С. В. ДАНОВ

СВЯЗЬ МЕЖДУ КЛАССИЧЕСКИМИ УРАВНЕНИЯМИ ГАМИЛЬТОНА И КВАНТОВЫМ УРАВНЕНИЕМ ШРЕДИНГЕРА

1. Уравнения Гамильтона и квантовое уравнение Шредингера

Рассматривается движение частиц в потенциальном силовом поле, которое описывается классическими каноническими уравнениями Гамильтона:

$$\dot{\vec{p}} = \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \text{ (a)}, \quad \vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \text{ (b)} \qquad (1,1)$$

и сопряженными с ними уравнениями Гамильтона — Якоби:

$$H = -\frac{\partial S}{\partial t} \text{ (a)}, \quad \vec{p} = \frac{\partial S}{\partial \vec{r}} = \nabla S \text{ (b)}. \qquad (1,2)$$

Доказывается, что из законов классической механики (1,1) и (1,2) выводится квантовое уравнение Шредингера. С этой целью в законы классической механики вместо функции действия S вводится новая переменная ψ, по формуле:

$$S = -i\hbar \frac{i}{\hbar} S = -i\hbar \ln e^{\frac{i}{\hbar}S} = -i\hbar \ln \psi, \quad \psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}. \qquad (1,3)$$

Функция ψ будет комплексной, т. к. S — действительная функция. Чтобы найти вид оператора импульса $\hat{\vec{p}}$ и гамильтониана $\hat{H}$ подставим S из (1,3) в (1,2);

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \text{ (a)}, \quad \vec{p}\psi = -i\hbar \nabla\psi \text{ (b)}. \qquad (1,4)$$

Отсюда находим вид операторов $\hat{H}$ и $\hat{\vec{p}}$:

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \text{ (a)}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \text{ (b)}. \qquad (1,5)$$

Доказывается, что функция ψ есть собственная функция операторов $\hat{H}$ и $\hat{\vec{p}}$:

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\partial S}{\partial t}\right)\psi = H\psi \text{ (a)}, \quad \hat{\vec{p}}\psi = -i\hbar\nabla\psi = (\nabla S)\psi = \vec{p}\psi \text{ (b)}. \tag{1,6}$$

Поэтому (1,6a) есть квантовое уравнение Шредингера для функции ψ. Записав уравнение Гамильтона — Якоби (1,2a) в развернутом виде:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U = 0, \tag{1,7}$$

подставляя сюда S из (1,3) и производя дифференцирование, найдем:

$$-\frac{i\hbar}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\nabla\psi}{\psi}\right)^2 + U = 0. \tag{1,8}$$

Вычисляя $\nabla^2 S = \operatorname{div}\vec{p} = m\operatorname{div}\vec{v} = -m\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\left(\frac{d\vec{p}}{dt}\right)$ и учитывая, что из уравнений (1,1) и (1,2) следует: $\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\partial\vec{p}}{\partial t}$, находим:

$$\nabla^2 S = 0 \text{ (a)}, \quad \left(\frac{\nabla\psi}{\psi}\right)^2 = \frac{\nabla^2\psi}{\psi} \text{ (b)}. \tag{1,9}$$

Учитывая (1,9b) можем уравнение (1,8) записать в виде квантового уравнения Шридингера для функции ψ:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - U\psi = 0. \tag{1,10}$$

Отсюда находим вид гамильтониана $\hat{H}$, для частицы движущейся в потенциальном поле:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U. \tag{1,11}$$

Доказывается, что функция

$$\psi' = ae^{\frac{i}{\hbar}S} \tag{1,12}$$

также удовлетворяет уравнению Шредингера, причем a есть произвольная функция координат x, y, z и времени t. Вводя обозначения:

$$S' = S - S_0 \text{ (a)}, \text{ где } S_0 = i\hbar\ln a \text{ (b)}, \tag{1,13}$$

