Квантовая механика как асимптотика решений обобщенного уравнения Крамерса

Е. М. Бениаминов

Рассматривается процесс диффузионного рассеяния волновой функции, заданной на фазовом пространстве, в котором тепловая диффузия задается только по импульсам. Приводится модифицированное уравнение Крамерса, описывающее это явление. В представленной модели обычное квантовое описание возникает как асимптотика этого процесса при большой величине сопротивления среды на единицу массы частицы. Показывается, что в этом случае процесс проходит несколько стадий. В течение первой быстрой стадии волновая функция переходит в одно из "стационарных" состояний. Во второй медленной стадии волновая функция меняется в подпространстве "стационарных" состояний в соответствии с уравнением Шредингера. Далее диссипация процесса приводит к декогеренции, и любая суперпозиция состояний приходит к одному из собственных состояний оператора Гамильтона. Смешанное состояние теплового равновесия (состояние Гиббса) возникает на последней стадии за счет теплового воздействия среды и случайных переходов между собственными состояниями оператора Гамильтона.

Кроме того, показано, что если, наоборот, сопротивление среды на единицу массы частицы мало, то в рассматриваемой модели плотность распределения вероятностей $\rho = |\varphi|^2$ удовлетворяет стандартному уравнению Лиувилля, как в классической статистической механике.

1 Описание и некоторые свойства модели

Так же, как в [2], рассматривается некоторая математическая модель процесса, состояние которого в каждый момент времени задается волновой функцией — комплекснозначной функцией $\varphi(x,p)$, где $(x,p) \in R^{2n}$, на фазовом пространстве, и n — размерность конфигурационного пространства. В отличие от квантовой механики, где волновая функция зависит только от координат или только от импульсов, в нашем случае волновая функция зависит и от координат, и от импульсов. По аналогии с квантовой механикой предполагается, что для волновых функций выполняется принцип суперпозиции, и плотность вероятности $\rho_D(x,p)$ в ограниченной области фазового пространства $(x,p) \in D \subset R^{2n}$, соответствующая волновой функции $\varphi(x,p)$, задается стандартной формулой

$$\rho_D(x,p) = |\varphi(x,p)|^2 / \int_D |\varphi(x,p)|^2 dxdp. \tag{1}$$

В квантовой механике изменение волновой функции по времени может быть определено интегралом Фейнмана по траекториям [3]. Принцип Фейнмана предполагает, что, если в начальный момент $t = t_0$ задана волновая функция $\varphi(x_0, p_0, t_0)$, то значение волновой функции в точке (x,p) в момент времени $t = t_1$ определяется интегралом по всем траекториям $\{x(t), p(t)\}$, соединяющим точки (x_0, p_0, t_0) и (x, p, t_1), от величины $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t_1}[V(x(t)) - p^2(t)/(2m)]dt\right)$, где $\hbar$ – постоянная Планка, по некоторой "мере" на траекториях, определенной Фейнманом.

В отличие от предположения Фейнмана в этой статье исследуется модель, в которой вместо меры Фейнмана на траекториях используется вероятностная мера диффузионного процесса (теплового броуновского движения), заданного уравнением Крамерса [4], [5]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial V}{\partial x_j}\frac{\partial f}{\partial p_j} - \frac{p_j}{m}\frac{\partial f}{\partial x_j}\Big) + \gamma\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p_j}\Big(p_j f + kTm\frac{\partial f}{\partial p_j}\Big), \tag{2}$$

где $f(x,p,t)$ — плотность распределения вероятностей частицы в фазовом пространстве в момент времени t; m — масса частицы; $V(x)$ — потенциальная функция внешних сил, действующих на частицу; $\gamma = \beta/m$ — коэффициент сопротивления среды, в которой находится частица, на единицу массы; k — постоянная Больцмана; T — температура среды.

Это классическое уравнение Крамерса, описывающее диффузионное движение частицы в фазовом пространстве под действием внешних сил, определенных потенциальной функцией $V(x)$, тепловой средой с температурой T и сопротивлением среды на единицу массы γ.

Для волновой функции $\varphi(x,p,t)$ рассматривается модифицированное уравнение Крамерса вида:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = A\varphi + \gamma B\varphi, \tag{3}$$

где
$$A\varphi = \sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial V}{\partial x_j}\frac{\partial\varphi}{\partial p_j} - \frac{p_j}{m}\frac{\partial\varphi}{\partial x_j}\Big) - \frac{i}{\hbar}\Big(mc^2 + V - \sum_{j=1}^{n}\frac{p_j^2}{2m}\Big)\varphi \tag{4}$$

и
$$B\varphi = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p_j}\left(\Big(p_j + i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\Big)\varphi + kTm\frac{\partial\varphi}{\partial p_j}\right). \tag{5}$$

Уравнение (3) получено из уравнения Крамерса (2) добавлением в правую часть слагаемого вида $-i/\hbar(mc^2+V-p^2/(2m))\varphi$ и заменой в операторе диффузии умножения функции φ на p_j действием оператора $(p_j + i\hbar\partial/\partial x_j)$ на функцию φ.

