ОПЕРАЦИОННАЯ АВТОМОДЕЛЬНОСТЬ: УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

Ершков С.В.

Следуя [1], исследование квантово-механического уравнения Шредингера мы приведем в его стационарном варианте, поскольку, в случае независимости потенциала частицы (*потенциальной энергии, входящей в уравнение Шредингера*) от времени, нестационарные автомодельные решения могут быть получены из стационарных умножением на экспоненциальный множитель $e^{-\frac{i}{\hbar}\cdot E\cdot t}$, где E – полная энергия квантовой системы, $i = \sqrt{-1}$, $\hbar =$ 1,05·10^{-27} эрг·сек – постоянная Планка.

Выпишем общий вид стационарного ($\partial/\partial t = 0$) уравнения Шредингера [1] в сферической системе координат $R,\ \theta,\ \varphi,$ описывающего изменение состояния отдельно взятой частицы в рассматриваемой области пространства, в поле потенциальных сил:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = U\psi\ , \qquad (1.1)$$

- здесь введены следующие обозначения:

m – масса частицы, $m = const \neq 0;$ ψ - волновая функция частицы, полностью описывающая ее квантовомеханическое состояние в данной точке пространства, $\psi = \psi\,(R,\ \theta,\ \varphi);$ $U = (V - E),$ где V – потенциальная энергия (потенциал) частицы, E – полная энергия квантовой системы, $U = U\,(R,\ \theta,\ \varphi);$ $\hbar$ – постоянная Планка.

Кроме того, здесь:

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial R^2} + \frac{2}{R}\frac{\partial\psi}{\partial R} + \frac{1}{R^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{R^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{1}{R^2}ctg\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\ .$$

При этом значение квадрата волновой функции, согласно общепринятым представлениям, можно отождествить с вероятностью (на единицу объема) обнаружить рассматриваемую частицу в данной точке пространства. Но, согласно принципу Паули, в одном и том же состоянии, - полностью определяемом волновой функцией, - не может находиться более одной частицы. Поэтому не существует классического аналога уравнения (*1.1*).

Следуя методу Фурье разделения переменных, будем искать решение в подобном виде:

$$\begin{aligned} \psi(R,\theta,\varphi) &= \psi(R)\cdot\psi(\theta)\cdot\psi(\varphi), \\ U(R,\theta,\varphi) &= U(R)\cdot U(\theta)\cdot U(\varphi) \ . \end{aligned} \tag{1.2}$$

После подстановки представлений (*1.2*) в уравнение (*1.1*), получим дифференциальное уравнение следующего вида:

$$\left(\frac{1}{\psi(R)}\right)\cdot\frac{d^2\psi(R)}{dR^2} + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot\left(\frac{1}{\psi(R)}\right)\cdot\frac{d\psi(R)}{dR} + \left(\frac{1}{R^2\sin^2\theta}\right)\cdot\left(\frac{1}{\psi(\varphi)}\right)\cdot\frac{d^2\psi(\varphi)}{d\varphi^2} +$$
$$+ \left(\frac{1}{R^2}\right)\cdot\left(\frac{1}{\psi(\theta)}\right)\cdot\frac{d^2\psi(\theta)}{d\theta^2} + \left(\frac{ctg\theta}{R^2}\right)\cdot\left(\frac{1}{\psi(\theta)}\right)\cdot\frac{d\psi(\theta)}{d\theta} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot U(\theta)\cdot U(\varphi) \ .$$

Произведя в последнем уравнении замену $v = \psi' / \psi$ по всем аргументам $R,\ \theta$ и φ, перепишем его следующим образом

$$\begin{aligned} &\left(v^2(R)+v'(R)\right) + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot v(R) + \left(\frac{1}{R^2\cdot\sin^2\theta}\right)\cdot\left(v^2(\varphi)+v'(\varphi)\right) + \\ &+ \left(\frac{1}{R^2}\right)\cdot\left(v^2(\theta)+v'(\theta)\right) + \left(\frac{ctg\,\theta}{R^2}\right)\cdot v(\theta) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot U(\theta)\cdot U(\varphi) \end{aligned} \tag{1.3}$$