можем (1,12) записать так:

$$\psi' = e^{\frac{i}{\hbar}S'} \text{ (a)}, \text{ где } S' = -i\hbar\ln\psi' \text{ (b)}. \tag{1,14}$$

Применяя к ψ' оператор $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U$, получим:

$$\hat{H}\psi' = i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \left(-\frac{\partial S'}{\partial t}\right)\psi' = H''\psi'. \tag{1,15}$$

Отсюда видно, что ψ' есть собственная функция оператора Гамильтона $\hat{H}$, а $-\frac{\partial S'}{\partial t} = H'$ — его собственное значение, следовательно для функции ψ' будет иметь место уравнение Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \hat{H}\psi' = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi' + U\psi', \tag{1,16}$$

что и требовалось доказать.

2. Об инвариантности классических уравнений Гамильтона и квантового уравнения Шредингера

Пусть $Oxyz$ — неподвижная система координат, в которой имеют место классические уравнения Гамильтона (1,1), (1,2) и квантовое уравнение Шредингера (1,10). Рассмотрим другую систему координат $O'x'y'z'$, которая движется произвольным образом относительно неподвижной системы O. Уравнения Гамильтона (1,1) и (1,2) являются общековариантными, поэтому в движущейся системе O' они запишутся следующим образом:

$$\dot{\vec{p}}' = \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H'}{\partial \vec{r}'} \text{ (a)}, \quad \vec{v}' = \frac{d\vec{r}'}{dt} = \frac{\partial H'}{\partial \vec{p}'} \text{ (b)} \tag{2,1}$$

и

$$H' = -\frac{\partial S'}{\partial t} \text{ (a)}, \quad \vec{p}' = \frac{\partial S'}{\partial \vec{r}'} = \nabla' S' \text{ (b)}. \tag{2,2}$$

Для разности между функциями действия S и S', измеренными в системах O и O', введем обозначение:

$$S_0 = S - S'. \tag{2,3}$$

Вместо функций действия S, S' и S_0, введем новые переменные ψ, ψ' и a, по формулам:

$$\left.\begin{aligned} S &= -i\hbar\frac{i}{\hbar}S = -i\hbar\ln\psi, \quad \text{где} \quad \psi = e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad \text{(a)} \\ S' &= -i\hbar\frac{i}{\hbar}S' = -i\hbar\ln\psi', \quad \text{где} \quad \psi' = e^{\frac{i}{\hbar}S'} \quad \text{(b)} \\ S_0 &= -i\hbar\frac{i}{\hbar}S_0 = i\hbar\ln a, \quad \text{где} \quad a = e^{-\frac{i}{\hbar}S_0} \quad \text{(c)} \end{aligned}\right\} \tag{2,4}$$

Подставляя из (2,4) в (2,3) значения функций S, S' и S_0, находим:

$$i\hbar \ln a = -i\hbar \ln \varphi + i\hbar \ln \psi'. \qquad (2,5)$$

Отсюда потенцированием получим:

$$\psi' = a\psi = ae^{\frac{i}{\hbar}S}. \qquad (2,6)$$

Если в системе координат O' с функцией $\psi' = e^{\frac{i}{\hbar}S'}$ проделать то же самое, что было сделано в первом разделе с функцией $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}$, то придем к выводу, что в системе координат O' функция ψ' будет удовлетворять квантовому уравнению Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi' - U\psi' = 0. \qquad (2,7)$$

Таким образом при переходе от неподвижной системы координат O, к произвольно движущейся системе координат O', квантовое уравнение Шредингера (1,10) не изменяет своей формы и переходит в квантовое уравнение Шредингера (2,7). Это значит, что уравнение Шредингера — общековариантно, а формула (2,6) определяет такое преобразование волновой функции ψ в волновую функцию ψ', относительно которого уравнение Шредингера является инвариантным.

3. Законы классической механики. Квантовые условия Зоммерфельда — Вильсона. Основные законы волновой механики.