Добавление слагаемого $-i/\hbar(mc^2+V-p^2/(2m))\varphi$ связано с тем дополнительным физическим требованием, что волновая функция в точке (x,p) гармонически колеблется с частотой $1/\hbar(mc^2+V-p^2/(2m))$ по времени.

Требование гармонического колебания волновой функции φ в точке (x,p) с большой частотой $1/\hbar(mc^2+V-p^2/(2m))$ в случае, когда mc^2 существенно больше величины V, приводит к тому, что сдвиг волновой функции по координате x_j с сохранением собственного времени в точке (x,p) вызывает фазовый сдвиг в колебании функции φ. При этом оператор бесконечно малого сдвига $\partial/\partial x_j$ заменяется на оператор $\partial/\partial x_j - ip_j/\hbar$. (Более подробное обоснование см. в [2].) Соответственно, если этот оператор умножить на $i\hbar$, то получим оператор $p_j + i\hbar\partial/\partial x_j$, использованный в модифицированном операторе диффузии B.

Перейдем к исследованию уравнения (3).

Чтобы отделить математику от физики в этом уравнении, сделаем замену переменных и перейдем к безразмерным величинам:

$$t' = \gamma t, \quad p' = \frac{p}{\sqrt{kTm}}, \quad x' = \frac{\sqrt{kTm}}{\hbar}x, \quad V'(x) = \frac{V(x)}{kT}. \tag{6}$$

В новых переменных уравнение (3) принимает вид:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t'} = \frac{kT}{\gamma\hbar}A'\varphi + B'\varphi, \tag{7}$$

где $$A'\varphi = \sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial V'}{\partial x'_j}\frac{\partial\varphi}{\partial p'_j} - p'_j\frac{\partial\varphi}{\partial x'_j}\Big) - i\Big(\frac{mc^2}{kT} + V' - \sum_{j=1}^{n}\frac{(p'_j)^2}{2}\Big)\varphi \quad \text{и} \tag{8}$$

$$B'\varphi = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p'_j}\left(\Big(p'_j + i\frac{\partial}{\partial x'_j}\Big)\varphi + \frac{\partial\varphi}{\partial p'_j}\right). \tag{9}$$

Параметром модели, описываемой уравнением (7), является безразмерная величина $kT/(\gamma\hbar)$, которую мы обозначим через ε.

Будем считать, что $\varepsilon = kT/(\gamma\hbar)$ — малая величина, являющаяся в уравнении (7) параметром малого возмущения невозмущенного уравнения $\partial\varphi/\partial t' = B'\varphi$, то есть уравнения

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t'} = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p'_j}\left(\Big(p'_j + i\frac{\partial}{\partial x'_j}\Big)\varphi + \frac{\partial\varphi}{\partial p'_j}\right). \tag{10}$$

Заметим, что малость величины $\varepsilon = kT/(\gamma\hbar)$ требует, чтобы коэффициент трения среды на единицу массы $\gamma = \beta/m = (k/\hbar)T/\varepsilon = 1.3\cdot 10^{11}T/\varepsilon$ был больше $1.3\cdot 10^{11}T$, так как $k/\hbar = 1.3\cdot 10^{11}$.

Подставим в уравнение (10) представление $\varphi(x', p', t')$ в виде интеграла Фурье по x':

$$\varphi(x', p', t') = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{R^n}\tilde{\varphi}(s', p', t')e^{is'x'}ds', \tag{11}$$

где $$\tilde{\varphi}(s', p', t') = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{R^n}\varphi(x', p', t')e^{-is'x'}dx'. \tag{12}$$

Получим, что $\tilde{\varphi}(s', p', t')$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial t'} = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p'_j}\Big((p'_j - s'_j)\tilde{\varphi} + \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial p'_j}\Big). \tag{13}$$

Оператор правой части этого уравнения хорошо известен (см., например [6]). Этот оператор имеет полный набор собственных функций в пространстве функций, стремящихся к нулю, при $|p'|$, стремящемся к бесконечности. Собственные значения этого оператора представляют собой целые неположительные числа. Собственному значению 0 соответствуют собственные функции вида

$$\tilde{\varphi}_0(s', p') = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\tilde{\psi}(s')e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}},$$

где $\tilde{\psi}(s')$ — произвольная комплекснозначная функция для $s' \in R^n$.

