FTAXP 29.05.15

10.51889/2959-5894.2025.90.2.007

Т.Б. Қоштыбаев[1], А.М. Татенов[1], М.Е. Алиева[2],

К.К. Жантлеуов[2], М.М. Мырзатай[2]

[1] Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан
[2]Абай атындағы Казақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан
e-mail: moldir-2008@mail.ru

КВАНТТЫҚ-МЕХАНИКАЛЫҚ ЖҮЙЕЛЕР ҮШІН ҮЗІЛІССІЗДІК ТЕҢДЕУІ

Аңдатпа

Мақала механикалық жүйелердің динамикасын, микробөлшектердің кванттық күйлерін сипаттайтын классикалық және кванттық теңдеулердің арасындағы өзара байланыстарға арналған. Релятивистік емес кванттық механикадағы ықтималдылық тығыздығының сақталуы үзіліссіздік теңдеуіне алып келетінін ескеріп осы теңдеуді кванттық теорияның негізі болып табылатын Шредингер теңдеуінен шығарып алуға болатындығы көрсетілген. Сонымен бірге, үзіліссіздік теңдеуін аналитикалық механиканың негізгі теңдеуі саналатын Гамильтон–Якоби теңдеуінен де алыну жолы ұсынылған. Шредингер теңдеуінің классикалық үлгісі (шегі) Гамильтон–Якоби теңдеуі екендігінің дәлелі ретінде осы теңдеу мен үзіліссіздік теңдеуін Шредингер теңдеуінен шығарып алу жолдары да келтірілген. Бұл мәселені Планк тұрақтысын өте аз шама деп есептей отырып та іске асыруға болады (квазиклассикалық жуықтау), алайда осы мақалада кванттық теңдеуден классикалық теңдеулерге өту әсерлік функцияның дәрежелік қатарға жіктелуі арқылы жасалды. Есептеулер кезінде қатардың тек бірінші дәрежелі мүшелері ғана ескерілді (бірінші реттік жуықтау). Аталған шектеулер бойынша бірдей нәтижеге қол жеткізгенмен, екінші жуықтау ықтималдылық пен бөлшектер санының сақталу заңын үйлесімді (бірізді) сипатта қарастыруға мүмкіндік береді. Бөлшектер санының сақталуы мен ықтималдылықтың өзгермеуі арасындағы идеялық ұқсастыққа теңдеуді интегралдау арқылы көз жеткізуге болады. Мақалада қарастырылған теңдеулер кәдуілгі және дербес туындылы дифференциялдық теңдеулердің дәрежелері бойынша және сипаты жағынан сызықты, сызықты емес қасиеттермен ерекшеленетіні ескерілді. Гамильтон–Якоби теңдеуі арқылы классикалық механикадағы кез–елген есепті шешуге болатындығы және Шредингер теңдеуінің квазиклассикалық жуықтаудағы рөлі айқындалған. Мақаланың кіріспе бөлімінде осы жағдайлар туралы қысқаша түрде мәліметтер келтірілген және алынған нәтижелерге талдаулар мен қорытынды жасалған.

Түйін сөздер: үзіліссіздік теңдеуі, әсерлік функция, кванттық жүйе, классикалық жуықтау, ықтималдылық.

Т.Б. Коштыбаев[1], А.М. Татенов[1], М.Е. Алиева[2], К.К. Жантлеуов[2], М.М. Мырзатай[2]
[1] Казахский национальный женский педагогичесий университет, г. Алматы, Казахстан
[2] Казахский национальный педагогический университет имени Абая, г. Алматы, Казахстан

УРАВНЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ ДЛЯ КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Аннотация

Статья посвящена динамике механических систем, взаимосвязи классических и квантовых уравнений, описывающих квантовые состояния микрочастиц. Учитывая, что сохранение плотности вероятности в нерелятивистской квантовой механике приводит к уравнению непрерывности, показано, что это уравнение можно вывести из уравнения Шредингера, которое является основой квантовой теории. При этом представлен способ вывода уравнения непрерывности из уравнения Гамильтона–Якоби, которое считается основным уравнением аналитической механики. В качестве доказательства того, что классической моделью (пределом) уравнения Шредингера является уравнение Гамильтона–Якоби, приведены способы вывода этого уравнения и уравнения непрерывности из уравнения Шредингера. Эту задачу можно реализовать, предполагая, что константа Планка очень мала (квазиклассическое приближение), однако в данной статье переход от квантового уравнения к классическим уравнениям осуществлен путем деления функции действия на степенной ряд. При расчетах учитывались только члены первого порядка ряда (приближение первого порядка). Хотя при указанных ограничениях достигается тот же результат, второе приближение позволяет когерентно (непротиворечиво) рассмотреть закон сохранения вероятности и числа частиц. Концептуальное сходство между сохранением числа частиц и инвариантностью вероятности можно проверить путем интегрирования уравнения. Отмечено, что рассматриваемые в статье уравнения отличаются по степени и характеру от обыкновенных и самостоятельно выведенных дифференциальных уравнений с линейными и нелинейными свойствами. Любая задача классической механики может быть решена с помощью уравнения Гамильтона–Якоби, определена роль уравнения Шрёдингера в квазиклассическом приближении. Во введении к статье кратко изложены сведения об этих случаях, а полученные результаты проанализированы и сделаны выводы.

