УДК 530.145

Н. Н. Чаус, канд. физ.-мат. наук (Ин-т математики АН Украины, Киев)

О плотности и потоке энергии в нерелятивистской квантовой механике

Приведен ряд формул, которые являются математическими следствиями из уравнения Шредингера $i\hbar\dot{\psi} = H\psi$ и представляют собой локальные законы сохранения энергии и импульса. Охвачено несколько случаев гамильтониана H.

Наведено ряд формул, які є математичними наслідками з рівняння Шредінгера $i\hbar\dot{\psi} = H\psi$ і являють собою локальні закони збереження енергії і імпульсу. Охоплено декілька випадків гамільтоніану H.

Предлагаемые формулы примыкают к известным в квантовой механике формулам под общим названием закона сохранения частиц, хотя появились эти последние первоначально для одной частицы и должны были бы прежде всего именоваться как локальный закон сохранения массы частицы (одной). Этот закон сохранения массы (или заряда) известен для одной и для совокупности взаимодействующих частиц в силовом поле $U(x, y, z, t)$, для частицы, находящейся в произвольном электромагнитном поле, справедлив для нелинейного уравнения Шредингера [1—3]. Для уравнения Шредингера известны и локальные законы сохранения энергии и импульса. Эти формулы получены для целей и в рамках статистической термодинамики [4, 5]. Однако эти формулы не имеют того совершенства, что закон сохранения массы. В то время как для получения точных формул для сохранения массы нигде не требуется никаких специальных ограничений на гамильтониан, локальные законы сохранения энергии и импульса в [4] получаются лишь при дополнительных ограничениях на потенциал в гамильтониане и являются приближенными. В [5] в предлагаемых точных формулах для плотностей и потоков фигурируют интегралы по некоторому числовому параметру и авторы не выясняют, какова роль такого интегрирования и насколько от него можно избавиться, например, при переходе к «x»-представлению. И главное — остается почти не затронутым вопрос о формулах, когда гамильтониан зависит от времени.

Автор считает, что первые локальные законы сохранения энергии и импульса должны появляться в квантовой механике не при рассмотрении задач статистической физики и метода вторичного квантования, а гораздо раньше.

1. Одна частица в силовом поле. Полагая $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(x, y, z, t)$, назовем

$$W = \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi\nabla\psi^* + U\psi\psi^*, \qquad (1)$$

$$\mathbf{P} = \frac{i\hbar}{2}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) \qquad (2)$$

плотностью энергии и плотностью импульса частицы. В дополнение к (1) и (2) назовем вектор

$$S = \frac{i\hbar}{2\mu}(H\psi\nabla\psi^* - H\psi^*\nabla\psi) \tag{3}$$

потоком энергии, а тензор

$$S_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{\partial\psi}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_\beta} + \frac{\partial\psi}{\partial x_\beta}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}(\psi\psi^*)\right\} \tag{4}$$

тензором напряжений (в нем $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$).

Справедливы соотношения

$$\frac{\partial}{\partial t}W + \operatorname{div} S = \frac{\partial U}{\partial t}\psi\psi^*, \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta}S_{\alpha\beta} = -\frac{\partial U}{\partial x_\alpha}\psi\psi^*, \tag{6}$$

которые и являются локальными законами сохранения энергии и импульса для одной частицы.

При достаточно регулярном убывании $|\psi|$ на бесконечности интегрирование равенства (6) по всему пространству приводит к теореме Эренфеста для импульса. При интегрировании (5) тоже получается понятный результат. Наличие в правых частях равенств (5) и (6) ненулевых выражений так же необходимо, как и в законах сохранения энергии и импульса в электродинамике. Приведенные формулы (1)—(6), можно считать, совпадают с соответствующими формулами из [4], если и там и здесь положить $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta$. Это как раз тот малоинтересный случай, когда приближенные формулы в [4] превращаются в точные.

Устанавливаются соотношения (5) и (6) и дальнейшие равенства с использованием лишь уравнения Шредингера и правил дифференцирования. Например,

$$\dot{W} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\dot{\psi}\nabla\psi^* + \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi\nabla\dot{\psi}^* + \frac{\partial}{\partial t}(U\psi\psi^*) = -\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla\psi^*\nabla(H\psi) + \frac{i\hbar}{2\mu}\nabla\psi\nabla(H\psi^*) + \frac{\partial}{\partial t}(U\psi\psi^*),$$

$$\operatorname{div} S = \frac{i\hbar}{2\mu}\{H\psi\Delta\psi^* - H\psi^*\Delta\psi + \nabla\psi^*\nabla(H\psi) - \nabla\psi\nabla(H\psi^*)\},$$

$$\dot{W} + \operatorname{div} S = \frac{i\hbar}{2\mu}\{H\psi\Delta\psi^* - H\psi^*\Delta\psi\} + \frac{\partial}{\partial t}(U\psi\psi^*) = \frac{i\hbar}{2\mu}U(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi) + U\frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*) + \frac{\partial U}{\partial t}\psi\psi^* = \frac{\partial U}{\partial t}\psi\psi^*$$

и (5) доказано.

