01

Каноническое усреднение уравнения Шредингера

© А.Г. Чирков

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 13 июня 2001 г.)

Представление уравнения Шредингера в виде классической гамильтоновой системы позволяет построить единую теорию возмущений как в классической, так и в квантовой механике, основанную на теории канонических преобразований, а также получить асимптотические оценки близости точного и приближенного решений уравнений Шредингера.

Основным предметом иследования в нерелятивистской квантовой теории является уравнение Шредингера [1]

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(q,t)}{\partial t}=\hat{H}\Psi(q,t), \tag{1}$$

где $i^2=-1$; $\hbar=1.054\cdot10^{-27}$ erg·s — постоянная Планка; $q=(q_1,q_2,\ldots,q_n)$ — вообще говоря, точка конфигурационного пространства соответствующей классической системы; t — время; $\Psi(q,t)$ — комплекснозначная функция с интегрируемым квадратом модуля; $\hat{H}$ — самосопряженный (симметрический) оператор, действующий в гильбертовом пространстве.

Уравнение Шредингера (1) должно решаться при соответствующих начальном $\Psi(q,0)=\Psi_0(q)$ и некоторых граничных условиях.

Случай, изучаемый в теории возмущений, возникает при возможности представления оператора $\hat{H}$ в виде суммы

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\varepsilon\hat{V},\quad 0<\varepsilon\ll 1 \tag{2}$$

двух самосопряженных операторов, причем соответствующая задача (1) для оператора $\hat{H}_0$ предполагается точно решаемой (порождающее приближение), а второй оператор мал в некотором смысле (возмущение) [2].

Большинство физически интересных задач оказываются при этом математически некорректными, так как операторы возмущения обычно не являются ограниченными и даже самосопряженными. Последнее связано с тем, что физики практически никогда не различают понятия самосопряженного и симметрического операторов. Это ведет к тому, что область задания оператора в гильбертовом пространстве остается неясной, что не позволяет применить методы спектральной теории [2,3]. В силу этого при практических расчетах трудно указать условие применимости теории возмущений и дать оценку разности между точным и приближенным решением.

Однако, оказывается возможным приведение уравнения Шредингера к хорошо изученному в нелинейной механике виду классической гамильтоновой системы, позволяющему применить строго обоснованные и более доступные по технике методы классической механики для его исследования. Рассмотрим уравнение (1) с операторами Шредингера (2), т.е. задачу

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(q,t)}{\partial t}=(\hat{H}_0+\varepsilon\hat{V})\Psi(q,t),$$
$$\Psi(q,0)=\Psi_0(q), \tag{3}$$

где оператор $\hat{H}_0$ не зависит от времени, ε — формальный малый параметр.

Наряду с задачей (3) рассматривается порождающее приближение, получающееся из (3) при $\varepsilon=0$,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi^0(q,t)}{\partial t}=\hat{H}_0\Psi^0(q,t),\quad \Psi^0(q,0)=\Psi_0(q). \tag{4}$$

Общее решение задачи (4), найденное методом Фурье, может быть представлено в виде (спектр для простоты предполагается дискретным)

$$\Psi^0(q,t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n^0\psi_n^0(q)\exp(-i\omega_n^0 t),$$

$$c_n^{(0)}=\int\Psi_0(q)\psi_n^{0*}(q)dq,\quad \omega_n^0=E_n^0/\hbar, \tag{5}$$

где $\psi_n^0(q)$, E_n^0 являются собственными функциями и собственными значениями задачи

$$\hat{H}_0\psi_n^0(q)=E_n^0\psi_n^0(q), \tag{6}$$

звездочкой обозначено комплексное сопряжение.

