)\mathrm{d}x,$$

имеем

$$y^{1-\alpha} = Ce^F \int e^{-F} g(x)\mathrm{d}x.$$

В нашем случае $\alpha = 2, f(x) = 1/x$, а $g(x) = -1/2x$. В результате имеем $W = (C_1x + C_2)^2$, где C_1 и C_2 — некоторые константы.

К этому результату можно прийти и другим путём, если в условиях постановки задачи (одномерный случай, $A = 0$) решить уравнение (1). Получаем: $\varphi = C_1x + C_2$), а по-скольку $W = \varphi^2$, то полученный выше результат становится очевидным.

Мы рассмотрели решение уравнения (3) в частном случае для иллюстрации. К вопросу о его решениях можно подойти с более общих позиций. В самом деле, выражение (2) — это тождество, верное при любой функции φ. Уравнение (1) своими решениями имеет вполне определённые функции φ. Поэтому, вычитая из тождества (2) уравнение (1), мы превращаем его в уравнение. Полученное уравнение — (3), очевидно, имеет те же решения, что и уравнение (1). В самом деле, если φ решение уравнения (1), то тождество (2) верно, в частности, и при таком φ. Исключая из тождества с таким φ соотношение, соответствующее уравнению (1) мы получаем остаток тождества, с конкретным видом функции φ. Этот остаток и есть уравнение (3). При этом этот конкретный вид функции φ оказывается решением как уравнения (1) так и уравнения (2) и наоборот.

4. Зависящий от времени потенциал, допускающий разделение переменных

Возможно рассмотреть несколько более общий вид уравнения Шрёдингера, включающий зависимость потенциала от времени. Такая ситуация типична для нестационарной теории возмущений [3]. Получаем

$$i\hbar\partial_t\Psi(\bar{r},t) = [(\hbar^2/2m)\Delta + U(\bar{r}) + V(t)]\Psi(\bar{r},t). \tag{4}$$

Представим $\Psi(\bar{r},t)$ в виде $\psi(\bar{r})\varphi(t)$, тогда имеем

$$i\hbar\partial_t\psi(\bar{r})\varphi(t) = [(\hbar^2/2m)\Delta + U(\bar{r}) + V(t)]\psi(\bar{r})\varphi(t) \tag{5}$$

или

$$\frac{[i\hbar\partial_t - V(t)](\psi(\bar{r})\varphi(t))}{\psi(\bar{r})\varphi(t)} = \frac{[(\hbar^2/2m)\Delta + U(\bar{r})](\psi(\bar{r})\varphi(t))}{\psi(\bar{r})\varphi(t)}. \tag{6}$$

Выносят и сокращая не зависящие от операторов функции, окончательно получаем

$$\frac{[i\hbar\partial_t - V(t)]\varphi(t)}{\varphi(t)} = \frac{[(\hbar^2/2m)\Delta + U(\bar{r})]\psi(\bar{r})}{\psi(\bar{r})} = E. \tag{7}$$

Здесь E — некоторая константа, как это и следует из схемы разделения переменных [4].

Таким образом, получаем два соотношения:

$$[i\hbar\partial_t - V(t)]\varphi(t) = E\varphi(t), \tag{8a}$$

$$[(\hbar^2/2m)\Delta + U(\bar{r})]\psi(\bar{r}) = E\psi(\bar{r}). \tag{8b}$$

Решая первое из них [5], имеем:

$$\frac{i\hbar\partial_t\varphi(t)}{\varphi(t)} = E + V(t) \Rightarrow i\hbar\partial_t \ln(\varphi(t)) = E + V(t). \tag{9}$$

Окончательно:

$$\varphi(t) = \varphi(0)\exp\left(\left[\int V(\tau)\mathrm{d}\tau + Et\right]/i\hbar\right). \tag{10}$$

Из этого соотношения ясно, что $Im(E) = 0$, в противном случае $\varphi(t)$ приобретает экспоненциальное поведение, что как в случае роста, так и в случае убывания экспоненты физически неприемлемо. Поскольку при этом уравнение (8b) оказывается тождественным рассмотренному нами ранее стационарному случаю, то введённая временная зависимость здесь оказывается не существенной.

5. Заключение

Предпринятое построение имело своей целью в явной форме, на уровне дифференциальных соотношений, продемонстрировать принципиальное отличие волновой функции от квадрата её модуля — плотности вероятности. С физической точки зрения представляет несомненный интерес рассмотрение в перспективе задачи не стационарной. С математической же точки зрения предпринятое построение представляет интерес как способ построения нелинейных дифференциальных уравнений, решения которых тем или иным образом соотносятся с решением линейной задачи.

Литература

1. *Зайцев В. Ф., Полянин А. Д.* Справочник по нелинейным дифференциальным уравнениям. — Москва: Физматлит, 1993. — 464 с.
2. *Зайцев В. Ф., Полянин А. Д.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. — Москва: Наука, 1997. — 304 с.
3. *Мессиа А.* Квантовая механика. — Т. 2.
4. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. — Москва: Издательство МГУ, 1999. — 799 с.
5. *Эльсгольц Л. Э.* Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. — Москва: Наука, 1969. — 424 с.

UDC 530.182, PACS 03.65.Ca

On a Probability Density Equation

S. V. Kopylov

Physics Department
MAMI Moscow State Technical University
38, str. B. Semenovskay, Moscow, Russia, 107023

The stationary Schrödinger equation depending on spatial coordinates has been considered. The problem of obtaining a differential relationship for the wave function squared was posed. By extracting Schrödinger's equation itself from this relationship a differential equation for a physically interpretable quantity, i.e. the probability density (wave function squared), has been formulated. As an example the one-dimensional case admitting a simple analytic solution was considered. The solution obtained is shown to be a solution squared of the corresponding nonlinear differential equation for the probability density. In the final section a more general non-stationary case was considered for the potential involving a time-dependent term, such potentials are found in the non-stationary perturbation theory. The constant in separating the variables remains real. Thus the procedure considered proves to be similar to that presented above for the stationary equation.

Key words and phrases: Schrödinger equation, stationary, probability density, real, nonlinear.

References

1. V. F. Zaitsev, A. D. Polyanin, Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations, Fizmatlit, Moscow, 1993, in Russian.
2. V. F. Zaitsev, A. D. Polyanin, Handbook of Linear Ordinary Differential Equations, Nauka, Moscow, 1997, in Russian.
3. A. Messiah, Quantum Mechanics, Vol. 2, Nauka, Moscow, 1979, in Russian.
4. A. N. Tikhonov, A. A. Samarsky, Equations of Mathematical Physics, Moscow State University Press, Moscow, 1999, in Russian.
5. L. E. Él'sgol'ts, Differential Equations and Calculus of Variations, Nauka, Moscow, 1969, in Russian.