EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. XVI KÖIDE
FÜÜSIKA * MATEMAATIKA. 1967, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ XVI
ФИЗИКА * МАТЕМАТИКА. 1967, № 2
https://doi.org/10.3176/phys.math.1967.2.03

Л. АЙНОЛА

ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Вариационный принцип, содержащий волновую функцию ψ и комплексно-сопряженную волновую функцию ψ^*, для зависящего от времени уравнения Шредингера общеизвестен [1]. В недавно опубликованной работе [2] уравнение Шредингера преобразуется к виду интегро-дифференциального уравнения и для последнего, аналогично случаю уравнения Шредингера для стационарных состояний, выводится вариационный принцип, где варьируемой величиной является только волновая функция ψ.

В настоящей заметке приводится вариационная формулировка, содержащая только волновую функцию ψ, непосредственно для дифференциального уравнения Шредингера. Показывается взаимоотношение между представленным вариационным принципом и ранее известными вариационными принципами. Как приложение, из сформулированного вариационного принципа выводится закон взаимности для квантовой механики.

1. Сформулируем следующую смешанную задачу для уравнения Шредингера. Найти решение $\psi(x, t)$ уравнения

$$-\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla^2 \psi + V\psi = i\hbar\, \partial\psi/\partial t, \quad x \in R, \quad t > 0 \tag{1.1}$$

при начальном условии

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad x \in R \tag{1.2}$$

и краевом условии

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) \quad x \in B, \quad t > 0. \tag{1.3}$$

Здесь R — ограниченная область в n-мерном эвклидовом пространстве; $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ — точка в R; B — краевая поверхность области R и $V(x)$, $\psi_0(x)$, $\psi_1(x, t)$ — заданные функции.

Введем обозначения

$$f * g = \int_0^\tau f(x, t)\, g(x, \tau - t)\, dt \tag{1.4}$$

$$\nabla f * \nabla g = \sum_{i=1}^{n} \partial f/\partial x_i * \partial g/\partial x_i. \tag{1.5}$$

Известные вариационные принципы для задачи (1.1)—(1.3) основываются на следующих функционалах [1, 2]:

$$J = \int_0^\tau \int_R \{\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla \psi \nabla \psi^* - \hbar (2i)^{-1} [\psi^* \partial\psi/\partial t - \\ - \partial\psi^*/\partial t \psi] - \psi^* V \psi\} dV dt \tag{1.6}$$

и

$$J = \int_R \{(V \ast \psi + 2i\psi_0 + i\psi) \ast \psi + k \ast \nabla \psi \ast \nabla \psi\} dV. \tag{1.7}$$

Уравнениями Эйлера—Лагранжа функционала (1.6) являются уравнение (1.1) и уравнение для комплексно-сопряженной функции

$$-\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* = -i\hbar\, \partial\psi^*/\partial t, \tag{1.8}$$

а в случае функционала (1.7) интегро-дифференциальное уравнение

$$i(\psi - \psi_0) = -k \ast \nabla^2 \psi + V \ast \psi. \tag{1.9}$$

Покажем, что можно сформулировать вариационную задачу непосредственно для уравнения Шредингера (1.1).

Легко доказать справедливость следующего вариационного принципа.

Функционал

$$J = 1/2 \int_R \{\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla \psi \ast \nabla \psi + V\psi \ast \psi - i\hbar\, \partial\psi/\partial t \ast \psi - \\ - i\hbar [1/2\psi(x, 0) - \psi_0] \psi(x, \tau)\} dV - \int_B \hbar^2 (2m)^{-1} (\psi - \psi_1) \ast \nabla \psi \mathbf{n}\, dS, \tag{1.10}$$

в котором $\psi(x, t)$ — произвольная функция, определенная при $x \in R$, $0 \leqslant t \leqslant \tau$, имеет стационарное значение

$$\delta J = 0 \tag{1.11}$$

тогда и только тогда, когда функция $\psi(x, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера (1.1) и краевому условию (1.3) в промежутке времени $0 < t < \tau$, а также начальному условию (1.2).

Основную часть функционала (1.10) можно получить из (1.6), если там сделать замену

$$\psi^*(x, t) = \psi(x, \tau - t). \tag{1.12}$$

В этом случае уравнение (1.8) совпадает с уравнением Шредингера (1.1).

Для вывода функционала (1.10) из функционала (1.7) надо провести его дифференцирование по параметру τ.

