Аналогии уравнения Шредингера

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Существует множество связей уравнения Шредингера с другими уравнениями, уравнением теплопроводности, диффузии и волновым уравнением для волн изгиба см. [1]. Но существенным является связь с уравнением Навье-Стокса, Докажем это.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi \,. \qquad (1)$$

Полагая время мнимым и волновую функцию равной температуре или концентрации, получим уравнение (здесь и далее вывод уравнений следует из [1], но отличие от уравнения Шредингера оригинальное)

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\hbar}{2m}\Delta T - UT/\hbar; \tau = it \qquad (2)$$

Эта аналогия позволяют решать уравнение Шредингера с помощью функции Грина на ЭВМ более просто см. [2]. Но тепловое уравнение имеет другой вид

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + V_k \frac{\partial T}{\partial x^k} = \chi \Delta T + \frac{\nu}{2c_p}\left(\frac{\partial V_l}{\partial x^k} + \frac{\partial V_k}{\partial x^l}\right)^2. \qquad (3)$$

Только при отсутствии конвекции оно имеет (2), т.е. для неподвижной среды.

Получается, что уравнение Шредингера не переходит в тепловое уравнение для двигающихся частиц.

Получим волновое уравнение для изгиба тонкой пластинки

$$i\hbar\frac{\partial(u+iv)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(u+iv)$$
$$\frac{\partial v}{\partial t}=\frac{\hbar}{2m}\Delta u;\frac{\partial u}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2m}\Delta v \quad . \qquad (4)$$
$$\frac{\partial\Delta v}{\partial t}=-\frac{2m}{\hbar}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{\hbar}{2m}\Delta^2 u$$

Получается уравнение $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}+(\frac{\hbar}{2m})^2\Delta^2 u=0$. Но аналогия не полная, отсутствует потенциал.

Аналогия между уравнением Шредингера и Навье-Стокса полная. Уравнение Шредингера сводится к уравнению Навье – Стокса со всеми членами. Докажем это. Для чего запишем уравнение Шредингера и преобразуем

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{l=1}^{3}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_l^2}+U\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\sum_{l=1}^{3}[\frac{\partial^2\ln\psi}{\partial x_l^2}+\frac{1}{\psi^2}(\frac{\partial\psi}{\partial x_l})^2]+U\psi \, .$$

Разделив на массу $m\psi$, получим уравнение

$$i\frac{\hbar}{m}\frac{\partial\ln\psi}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m^2}\sum_{l=1}^{3}(\frac{\partial\ln\psi}{\partial x_l})^2=-\frac{\hbar^2}{2m^2}\sum_{l=1}^{3}\frac{\partial^2\ln\psi}{\partial x_l^2}+U/m \, .$$

Получим уравнение в частных производных, взяв градиент от обеих частей уравнения, введем действительную скорость по формуле $\mathbf{V}=-i\frac{\hbar}{m}\nabla\ln\psi$.

$$\frac{\partial i\frac{\hbar}{m}\nabla\ln\psi}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{l=1}^{3}\frac{\partial\ln\psi}{\partial x_l}\frac{\partial\nabla\ln\psi}{\partial x_l}=\frac{i\hbar}{2m}\sum_{l=1}^{3}\frac{\partial^2 i\frac{\hbar}{m}\nabla\ln\psi}{\partial x_l^2}+\nabla U/m$$

Подставляя значение скорости в преобразованное уравнение Шредингера, получим

$$\frac{\partial V_p}{\partial t}+\sum_{l=1}^{3}V_l\frac{\partial V_p}{\partial x_l}=\nu\sum_{l=1}^{3}\frac{\partial^2 V_p}{\partial x_l^2}-\frac{\partial U}{\partial x^p}/m, \nu=\frac{i\hbar}{2m} \, .$$

Получим трехмерное уравнение Навье – Стокса с давлением, соответствующим потенциалу. Но задача гидродинамики отличается от уравнения Навье – Стокса, полученного из уравнения Шредингера, уравнением неразрывности.

$$\begin{gathered}
i\hbar\psi^{-1}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{-1}\Delta\psi + U\psi^{-1}\psi = 0 \\
-i\hbar\psi\frac{\partial\psi^{-1}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\Delta\psi^{-1} + U\psi\psi^{-1} = 0 \\
div(\psi^{-1}\nabla\psi - \psi\nabla\psi^{-1}) = \nabla\psi^{-1}\nabla\psi + \psi^{-1}\Delta\psi - \nabla\psi\nabla\psi^{-1} - \psi\Delta\psi^{-1} = \\
= \psi^{-1}\Delta\psi - \psi\Delta\psi^{-1}
\end{gathered} \quad . \qquad (1)$$

Определение обратной функции следует из формул

$$\begin{gathered}
\psi_k^{-1} = a_{kp}\psi_p \\
<\psi_k^{-1} | \psi_u >= \delta_{ku} = a_{kp} < \psi_p | \psi_v > \\
a_{kp} =< \psi_k | \psi_p >^{-1}
\end{gathered}$$

Вычитая из первого уравнения (1) второе, получим уравнение неразрывности для значения комплексной скорости

$$\begin{gathered}
\frac{\partial < \psi^{-1}\psi |}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} div(< \psi^{-1}\nabla\psi | - < \psi\nabla\psi^{-1} |) = \\
= \frac{\partial < \psi^{-1}\psi |}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} div(< \psi^{-1}\psi\nabla\ln\psi | + < \psi\psi^{-1}\nabla\ln\psi |) = \\
= \frac{\partial c_n^{-1}c_n}{\partial t} - \frac{i\hbar}{m} div(c_n^{-1}c_m < \psi_n^{-1}\psi_m\nabla\ln\psi) = 0, \\
div < \widehat{\mathbf{V}} |= -div\, i\frac{\hbar}{m} < \widehat{\nabla}\ln\psi |= 0 \\
\rho = \psi^{-1}\psi = \psi\psi^{-1}, \\
< \psi^{-1} | \psi >=< c_n^{-1}\psi_n^{-1} | c_m\psi_m >=< c_n^{-1}c_m\psi_n^{-1} | \psi_m >= c_n^{-1}c_m\delta_{nm} = c_n^{-1}c_n \\
\partial\ln < \psi^{-1} | \psi >= \partial\ln c_n^{-1}c_n = 0
\end{gathered}$$

Где равенство $div(< \mathbf{V} |) = 0$ относительно значения скорости. Если использовать коэффициенты ряда, зависящие от времени, то получим уравнение $\frac{\partial\ln < \rho(t) |}{\partial t} + div(< \mathbf{V} |= 0, < \rho(t) |=< c_n^{-1}(t)c_n(t) |=< N(t) |$. Количество состояний рассматривается конечное, поэтому о сходимости ряда заботиться не надо.

В силу выполнения оператора неразрывности, в случае потенциального течения, полученного из уравнения Шредингера, заботиться об уравнении неразрывности не надо при потенциальном решении уравнения Навье- Стокса, оно выполняется автоматически.

Литература

1. https://physics.stackexchange.com/questions/281145/connection-between-schrödinger-equation-and-heat-equation
2. http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~ajw29/thesis/node27.html