Ключевые слова: уравнение непрерывности, действие, квантовая система, классическое приближение, вероятность.

T.B. Koshtybayev[1], A. Tatenov[1], M. Aliyeva [2], K. Zhantleuov[2], M. Myrzatay[2]
[1] Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan
[2]Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

CONTINUITY EQUATION FOR QUANTUM MECHANICAL SYSTEMS

Abstract

The article is devoted to the dynamics of mechanical systems, the relationship between classical and quantum equations describing quantum states of microparticles. Taking into account that the conservation of probability density in nonrelativistic quantum mechanics leads to the continuity equation, it is shown that this equation can be derived from the Schrödinger equation, which is the basis of quantum theory. At the same time, a method for deriving the continuity equation from the Hamilton-Jacobi equation, which is considered the main equation of analytical mechanics, is presented. As a proof that the classical model (limit) of the Schrödinger equation is the Hamilton–Jacobi equation, methods for deriving this equation and the continuity equation from the Schrödinger equation are given. This problem can be realized by assuming that Planck's constant is very small (semiclassical approximation), but in this article the transition from the quantum equation to the classical equations is realized by dividing the action function by a power series. Only the first–order terms of the series were taken into account in the calculations (first–order approximation). Although the same result is achieved under the specified restrictions, the second approximation allows one to consider the law of conservation of probability and the number of particles coherently (consistently). The conceptual similarity between conservation of the number of particles and probability invariance can be verified by integrating the equation. It is noted that the equations considered in the article differ in degree and nature from ordinary and independently derived differential equations with linear and nonlinear properties. Any problem in classical mechanics can be solved using the Hamilton–Jacobi equation, and the role of the Schrödinger equation in the semiclassical approximation is determined. The introduction to the article briefly presents information about these cases, and the results obtained are analyzed and conclusions are drawn.

Keywords: continuity equation, action, quantum system, classical approximation, probability.

Негізгі ережелер

Кванттық механиканың негізгі теңдеуі ретінде жүйенің толқындық функциясына арналған Шредингер теңдеуі алынған. Егер қарастырылып жатқан жүйе классикалық болса, яғни қозғалыс классикалық механика теңдеулері арқылы барынша дәл сипатталатын болса, онда осы жүйеге арналған Шредингер теңдеуі классикалық теңдеулердің біріне, дәлірек айтқанда Гамильтон–Якоби теңдеуіне өтуі тиіс. Бұл теңдеулердің құрылымындағы басты айырмашылық – Шредингер теңдеуінің сызықтық теңдеу болуында.

Кіріспе

Кванттық механикадағы маңызды бір заңдылықтардың бірі – сәйкестік принципі: өте үлкен шамалар жағдайында және кванттық жүйенің сыртқы ортамен әсерлесуі кезінде кванттық механиканың теңдеулері классикалық механика теңдеулеріне өте бастайды. Бұл тұжырымдар кванттық механиканың классикалық физиканы теріске шығармайтындығын, қайта оны микроскопиялық масштабтар жағдайында толықтыратындығын растап отыр. Бөлшектің координатасы мен импульсін бірмезгілде анықтау мүмкін еместігі мен бөлшектің траекториясының болмауы секілді кванттық механиканың принциптеріне классикалық түсініктер тұрғысынан қарауға болмайды. Бұлар тек микроөлшемді жүйелер үшін ғана орындалады да, макрожүйелер үшін жарамсыз. Кванттық жүйелерге арналған теңдеулерден классикалық теңдеулерге өту үшін арнайы математикалық тәсілдер, функциялар, операторлық есептеулер, теоремалар мен концепциялар, жуықтаулар (шекаралық шарттар) қолданылады. Солардың ішінде маңыздылары: Гамильтон функциясы (гамильтониан), Лиувилл теоремасы, Якоби матрицасы (якобиан), Шредингер теңдеуі және т.б. да математикалық физиканың фундаментальды заңдылықтары [1]. Кванттық теңдеулерден классикалық теңдеулерге өту мәселесі осы мақаланың да негізгі идеялық мазмұнына айналған, атап айтқанда бөлшектердің классикалық және кванттық жүйелері үшін кеңістіктің шектелген көлеміндегі бөлшектер санының сақталу заңдылығы (үзіліссіздік теңдеуі) екі түрлі жолмен шығарылып көрсетіледі. Оның біріншісі – Шредингер теңдеуінен классикалық Гамильтон–Якоби теңдеуіне және үзіліссіздік теңдеуіне өту (релятивистік кванттық механикада ықтималдылықтың сақталуы үзіліссіздік теңдеуіне әкеледі), ал екіншісі – үзіліссіздік теңдеуін тікелей Шредингер теңдеуінен шығарып алу.