Применим теперь концепцию операционной автомодельности, формирующую новые представления о характере эволюционных преобразований [1]. Учитывая постулируемый в [1] Риккатиев характер выстраиваемых решений (*для существенных числовых инвариантов исследуемой модели* $v = u' / u$), мы можем записать:

$$\begin{aligned} \left(v^2(R) + v'(R)\right) &= f_1(R), \\ \left(v^2(\theta) + v'(\theta)\right) &= f_2(\theta), \\ \left(v^2(\varphi) + v'(\varphi)\right) &= f_3(\varphi) \,. \end{aligned} \tag{1.4}$$

После подстановки соотношений (*1.4*) в (*1.3*), получим уравнение следующего вида

$$f_1(R) + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot v(R) + \left(\frac{1}{R^2\cdot sin^2\theta}\right)\cdot f_3(\varphi) +$$
$$+ \left(\frac{1}{R^2}\right)\cdot f_2(\theta) + \left(\frac{ctg\theta}{R^2}\right)\cdot v(\theta) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot U(\theta)\cdot U(\varphi)\ .$$

В большинстве случаев, для представления функции $U = (V - E)$ допустимо осесимметричное приближение. Это означает, что $\partial U/\partial\varphi = 0$ или, в нашем случае:

$$U(\varphi) = const = C_0 \neq 0.$$

Тогда последнее уравнение приобретает следующий вид:

$$f_1(R) + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot v(R) + \left(\frac{1}{R^2\cdot sin^2\theta}\right)\cdot f_3(\varphi) + \qquad (1.5)$$
$$+ \left(\frac{1}{R^2}\right)\cdot f_2(\theta) + \left(\frac{ctg\,\theta}{R^2}\right)\cdot v(\theta) = \left(\frac{2m\cdot C_0}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot U(\theta)\ .$$

Следуя далее методу Фурье разделения переменных, из общего вида уравнения (*1.5*) и входящих в него членов, зависящих от переменной φ, мы можем сделать вывод, что (*здесь* $C_1 \neq 0$):

$$f_3(\varphi) = const = C_1 \qquad (1.6)$$

В этом случае, уравнение (*1.5*) перепишется следующим образом:

$$f_1(R) + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot v(R) + \left(\frac{C_1}{R^2\cdot sin^2\theta}\right) + \left(\frac{1}{R^2}\right)\cdot f_2(\theta) + \left(\frac{ctg\theta}{R^2}\right)\cdot v(\theta) = \left(\frac{2m\cdot C_0}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot U(\theta)\ ,$$

или

$$U(\theta)\cdot\left(\frac{2m\cdot C_0}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot R^2 - \left(R^2\cdot f_1(R) + 2R\cdot v(R)\right) = \left(\frac{C_1}{sin^2\theta}\right) + f_2(\theta) + ctg\theta\cdot v(\theta)\ .$$

Мы видим, что в последнем уравнении переменные могут разделиться только в двух случаях: 1) $U(\theta) = const = C_2 \neq 0$; 2) $U(R)\cdot R^2 = const = C_3 \neq 0.$

Случай 2) подробно рассматривался в [1]; при этом зависимость $U(R) = C_3 / R^2$ означает, что потенциальная энергия частицы в данной точке пространства V

отличается от полной энергии квантовой системы E на некий довесок ~ ($1/R^2$), который может быть ассоциирован (связан) с воздействием на частицу поля центробежных сил.

Рассмотрим более подробно первый вариант. Без ограничения общности, можно сказать что условие $U(\theta) = const = C_2$ означает, что нами рассматривается случай стационарного, *сферически симметричного* поля потенциальной энергии (потенциала) частицы V, а также поля полной энергии квантовой системы E.