Автор не уверен, что предложенная формулировка локального закона сохранения энергии (5) соответствует действительности, и может предложить, как и в [4, 5], еще одну формулу с другой плотностью энергии и с другим ее потоком, либо линейную комбинацию из этих формул, оставляя, конечно, каждый раз ту же правую часть, что и в (5). Распространенная точка зрения, что таких формул всегда можно выписать сколько угодно и все они одинаково хороши, является ошибочной.

Действительность состоит в том, что произвольный набор функций $\Phi_i(t, x_1, \ldots, x_n)$, $i = 1, \ldots, n$, порождает по формулам $u_i = \frac{\partial}{\partial t}\Phi_i$, $u_0 =$

$= \frac{\partial}{\partial x_1}\Phi_1 + ... + \frac{\partial}{\partial x_n}\Phi_n$ решение уравнения $\frac{\partial}{\partial t}u_0 = \frac{\partial}{\partial x_1}\Phi_1 + ...$ $... + \frac{\partial}{\partial x_n}\Phi_n$, и наоборот. Но так выглядит абстрактная математика, а физика состоит в том, что при попытке заменить в имеющемся равенстве, например, u_0 на $\tilde{u}_0$ необходимо соорудить это новое $\tilde{u}_0$ только из тех параметров, что задействованы в конкретной физической теории, и так, чтобы $\tilde{u}_0$ имело ту же размерность, что и u_0. При этом вся многозначность ответа может улетучиться. И это еще не все. Есть еще эксперимент и общее здание физики. Так, автор считает, что в теории идеальной несжимаемой жидкости локальный закон сохранения энергии определен однозначно. При отсутствии массовых сил это формула

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\rho v^2\right) + \operatorname{div}\left[\left(\frac{1}{2}\rho v^2 + p\right)v\right] = 0,$$

которая, кстати, отсутствует по какой-то причине во всех учебниках и во всех справочниках по гидромеханике, хотя и известна человечеству [3, 6, 7]. Единственная формальная возможность сварьировать эту фундаментальную формулу состоит в том, что давление p изменяется на константу. Но при такой замене тут же следует признать, что физика уже изменилась. Точно так же в электродинамике вместо известного уравнения Пойнтинга автор может предложить еще только один новый вариант локального закона сохранения энергии [8]. К изложенному добавим, что в квантовой механике волновая функция ψ не может повсеместно считаться безразмерной. Из самого уравнения Шредингера это не вытекает, но если рассматривать упоминавшиеся локальные законы сохранения, то придется признать, что в случае, например, одной частицы величина $|\psi|^2$ обязана иметь размерность см$^{-3}$. Такая же размерность предполагается у $|\psi|$ и в формулах (1)—(6) и далее для одной частицы.

2. Система невзаимодействующих частиц. В этом случае гамильтониан H состоит из N слагаемых вида $H_k = -\frac{\hbar^2}{2\mu_k}\Delta_k + U_k(\xi_k, \eta_k, \zeta_k, t)$. Чтобы получить законы сохранения не в пространстве $3N$ измерений, а в пространстве (x_1, x_2, x_3), используется естественная процедура получения законов сохранения для каждой частицы в отдельности и последующего суммирования N равенств. Для этого обозначим через ψ_k функцию, которая получается из ψ после замены в ней переменных ξ_k, η_k, ζ_k на x_1, x_2, x_3 при сохранении на своих местах остальных переменных ξ_j, η_j, ζ_j. Обозначим также $H_k^{(k)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_k}\Delta + U_k(x_1, x_2, x_3, t)$, $\Delta = \sum \partial^2/\partial x_i^2$, $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}\right)$. Пусть, кроме того, $d\Omega = \prod_{s=1}^{N} d\xi_s d\eta_s d\zeta_s = d\xi_k d\eta_k \times$ $\times\, d\zeta_k d\Omega_k$. Назовем

$$W^{(k)} = W^{(k)}(x_1, x_2, x_3, t) = \int\left(\frac{\hbar^2}{2\mu_k}\nabla\psi_k^*\nabla\psi_k + U_k\psi_k\psi_k^*\right)d\Omega_k \tag{7}$$

плотностью энергии, обусловленной k-й частицей, а вектор

$$\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{p}^{(k)}(x_1, x_2, x_3, t) = \frac{i\hbar}{2}\int(\psi_k\nabla\psi_k^* - \psi_k^*\nabla\psi_k)\,d\Omega_k \tag{8}$$

