УДК 539.12

Об одном специальном решении уравнения Шредингера

Ю. И. Сорокин

Кафедра экспериментальной физики,
Российский университет дружбы народов,
Россия, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6

Приведена волновая функция частицы, ускоряемой постоянной силой.

Основная задача квантовой механики — задача рассеяния: частицы с первоначальной, в момент t_a, функцией распределения по координатам $\Phi_a(x_a, y_a, z_a, t_a)$ рассеиваются на каком-то рассеивателе. Требуется определить распределение в момент $t_b : \Phi_b(r_b, t_b)$.

Квантовая механика может быть компактно изложена, если принять постулат: волновая функция $\Psi(r, t)$, связанная с функцией распределения $\Phi(r, t)$ соотношением [2, с. 21]

$$\Phi = |\Psi|^2, \tag{1}$$

подчиняется уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \mathrm{H}\Psi,$$

где H — гамильтониан (оператор энергии) системы частица-рассеиватель.

Если H не зависит явно от времени, то при формальном интегрировании уравнения Шредингера легко получить:

$$\Psi_b = \exp[-iH(t_b - t_a)/\hbar]\Psi_a.$$

Интегральное представление экспоненциального оператора получается разложением Ψ_a по ортонормированным собственным функциям оператора H

$$H\phi_i = E_i\phi_i,$$

$$\Psi_a(r) = \sum_i \langle\phi_i \mid \Psi_a\rangle\phi_i(r),$$

$$\Psi_a(r) = \sum_i \langle\phi_i|\Psi_a\rangle\phi_i(r),$$

$$\Psi_b = \Psi(r_b, t_b) = \sum_i \langle\phi_i \mid \Psi_a\rangle\phi_i(r_b)\exp[-iE_i(t_b - t_a)/\hbar].$$

Если Ψ_a совпадает с собственной функцией ϕ_i гамильтониана H, то в сумме остается лишь один член

$$\Psi_b = \Psi(r_b, t_b) = \sum_i \langle\phi_i \mid \Psi_a\rangle\phi_i(r_b)\exp[-iE_i(t_b - t_a)/\hbar].$$

$$\Psi_b = \phi_i(r_b)\exp[-iE_i(t_b - t_a)/\hbar].$$

В соотношении

$$\Psi_b = \Psi(r_b, t_b) = \int\limits_V \sum \phi_i^*(r_a)\Psi_a(r_a, t_a)\phi_i(r_b)\exp[-iE_i(t_b - t_a)/\hbar]\, dr_a\,,$$

где V — объем, в котором может находиться частица в момент t_a, можно выделить сумму

$$G = \sum_i \phi_i(r_b)\phi_i^*(r_a)\exp[-iE_i(tb - t_a)/\hbar]\,, \tag{2}$$

которая, после умножения на ступенчатую функцию Хэвисайда ($\Theta(T) = 1$, если $T \geqslant 0$, $\Theta(T) = 0$, если $T < 0$, $T = t - t_0$), становится функцией Грина (функцией точечного источника) уравнения Шредингера

$$(i\hbar\,\partial/\partial t - H)(G\Theta) = i\hbar\delta(t - t_a)\delta(r - r_a)\,. \tag{3}$$

Соотношение

$$\Psi_b = \int\limits_V G(r_b, t_b, r_a, t_a)\Psi_a(r_a, t_a)\, dr_a$$

сохраняет свой вид и в случае, когда H зависит от времени, хотя сама функция Грина, оставаясь решением уравнения (3), уже не имеет вида суммы произведений собственных функций оператора энергии (поскольку не существует стационарных состояний).