Зерттеудің өзектілігі

Логикалық тұрғыдан алғанда толықтай аяқталған екі физикалық теория бар: классикалық механика және кванттық механика. Бұларға бір-біріне тәуелсіз, өз алдына жеке–дара өмір сүре алатын дербестікте деп қарауға да болады. Алайда, кез–келген физик классикалық механиканы кванттық механиканың $\hbar \to 0$ шектік жағдайы деп түсінеді. Шындығында да, бұл шектік шартта әртүрлі кванттық теориялар бір ғана классикалық тұжырымға алып келетін жағдайлар да көптеп кездеседі. Шредингер теңдеуі осы шектік шартта классикалық механиканың негізгі теңдеуіне айналуы тиіс. Гамильтон-Якоби теңдеуі классикалық және кванттық механика арасындағы көпір іспетті. Шрёдингер, Паули, Дирак, Клейн-Гордон, Прок, Липпман–Швингер теңдеулерінің негізінде Гамильтон–Якоби теңдеуі жатыр.

Материалдар мен әдістер

Мақалада қолданылатын материалдар классикалық, аналитикалық және кванттық механиканың негізгі теңдеулері мен тұжырымдамалары. Көтерілген мәселенің шешімі математикалық өрнектерді бағалауға, кванттық–механикалық шамалардың аналитикалық қасиеттеріне және теңдеулерді жуықтаулар тәсілімен шешуге негізделген жүйелі модель арқылы іске асырылатын болады. Айнымалыларды түрлендіру арқылы классика мен кванттық әлем арасындағы өтпелі процестердің ауқымы белгіленіп, қойылған мәселенің түйіні табылып, ізделінген нәтижелерге қолжетімді бағыттар айқындалады.

Негізгі ойлар

Гамильтонның теңдеулер жүйесінде жалпылама жылдамдықтардың орнына жалпыланған импульстер алынған. Гамильтонның ұстанымы ең аз әсер принципімен байланысты [2]. Оны алғаш рет Мопертюи тұжырымдаған болатын: динамика *кинетикалық энергиядан алынған интеграл аз шама болады* деген талапқа негізделген және бұл интеграл *әсер* деп аталады. Лагранж және Гамильтон механикалары шартты түрде өзара ұқсас болғанымен, кейінгісі классикалық механиканың математикалық құрылымы жағынан пайдалырақ болды. Гамильтон-Якоби теңдеуі классикалық механикаға қатысты болғанымен оны кванттық және классикалық механика арасын байланыстырушы ретінде қолданған ыңғайлырақ. Себебі оны тікелей Шредингер теңдеуінен жылдам осцилляцияланушы толқындық функция жуықтауында алуға болады. Классикалық механикада классикалық гамильтониан канникалық түрлендіру арқылы сызықтық емес бірінші ретті дифференциалдық теңдеуге келеді де, оның шешімдері арқылы динамикалық жүйенің күй сипаты айқындалады. Механикалық жүйенің жағдайы фазалық кеңістіктегі шектелген көлемде қарастырылады. Бұл көлем тек бастапқы шарттармен ғана ерекшеленетін Гамильтон жүйелерімен толтырылады. Бұл жағдайды Гиббс ансамблі деп айтады, Лиувилл теоремасына сәйкес Гиббс ансамблінің қозғалысы кезінде фазалық көлем сақталатын болады.

Зерттеудің әдіснамасы

Классикалық механикада бөлшектің немесе бөлшектер жүйесінің қозғалыс теңдеуі математикалық тұрғыдан әртүрлі өрнектермен берілуі мүмкін. Осы Ньютондық немесе Лагранждық теңдеулер, Гамильтонның канондық теңдеулері аса күрделі есептерді жалпылама координаталарда шығару үшін өте қолайлы болып табылады. Аталған теңдеулерге кәдуілгі дифференциалдық теңдеулер жүйесі деп те карауға болады: Ньютондық немесе Лагранждық теңдеулер екінші ретті, ал Гамильтон теңдеулері бірінші ретті болғанменен, саны жағынан алдыңғыларға қарағанда екі есе көп. Бұл теңдеулердің шешімдері координаталар мен импульстердің уақытқа тәуелді болатын өрнектері түрінде беріледі. Аналитикалық механикада гамильтондық канондық теңдеулер жүйесінің шешімін бір ғана дербес туындылы дифференциалдық теңдеудің шешіміне келтіруге болады деген тұжырым бар. Бұл теңдеу Гамильтон–Якоби теңдеуі болып табылады. Оның көмегімен классикалық механиканың кез–келген есебін шешуге болады. Шредингер теңдеуі өзінің құрылымы мен сипаты жағынан осы теңдеуге тура келеді.

Зерттеу нәтижелері

Механикалық жүйелердің динамикасын, микробөлшектердің кванттық күйлерін сипаттайтын классикалық және кванттық теңдеулердің арасындағы өзара байланыстар орнатылған. Релятивистік емес кванттық механикадағы ықтималдылық тығыздығының сақталуы үзіліссіздік теңдеуіне алып келетін жағдай ескеріліп, аталған теңдеуді кванттық теорияның негізі болып табылатын Шредингер теңдеуінен шығарып алуға болатындығы дәлелденген. Сонымен бірге, үзіліссіздік теңдеуін аналитикалық механиканың негізгі теңдеуі саналатын Гамильтон-Якоби теңдеуінен де алыну жолы ұсынылған. Шредингер теңдеуінің классикалық үлгісі (шегі) Гамильтон-Якоби теңдеуі екендігінің дәлелі ретінде осы теңдеу [3] мен үзіліссіздік теңдеуін Шредингер теңдеуінен шығарып алу жолдары да келтірілген.