Остальные собственные функции получаются как производные функций $\tilde{\varphi}_0(s',p')$ по p' и имеют собственные значения $-1,-2,...$, соответственно, в зависимости от степени производной, а проектор P_0 на подпространство собственных функций с собственным значением, равным 0, имеет вид:

$$\tilde{\varphi}_0(s',p') = P_0\tilde{\varphi} = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\tilde{\psi}(s')e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}, \text{ где } \tilde{\psi}(s') = \int_{R^n}\tilde{\varphi}(s',p')dp'. \quad (14)$$

Поэтому, рассматривая уравнение (13) в базисе этих собственных функций, получим, что всякое решение $\tilde{\varphi}(s',p',t')$ этого уравнения экспоненциально по времени с показателем -1 стремится к стационарному вида $\tilde{\varphi}_0$. Отсюда, с учетом представления (11) функции $\varphi(x',p',t)$ через $\tilde{\varphi}(s',p',t')$, получаем, что "стационарные" решения $\varphi_0(x',p')$ уравнения (7) имеют вид:

$$\varphi_0(x',p') = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{R^n}\tilde{\psi}(s')e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'x'}ds'.$$

Представим функцию $\tilde{\psi}(s')$, в свою очередь, в виде интеграла Фурье:

$$\tilde{\psi}(s') = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{R^n}\psi(y')e^{-is'y'}dy'.$$

Подставив это выражение в предыдущее выражение и интегрируя по s', получим

$$\varphi_0(x',p') = \frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int_{R^{2n}}\psi(y')e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-y')}ds'\ dy' =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{R^n}\psi(y')e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}}e^{ip'(x'-y')}dy'$$

или с учетом (14)

$$\varphi_0 = P_0\varphi = \frac{1}{(2\pi)^n}\int\limits_{R^n}\psi(y')e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}}e^{ip'(x'-y')}dy', \text{ где } \psi(y') = \int\limits_{R^n}\varphi(y',p')dp'. \quad (15)$$

Итак, если ε — малая величина, то за время t' порядка 1 решение уравнения (7), начиная с произвольной функции φ, приблизится к функции вида φ_0, которая в исходных координатах (6) имеет вид:

$$\varphi_0(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int_{R^n}\psi(y)\exp\left(-\frac{kTm(x-y)^2}{2\hbar^2}\right)\exp\left(\frac{ip(x-y)}{\hbar}\right)dy.$$

Далее решение уравнения (3), меняясь по времени, будет близко к подпространству "стационарных" функций вида φ_0.

Заметим, что полученные здесь "стационарные" функции совпадают с точностью до нормирующего множителя со "стационарными" функциями теоремы 1, полученными в работе [2], если положить величину $kTm/\hbar$ равной b/a, где a^2 и b^2 — коэффициенты диффузий по координатам и импульсам в модели, рассмотренной в [2]. Поэтому некоторые результаты, полученные в [1], [2], верны и в нашем случае. Их мы будем приводить без доказательства.

Результаты получены методом теории возмущений до второго порядка уравнения (7) $\partial\varphi/\partial t = \varepsilon A'\varphi + B'\varphi$ при $\varepsilon \ll 1$, где A' – косоэрмитовый оператор, а B' – оператор с неположительным дискретным спектром.

Заметим, что это уравнение не сохраняет норму функции φ, которую мы нормируем для получения распределения $\rho(x,p)$. Соответствующее уравнение, сохраняющее норму, которое на самом деле исследуется, имеет вид $\partial\varphi/\partial t = \varepsilon A'\varphi + B'\varphi + k\varphi$, где $k = -(\langle B'\varphi,\varphi\rangle + \langle\varphi, B'\varphi\rangle)/(2\langle\varphi,\varphi\rangle)$, но оно нелинейно.

2 Основные результаты

Обозначим через $H(x,p) = p^2/(2m) + V(x) + mc^2$ — функцию Гамильтона системы.

Теорема 1. *Движение, описываемое уравнением (3), асимптотически распадается при малом $\varepsilon = kT/(\gamma\hbar)$ на быстрое движение и медленное.*

1) В результате быстрого движения произвольная волновая функция $\varphi(x,p,0)$ переходит за время порядка $1/\gamma$ к функции, которая после нормирования имеет вид:

$$\varphi_0(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{R^n} \psi(y)\chi(x-y)e^{ip(x-y)/\hbar}dy, \qquad (16)$$

$$\text{где} \qquad ||\psi|| = 1 \qquad \text{и} \qquad \chi(x-y) = \left(\frac{kTm}{\pi\hbar^2}\right)^{n/4} e^{-kTm(x-y)^2/(2\hbar^2)}, \qquad (17)$$

Волновые функции вида (16) образуют линейное подпространство. Элементы этого подпространства параметризуются волновыми функциями $\psi(y)$, зависящими только от координат $y \in R^n$.

2) Медленное движение, начинающееся с волновой функции $\varphi_0(x,p)$ вида (16) с ненулевой функцией $\psi(y)$ происходит по подпространству и параметризуется волновой функцией $\psi(y,t)$, зависящей от времени. Функция $\psi(y,t)$ при этом удовлетворяет уравнению Шредингера вида $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$, где

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2\psi}{\partial y_k^2}\Big) + V(y)\psi + \frac{kT}{2}n\psi + mc^2\psi. \tag{18}$$

Доказательство первой части теоремы 1 приведено в [2]. Доказательство второй части этой теоремы приводится в приложении 1 к этой статье.