В этом случае последнее уравнение приобретает следующий вид:

$$\left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\cdot R^2 - \left(R^2\cdot f_1(R) + 2R\cdot v(R)\right) = \left(\frac{C_1}{sin^2\theta}\right) + f_2(\theta) + ctg\theta\cdot v(\theta),$$

или

$$-R^2\cdot\left(-\left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right)\cdot U(R) + f_1(R)\right) - 2R\cdot v(R) = \left(\frac{C_1}{sin^2\theta}\right) + f_2(\theta) + ctg\theta\cdot v(\theta)\ .$$

Таким образом, из общего вида этого уравнения и входящих в него членов, зависящих от переменных R и θ, можно сделать следующий вывод

$$\begin{aligned}
&-R^2\cdot\left(-\left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right)\cdot U(R) + f_1(R)\right) - 2R\cdot v(R) = const = \tau \\
&\left(\frac{C_1}{sin^2\theta}\right) + f_2(\theta) + ctg\theta\cdot v(\theta) = const = \tau\ .
\end{aligned} \qquad (1.7)$$

Теперь, выразив функции $f_1(R)$ и $f_2(\theta)$ из соотношений (1.7) и подставив их в (1.4), получим:

$$\left(v^2(R) + v'(R)\right) = f_1(R) = -\frac{\tau}{R^2} - \frac{2v(R)}{R} + \left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right)\cdot U(R),$$

$$\left(v^2(\theta) + v'(\theta)\right) = f_2(\theta) = \tau - ctg\,\theta\cdot v(\theta) - \left(\frac{C_1}{sin^2\theta}\right)\ .$$

Или, переписав несколько иначе:

$$\begin{aligned}
&v'(R) = -v^2(R) - \left(\frac{2}{R}\right)\cdot v(R) - \left(\frac{\tau}{R^2} - \left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\right), \\
&v'(\theta) = -v^2(\theta) - ctg\,\theta\cdot v(\theta) + \left(\tau - \frac{C_1}{sin^2\theta}\right)\ .
\end{aligned} \qquad (1.8)$$

Итак, как и предполагалось, мы получили систему из двух уравнений типа Риккати [2] относительно функций $v = \psi' / \psi$ по аргументам $R,\ \theta$.

Это означает [3-4], что искомое решение существует непрерывным образом только в определенном диапазоне значений соответствующего аргумента, или, другими словами, претерпевает разрыв.

Последний результат может быть ассоциирован с возможностью проявления (возникновения) мгновенного перехода частицы из одного квантовомеханического состояния – в другое, что связано со скачкообразным, Риккатиевого типа изменением волновой функции.

Совершив обратный переход к функции ψ по аргументам $R,\ \theta$ в соотношениях (*1.8*), получим

$$\psi''(R) + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot\psi'(R) + \left(\frac{\tau}{R^2} - \left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right)\cdot U(R)\right)\cdot\psi(R) = 0\,,$$

$$\psi''(\theta) + ctg\,\theta\cdot\psi'(\theta) + \left(\frac{C_1}{\sin^2\theta} - \tau\right)\cdot\psi(\theta) = 0\,. \qquad (1.9)$$

В общем случае ($\tau \neq 0,\ U \neq 0$), первое из уравнений (*1.9*) является уравнением Бесселя и его решения выражаются через циллиндрические функции (*см.* [2], *пример* 2.162, 1а), а второе уравнение – это уравнение Лежандра ([2], *пример* 2.240).

При этом предполагается, что для функции $U\ (R) = V(R) - E(R)$ её составляющие:

$$V(R) \sim R^{m-2}\,, \quad E(R) \sim R^{-2}\,, \qquad (1.10)$$

- где $m \neq 0$. Это предположение оправдано с физической точки зрения, поскольку в большинстве случаев $V(R) \sim 1/R$ (*как например, в случае гравитационного поля или поля кулоновских сил*), а полная энергия квантовой системы соответствует случаю набора квантовых уровней энергии гармонического осциллятора: $E(R) \sim 1/R^2$