Фейнман в [3] с помощью интегрирования по траекториям отыскал функцию Грина для случая квадратичной зависимости энергии от координат и скоростей (в нерелятивистском приближении). Им выведено также соотношение (совпавшее с уравнением Дайсона) для функции Грина G гамильтониана $H = H_0 + V$, если известна G_0-функция Грина гамильтониана H_0

$$G(x, t, x_0, t_0) = G_0(x, t, x_0, t_0) - \frac{i}{\hbar}\int G_0(x, t, x', t')V(x', t')G(x', t', x_0, t_0)\, dx'\, dt'\,,$$

которое сразу позволяет получить амплитуду перехода $\langle f|G|i\rangle$ из состояния $\psi_i(x_0, t_0)$ в состояние $\psi_f(x, t)$, [3, с. 182]. При этом не всегда необходимо решать уравнение Дайсона. Иногда достаточно знать свойства решения. В частности, если есть основания полагать, что

$$G|i\rangle \approx G_0|i\rangle = \psi_i(x, t) = \phi_i(x)\exp(-iE_i t/\hbar)$$

и

$$\langle f|G \approx \langle f|G_0 = \psi_f^*(x_0, t_0) = \phi_f^*(x_0)\exp(iE_f t_0/\hbar)\,,$$

то справедливо борновское приближение

$$\langle f|G|i\rangle = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar}\int\limits_V \int\limits_0^T \phi_f^*(x)V(x, t')\phi_i(x)\exp[-i(E_i - E_f)t'/\hbar]\, dt'\, dx\,. \tag{4}$$

Условие применимости борновского приближения $G|i\rangle \approx G_0|i\rangle$ не противоречит общепринятому: $\Psi(x, t) \approx \psi_i(x, t)$, но не совпадает с ним.

Функции Грина, полученные Фейнманом, имеют вид произведения медленно меняющейся части на экспоненту от действия, деленного на $\hbar$.

Практически медленно меняющаяся часть подбирается так, чтобы получившееся произведение удовлетворяло уравнению Шредингера (для функции Грина, т. е. (3)).

В частности, Фейнманом получена функция Грина для одномерного движения в поле постоянной силы F

$$G(x_b, T, x_a, 0) = \sqrt{m/(2\pi i\hbar T)}\exp(iS/\hbar)\,, \tag{5}$$

$$T = t_b - t_a \geqslant 0\,,$$

$$S = \int_0^T L\,dt = m(x_b - x_a)^2/2T + FT(x_b + x_a)/2 - F^2T^3/24m\,. \tag{6}$$

Здесь, в последнем слагаемом, у Фейнмана имеется досадная опечатка (напечатано $FT^3/24$) [4].

Полученное Фейнманом соотношение нагляднее, чем запись с помощью интеграла от произведений собственных функций оператора энергии, которые не выражаются через элементарные функции. Его можно использовать как приближение точной волновой функции электрона, ускоренного электрическим полем $E = F/e$ (например, электронной пушки).

Если начальное распределение покоящегося электрона имеет вид гауссианы

$$\Phi_0(\mathrm{x}_0, 0) = (2\pi\Delta^2)^{-1/2}\exp(-x_0^2/2\Delta^2)\,,$$

то в поле постоянной силы распределение будет определяться Ψ-функцией

$$\Psi(x, T) = \int G(x, T, x_0, 0)(2\pi\Delta^2)^{-1/4}\exp(-x_0^2/4\Delta^2)\,dx_0 =$$

$$= \int\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T\sqrt{2\pi\Delta^2}}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m(x - x_0)^2}{2T} + \frac{FT(x + x_0)}{2} - \frac{F^2T^3}{24m}\right] - \frac{x_0^2}{4\Delta^2}\right\}dx_0 =$$

$$= (2\pi)^{-1/4}\sqrt{\frac{\Delta}{\frac{i\hbar T}{2m} + \Delta^2}}\exp\left[-\frac{(x - FT^2/2m)^2}{4\Delta^2 + 2i\hbar T/m} + \frac{iFTx}{\hbar} - \frac{iF^2T^3}{6m\hbar}\right].$$

Видно, что у гауссианы появился множитель: $\exp(iFTx/\hbar) = \exp(ipx/\hbar)$, который соответствует волне Де-Бройля. Сама гауссиана расплывается, но ее центр движется по классической траектории, в соответствии со вторым законом Ньютона [2, с. 66], с классическим ускорением и с классической скоростью $v = v(T) = FT/m$, что соответствует групповой скорости электрона [2, с. 19]. Результат легко обобщить на трехмерный случай.