Теорема 2. *Оператор проекции P_0, преобразующий произвольную интегрируемую функцию $\varphi(x,p)$, заданную на фазовом пространстве, в функцию вида (16) (но без нормирования), получающуюся в результате быстрого движения, описываемого в теореме 1, имеет вид:*

$$P_0\varphi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int\limits_{R^n}\psi(y)e^{-\frac{kT(x-x')^2}{2\hbar^2}}e^{\frac{ip(x-x')}{\hbar}}dy, \quad \text{где} \;\; \psi(y) = \int\limits_{R}\varphi(y,p)dp. \tag{19}$$

Теорема вытекает из определения оператора P_0 и формулы (15), выраженной через исходные координаты (6).

Теорема 3. *Если $\psi(x)$ — волновая функция на конфигурационном пространстве и $\varphi_0(x,p)$ — соответствующая ей по формуле (16) волновая функция в фазовом пространстве, то плотность вероятностей $\rho(x,p) = |\varphi_0(x,p)|^2$ в фазовом пространстве выражается формулой:*

$$\rho(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\left(\frac{kTm}{4\pi\hbar^2}\right)^{n/2}\int\limits_{R^{2n}}\psi\left(x+\frac{x''-x'}{2}\right)\psi^*\left(x+\frac{x''+x'}{2}\right) \tag{20}$$
$$\exp\left(-\frac{kTm(x'')^2}{4\hbar^2}\right)\exp\left(-\frac{kTm(x')^2}{4\hbar^2}\right)\exp\left(\frac{ix'p}{\hbar}\right)dx''dx'.$$

В отличие от квазираспределений

$$W(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int\limits_{R^n}\psi\left(x-\frac{x'}{2}\right)\psi^*\left(x+\frac{x'}{2}\right)\exp\left(\frac{ix'p}{\hbar}\right)dx',$$

определенных Вигнером [7], плотность $\rho(x,p)$ в фазовом пространстве, заданная выражением (20), всегда неотрицательна. Её выражение отличается от выражения функции Вигнера экспонентами под интегралом, которые задают сглаживание по плотностям распределений, близким к дельта-функциям.

Доказательство теоремы 3 приведено в [2].

Алгебра наблюдаемых, заданных действительными функциями на фазовом пространстве, но усредняемых по плотностям распределений вероятностей вида (20), исследовалась в [8].

Так как распределения вероятностей в конфигурационном пространстве $\rho(x)$ выражается по формуле $\rho(x) = \int_{R^3} \rho(x,p)dp$, то интегрированием выражения (20) по p получаем следующее утверждение.

Следствие 1. *Если $\psi(x)$ — волновая функция на конфигурационном пространстве, то соответствующая ей плотность $\rho(x)$ в конфигурационном пространстве задается формулой*

$$\rho(x) = \int_{R^3} |\psi(y)|^2 \chi^2(x-y)dy, \tag{21}$$

где $\chi(x,y)$ выражается соотношением (17). То есть $\rho(x)$ получается из $|\psi(x)|^2$ сглаживанием (сверткой) по плотности нормального распределения с дисперсией $\hbar^2/(2kTm)$, и точность определения координаты ограничивается величиной $\sim \hbar/\sqrt{2kTm}$, которую называют длиной де Бройля тепловой волны.

Теорема 4. *Если величина $\varepsilon = kT/(\gamma\hbar) \ll 1$, то возмущения первого порядка к собственному значению 0 оператора B' в уравнении (7) равны собственным значениям оператора $-i/(\gamma\hbar)\hat{H}$, где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона, представленный формулой (18). Если действительные части возмущений второго порядка, соответствующие этим возмущениям первого порядка, различны, то любое решение уравнения (3) через время, пропорциональное $1/(\gamma\varepsilon^2) = \gamma\hbar^2/(kT)^2$, перейдет в одно из собственных состояний оператора Гамильтона.*

Доказательство теоремы приводится в приложении 2.

Эта теорема описывает процесс, который в литературе называется декогеренцией квантовых состояний [9], [10], [11]. Оценка времени декогеренции, данная в теореме 4, по форме несколько отличается от оценки, приведенной в литературе, например в [10]. Исследование соответствия этих оценок — тема другой будущей работы.

В соответствии с теоремой 4 процесс, описываемый уравнением (3), через время пропорциональное $\gamma\hbar^2/(kT)^2$ будет находиться в одном из собственных состояний операторатора Гамильтона (энергии). Далее, на больших масштабах времени система под воздействием тепловой среды за счет больших уклонений случайного процесса будет перескакивать из одних собственных состояний в другие. В пределе при $t \to \infty$ система перейдет в смешанное состояние, соответствующее тепловому равновесному состоянию Гиббса.

Мы исследовали уравнение (3) при малом значении величины $\varepsilon = kT/(\gamma\hbar)$ и получили, что процесс, описываемый этим уравнением, асимптотически близок к процессу, имеющему стандартное квантовое описание. Рассмотрим теперь это же уравнение в случае, когда ε — большая величина.