Негізгі бөлім. Классикалық Гамильтон-Якоби теңдеуін Шредингердің уақыт айнымалысын (t) қамитын теңдеуінен де шығарып алуға болатынын дәлелдеу үшін массасы m бөлшектің $U(x,y,z,t)$ потенциалдық өрістегі қозғалысын қарастырамыз. $S_0(x,y,z,t)$ *әсерлік функцияға* арналған Гамильтон–Якоби теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2\right\}+U\left(x,y,z\right) \qquad (1)$$

Классикалық механика шеңберінде жүйенің нақты траекториясында есептелген жүйенің әрекет ету шамасының тікелей физикалық мағынасы жоқ. Алайда, бұл шаманың жүйенің бастапқы және соңғы позицияларына тәуелділігін зерттеу қозғалыс теңдеулерін интеграциялаудың түбегейлі жаңа тәсілін – Гамильтон-Якоби әдісі деп атауға мүмкіндік береді. $S_0(x,y,z,t)$ функциясы мынадай қасиеттер көрсетеді:

$$P_x=-\frac{\partial S_0}{\partial x};\ P_y=-\frac{\partial S_0}{\partial y};\ P_z=-\frac{\partial S_0}{\partial z} \qquad (2)$$

Мұндағы P_x,P_y,P_z – бөлшектің $\vec{P}$ импульсінің x, y, z координаталардағы проекциялары немесе импульстің x, y, z бағыттардағы құраушылары. (1)–ді (2) арқылы жазғанда:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left\{P_x{}^2+P_y{}^2+P_z{}^2\right\}+U\left(x,y,z\right) \qquad (1a)$$

Классикалық Гамильтон функциясының өрнегі де дәл осылайша жазылады:

$$H\left(P_x, P_y, P_z, x, y, z, t\right) = \frac{1}{2m}\left\{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right\} + U\left(x, y, z\right) \tag{3}$$

(2) және (1а)–ны ескерсек:

$$H\left(-\frac{\partial S_0}{\partial x}, -\frac{\partial S_0}{\partial y}, -\frac{\partial S_0}{\partial z}, x, y, z, t\right) = \frac{\partial S_0}{\partial t} \tag{4}$$

Гамильтон функциясы бөлшектің E энергиясын анықтайтын болғандықтан [4], (4)–тен:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = E \tag{5}$$

Бұдан $\partial S_0 = E\partial t$, екі жағын интегралдағанда $\int \partial S_0 = E\int \partial t$ және бұдан: $S_0 = Et + C$. Интегралдау тұрақтысы $C = -S_0(x, y, z, t)$ болса, онда: $S_0 = Et - S_0(x, y, z, t)$. Кеңістіктен көлемі ΔV болатын элементті бөліп алайық және ондағы бөлшектер саны $\Delta N = \rho \Delta V$ болсын (ρ–бөлшектердің тығыздығы). Бөлшектер санының уақыт бойынша туындысын нөлге теңестіру бөлшектер санының уақыт бойынша өзгермейтіндігін білідіреді, яғни элементтегі бөлшектердің саны шектеулі деген сөз:

$$\frac{D(\Delta N)}{Dt} = \frac{D(\rho \Delta V)}{Dt} = \rho\frac{D(\Delta V)}{Dt} + \Delta V\frac{D\rho}{Dt} = 0 \tag{6}$$

Мұндағы $\frac{D}{Dt}$ – шектелген туындының белгісі;

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{\upsilon}) \tag{7}$$

$$\frac{D(\Delta V)}{Dt} = div\left(\Delta V\vec{\upsilon}\right) = \nabla\left(\Delta V\vec{\upsilon}\right) \tag{8}$$

(7) мен (8)-ді (6)-ға қойсақ: $\rho div\left(\Delta V\vec{\upsilon}\right) + \Delta V\frac{\partial \rho}{\partial t} + \Delta V\left(\nabla\rho\vec{\upsilon}\right) = 0$, осыны ΔV -ға қысқартсақ [5]:

$$\frac{\rho}{\Delta V} div\left(\Delta V\vec{\upsilon}\right) + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\nabla\rho\vec{\upsilon}\right) = 0 \tag{9}$$

Бұл теңдік орындалуы үшін оның сол жағында тұрған мүшелердің әрқайсысы нөлге тең болуы тиіс: $\frac{\rho}{\Delta V} div\left(\Delta V\vec{\upsilon}\right) = 0$ және $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\nabla\rho\vec{\upsilon}\right) = 0$. Соңғы теңдеуді *үзіліссіздік теңдеуі* деп атайды. Бөлшектің жылдамдығы $\vec{\upsilon} = \frac{\vec{P}}{m}$ немесе

$$\vec{\upsilon} = \frac{1}{m}\left(P_x\vec{e}_1 + P_y\vec{e}_2 + P_z\vec{e}_3\right) \tag{10}$$