Приводим теперь доказательство принципа (1.11). Выпишем вариацию

$$\delta J = \int_R \{\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla \psi \overset{*}{} \nabla \delta\psi + V\psi \overset{*}{} \delta\psi - 1/2\, i\hbar\, \partial\psi/\partial t \overset{*}{} \delta\psi -$$

$$- i\hbar\psi \overset{*}{} \partial\delta\psi/\partial t - i\hbar [1/2\psi(x,0) - \psi_0]\, \delta\psi(x,\tau) - 1/2 i\hbar\psi(x,\tau)\, \delta\psi(x,0)\}\, dV -$$

$$- \hbar^2 (2m)^{-1} \int_B [(\psi - \psi_1) \overset{*}{} \delta \nabla \psi \mathbf{n} + \nabla \psi \mathbf{n} \overset{*}{} \delta\psi]\, dS. \tag{1.13}$$

Используя формулу Остроградского, можно выражение (1.13) преобразовать к виду

$$\delta J = \int_R \{[-\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla^2 \psi + V\psi - i\hbar\, \partial\psi/\partial t] \overset{*}{} \delta\psi -$$

$$- i\hbar [\psi(x,0) - \psi_0]\, \delta\psi(x,\tau)\}\, dV - \hbar^2 (2m)^{-1} \int_B (\psi - \psi_1) \overset{*}{} \delta \nabla \psi \mathbf{n}\, dS. \tag{1.14}$$

При помощи фундаментальной леммы вариационного исчисления из выражения (1.14) непосредственно следует, что для выполнения условия $\delta J = 0$ необходимо и достаточно, чтобы функция $\psi(x,t)$ являлась решением уравнения (1.1) при начальном и краевом условиях (1.2), (1.3).

Отметим, что из вариационного принципа (1.11) можно вывести при помощи дифференцирования и интегрирования по параметру τ две последовательности эквивалентных вариационных принципов.

2. В качестве примера применения вариационного принципа (1.11) выведем при его помощи закон взаимности для квантовой механики.

Выражение (1.13) может быть преобразовано к виду

$$\delta J = \int_R \{[-\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla^2 \delta\psi + V\delta\psi - i\hbar\, \partial\delta\psi/\partial t] \overset{*}{} \psi + i\hbar\, \psi_0 \delta\psi(x,\tau) -$$

$$- i\hbar\psi(x,\tau)\, \delta\psi(x,0)\}\, dV + \hbar^2 (2m)^{-1} \int_B (\psi_1 \overset{*}{} \delta \nabla \psi \mathbf{n} - \nabla \psi \mathbf{n} \overset{*}{} \delta\psi)\, dS. \tag{2.1}$$

Используем теперь тот факт, что если $\psi(x,t)$ — решение уравнения Шредингера (1.1) при начальном и краевом условиях (1.2), (1.3), то условие (1.11) выполнено при любом выборе вариации $\delta\psi(x,t)$.

Обозначим

$$\delta\psi(x,t) = \psi'(x,t) \tag{2.2}$$

и предположим, что $\psi'(x,t)$ является решением уравнения Шредингера

$$-\hbar^2 (2m)^{-1} \nabla^2 \psi' + V\psi' = i\hbar\, \partial\psi'/\partial t, \quad x \in R, \quad t > 0 \tag{2.3}$$

при начальном условии

$$\psi'(x,0) = \psi_0'(x), \quad x \in R \tag{2.4}$$

и краевом условии

$$\psi'(x,t)=\psi_1'(x,t),\quad x\in B,\quad t>0. \tag{2.5}$$

Введя соотношения (2.2)—(2.5) в выражение (2.1), получим из условия (1.11) следующий закон взаимности:

$$i\int\limits_R \psi_0\psi'(x,\tau)\,dV+\hbar(2m)^{-1}\int\limits_B \psi_1^*\nabla\psi'\mathbf{n}dS=$$

$$=i\int\limits_R \psi_0'\psi(x,\tau)\,dV+\hbar(2m)^{-1}\int\limits_B \psi_1'^*\nabla\psi\mathbf{n}dS. \tag{2.6}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Морс Ф. М., Фешбах Г., Методы теоретической физики, т. I, М., 1958.
2. Gurtin M. E., J. Math. Phys., 6, 1506 (1965).

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
4/XI 1966

L. AINOLA

VARIATSIOONPRINTSIIP SCHRÖDINGERI VÕRRANDI JAOKS

Esitatakse funktsionaal, mille statsionaarsustingimusteks on ajast sõltuv Schrödingeri võrrand vastavatel alg- ja ääretingimustel. Variatsioonprintsiibi kasutamise näitena leitakse selle abil kvantmehaanika vastastikuse mõju seadus.

L. AINOLA

VARIATIONAL PRINCIPLE FOR THE SCHRÖDINGER EQUATION

A functional which has as necessary conditions of stationarity the time-dependent Schrödinger equation and corresponding initial and boundary conditions, is presented. As an example of application of the variational principle, the reciprocity theorem in quantum mechanics is derived.