Теорема 5. *Если $\varepsilon = kT/(\gamma\hbar) \gg 1$, то есть $\gamma\hbar/(kT) \ll 1$, где $\gamma = \beta/m$ — сопротивление среды на единицу массы, то оператором B в уравнении (3) можно пренебречь, и в этом случае плотность распределения вероятностей $\rho(x,p,t) = \varphi(x,p,t)\varphi^*(x,p,t)$ удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля вида:*

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial V}{\partial x_j}\frac{\partial \rho}{\partial p_j} - \frac{p_j}{m}\frac{\partial\rho}{\partial x_j}\Big). \tag{22}$$

Доказательство теоремы следует из того, что уравнение (3) без оператора B является уравнением в частных производных первого порядка, состоящее из суммы оператора Лиувилля и оператора умножения на функцию. Решение $\varphi(x,p,t)$ такого уравнения получается из начального состояния $\varphi^0(x,p) = \varphi(x,p,0)$ и характеристик $x(t), p(t)$ уравнения с начальными условиями: $x(0) = x,\ p(0) = p$, в виде:

$$\varphi(x,p,t) = \varphi^0(x(t),p(t)) \exp\left(-i/\hbar\int_0^t \Big(mc^2 + V(x(t)) - p^2(t)/(2m)\Big)\,dt\right).$$

Соответственно:

$$\rho(x,p,t) = \varphi(x,p,t)\varphi^*(x,p,t) = \varphi(x(t),p(t))\varphi^*(x(t),p(t)) = \rho(x(t),p(t)).$$

Следовательно, фаза волны несущественна, и плотность $\rho(x,p,t)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля.

Таким образом, теорема 5 утверждает, что при малом значении величины $\beta\hbar/(kTm)$ процесс, описываемый уравнением (3), асимптотически близок к процессу с классическим (не квантовым) описанием движения частицы. Этот случай возникает, когда велика масса частицы m по сравнению с сопротивлением среды β.

3 Заключение

В квантовой оптике стали широко применяться методы исследования динамики квантовых процессов в фазовом пространстве, смотри, например [12], где, в частности, рассматриваются динамика волновых пакетов и интерференция в фазовом пространстве. На этом пути удается моделировать динамику ионов в ловушках, оптику атомов в квантовых световых полях и т.д. "Этот подход с акцентом на фундаментальную роль фазовых переменных позволяет очень наглядно излагать и интерпретировать разнообразные разделы квантовой оптики ..." (из аннотации к книге [12]).

Эти успехи наводят на мысль, что полезно было бы рассмотреть не только поведение распределений в фазовом пространстве, как это делается, например в [12], [13], [14], но и ввести саму волновую функцию на фазовом пространстве.

В данной работе, следуя этому направлению, построено диффузионное уравнение для волновой функции с большой частотой колебаний в фазовом пространстве, описывающее процесс теплового рассеяния волны в фазовом пространстве. В представленной модели отражаются как классическое, так и квантово-механическое поведение частицы. Если величина $\varepsilon = kTm/(\beta\hbar)$ мала, то в этой модели поведение частицы после короткого переходного этапа (порядка $m/\beta < \hbar/kT = 0.77 \cdot 10^{-12}/T$ сек.) приводится к стандартной картине квантовой механики с соотношением неопределенности Гейзенберга и уравнением Шредингера для описания динамики. Если же величина ε большая, то частица ведет себя в соответствии с классической механикой, и плотность распределения вероятностей этой частицы в фазовом пространстве удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля.

В общем случае поведение частицы, описываемое этой моделью носит смешанный характер. Было бы интересно проанализировать модель в этом случае и сравнить с результатами экспериментов для частиц с промежуточными значениями ε.

С экспериментальными данными также следует сравнить и оценку времени декогеренции, данную в теореме 4. Кроме того, следует построить теоретическую оценку времени перехода квантовой системы к смешанному состоянию теплового равновесия в этой модели.

Нужно также отдать должное многочисленным работам предшественников, благодаря которым возникла тема статьи, была поставлена задача и найдены методы ее решения. Это отдельная большая работа. В науке постановка правильных вопросов значат не меньше полученных результатов. Ярким примером этого являются вопросы А.Эйнштейна, благодаря которым становилась и развивается сейчас квантовая механика.

В работах В.П. Маслова [15, 16] уже исследовалась некоторая задача описания движения распределения зарядов в фазовом пространстве под действием на заряды случайного поля. В [15] при некоторых предположениях доказано, что если начальное распределение зарядов, зависящее от координат и импульсов, принадлежит некоторому подпространству, параметризованному комплекснозначными функциями, зависящими от координат, то распределение не выходит из этого подпространства, и динамика такой системы описывается соответствующим уравнением Шредингера. Этот результат, безусловно, оказал влияние на автора при постановке задачи данной работы.

Благодарности: Я от всего сердца благодарю профессора Г.Л. Литвинова за многолетнее внимание к моей работе, понимание и помощь в правильной организации и подаче материала.

Приложения

Приложение 1. Доказательство пункта 2 теоремы 1

Рассмотрим уравнение (3) в безразмерной системе переменных (6). В этих переменных оно принимает вид (7), и "стационарные" решения, к которым сходятся произвольные решения уравнения (7) за время t' порядка 1 имеют вид (15).