Осыған (1)–ді әкеліп қойсақ:

$$\vec{\upsilon}=\frac{1}{m}\left(-\frac{\partial S_0}{\partial x}\vec{e}_1-\frac{\partial S_0}{\partial y}\vec{e}_2-\frac{\partial S_0}{\partial z}\vec{e}_3\right)=-\frac{1}{m}\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1+\frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2+\frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3\right)S_0$$

Бұл жерде $\nabla=\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1+\frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2+\frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3$ – Гамильтон (набла) операторы екенін ескерсек, онда

$$\vec{\upsilon}=-\frac{1}{m}\nabla S_0 \tag{11}$$

Осыны $\frac{\partial\rho}{\partial t}+\left(\nabla\rho\vec{\upsilon}\right)=0$ теңдеуіне қойсақ: $\frac{\partial\rho}{\partial t}+div\left(-\frac{\rho}{m}\nabla S_0\right)=0$ немесе

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}-\frac{1}{m}div\left(\rho\nabla S_0\right)=0 \tag{12}$$

Бұл теңдеуде

$$div\left(\rho\nabla S_0\right)=\nabla\left(\rho\nabla S_0\right)=\rho\nabla\left(\nabla S_0\right)+\nabla S_0\left(\nabla\rho\right) \tag{13}$$

Сонда, (12)–ден:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}-\frac{1}{m}\left(\rho\nabla\left(\nabla S_0\right)+\nabla S_0\left(\nabla\rho\right)\right)=0 \tag{12a}$$

(13)–тің мынадай ереже бойынша шыққандығын ескертеміз: $\nabla\left(AB\right)=A\left(\nabla B\right)+B\left(\nabla A\right)$, мұндағы A,B–декарттық координаталарға тәуелді болатын скаляр немесе векторлық функциялар. (12а) теңдеудегі екінші мүшеде

$$\rho\nabla\left(\nabla S_0\right)=\rho(\nabla\nabla)S_0=\rho\nabla^2S_0=\rho\Delta S_0 \tag{14}$$

мұндағы $\nabla^2=\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – Лаплас операторы. Олай болса, (14)–ті (12а)–ға қойып төмендегідей теңдеу аламыз [8, 9]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}-\frac{1}{m}\left(\rho\Delta S_0+\nabla S_0\left(\nabla\rho\right)\right)=0 \tag{15}$$

Осы жазылған үзіліссіздік теңдеуін төмендегі Шредингер теңдеуінен де шығарып алуға болатындығын дәлелдеп көрсетуге болады:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{16}$$

мұндағы

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(x,y,z,t) \tag{17}$$

(16)–ның шешімі

$$\psi = \exp(-\frac{iS}{\hbar}) \tag{18}$$

Бұл шешімдегі $S - x, y, z, t$ айнымалыларына тәуелді болатын қандай да бір белгісіз функция [6]. (16)–ны нақты түрге келтіріп алу үшін (17)–ні (16)–ға қою керек. Нәтижеде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(x,y,z,t)\psi$$

немесе

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + U(x,y,z,t)\psi \tag{16a}$$

Бұл теңдеудегі $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ –ты мына түрде анықтаймыз:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\exp(-\frac{iS}{\hbar})\right) = -\frac{i}{\hbar}\exp(-\frac{iS}{\hbar})\frac{\partial S}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\psi\right) = -\frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\psi\right) = \tag{19}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\partial S}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right\} = -\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\partial S}{\partial x}\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\psi\right) + \psi\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right\} = -\frac{i}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\psi - \frac{i}{\hbar}\psi\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$$

Дәл осы сияқты:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = -\frac{i}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2\psi - \frac{i}{\hbar}\psi\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \tag{20}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{i}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\psi - \frac{i}{\hbar}\psi\frac{\partial^2 S}{\partial z^2} \tag{21}$$

Енді (16a)–дағы $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ мүшені есептейік:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\exp(-\frac{i}{\hbar}S)\right) = -\frac{i}{\hbar}\exp(-\frac{i}{\hbar}S)\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\psi\frac{\partial S}{\partial t} \tag{22}$$

(19)–(22) теңдіктерінің барлығын (16a)–ға қойғанда:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right\} + U(x,y,z,t) + \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)S$$

$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – Лаплас операторын ескерсек:

$$\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right\}+U(x,y,z,t)+\frac{i\hbar}{2m}\Delta S \quad (23)$$

S функцияны $i\hbar$–тың дәрежелері бойынша қатарға жіктейік: $S=(i\hbar)^0 S_0+(i\hbar)^1 S_1+(i\hbar)^2 S_2+\dots$. Бұл жерде $(i\hbar)^0=1$ болатынын ескеріп, тек $(i\hbar)^1$ мүшелермен ғана шектелеміз:

$$S=S_0+(i\hbar)^1 S_1+(i\hbar)^2 S_2+\dots \quad (24)$$

Осыны (23)–ке қойсақ:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial S_1}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left\{\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial y}+i\hbar\frac{\partial S_1}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial z}+i\hbar\frac{\partial S_1}{\partial z}\right)^2\right\}+U(x,y,z,t)+$$
$$+\frac{i\hbar}{2m}\left\{\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}+i\hbar\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial y^2}+i\hbar\frac{\partial^2 S_1}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial z^2}+i\hbar\frac{\partial^2 S_1}{\partial z^2}\right\}$$