Функция действия S, входящая в уравнение Гамильтона, зависит от $\vec{r}$ и t, поэтому:

$$dS(\vec{r}, t) = \frac{\partial S}{\partial t}dt + \frac{\partial S}{\partial \vec{r}}d\vec{r} = -H\,dt + \vec{p}\,d\vec{r}. \qquad (3,1)$$

Если нас интересуют только изменения функции действия S во времени, то в соответствии с формулой (3,1), получим:

$$dS(t) = -H\,dt. \qquad (3,2)$$

Если нас интересуют только изменения функции действия S в пространстве, то в соответствии с формулой (3,1), получим:

$$dS(\vec{r}) = \vec{p}\,d\vec{r}. \qquad (3,3)$$

Формула (3,1) определяет изменения функции действия S во времени и в пространстве.

В дальнейшем будем считать, что частица движется по траектории, которая является плоской и замкнутой кривой линией L, тогда интегрируя (3,2) и (3,3) по замкнутому контуру L (орбита частицы), получим:

$$\oint_L dS(t) = -\oint_L H\,dt \text{ (a)}, \quad \oint_L dS(\vec{r}) = \oint_L \vec{p}\,d\vec{r} \text{ (b)}. \qquad (3,4)$$

Введем вместо $S(t)$ и $S(\vec{r})$ новые обозначения ξ и η воспользовавшись очевидным алгебраическим тождеством:

$$\left.\begin{aligned} S(t) &= -i\hbar\frac{i}{\hbar}S(t) = -i\hbar\ln\xi, \text{ где } \xi = e^{\frac{i}{\hbar}S(t)} = e^{i\varphi}, \ \varphi = \frac{S(t)}{\hbar} \text{ (a)}, \\ S(\vec{r}) &= -i\hbar\frac{i}{\hbar}S(\vec{r}) = -i\hbar\ln\eta, \text{ где } \eta = e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r})} = e^{i\psi}, \ \psi = \frac{S(\vec{r})}{\hbar} \text{ (b)}, \end{aligned}\right\} \qquad (3,5)$$

тогда формулы (3,4) принимают следующий вид:

$$-\oint_L H\,dt = -i\hbar\oint_L \frac{d\xi}{\xi} = \hbar\oint_L d\varphi \text{ (a)},$$

$$\oint_L \vec{p}\,d\vec{r} = -i\hbar\oint_L \frac{d\eta}{\eta} = \hbar\oint_L d\psi \text{ (b)}. \qquad (3,6)$$

Но $\oint_L d\varphi = 2\pi$ и $\oint_L d\psi = 2\pi$, если контур L обойти один раз, а если контур L обходится n раз, то:

$$\oint_{L_n} d\varphi = 2\pi n \text{ (a)}, \quad \oint_{L_n} d\psi = 2\pi n \text{ (b)}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Если в формуле (3,6a) в интеграле, стоящем в левой части, контур L обойдем n раз по часовой стрелке, а в правой части — наоборот, тогда знак минус исчезает и если в (3,6b) этого не делать, то получим:

$$\oint_{L_n} H\,dt = 2\pi n\hbar = hn \text{ (a)}, \quad \oint_{L_n} \vec{p}\,d\vec{r} = 2\pi n\hbar = hn \text{ (b)},$$
$$n = 1, 2, 3, \ldots . \qquad (3,7)$$

Формула (3,7b) есть известные из классической квантовой механики условия Зоммерфельда — Вильсона. Учитывая, что $\vec{p}$ и $d\vec{r}$ имеют одинаковое направление найдем, что $\vec{p}\,d\vec{r} = p\,dr$, а т. к. в теории Гамильтона p и r есть независимые переменные, то при интегрировании по r импульс p можно вынести за знак интеграла и тогда из (3,7b) находим:

$$hn = 2\pi n\hbar = \oint_{L_n} p\,dr = p\oint_{L_n} dr = p\cdot\lambda n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots . \qquad (3,8)$$

Здесь через λ обозначена длина контура L (длина орбиты частицы). Из (3,8) находим:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \tag{3,9}$$