Пусть $\varphi_0(x', p', t')$ — функция вида (15), соответствующая функции $\psi(y', t')$. Подставим это выражение в уравнение (7) и возьмем проекцию обеих частей этого уравнения на пространство функций $\psi(y', t')$ по формуле (15). Имеем:

$$\int\limits_{R^n} \frac{\partial \varphi_0}{\partial t'} dp' = \int\limits_{R^n} \left(\frac{kT}{\gamma \hbar} A' + B' \right) \varphi_0 dp'$$

или, учитывая, что $B'\varphi_0 = 0$, после подстановки выражения $\varphi_0(x', p', t')$ в виде (15) получим:

$$\frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} \frac{\partial \psi(y', t')}{\partial t'} e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy' dp' =$$

$$= \frac{kT}{\gamma \hbar} \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} A' \psi(y', t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy' dp'.$$

Проинтегрируем правую часть этого равенства по p' и по y', заметив, что в правой части равенства стоит дельта-функция, получим:

$$\frac{\partial \psi(x', t')}{\partial t'} = \frac{kT}{\gamma \hbar} \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} A' \psi(y', t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy' dp'.$$

Учитывая выражение (8) для оператора A', из последнего равенства получим:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t'} = \frac{kT}{\gamma \hbar} \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} \left(\sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial V'}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial p'_j} - p'_j \frac{\partial}{\partial x'_j} \right) - i \left(\frac{mc^2}{kT} + V' - \sum_{j=1}^{n} \frac{(p'_j)^2}{2} \right) \right) \times$$

$$\times \psi(y', t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy' dp' = \frac{kT}{\gamma \hbar} (I_1 + I_2 + I_3 + I_4), \text{ где} \quad (23)$$

$$I_1 = \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial V'(x')}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial p'_j} \left(\psi(y',t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} \right) dy'dp'; \quad (24)$$

$$I_2 = -\frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} \sum_{j=1}^{n} p'_j \frac{\partial}{\partial x'_j} \left(\psi(y',t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} \right) dy'dp'; \quad (25)$$

$$I_3 = -i \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} \left(\frac{mc^2}{kT} + V'(x') \right) \psi(y',t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy'dp'; \quad (26)$$

$$I_4 = i \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{R^{2n}} \sum_{j=1}^{n} \frac{(p'_j)^2}{2} \psi(y',t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy'dp'. \quad (27)$$

Рассмотрим интеграл I_1, заданный выражением (24). Поменяем местами суммирование и интегрирование, вынесем за знак интеграла выражения, независящие от переменных интегрирования, вычислим производные по p'_j, и проинтегрируем оставшиеся интегралы по p' и y'. Получим:

$$I_1 = \frac{i}{(2\pi)^n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial V'(x')}{\partial x'_j} \int\limits_{R^{2n}} \psi(y',t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} (x'_j - y'_j) e^{ip'(x'-y')} dy'dp' = 0 \quad (28)$$

Рассмотрим интеграл I_2, заданный выражением (25). Поменяем местами суммирование и интегрирование, вынесем производные по x'_j за знак интеграла, заменим выражения $p'_j \exp(ip'(x'-y'))$ на равные им выражения $i\partial \ \exp(ip'(x'-y'))/(\partial y'_j)$ и проинтегрируем полученные интегралы по частям. Имеем:

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{1}{(2\pi)^n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x'_j} \int\limits_{R^{2n}} \psi(y',t') e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} i \frac{\partial}{\partial y'_j} e^{ip'(x'-y')} dy'dp' = \\ &= \frac{i}{(2\pi)^n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x'_j} \int\limits_{R^{2n}} \frac{\partial \psi(y',t')}{\partial y'_j} e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy'dp' - \\ &\quad - \frac{i}{(2\pi)^n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x'_j} \int\limits_{R^{2n}} \psi(y',t') (x'_j - y'_j) e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}} e^{ip'(x'-y')} dy'dp' \\ &= i \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 \psi(x',t')}{\partial (x'_j)^2}. \end{aligned} \quad (29)$$

Рассмотрим интеграл I_3, заданный выражением (26). Вынесем за знак интеграла выражения, независящие от переменных интегрирования, и проинтегрируем оставшийся интеграл по p' и y'. Получим:

$$\begin{aligned} I_3 &= -i\Big(\frac{mc^2}{kT}+V'(x')\Big)\frac{1}{(2\pi)^n}\int\limits_{R^{2n}}\psi(y',t')e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}}e^{ip'(x'-y')}dy'dp' = \\ &= -i\Big(\frac{mc^2}{kT}+V'(x')\Big)\psi(x',t'). \end{aligned} \tag{30}$$

