

9. Новгородова М. И., Горшков А. И. и др. Новые структурные модификации самородного серебра // Докл. АН СССР, 1978, 243, – № 5. – С. 1289.
10. Zelenskij V. F., Nekludov I. M., Martynov I. S., Morozov A. N., Pistyak S. V. and Pylaiko V. F. Rad. Effects Defects in Solids. 1990, 115. 31.
11. Гусев В. А., Мартынов И. С. и др. Изменение субструктуры с отжигом в пленках серебра высокой частоты // ВАНТ. Сер. физ. и техн. высокого вакуума, 1976, 2(6). 48.
12. Серых В. П. Порошок. Комплекс программ для структурного анализа поликристаллов: Препринт ХФТИ 85-5. – М.: РЦНИИатоминформ, 1985.
13. Bykov V. N., Troyan V. A., Zdorovtseva G. G., Khaimovich V. S. Phase transformations at bombardment of thin film with ions // Phys. Stat. Sol. (a). 1975. Vol. 32. P. 53-61.
14. Belii I. M., Komarov F. F., Tishkov V. S., Yankovskii V.M. Formation of chemical compounds by ion bombardment of thin transition metal film // Phys. Stat. Sol. (a). 1978. Vol. 45. P. 343-352.
15. Дубинко В. И., Слезов В. В. и др. // ВАНТ сер. Физика радиационных повреждений и радиационное металловедение, 1985. – Вып. 1(34), 1-77.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПО МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

УДК 531.1

НЕКАНОНИЧЕСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ НА БАЗЕ РАСШИРЕНИЯ ШРЕДИНГЕРОВСКОГО ОПИСАНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Г. К. Хомяков
«Хартон», г. Харьков

В работе предлагается такой математический формализм для квантовой механики, который соответствует доктрине классической механики, т.е. описание эволюции динамических переменных механической системы и условий квантования представляется системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка по времени. Формализм имеет более тесную связь со стационарным уравнением Шредингера, чем устанавливается в квазиклассическом приближении.

1. В предлагаемом формализме динамика системы частиц описывается уравнением Гамильтона-Якоби

$$\partial S / \partial t = -H(r_i, p_i, t),$$

где S – главная функция Гамильтона, t – время, H – гамильтониан системы, r_i – вектор положения i -ой частицы, $p_i = \text{grad}_i(S)$ – ее импульс. $S(r_i, t)$ связана с уравнениями движения в явном виде соотношениями

$$\partial S / \partial x_{i0} = p_{i0}; \partial S / \partial \alpha_i = \beta_i,$$

где α_i, β_i связаны с начальными координатами и импульсами.

Поскольку рассмотрение будет касаться случаев, когда H не зависит явно от времени $S(r_i, \alpha_i, t) = W(r_i, \alpha_i, E) - E \cdot (t - t_0)$, и для характеристической функции Гамильтона W имеем уравнение

$$H(r_i, \text{grad}_i W) = E, \quad (1)$$

где $\text{grad}_i(W) = p_i$ (2) кинетический импульс i -ой частицы, E – энергия системы [1].

2 Для уравнений (1), (2) условия квантования формулируются нами с помощью тензорной системы дифференциальных уравнений

$$-h^2 \frac{d}{dr_i} \text{grad}_i Z = p_i p_i Z, \quad (3)$$

где $p_i p_i$ – диада, образованная с помощью (2), $h = h/2\pi$ – постоянная Планка. Sp (след) уравнения (3) дает для случая одной частицы

$$-h^2 \Delta Z = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \cdot Z = p^2 \cdot Z,$$

где Δ – лапласиан. Так как рассматривается случай, когда $E = p^2/2m + V$, то получаем уравнение Шредингера

$$\left(-h^2 \frac{\Delta}{2m} + V\right) \cdot Z = E \cdot Z. \quad (4)$$

Аналогично получается уравнение Шредингера для системы из N частиц, если взять сумму $\sum Sp_i$ и считать $Z = Z(r_1, r_2, \dots)$ [2].