и

$$p = \frac{2\pi}{\lambda}\hbar = \hbar k, \quad \text{где} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}. \tag{3,10}$$

Если $\vec{n}$ есть единичный вектор вектора импульса $\vec{p} = p\vec{n}$, тогда умножая (3,10) на $\vec{n}$ получим:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad \text{где} \quad \vec{k} = k\vec{n} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}. \tag{3,11}$$

В дальнейшем будет доказано, что λ, k и $\vec{k}$ есть длина волны, волновое число и волновой вектор де-бройлевских волн, поэтому формула (3,11) есть одно из основных уравнений волновой механики, впервые установленное де-Бройлем, для частиц вещества.

Рассмотрим теперь стационарные орбиты, для которых $\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$ поэтому в интеграле, стоящем в левой части формулы (3,7а) функция Гамильтона H может быть вынесена за знак интеграла, тогда получим:

$$2\pi n\hbar = \oint\limits_{L_n} H\,dt = H\oint\limits_{L_n} dt = H \cdot Tn, \tag{3,12}$$

где T — период обращения частицы по орбите. Из (3,12) находим:

$$H = \frac{2\pi}{T}\hbar = 2\pi\nu\hbar = \hbar\omega, \tag{3,13}$$

где ω — циклическая частота обращения частицы по орбите. В дальнейшем будет доказано, что ω одновременно есть циклическая частота де-бройлевских волн, поэтому формула (3,13) есть одно из основных уравнений волновой механики, впервые в таком виде, для частиц вещества, записанное де-Бройлем.

Как выше было установлено, волну де-Бройля можно записать следующим образом:

$$\psi = a\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = a\exp(i\varphi), \quad \text{где} \quad \varphi = \frac{S}{\hbar}. \tag{3,14}$$

Учитывая, что:

$$dS = -H\,dt + \vec{p}\,d\vec{r}, \tag{3,15}$$

$$d\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial t}dt + \frac{\partial\varphi}{\partial\vec{r}}d\vec{r} = -\omega\,dt + \vec{k}\,d\vec{r}, \tag{3,16}$$

где $\omega = -\frac{\partial\varphi}{\partial t}$ и $\vec{k} = \frac{\partial\varphi}{\partial\vec{r}}$ есть циклическая частота и волновой вектор волн де-Бройля, и умножая (3,16) на $\hbar$, получим:

$$dS = -\hbar\omega\, dt + \hbar\vec{k}\, d\vec{r}. \qquad (3,17)$$

Сравнивая (3,15) и (3,17) находим:

$$H = \hbar\omega \text{ (a)}, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \text{ (b)}. \qquad (3,18)$$

Формула (3,18a) совпадает с (3,13), а формула (3,18b) совпадает с (3,10), поэтому в формулах (3,10) и (3,13) величины ω и $\vec{k}$ есть циклическая частота и волновой вектор де-бройлевской волны.

4. Квантовое уравнение Шредингера и законы классической механики

Для частицы, движущейся в потенциальном силовом поле имеет место квантовое уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \qquad (4,1)$$

в которое входит комплексная волновая функция ψ, являющаяся волной де-Бройля:

$$\psi = a\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = a\exp(i\varphi), \quad \left(\varphi = \frac{S}{\hbar}\right) \qquad (4,2)$$

где a и φ — амплитуда и фаза этой волны.

Введем в рассмотрение операторы импульса $\hat{\vec{p}}$ и энергии $\hat{H}$:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \text{ (a)}, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \text{ (b)} \qquad (4,3)$$

и докажем, что функция:

$$\psi' = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \qquad (4,4)$$

есть собственная функция операторов $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$:

$$\hat{\vec{p}}\psi' = -i\hbar\nabla\psi' = (\nabla S)\psi' \text{ (a)}, \quad \hat{H}\psi' = i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \left(-\frac{\partial S}{\partial t}\right)\psi' \text{ (b)}. \qquad (4,5)$$