плотностью импульса, обусловленного k-й частицей. В дополнение к (7) и (8) назовем вектор

$$S^{(k)} = \frac{i\hbar}{2\mu_k}\int(\nabla\psi_k^* H_k^{(k)}\psi_k - \nabla\psi_k H_k^{(k)}\psi_k^*)\,d\Omega_k$$

и тензор

$$S^{(k)}_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2\mu_k} \int \left\{ \frac{\partial\psi_k}{\partial x_\alpha} \frac{\partial\psi^*_k}{\partial x_\beta} + \frac{\partial\psi_k}{\partial x_\beta} \frac{\partial\psi^*_k}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} (\psi_k\psi^*_k) \right\} d\Omega_k$$

потоком энергии и тензором напряжений, обусловленных k-й частицей.

Нетрудно убедиться, что *при каждом* $k = 1, \ldots, N$ *выполняются соотношения*

$$\frac{\partial}{\partial t} W^{(k)} + \operatorname{div} S^{(k)} = \int \dot{U}_k \psi_k \psi^*_k d\Omega_k, \tag{9}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p^{(k)}_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta} S^{(k)}_{\alpha\beta} = -\int \frac{\partial U_k}{\partial x_\alpha} \psi_k \psi^*_k d\Omega_k, \tag{10}$$

естественно обобщающие соотношения (5) *и* (6). *После суммирования* (9) *и* (10) *по* k *получим локальные законы сохранения энергии и импульса системы* N *частиц*.

3. Пара тождественных взаимодействующих частиц. При этом $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_2 + \Phi(|r_1 - r_2|)$. Выписать здесь законы сохранения можно, воспользовавшись общим подходом п. 2. Учитывая, что сейчас $\psi(r_1, r_2, t) = \pm\psi(r_2, r_1, t)$, можно сразу ввести плотности и их потоки для пары частиц. Под плотностью энергии W следует понимать величину

$$W = \int \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla\psi_1 \nabla\psi^*_1 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_2\psi_1 \nabla_2\psi^*_1 + \Phi(|r - r_2|)\psi_1\psi^*_1 \right) dr_2.$$

Здесь $W = W(x_1, x_2, x_3, t)$, $r = (x_1, x_2, x_3)$, $r_2 = (\xi, \eta, \zeta)$, $\psi_1 = \psi(r, r_2, t)$, $\nabla_2 = \left(\frac{\partial}{\partial\xi}, \frac{\partial}{\partial\eta}, \frac{\partial}{\partial\zeta}\right)$. При этом потоком энергии будет вектор

$$S = \frac{i\hbar}{2\mu} \int (\nabla\psi^*_1 H_1 \psi_1 - \nabla\psi_1 H_1 \psi^*_1)\, dr_2,$$

где H_1 есть H после замены в нем r_1 на r.

Локальный закон сохранения состоит в том, что

$$\dot{W} + \operatorname{div} S = 0. \tag{11}$$

Равенство (11) является точным, справедливо без каких-либо дополнительных ограничений на потенциал $\Phi(|r_1 - r_2|)$ и становится в один ряд с формулой (5).

Под плотностью распределенного в пространстве импульса пары взаимодействующих частиц с учетом симметрии ψ естественно понимать вектор

$$\mathbf{p} = i\hbar \int (\psi_1 \nabla\psi^*_1 - \psi^*_1 \nabla\psi_1)\, dr_2.$$

Тензором напряжений будет

$$S_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \left(\frac{\partial\psi_1}{\partial x_\alpha} \frac{\partial\psi^*_1}{\partial x_\beta} + \frac{\partial\psi_1}{\partial x_\beta} \frac{\partial\psi^*_1}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} (\psi_1\psi^*_1) \right) dr_2,$$

а *закон сохранения импульса принимает вид*

$$\frac{\partial}{\partial t} p_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta} S_{\alpha\beta} = -2 \int \frac{\partial\Phi(|r - r_2|)}{\partial x_\alpha} \psi_1 \psi^*_1 dr_2.$$

Последняя формула родственна формуле (6) и, быть может, не надо бороться дальше с ее ненулевой правой частью и пытаться получше спрятать ее под знак дивергенции в тензор $S_{\alpha\beta}$, к чему стремятся в статистической физике. Может быть, в этой точной формуле надо лишь правильно прочесть правую часть.