3. Если α – совокупность параметров, фиксирующих состояние при $t=0$, то волновая функция уравнения Шредингера может быть представлена через $Z(r, \alpha)$ и некоторую амплитуду распределения $\rho(\alpha)$

$$\Psi(r) = \int \rho(\alpha) \cdot Z(r, \alpha) \cdot d\alpha. \quad (5)$$

Поэтому в рассматриваемой схеме $\Psi(r)$ описывает ансамбль частиц. Естественно потребовать, чтобы для стационарных состояний функция Z удовлетворяла таким же граничным условиям конечности, непрерывности и однозначности, каким удовлетворяет Ψ .

4. Система уравнений (1), (2), (3) это система уравнений в частных производных, но, в противоположность ситуации с уравнением Шредингера, с этой системой можно связать систему обыкновенных дифференциальных уравнений.

Уравнение Гамильтона-Якоби известным образом связано с системой уравнений Гамильтона. Для случая одной частицы:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial r}, \quad \frac{dr}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (6)$$

Для получения уравнения квантования для системы (6), соответствующего уравнению (3) для уравнения (1), введем вектор

$$P = -i \cdot h \cdot \text{grad}(\ln Z), \quad (7)$$

для которого из (3) следует

$$\frac{dP}{dr} = \frac{i}{h} \cdot [pp - PP]. \quad (8)$$

Действительно, взяв одну компоненту (7), продифференцировав ее по x_k и исключив Z , получим (8).

При движении частицы по траектории, определяемой (6), вектор P изменяется во времени в соответствии с

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i}{h} \cdot [pp - PP] \cdot v,$$

где $v = dr/dt$.

В случае $H = T + V$, где $T = p^2/2m$, имеем $p = mv$. Кроме того, так как $pp \cdot v = p \cdot (p, v)$ и $PP \cdot v = P \cdot (P, v)$, то

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i}{hm} \cdot [p^2 \cdot p - P \cdot (P, p)]. \quad (9)$$

Описание движения одной частицы во времени дается уравнениями (6) и (9). Вектор P при этом является равноправной с r и p динамической переменной

5. При преобразованиях Галилея динамические переменные в (6) и (9) ведут себя следующим образом

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r + V \cdot t, \\ p &\rightarrow p + m \cdot V, \\ P &\rightarrow P + m \cdot V. \end{aligned}$$

Так как вектор P ведет себя так же, как кинетический импульс, естественно назвать его квантовым импульсом.

6. Обобщение (6) и (9) на случай многих частиц производится приписыванием индексов.

В некоторых случаях удобно положить $P = i \cdot \Pi$ и иметь дело с системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial r}; \quad \frac{dr}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}; \\ \frac{d\Pi}{dt} &= \frac{1}{hm} \cdot [p^2 \cdot p - \Pi \cdot (\Pi, p)] \end{aligned} \quad (10)$$

7. Системы уравнений (6), (9) или (10) неудобны в том отношении, что представляющие физический интерес решения не есть

гладкие функции (напр. для одномерного случая решения имеют особенности типа полюсов в точках, где $Z=0$). Чтобы получить уравнения для гладких функций, уравнение (3) удобно разбить на два

$$-h^2 \cdot \frac{dR}{dr} = pp \cdot Z.$$

$$R = \text{grad}Z.$$

Домножив первое уравнение на элементарное смещение вдоль траектории движения и отнеся к элементарному отрезку времени, получим

$$-mh^2 \frac{dR}{dt} = p^2 \cdot p \cdot Z. \quad (11)$$

Из второго уравнения следует

$$m \cdot \frac{dZ}{dt} = (R, p). \quad (12)$$

Переменные Π , R и Z связаны соотношением $\Pi = -h \cdot R/Z$.

Обобщение (10) на случай системы многих частиц производится приписыванием индексов.

8. Система (10) есть система обыкновенных дифференциальных уравнений и имеет множество решений, непрерывно зависящих от начальных значений динамических переменных. Из всего множества решений физический интерес представляют те, которые соответствуют стационарным состояниям. В квантовой механике Бора-Зоммерфельда нужные решения выбираются правилом

$$\oint p \cdot dq = n \cdot h,$$

где интеграл вычисляется на периоде классического движения [3].