Кроме того, в [2] утверждается что решение первого из уравнений (*1.9*) может быть выражено через элементарные трансцендентные функции в том и только в том случае, когда $U(R) = 0$ или когда ($n = 0, 1, 2, 3, \ldots$):

$$\tau = 1/4 - (1/4)\cdot(2n+1)^2$$

Выбрав в качестве базовой модели случай соответствия полной энергии квантовой системы набору энергетических уровней гармонического осциллятора (*в сферической системе координат*):

$$E(R) = \frac{\left((2n+1)^2 - 1\right)}{4R^2},$$

- а также выбрав константы C_0 и C_2 таким образом, что:

$$\left(\frac{2m\cdot C_0\cdot C_2}{\hbar^2}\right) = 1,$$

- в итоге получим из (*1.9*)

$$\psi''(R) + \left(\frac{2}{R}\right)\cdot\psi'(R) - V(R)\cdot\psi(R) = 0,$$

или (*при соответствующем выборе константы в представлении функции* $V(R)$):

$$R^2\cdot\psi''(R) + 2R\cdot\psi'(R) + R^m\cdot\psi(R) = 0,$$

- при учете соотношения (*1.10*).

Последнее уравнение является *классическим* случаем уравнения Бесселя и его решения выражаются через циллиндрические функции [2] ($m \neq 0$):

$$\psi(R) = \left(\frac{1}{R^{1/2}}\right)\cdot Z_\nu\left(\frac{2}{m}\cdot R^{\frac{m}{2}}\right), \quad \nu = \frac{1}{m}.$$

Для определенности, положим $m = 1$, или, другими словами: $V(R) \sim - 1/R$. Тогда решение первого из уравнений (*1.9*) запишется следующим образом:

$$\psi(R) = \left(\frac{1}{R^{1/2}}\right)\cdot Z_1\left(2\sqrt{R}\right).$$

Что касается функции $v = \psi'/\psi$ по аргументу φ, то исходя из соотношений (*1.4*) и (*1.6*), мы можем записать:

$$v'(\varphi) + v^2(\varphi) = C_1.$$

Или, с учетом условия ограниченности решения для всех значений $\varphi \in [0, 2\pi \cdot n]$, $n \in N$:

$$\psi''(\varphi) - C_1 \cdot \psi(\varphi) = 0,$$
$$\psi(\varphi) = C_{01} \cdot \cos\left(\varphi \cdot \sqrt{|C_1|}\right) + C_{02} \cdot \sin\left(\varphi \cdot \sqrt{|C_1|}\right).$$

где $C_1 < 0$.

Как уже отмечалось выше, значение квадрата волновой функции можно отождествить с вероятностью (на единицу объема) обнаружить рассматриваемую частицу в данной точке пространства. Это означает, что интеграл квадрата волновой функции по всему объему рассматриваемого пространства должен быть равен единице. Последнее требование накладывает определенные ограничения на выбор констант рассматриваемого решения.

При этом, в случае расходимости интегралов по переменным R, θ или φ, необходимо произвести нормировку волновой функции частицы ψ на δ–функцию Дирака.

Необходимо также отметить, что в основу данной работы, демонстрирующей чисто счетные, практические преимущества метода операционной автомодельности в моделировании эволюционных процессов [1] положена идея энтропийной параметризации эволюционных процессов, высказывавшаяся в работе Александра Петровича Левича [5].

Список использованной литературы:

1. Ершков С.В. Параметрическая коррекция представлений о характере эволюционных преобразований // Опубликовано на сайте Института исследований природы времени: http://www.chronos.msu.ru/RREPORTS/yershkov_parametricheskaya.pdf
2. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям М.: Наука. 1971.
3. Ершков С. В., Щенников В. В. Об автомодельных решениях системы полных уравнений Навье-Стокса для случая осесимметричных закрученных течений

вязкого сжимаемого газа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2001. Т. 41. № 7. С. 1117 – 1124.

4. Быркин А.П., Ершков С.В., Щенников В.В. Конически автомодельные решения уравнений Максвелла с кручением электро-магнитного поля // Материалы 3-его совещания по магнитной и плазменной аэродинамике в аэро-космических приложениях. М.: Институт высоких температур РАН. Апрель 2001. С.377–380.
5. Левич А.П. Метаболический и энтропийный подходы в моделировании времени // Опубликовано на сайте Института исследований природы времени: http://www.chronos.msu.ru/RREPORTS/levich_metabolichesky/levich_metabolichesky.htm