Если через $\vec{p}$ и H обозначить собственные значения операторов $\vec{p}$ и $\hat{H}$, то из формул (4,5) найдем:

$$\vec{p} = \nabla S \text{ (a)}, \quad H = -\frac{\partial S}{\partial t} \text{ (b)}. \qquad (4,6)$$

Т. к. в (4,6) $\vec{p}$ есть импульс частицы, а H — ее функция Гамильтона, следовательно S есть функция действия частицы — таков физический смысл функции S входящей в волну де-Бройля (4,2): $\psi = a \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$. Сама волна де-Бройля ψ также является собственной функцией операторов $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$:

$$\hat{\vec{p}}\psi = -i\hbar \nabla\psi = (\nabla S')\psi \text{ (a)}, \quad \hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\partial S'}{\partial t}\right)\psi \text{ (b)}, \tag{4,7}$$

где были введены следующие обозначения:

$$S' = S - S_0 \text{ (a)}, \quad S_0 = i\hbar \ln a \text{ (b)}. \tag{4,8}$$

Обозначая через $\vec{p}'$ и H' — собственные значения операторов $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$, из (4,7) найдем:

$$\vec{p}' = \nabla S' \text{ (a)}, \quad H' = -\frac{\partial S'}{\partial t} \text{ (b)}. \tag{4,9}$$

В волне де-Бройля $\psi = a \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$ функции a и S — действительные, поэтому из (4,8) следует, что S' будет комплексной функцией, следовательно $\vec{p}'$ и H' будут также комплексными функциями. Но $\vec{p}'$ и H' есть собственные значения операторов $\hat{\vec{p}}$ и $\hat{H}$ и по своему физическому смыслу функции $\vec{p}'$ и H' не могут быть комплексными, или мнимыми, они должны быть только действительными функциями. Это значит, что в уравнениях (4,9) нужно отбросить их мнимые части и сохранить только действительные части, что приводит к следующим двум уравнениям:

$$\vec{p} = \nabla S \text{ (a)}, \quad H = -\frac{\partial S}{\partial t} \text{ (b)}, \tag{4,10}$$

которые есть классические уравнения Гамильтона — Якоби. Следовательно, в волне де-Бройля $\psi = a \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$, удовлетворяющей уравнению Шредингера (4,1), функция S есть функция действия частицы и она удовлетворяет законам классической механики (4,10). Эти последние законы непосредственно вытекают из уравнения Шредингера (4,1), без всяких предельных переходов. Вопрос этот более подробно будет рассмотрен в следующем разделе.

5. О предельном переходе в квантовой механике

Вопрос о предельном переходе в квантовой механике решается следующим образом. В квантовое уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi - U\psi = 0 \tag{5,1}$$

подставляют значение ψ в форме волны де-Бройля:

$$\psi = a \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \tag{5,2}$$

после чего уравнение Шредингера (5,1) расщепляется на два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 a}{a} = 0 \tag{5,3}$$

и

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div}\left(w \frac{\nabla S}{m}\right) = 0, \tag{5,4}$$

где $w = \psi\psi^*$ — плотность вероятности.

Для осуществления предельного перехода полагают $h \to 0$, тогда из (5,3) получают классическое уравнение Гамильтона — Якоби:

$$\frac{\partial S'}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U = 0. \tag{5,5}$$

В действительности, классическое уравнение Гамильтона — Якоби (5,5) может быть получено непосредственно из квантового уравнения Шредингера (5,1) независимо от значений постоянной Планка h, как это будет показано в дальнейшем.

Введем в рассмотрение функцию:

$$\psi^* = a \exp\left(-\frac{i}{\hbar} S\right), \tag{5,6}$$

которая является комплексно сопряженной с функцией ψ и удовлетворяет квантовому уравнению Шредингера:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* - U\psi^* = 0 \tag{5,7}$$

комплексно сопряженному с уравнением Шредингера (5,1).