Жақшаларды ашып, $\hbar^0,\hbar^1,\hbar^2$–ге көбейтіліп тұрған мүшелерді жинақтап жазамыз:

$$\hbar^0\left\{\frac{\partial S_0}{\partial t}-\frac{1}{2m}\left(\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2\right)-U(x,y,z,t)\right\}+$$
$$+i\hbar\left\{\frac{\partial S_1}{\partial t}-\frac{1}{2m}\left(2\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x}+2\frac{\partial S_0}{\partial y}\frac{\partial S_1}{\partial y}+2\frac{\partial S_0}{\partial z}\frac{\partial S_1}{\partial z}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial z^2}\right)\right\}-$$
$$-\frac{i^2\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_1}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_1}{\partial z}\right)^2+\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S_1}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S_1}{\partial z^2}\right\}=0$$

Бұл теңдік орындалуы үшін сол жақта тұрғандардың әрқайсысы нөлге тең болуы тиіс:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t}-\frac{1}{2m}\left(\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2\right)-U(x,y,z,t)=0 \quad (25)$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial t}-\frac{1}{2m}\left(2\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x}+2\frac{\partial S_0}{\partial y}\frac{\partial S_1}{\partial y}+2\frac{\partial S_0}{\partial z}\frac{\partial S_1}{\partial z}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S_0}{\partial z^2}\right)=0 \quad (26)$$

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_1}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_1}{\partial z}\right)^2+\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 S_1}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 S_1}{\partial z^2}=0 \quad (27)$$

(25)–тен:

$$\frac{\partial S_0}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2\right)+U(x,y,z,t) \quad (25a)$$

(26)–теңдеуді

$$\frac{\partial S_1}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(2\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x}+2\frac{\partial S_0}{\partial y}\frac{\partial S_1}{\partial y}+2\frac{\partial S_0}{\partial z}\frac{\partial S_1}{\partial z}+\Delta S_0\right) \qquad (26в)$$

Дәл осындай жолдармен (27)–ден мынаны аламыз:

$$\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S_1}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S_1}{\partial z}\right)^2=-\Delta S_1 \qquad (27a)$$

Олай болса, (25a)–теңдеуі Гамильтон–Якоби теңдеуіне, ал (26в)–теңдеуі (15)-түрдегі үзіліссіздік теңдеуіне сәйкес келеді екен:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=\frac{1}{m}\left(\nabla S_0\nabla\rho+\rho\Delta S_0\right) \qquad (27c)$$

Осы айтқанымыз дәлелді болуы үшін (26в)–ны түрлендіріп жазайық:

$$\frac{\partial S_1}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(2\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x}+\frac{\partial S_0}{\partial y}\frac{\partial S_1}{\partial y}+\frac{\partial S_0}{\partial z}\frac{\partial S_1}{\partial z}\right)+\Delta S_0\right) \qquad (26c)$$

Мына көбейтіндіні қарастыра кетейік:

$$\nabla S_0\nabla S_1=\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1+\frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2+\frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3\right)S_0\right\}\times\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_1+\frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_2+\frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_3\right)S_1\right\}=$$
$$=\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x}+\frac{\partial S_0}{\partial y}\frac{\partial S_1}{\partial y}+\frac{\partial S_0}{\partial z}\frac{\partial S_1}{\partial z}$$

Осыны (26c)–ға қолдансақ, онда

$$\frac{\partial S_1}{\partial t}=\frac{1}{2m}\left(2\nabla S_0\nabla S_1+\Delta S_0\right) \qquad (28)$$

Бөлшектің $M(x,y,z)$ нүктесінің маңайынан табылу ықтималдылығы [7]

$$\rho=|\psi|^2 \qquad (29)$$

Бұл жерде $|\psi|=\sqrt{\exp\left(-\frac{iS}{\hbar}\right)^2}$, ал оның квадраты:

$$|\psi|^2=\exp\left(-\frac{2iS}{\hbar}\right) \qquad (30)$$

Осыған (24)–ші қатардағы екінші тұрған $S=i\hbar S_1$ мүшені қойғанда:

$$|\psi|^2=\exp\left(-\frac{2i}{\hbar}i\hbar S_1\right)=\exp\left(2S_1\right)$$

Бұны (29)–ға қойғанда:

$$\rho = \exp\left(2S_1\right) \tag{29a}$$

Мысал үшін, осы теңдіктен *x* бойынша дербес туынды алайық:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\exp(2S_1)\right) = 2\exp(2S_1)\frac{\partial S_1}{\partial x} \tag{31}$$

Дәл осы сияқты

$$\nabla \rho = \nabla\left(\exp(2S_1)\right) = 2\nabla S_1 \exp(2S_1) \tag{32}$$

(31) сияқты (29a)–дан *t* бойынша дербес туынды алайық:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2\exp(2S_1)\frac{\partial S_1}{\partial t} \tag{33}$$