Если к моменту T_a электрон прошел ускоряющий промежуток шириной $x_{a0} = FT_a^2/2m$, то дальнейшая эволюция волновой функции электрона определяется гамильтонианом свободного движения $H = -[\hbar^2/(2m)]\partial^2/\partial x_b^2$ и его функцией Грина, в которую перейдет выражение (5), (6) при $F = 0$, и которую, в данном случае вновь запишем в виде суммы (интеграла) произведений собственных функций этого гамильтониана

$$G = \int\exp[ik(x_b - x_a)]\exp[-iEk(t_b - T_a)/\hbar]\,dk/2\pi.$$

Начиная новый отсчет от x_{a0} и T_a, обозначив $\delta = [\Delta^2 + (\hbar T_a/2m\Delta)^2]^{1/2}$, $k_a = mv_a/\hbar = FT_a/\hbar$ и отбрасывая теперь уже постоянный сомножитель

$\exp[-iF^2T_a^3/(6m\hbar)]$, получим

$$\Psi(x,T) = \int G(x,T,x_a,0)(2\pi\delta^2)^{-1/4}\exp(-x_a^2/4\delta^2 + ik_a x_a)\,dx_a =$$

$$= \int\int \exp[ik(x-x_a)]\exp\left(-\frac{iE_kT}{\hbar}\right)(2\pi\delta^2)^{-1/4}\exp\left(-\frac{x_a^2}{4\delta^2} + ik_a x_a\right)dx_a\,dk/2\pi =$$

$$= (2\pi\delta^2)^{-1/4}\int \exp\left(ikx - \frac{iE_kT}{\hbar}\right)\int \exp\left[-\frac{x_a^2}{4\delta^2} + i(k_a - k)x_a\right]dx_a\,dk/2\pi =$$

$$= (2\pi\delta^2)^{-1/4}(4\pi\delta^2)^{1/2}\int \exp\left(ikx - \frac{iE_kT}{\hbar}\right)\exp\left[-(k_a-k)^2\delta^2\right]dk/2\pi\,.$$

Таким образом, дисперсия импульсов волн де-Бройля связана с дисперсией координат $\delta^2 = [\Delta^2 + (\hbar T_a/2m\Delta)^2]$ соотношением неопределенности Гейзенберга [1, с. 68]

$$(k_a - k)^2\delta^2 = 1/4\,.$$

Если взять интеграл по импульсам (учитывая, что $E_k = k^2\hbar^2/2m$), то можно получить соотношение, аналогичное предыдущему (минимизирующий волновой пакет, [5, с. 72])

$$\Psi(x,T) = (2\pi)^{-1/4}\sqrt{\frac{\delta}{i\hbar T/2m + \delta^2}}\exp\left[-\frac{(x-v_aT)^2}{4\delta^2 + 2i\hbar T/m} + \frac{imv_ax}{\hbar} - \frac{ik_a^2\hbar T}{2m}\right].$$

В соответствии с (1) имеем функцию распределения

$$\Phi = |\Psi|^2 = \left\{2\pi\left[\left(\frac{\hbar T}{2m\delta}\right)^2 + \delta^2\right]\right\}^{-1/2}\cdot\exp\left\{-\frac{(x-v_aT)^2}{2\left[\left(\frac{\hbar T}{2m\delta}\right)^2 + \delta^2\right]}\right\}.$$

Видно, что центр распределения продолжает движение по инерции с теперь уже постоянной скоростью v_a, а само распределение продолжает расплываться.

Литература

1. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Наука, 1974. — 752 с.
2. *Давыдов А. С.* Квантовая механика. Физматгиз. — М., 1963. — 748 с.
3. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. / Пер. с англ. — М.: Мир, 1968. — 382 с.
4. *Сорокин Ю. И.* Функция Грина, абсолютная величина напряженности электрического поля фотона и длина фотонного цуга // Вестник РУДН: Серия «Физика». — 2002. — № 10(1). — С. 126–128.
5. *Шифф Л.* Квантовая механика. — М.: Иностранная литература, 1959. — 473 с.

UDC 539.12

On a Special Solution to Shrödinger Equation

Yu. I. Sorokin

Department of Experimental Physics,
Peoples' Friendship University of Russia,
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russia

It has been obtained the wave function of particle, accelerated by constant force.