Из самосопряженности оператора $\hat{H}_0$ следует, что для $\Psi(q,t)\in L^2$ справедливо разложение

$$\Psi(q,t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(t)\psi_n^0(q)\exp(-i\omega_n^0 t). \tag{7}$$

Подставляя разложение (7) в (3), находим уравнения для коэффициентов разложения $c_n(t)$, $c_n^*(t)$

$$\dot{c}_n(t)=-i\varepsilon\sum_{m=0}^{\infty}v_{nm}c_m(t)\exp(-i\omega_{mn}^0 t),$$

$$\dot{c}_n^*(t)=i\varepsilon\sum_{m=0}^{\infty}v_{mn}c_m^*(t)\exp(i\omega_{mn}^0 t), \tag{8}$$

$$v_{mn}(t) = \frac{1}{\hbar}\int \psi_m^{0*}(q)\hat{V}(q,t)\psi_n^0(q)dq, \quad (9)$$

где точкой обозначена производная по времени, $\omega_{mn}^0 = \omega_m^0 - \omega_n^0$.

Система уравнений (8) оказывается гамильтоновой (в классическом смысле) с функцией Гамильтона

$$\varepsilon H_1(c, c^*, t) = -i\varepsilon \sum_{n,m=0}^{\infty} v_{nm} c_n^* c_m \exp(i\omega_{nm}^0 t), \quad (10)$$

описывающей классическую распределенную систему с бесконечным числом внутренних резонансов. Гамильтоновость обеспечивается эрмитовостью матрицы v_{nm} (самосопряженностью оператора возмущения). Выделяя главный резонанс $\omega_n^0 = \omega_m^0$, функцию Гамильтона (10) можно представить в виде

$$\varepsilon H_1(c, c^*, t) = -i\varepsilon v_{nn} c_n c_n^* - i\varepsilon {\sum_{n,m=0}^{\infty}}' v_{nm} c_n^* c_m \exp(i\omega_{nm}^0 t). \quad (11)$$

Переходя от переменных c_n, c_n^* к вещественным переменным действие–угол I_n, ψ_n, по формулам

$$c_n = \sqrt{I_n}\exp(-i\psi_n), \quad I_n = c_n c_n^*,$$

$$c_n^* = \sqrt{I_n}\exp(i\psi_n), \quad \psi_n = -\mathrm{arctg}\,\frac{(c_n - c_n^*)}{i(c_n + c_n^*)} \quad (12)$$

систему (8) можно представить в виде

$$\dot{I}_n = \varepsilon 2 {\sum_{m=0}^{\infty}}' \sqrt{I_n I_m}\,\mathrm{Im}\,\{v_{nm}\exp[-i(\psi_m - \psi_n + \omega_{mn}^0 t)]\},$$

$$\dot{\psi}_n = \varepsilon v_{mn} + \varepsilon {\sum_{m=0}^{\infty}}' \sqrt{\frac{I_n}{I_m}} \times \mathrm{Re}\,\{v_{nm}\exp[-i(\psi_m - \psi_n + \omega_{mn}^0 t)]\}, \quad (13)$$

а функцию Гамильтона (12) в виде

$$\varepsilon H_1(I, \psi, t) = \varepsilon \sum_{m,n=0}^{\infty} v_{mn}\sqrt{I_n I_m} \times \exp[-i(\psi_m - \psi_n + \omega_{mn}^0 t)], \quad (14)$$

где штрих у знака суммы означает, что выделен главный резонанс, т. е. слагаемые с $n = m$.

Системы (8) и (13) не содержат постоянной Планка в явном виде и являются классическими гамильтоновыми системами с бесконечным числом внутренних резонансов. Методы их исследования прекрасно разработаны в трудах Н.Н. Боголюбова, Ю.А. Митропольского, Е.А. Гребеникова, В.И. Арнольда и их учеников [4–8]. В частности, оценка по норме разности точного и приближенного решений и условий применимости метода усреднения для этих систем дается теоремой Ф.С. Лося [4,9], являющейся обобщением теоремы Н.Н. Боголюбова для случая бесконечномерного координатного гильбертова пространства.