(32)–ден:

$$\nabla S_1 = \frac{\nabla \rho}{2\exp(2S_1)} \tag{32a}$$

Ал (33)–тен:

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{\dfrac{\partial \rho}{\partial t}}{2\exp(2S_1)} \tag{33a}$$

$\rho = \exp\left(2S_1\right)$ болатынын ескеріп ((29a)–бойынша) (32a) мен (33a)–дан:

$$\nabla S_1 = \frac{\nabla \rho}{2\rho}\ ,\ \frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{2\rho}\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Осы екеуін (28)–ге қойсақ:

$$\frac{1}{2\rho}\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(2\nabla S_0 \frac{\nabla \rho}{2\rho} + \Delta S_0\right)$$

Теңдіктің екі жағын 2ρ–ға көбейтсек, нәтижеде (27c)–теңдеуі шығады:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{m}\left(\nabla S_0 \nabla \rho + \rho \Delta S_0\right)$$

Сонымен, біз Шредингер теңдеуінен (27c)-түрінде жазылатын үзіліссіздік теңдеуін алдық, бұл теңдеу классикалық Гамильтон–Якоби теңдеуі арқылы алынған болатын. Олай болса, бұл айтылғандарды қысқа түрде Шредингер теңдеуінен Гамильтон-Якоби теңдеуіне өту деп те қабылдасақ болады.

Дискуссия

Мақалада қойылған тақырыптық мақсаттағы мәселені шешу үшін орындалған есептеулер кезінде жуықтаулар тәсілі қолданылып, ондағы қатардың тек бірінші дәрежелі мүшелері ғана ескерілді (бірінші реттік жуықтау). Аталған шектеулер арқылы бірдей нәтижелер алынғанымен, екінші жуықтаулар ықтималдылық пен бөлшектер санының сақталу заңын өзара үйлесімді сипатта іздеуге жағдай жасады. Бөлшектер санының сақталуы мен ықтималдылықтың өзгермеуі арасындағы идеялық ұқсастық теңдеуді интегралдау арқылы іске асырылды. Мақалада қарастырылған теңдеулер кәдуілгі және дербес туындылы дифференциалдық теңдеулердің дәрежері бойынша және сипаты жағынан сызықты, сызықты емес қасиеттермен ерекшеленетіні ескерілді. Гамильтон–Якоби теңдеуі арқылы классикалық механикадағы кез–келген есепті шешуге болатындығы [7,8] және Шредингер теңдеуінің квазиклассикалық жуықтаудағы рөлі айқындалды. Мақалада қойылған математикалық шарттар мен шектеулердің физикалық астарлары да шешімдермен бірге талданып отырды.

Қорытынды

Шредингер теңдеуі координата мен уақытқа тәуелді толқындық функцияны табуға, бөлшектің кеңістіктік нүктесінде болу ықтималдылығының тығыздығын анықтауға мүмкіндік жасайды. Бұл шамалар бөлшектің кванттық күйінің негізгі сипаттамалары болып табылады. Шредингер теңдеуі кеңістік пен уақыттың симметриясын ескеретін болғандықтан, одан массаның, зарядтың және т.б. сақталу заңдарын шығарып алуға болады. Сондай сақталу заңдарының бірі-күй ықтималдылығының сақталу заңы, оның математикалық өрнегі–үзіліссіздік теңдеуі.

Гамильтон-Якоби теңдеуі біріншіден, еркіндік дәрежелер санына шектеу қойылмаған механикалық жүйенің динамикасына жауапты; екіншіден, аналитикалық механиканың негізгі теңдеуі; үшіншіден, Шредингер теңдеуінің классикалық шектік жағдайы болып табылады [8]. Келтірілген осы мәліметтердің дәлелі ретінде бұл мақалада Шредингер теңдеуінен Гамильтон-Якоби теңдеуін және үзіліссіздік теңдеуін шығарып алу бағытындағы арналған есептеулер орындалды. Сонымен бірге, үзіліссіздік теңдеуін Гамильтон-Якоби теңдеуінен де шығаруға болатындығы көрсетілді. Бұл жерде әсерлік функция дәрежелік қатарға жіктеліп, қатардың тек бірінші дәрежелі мүшелері ғана ескерілді (бірінші реттік жуықтау). Бұрындары бұл мәселе Планк тұрақтысын өте аз шама деп алу арқылы шешілетін (квазиклассикалық жуықтау).

Пайдаланылған дереккөздердің тізімі

[1] Stephane A., B.Florence Electron Mass Predicted From Substructure Stability in Electrodinamical Model // Frontiers in Physics. – 2020. – 8. DOI 10.3389/fphy. 2020.00213

[2] Ольчак А.С. О связи квантовой неопределенности и классических сил. // Вестник НИЯУ МИФИ. 2021. № 6. С. 505-508. https://doi.org/10.56304/S2304487X21060079

[3] Давыдов А.П., Злыднева Т.П. Интерференция электромагнитных волн с точки зрения волновой функции фотона в координатном представлении. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2018. № 8. С. 27-40. DOI: 10.18127/j15604128-201808-04

[4] Белинский А.В. Квантовая неопределенность и контрпример нелокального классического "реализма". // Оптика и спектроскопия. 2017. № 3. С. 393-399. DOI: 10.7868/S0030403417090070