Стационарные состояния в рассматриваемом случае можно определить, потребовав, чтобы:

а) переменные R , Π , R , Z имели тот же период, что и классическое движение;

б) $\text{Re}s = \oint (\Pi, p) \cdot dt = i \cdot n \cdot h \cdot m$, n -главное квантовое число (аналог правила Бора-Зоммерфельда);

с) энергия E была действительной величиной;

д) $\text{As} = \oint (\Pi - ip) \cdot dr = 0$ - гребование согласует направление векторов Π и p ;

$$\text{e) } Ss = \text{Im} \oint (\Pi \times p) \cdot \frac{|p|}{p^2} \cdot dt = 0 \quad - \text{требование, соответствующее равенству нулю среднего потока по нормали к орбите, т.к. под интегралом аналог шредингеровского}$$

варианта, соответствующее равенству нулю среднего потока по нормали к орбите, т.к. под интегралом аналог шредингеровского

$$s = \text{Re}(\Psi^* \cdot \frac{h}{im} \cdot \text{grad}\Psi).$$

9. В рамках предложенного формализма численными методами было изучено эллиптическое P состояние двумерного атома водорода ($n=2$, $n_r=1$ по классификации Зоммерфельда [3]). Гамильтониан брался в виде (в атомных единицах)

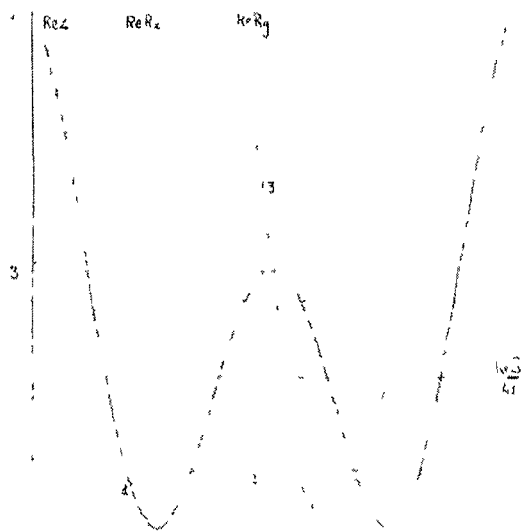
$$H = \frac{1}{2} \cdot (p_x^2 + p_y^2) - \frac{1}{r}, \quad \text{где } r = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

В процессе счета для системы уравнений (6),(11),(12) и условий a,b,d,e минимизировалась величина

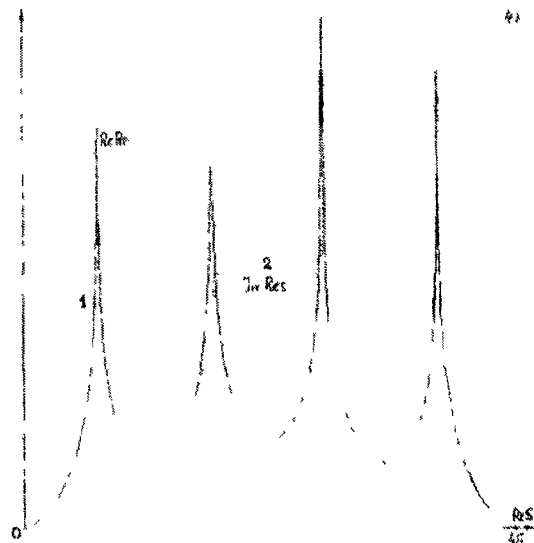
$$FM = T(R, Z) + |\text{Re}s - 4\pi i|^2 + a \cdot |\text{As}|^2 + Ss^2,$$

где функция $T(R, Z)$ обеспечивает периодичность Π, R, Z на периоде классического движения, $a > 0$ - постоянная. Действительность энергии (условие с) учитывалась при задании начальных условий. Большая ось орбиты располагалась вдоль оси x (При $t=0$ $p_x=0$, $y=0$). Начальные условия для r и p брались близкими к зоммерфельдовским и обеспечивающими возмущение по энергии $\sim +1\%$ и $\sim -1\%$, а для R - произвольными, но такими, при которых $\text{Re}s \sim 4\pi i$. Для варианта, представленного на рис.1÷4 энергия до минимизации была $E = -0.12634$ при $FM = 0.176$, после минимизации $E = -0.12496$ при $FM = 2.08 \cdot 10^{-6}$ (точное значение $E = -0.125$).