Логарифмируя формулу (5,2) получим:

$$S = -i\hbar \ln\frac{\psi}{a} = -i\hbar \ln\psi' = -i\hbar \ln\psi + i\hbar \ln a = S' - S_0, \tag{5,8}$$

где были введены следующие обозначения:

$$\left.\begin{aligned} S &= -i\hbar \ln\psi', & \psi' &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \text{ (a)},\\ S' &= -i\hbar \ln\psi, & \psi &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S'\right) \text{ (b)},\\ S_0 &= -i\hbar \ln a, & a &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0\right) \text{ (c)}. \end{aligned}\right\} \tag{5,9}$$

Если из формулы (5,9b) в уравнение Шредингера (5,1) подставить значение $\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S'\right)$, то получим уравнение:

$$\frac{\partial S'}{\partial t} + \frac{(\nabla S')^2}{2m} + U + \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S' = 0. \qquad (5,10)$$

Теперь докажем, что все три функции S, S' и S_0, введенные по формулам (5,9), удовлетворяют уравнению Лапласа.

Учитывая, что $w = \psi\psi^* = a^2$, $\psi^* = \frac{a^2}{\psi} = a^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} S'\right)$ и подставляя этот результат в уравнение Шредингера (5,7), а затем принимая во внимание (5,10), найдем:

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \frac{\nabla S' \, \nabla a^2}{m} + \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 a^2 = 0. \qquad (5,11)$$

Из формул (5,8) и (5,9) находим:

$$\nabla S' = \nabla S - i\hbar \frac{\nabla a}{a}. \qquad (5,12)$$

Это значение $\nabla S'$ подставляем в уравнение (5,11), к полученному результату прибавим и отнимем $\frac{a^2 \nabla^2 S}{m}$, а затем учтем уравнение неразрывности (5,4), тогда умножив полученный результат на $\frac{1}{a^2}$, найдем:

$$\nabla^2 S - i\hbar\left[\frac{\nabla^2 a}{a} - \left(\frac{\nabla a}{a}\right)^2\right] = 0. \qquad (5,13)$$

Здесь было учтено, что $\nabla^2 a^2 = 2a\nabla^2 a + 2(\nabla a)^2$. Входящие в уравнение (5,13) функции a и S являются действительными функциями, поэтому уравнение распадается на два уравнения:

$$\nabla^2 S = 0 \qquad (5,14)$$

и

$$-i\hbar\left[\frac{\Delta^2 a}{a} - \left(\frac{\nabla a}{a}\right)^2\right] = \nabla^2(-i\hbar \ln a) = \nabla^2 S_0 = 0. \qquad (5,15)$$

Из (5,12), если учесть (5,14) и (5,15), найдем:

$$\nabla^2 S' = 0. \qquad (5,16)$$

Согласно (5,16) уравнение (5,10) принимает следующий вид:

$$\frac{\partial S'}{\partial t} + \frac{(\nabla S')^2}{2m} + U = 0. \qquad (5,17)$$

Таким образом убеждаемся, что функция S', введенная по формуле (5,8), удовлетворяет уравнению (5,17) подобному классическому уравнению Гамильтона — Якоби. Это уравнение мы не назвали классическим уравнением Гамильтона — Якоби потому, что в нем функция S' — комплексная, как это видно из формул (5,8) и (5,9).

Применяя оператор $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$ к функции $\psi' = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$, найдем:

$$\hat{H}\psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \left(-\frac{\partial S}{\partial t}\right)\psi' \text{ (a)}, \quad \hat{H}\psi' = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi' + U\psi' = \left[\frac{(\nabla S)^2}{2m} + U\right]\psi' \text{ (b)}. \tag{5,18}$$

Сравнивая оба результата, найдем классическое уравнение Гамильтона — Якоби для функции S:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U = 0. \tag{5,19}$$

Таким образом убеждаемся, что классическое уравнение Гамильтона — Якоби (5,19) непосредственно вытекает из квантового уравнения Шредингера (5,1), совершенно независимо от значений постоянной Планка h.