[5] Коштыбаев Т.Б., Алиева М.Е., Татенов А.М. Кванттық-механикалық жүйелердің математикалық негіздемесі. // Абай атындағы ҚазҰПУ хабаршысы, физика-математика ғылымдары сериясы. 2024. №2. С. 83-95. DOI:10.51889/2959-5894.2024.86.2.008

[6] Лаптухов А.И. Электродинамика фотона и его структура как сгустка одного из многих возможных состояний электромагнитного поля. // Журнал технической физики. 2017. № 10. С. 1466-1474. https://doi.org/10.21883/JTF.2017.10.44988.2204

[7] Журавлев В.М. Принцип материальности пространства и фундаментальные поля. // Пространство, время и фундаментальные взаимодействия. 2020. № 3. С. 37-57. DOI: 10.17238/issn2226-8812.2020.3.37-57

[8] Қоштыбаев Т.Б., Алиева М.Е., Камал Б.Ә., Құткелдиева Э.О. Дененің бірқалыпты және бірқалыпсыз қозғалыстарының математикалық негіздемесі. // Абай атындағы ҚазҰПУ хабаршысы, физика-математика ғылымдары сериясы. 2024. № 1. С. 80-92. DOI:10.51889/2959-5894.2024.85.1.008

[9] Қоштыбаев Т.Б., Ақжолова Ә.Ә., Татенов А.М., Алиева М.Е. Механикалық қозғалыстардың математикалық бастамалары. // Қазақстан Республикасы Ұлттық инженерлік академиясының

хабаршысы, «Қолданбалы математика». 2024. №3. С. 329-341. https://doi.org/10.47533/2024.1606-146X.72

References

[1] Stephane, A. (2020) Electron Mass Predicted From Substructure Stability in Electrodinamical Model. Frontiers in Physics. № 8. DOI 10.3389/fphy. 2020.00213

[2] Ol'chak A.S. (2021) O svjazi kvantovoj neopredelennosti i klassicheskih sil [On the connection between quantum uncertainty and classical forces]. Vestnik nacional'nogo issledovatel'skogo jadernogo universiteta Moskovskij inzhenerno-fizicheskij institut. № 6, 505-508. (In Russian) https://doi.org/10.56304/S2304487X21060079

[3] Davydov A.P., Zlydneva T.P. (2018) Interferencija jelektromagnitnyh voln s tochki zrenija volnovoj funkcii fotona v koordinatnom predstavlenii [Interference of electromagnetic waves from the point of view of the photon wave function in the coordinate representation]. Jelektromagnitnye volny i jelektronnye sistemy. №8, 27-40. (In Russian) DOI: 10.18127/j15604128-201808-04

[4] Belinskij A.V. (2017) Kvantovaja neopredelennost' i kontrprimer nelokal'nogo klassicheskogo "realizma" [Quantum uncertainty and a counterexample of non-local classical "realism"]. Optika i spektroskopija. №3, 393-399. (In Russian) DOI: 10.7868/S0030403417090070

[5] Koshtybayev T., Aliyeva M., Tatenov A. (2024) Kvanttyk-mehanikalyk zhujelerdin matematikalyk negizdemesi [Mathematical justification of quantum-mechanical systems]. Abaj atyndagy KazUPU habarshysy, fizika-matematika gylymdary serijasy. №2, 83-95. (In Kazakh) DOI:10.51889/2959-5894.2024.86.2.008

[6] Laptuhov A.I. (2017) Jelektrodinamika fotona i ego struktura kak sgustka odnogo iz mnogih vozmozhnyh sostojanij jelektromagnitnogo polja [The electrodynamics of a photon and its structure as a cluster of one of the many possible states of the electromagnetic field]. Zhurnal tehnicheskoj fiziki. № 10, 1466-1474. (In Russian) https://doi.org/10.21883/JTF.2017.10.44988.2204

[7] Zhuravlev V.M. (2020) Princip material'nosti prostranstva i fundamental'nye polja [The principle of the materiality of space and fundamental fields]. Prostranstvo, vremja i fundamental'nye vzaimodejstvija. № 3, 37-57. (In Russian) DOI:10.17238/issn2226-8812.2020.3.37-57

[8] Koshtybayev T., Aliyeva M., Kamal B., Kutkeldiyeva E. (2024) Denenin birkalypty zhane birkalypsyz kozgalystarynyn matematikalyk negizdemesi [Mathematical justification of smooth and uneven body movements]. Abaj atyndagy KazUPU habarshysy, fizika-matematika gylymdary serijasy. №1, 80-92. (In Kazakh) DOI:10.51889/2959-5894.2024.85.1.008

[9] Koshtybayev T., Akzholova A., Tatenov A., Aliyeva M. (2024) Mehanikalyk kozgalystardyn matematikalyk bastamalary [Mathematical beginnings of mechanical movements]. Kazakstan Respublikasy Ulttyk inzhenerlik akademijasynyn habarshysy, «Koldanbaly matematika». №3. 329-341. (In Kazakh) https://doi.org/10.47533/2024.1606-146X.72