Рассмотрим интеграл I_4, заданный выражением (27). Поменяем местами суммирование и интегрирование, вынесем $1/2$ за знак интеграла, заменим выражение $(p'_j)^2\exp(ip'(x'-y'))$ второй производной функции $-\exp(ip'(x'-y'))$ по y'_j и проинтегрируем полученные интегралы по частям. Имеем:

$$\begin{aligned} I_4 &= -\frac{i}{2}\frac{1}{(2\pi)^n}\sum_{j=1}^{n}\int\limits_{R^{2n}}\psi(y',t')e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}}\frac{\partial^2}{\partial(y'_j)^2}e^{ip'(x'-y')}dy'dp' = \\ &= -\frac{i}{2}\frac{1}{(2\pi)^n}\sum_{j=1}^{n}\int\limits_{R^{2n}}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial(y'_j)^2}-2\frac{\partial\psi}{\partial y'_j}(x'_j-y'_j)+\psi(x'_j-y'_j)^2+\psi\right)\times \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \times e^{-\frac{(x'-y')^2}{2}}e^{ip'(x'-y')}dy'dp' = \\ &= -\frac{i}{2}\left(\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2\psi(x',t')}{\partial(x'_j)^2}+n\psi(x',t')\right). \end{aligned} \tag{31}$$

Подставим полученные выражения для интегралов I_1 — I_4 в равенство (23), приведем подобные члены и вынесем $-i$ за скобку. Получим,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t'} = -\frac{i}{\hbar}\frac{kT}{\gamma}\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial(x'_j)^2}+V'+\frac{mc^2}{kT}+\frac{n}{2}\right)\psi(x',t').$$

Если в полученном равенстве перейти к исходной системе координат (6), то получим требуемое в пункте 2 теоремы 1 равенство (18).

Приложение 2. Доказательство теоремы 4

Рассмотрим уравненение (7) вида $\partial\varphi/\partial t' = \varepsilon A'\varphi + B'\varphi$. Пусть P_0 — проектор на подпространство собственных функций оператора B' с собственным значением, равным 0. Тогда по определению P_0 имеем равенства:

$$P_0 P_0 = P_0; \qquad P_0 B' = B' P_0 = 0.$$

Через φ_0 будем обозначать функцию, принадлежащую области значение проектора P_0, то есть $\varphi_0 = P_0\varphi_0$.

Заметим, что по построению оператора $\hat{H}$ теоремы 1, приведенного в приложении 1, оператор $\varepsilon P_0 A'$ на подпространстве функций φ_0 в представлении функций $\psi(y)$ имеет вид $-i/(\gamma\hbar)\hat{H}$. Поэтому собственные значения операторов $\varepsilon P_0 A'$ и $-i/(\gamma\hbar)\hat{H}$ совпадают. Так как оператор $\hat{H}$ самосопряженный, то он имеет полную систему собственных функций, и, следовательно, полную систему собственных функций имеет оператор $\varepsilon P_0 A'$ на подпространстве значений проектора P_0 .

Выделим полученное утверждение в лемму.

Лемма. *Собственные значения операторов $\varepsilon P_0 A'$ и $-i/(\gamma\hbar)\hat{H}$ совпадают. Оператор $\varepsilon P_0 A'$ имеет полную систему собственных функций на подпространстве значений проектора P_0.*

Рассмотрим задачу на собственные значения уравненения (7) вида: $\lambda_\varepsilon\varphi_\varepsilon = (\varepsilon A' + B')\varphi_\varepsilon$.

В соответствии с методом теории возмущений будем искать решения в виде ряда:

$$\lambda_\varepsilon = \lambda_0 + \varepsilon\lambda_1 + \varepsilon^2\lambda_2 + \ldots$$

$$\varphi_\varepsilon = \varphi_0 + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \ldots$$

Подставим эти ряды в уравнение на собственные значения и сравним коэффициенты при одинаковых степенях ε. Получим:

$$(\varepsilon_0) \qquad \lambda_0\varphi_0 = B'\varphi_0;$$

$$(\varepsilon_1) \qquad \lambda_1\varphi_0 + \lambda_0\varphi_1 = A'\varphi_0 + B'\varphi_1;$$

Нас интересуют возмущения к собственному значению $\lambda_0 = 0$. В этом случае уравнение (ε_0) означает, что φ_0 — это собственная функция оператора B' с собственным значением, равным 0.

Применим к обеим частям равенства (ε_1) оператор εP_0. С учетом равенств $P_0\varphi_0 = \varphi_0$, $\lambda_0 = 0$ и $P_0 B' = 0$ получим:

$$\varepsilon\lambda_1\varphi_0 = \varepsilon P_0 A'\varphi_0.$$

Отсюда, величина $\varepsilon\lambda_1$ является собственным значение оператора $\varepsilon P_0 A'$ на подпространстве значений проектора P_0, и по лемме величина $\varepsilon\lambda_1$ является собственным значением оператора $-i/(\gamma\hbar)\hat{H}$. С другой стороны, величина $\varepsilon\lambda_1$ по определению является поправкой первого порядка к собственному значению 0 оператора $\varepsilon A' + B'$.

Таким образом, первая часть теоремы 4 доказана.