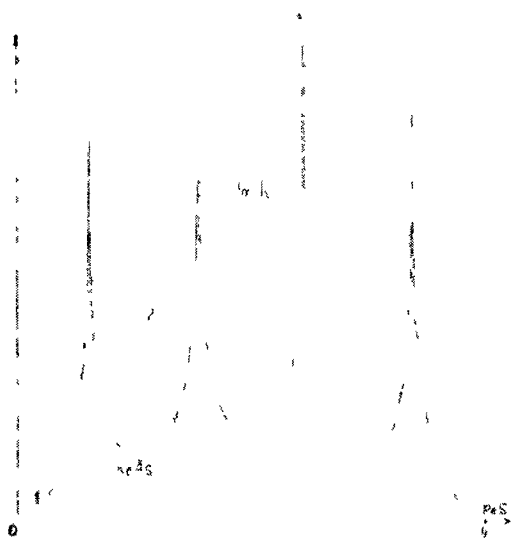
Зависимость действительных частей величин Z , R_x , R_y от действительной части классического действия на интервале $0 \div 4\pi$ показана на рис.1. Мнимые части их не дают заметного вклада в FM в силу малости. При $t=0$ принималось $Z=(1,0)$. При этом $-0.29 < \text{Re}R_x < 0.36$ и $-0.44 < \text{Re}R_y < 0.44$.



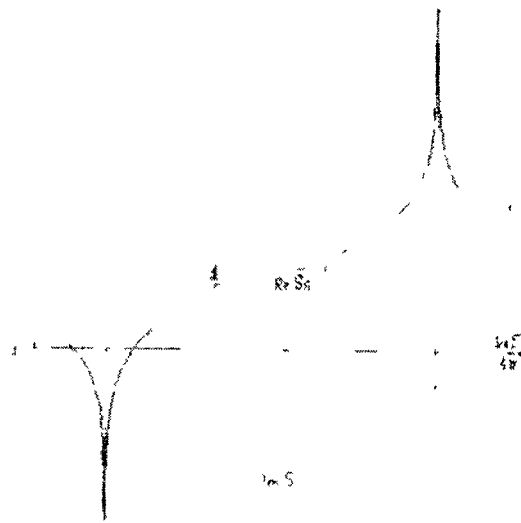
Р и с . 1. Неканоническая формулировка квантовой механики на базе расширения шредингеровского описания движения.



Р и с . 2 Неканоническая формулировка квантовой механики на базе расширения шредингеровского описания движения.



Р и с . 3 Неканоническая формулировка квантовой механики на базе расширения шредингеровского описания движения



Р и с . 4. Неканоническая формулировка квантовой механики на базе расширения шредингеровского описания движения

Res как функция верхнего предела на том же интервале показана на рис.2. Пики действительной части (1) и скачки мнимой части (2) обязаны обходам множеств $Z=0$, когда они располагаются близко к траектории. Этими же причинами обусловлены особенности в поведении функций As (рис.3) и Ss (рис.4).

Автор благодарен П. П. Матяшу за по-

мощь в проведении численных расчетов и обосуждение полученных результатов.

Библиографический список

1. Г. Гольдштейн. Классическая механика. Изд.2. – М.: Наука, 1975. – 415 с
2. А. Мессиа. Квантовая механика.– М.. Наука, 1978. – Т.1. – 480 с.
3. А. Зоммерфельд. Строение атома и спектры. М. ГТТЛ, 1956. – Т.1. – 592.