Используя метод усреднения, можно построить приближенное решение систем (8), (13), аппроксимирующее точное с любой наперед заданной точностью.

Каноническая форма систем (8), (13) позволяет провести переход к эволюционным уравнениям, оперируя только функциями Гамильтона (10), (11) или (14), т. е. вычисляя усредненную функцию Гамильтона. Например, для (10), (11) второе приближение $\bar{H}^{(2)}$ для усредненного гамильтониана строится по формулам

$$\bar{H}^{(2)}(\bar{c}, \bar{c}^*) = \varepsilon \bar{H}_1(\bar{c}, \bar{c}^*) + \varepsilon^2 \bar{H}_2(\bar{c}, \bar{c}^*),$$

$$\bar{H}_1 = \langle H_1 \rangle, \quad \bar{H}_2 = -\left\langle \frac{\partial \tilde{H}_1}{\partial \bar{c}^*}\,\frac{\partial\{H_1\}}{\partial \bar{c}} \right\rangle, \quad (15)$$

где $\bar{c}_n$, $\bar{c}_n^*$ — эволюционные составляющие переменных c_n, c_n^* и использованы обозначения

$$\langle f \rangle = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(\bar{c}, \bar{c}^*, t)dt,$$

$$\tilde{f}(\bar{c}, \bar{c}^*, t) = f(\bar{c}, \bar{c}^*, t) - \langle f \rangle,$$

$$\{f\} = \int \tilde{f}(\bar{c}, \bar{c}^*, t)dt, \quad (16)$$

причем появляющаяся при вычислении последней квадратуры произвольная функция медленных переменных $\bar{c}$, $\bar{c}^*$ положена равной нулю.

Заметим, что $\bar{H}$ является интегралом движения усредненных уравнений, т. е. адиабатическим инвариантом [7,8].

Первое приближение $\bar{c}_n^{(1)}$ для коэффициентов разложения c_n находится по формуле $c_n^{(1)} = \bar{c}_n$, где $\bar{c}_n$ удовлетворяет уравнениям

$$\dot{\bar{c}}_n = \varepsilon \frac{\partial \bar{H}_1}{\partial \bar{c}_n^*}. \quad (17)$$

Второе приближение $c_n^{(2)}$ для коэффициентов разложения c_n вычисляется по формулам

$$c_n^{(2)} = \bar{c}_n + \varepsilon \frac{\partial\{H_1\}}{\partial \bar{c}_n^*}, \quad (18)$$

где второе приближение для эволюционных составляющих $\bar{c}_n^{(2)}$ находится из уравнений

$$\dot{\bar{c}}_n = \varepsilon \frac{\partial \bar{H}_1}{\partial \bar{c}_n^*} + \varepsilon^2 \frac{\partial \bar{H}_2}{\partial \bar{c}_n^*}. \quad (19)$$

Таким образом, отождествлять переменные c_n и их эволюционные составляющие можно только в первом приближении. Полученные соотношения позволяют по единым формулам проводить расчет в классической и квантовой механике.

Список литературы

[1] *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: ГИФМЛ, 1963. 70 с.

[2] *Като Т.* Теория возмущений линейных операторов. М.: Мир, 1972. 740 с.

[3] *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982. 428 с.

[4] *Митропольский Ю.А.* Метод усреднения в нелинейной механике. Киев: Наукова думка, 1971. 440 с.

[5] *Митропольский Ю.А., Мосеенков Б.И.* Асимптотические решения уравнений в частных производных. Киев: Вища школа, 1976. 512 с.

[6] *Гребеников Е.А.* Метод усреднения в прикладных задачах. М.: Наука, 1986. 255 с.

[7] *Арнольд В.И.* Математические методы классической механики. М.: Наука, 1989. 472 с.

[8] *Арнольд В.И.* Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978. 304 с.

[9] *Лось Ф.С.* // Укр. мат. журн. 1950. Т. 2. Вып. 3. С. 87–93.