4. Заряженная частица в произвольном электромагнитном поле. Рассмотрим уравнение Шредингера

$$i\hbar\dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi + \frac{ie\hbar}{\mu c}A_\alpha\frac{\partial\psi}{\partial x_\alpha} + \frac{ie\hbar}{2\mu c}\operatorname{div}\mathbf{A}\psi + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2\psi + V\psi.$$

Начнем с вопроса об импульсе. Плотность его, конечно, должна определяться формулой

$$\mathbf{p} = \mu\mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) - \frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\psi\psi^*.$$

Вектор $\mathbf{J}$ хорошо известен и для него [1] $\frac{\partial}{\partial t}(\psi\psi^*) + \operatorname{div}\mathbf{J} = 0$. Теперь же вопрос о законе сохранения, в котором будет фигурировать не $\operatorname{div}\mathbf{p}$, а $\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{p}$. Положим

$$T_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_\beta} + \frac{\partial\psi}{\partial x_\beta}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha\partial x_\beta}(\psi\psi^*)\right) - $$
$$-\frac{e}{c}(A_\alpha J_\beta + A_\beta J_\alpha) - \frac{e^2}{\mu c^2}A_\alpha A_\beta\psi\psi^*.$$

Выполняется следующее соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t}p_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta}T_{\alpha\beta} = f_\alpha, \tag{12}$$

где $f_\alpha = \left(-\frac{e}{c}\dot{A}_\alpha - e\frac{\partial}{\partial x_\alpha}V\right)\psi\psi^* - \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\right)J_\beta$.

Правая часть f в (12) имеет в точности тот самый вид, который нужен в теореме Эренфеста для среднего импульса частицы в электромагнитном поле. *Поэтому формула* (12) *может считаться локальным законом сохранения импульса частицы, а тензор* $T_{\alpha\beta}$ — *тензором напряжений*. Проверку справедливости (12) мы опускаем. Заметим, что фигурирующие в (12) величины p_α и f_α являются калибровочно инвариантными, т. е., будучи зависимыми от $\mathbf{A}$, V и ψ, они сохраняют свои значения при одновременной замене в них $\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla g$, $V \to V - c^{-1}\dot{g}$, $\psi \to \psi\exp(ie\hbar^{-1}c^{-1})$ [1]. Нетрудно убедиться в том, что такое же свойство имеет и тензор $T_{\alpha\beta}$.

Можно выписать и локальный закон сохранения энергии для рассматриваемого уравнения. Но здесь надо первоначально сделать выбор, какая энергия имеется в виду. Если не налагать никаких ограничений на потенциалы $\mathbf{A}$ и V, то будет естественнее всего следить за кинетической энергией частицы. Так как $H = \frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + eV$, то в качестве плотности кинетической энергии можно взять симметричное выражение

$$W = \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi\nabla\psi^* + \frac{e}{2\mu c}\mathbf{A}\left(\frac{e}{c}\mathbf{A}\psi\psi^* + i\hbar(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\right).$$

В качестве потока этой энергии предлагается вектор

$$S = \frac{i\hbar}{2\mu}(\nabla\psi^* H_0\psi - \nabla\psi H_0^*\psi^*) - \frac{e}{2\mu c}\mathbf{A}(\psi H_0^*\psi^* + \psi^* H_0\psi),$$

где $H_0 = H - eV$.

При таком выборе W *и* S *выполняется следующее соотношение*:

$$\dot{W} + \operatorname{div}S = e\mathbf{E}\cdot\mathbf{J}, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} - \nabla V.$$

Это и есть локальный закон сохранения кинетической энергии частицы и правая часть в нем $e\mathbf{E}\cdot\mathbf{J}$ при сравнении ее с правой частью известного в электродинамике уравнения Пойнтинга показывает, что изменение кинетической энергии частицы происходит только за счет электромагнитной энергии поля.

1. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики.— М. : Наука, 1983.— 664 с.
2. *Владимиров В. С., Волович И. В.* Локальные и нелокальные токи для нелинейных уравнений // Теорет. и мат. физика.— 1985.— **62**, № 1.— С. 3—29.
3. *Владимиров В. С., Волович И. В.* Законы сохранения для нелинейных уравнений // Актуальные проблемы вычислит. математики и мат. моделирования.— Новосибирск: Наука, 1985.— С. 147—162.
4. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика.— М. : Наука, 1971.— 416 с.
5. *Ахиезер А. И., Пелетминский С. В.* Методы статистической физики.— М. : Наука, 1977.— 368 с.
6. *Блохинцев Д. И.* Акустика неоднородной движущейся среды.— М.; Л.: ОГИЗ, 1946.— 220 с.
7. *Уизем Дж.* Линейные и нелинейные волны.— М. : Мир, 1977.— 622 с.
8. *Чаус Н. Н.* К вопросу об энергии в электродинамике // Прямые и обратные задачи спектральной теории дифференциальных операторов.— Киев : Ин-т математики АН УССР, 1985.— С. 123—129.

Получено 19.01.89