Для доказательства второй части представим произвольную функцию $\varphi_0(t')$ из подпространства значений проектора P_0 в виде суммы (или интеграла для непрерывного спектра):

$$\varphi_0(t') = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(t')\varphi_0^k,$$

где φ_0^k — собственные функции оператора $P_0 A'$ с собственными значениями λ_1^k. Это возможно сделать, так как по лемме такие функции образуют полную систему функций. Кроме того, из этой же леммы следует, что числа λ_1^k чисто мнимые, так как они являются собственными числами оператора $-i/(\varepsilon\gamma\hbar)\hat{H}$, где $\hat{H}$ — самосопряженный оператор Гамильтона с действительным спектром.

Пусть $\lambda_\varepsilon^k \approx \varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k$, и $\varphi_\varepsilon^k \approx \varphi_0^k + \varepsilon\varphi_1^k$ — приближения собственных значении и собственных функций, соответствующие собственным функциям φ_0^k. По условию теоремы 4 действительные части $Re\lambda_2^k$ различны при различных k.

Рассмотрим уравнение (7), ограниченное на подпространстве из базисных векторов вида φ_ε^k с функцией вида

$$\varphi(t') = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(t')\varphi_\varepsilon^k.$$

В этом базисе уравнение распадается (с точностью до членов порядка (ε^3) в систему уравнений по k вида:

$$\frac{\partial c_k(t')}{\partial t'} = (\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)c_k(t'),$$

решение которых имеет вид: $c_k(t') = c_k(0)\exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')$. Отсюда, решение уравнения (7) приближенно представляется в виде:

$$\varphi(t') = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(0)\exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')\varphi_\varepsilon^k =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} c_k(0) \exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')(\varphi_0^k + \varepsilon\varphi_1^k) =$$
$$= \sum_{k=1}^{\infty} c_k(0) \exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')\varphi_0^k + \sum_{k=1}^{\infty} c_k(0) \exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')\varepsilon\varphi_1^k =$$
$$= \varphi_0(t') + \varepsilon\varphi_1(t'), \tag{32}$$

где $$\varphi_0(t') = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(0) \exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')\varphi_0^k; \tag{33}$$
$$\varphi_1(t') = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(0) \exp((\varepsilon\lambda_1^k + \varepsilon^2\lambda_2^k)t')\varphi_1^k. \tag{34}$$

Так как ε — малая величина, то из равенства (32) следует, что решение $\varphi(t')$ мало отличается от функции $\varphi_0(t')$, заданной выражением (33).

Так как $\varepsilon\lambda_1^k$ — мнимая величина, то вклад каждого слагаемого в сумму, задающего функцию $\varphi_0(t')$ в выражении (33), убывает во времени $t' = \gamma t$ пропорционально $\exp(\varepsilon^2 Re(\lambda_2^k)t') = \exp(\gamma\varepsilon^2 Re(\lambda_2^k)t)$, где $Re(\lambda_2^k)$ действительная часть числа λ_2^k. Отсюда следует, что через время $t \sim 1/(\gamma\varepsilon^2)$ эта сумма будет определяться слагаемым с наибольшей величиной $Re(\lambda_2^k)$ среди слагаемых со значимыми величинами коэффициентов $c_k(0)$.

Таким образом, теорема 4 доказана.

Список литературы

[1] Бениаминов Е.М. *Диффузионные процессы в фазовых пространствах и квантовая механика* // Доклады академии наук. 2007. Т. 416. № 1. С. 31-35.

[2] Бениаминов Е.М. *Квантование как асимптотика некоторого диффузионного процесса в фазовом пространстве*// http://beniaminov.rsuh.ru/ExpandedDAN.pdf (текст на англ. яз .http://arxiv.org/abs/0812.5116v1). (2008)

[3] Фейнман Р., А. Хибс А. Квантовая механика и интеграл по траекториям. М.: Мир, 1968. 384 с.

[4] Kramers H.A. // Physica. 1940. Vol. 7. P. 284-304.

[5] Van Kampmen N.G. Stochastic Processes in Physics and Chemistry. North Holland, Amsterdam, 1981; пер.: М.:"Высшая школа", 1990.

[6] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.:"Наука", 1976.

[7] Wigner E. *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium* // Phys. Rev. 1932. V. 40. P. 749-759.

[8] Beniaminov E.M. *A Method for Justification of the View of Observables in Quantum Mechanics and Probability Distributions in Phase Space* http://arxiv.org/abs/quant-ph/0106112 (2001).

[9] Zeh H.D. *Roots and Fruits of Decoherence.* // In: Quantum Decoherence, Duplantier, B., Raimond, J.-M., and Rivasseau, V., edts. (Birkhäuser, 2006), p. 151-175 (arXiv:quant-ph/0512078v2).

[10] Zurek W. H. *Decoherence and the transition from quantum to classical - REVISITED* arXiv:quant-ph/0306072v1. 2003 (An updated version of PHYSICS TODAY, 44:36-44 (1991)).

[11] Менский М.Б. *Диссипация и декогеренция квантовых систем.* УФН. 2003. Т.173. С.1199-1219.

[12] Шляйх В.П. Квантовая оптика в фазовом пространстве. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 760 с.

[13] Ibort A., Man'ko V.I., Marmo G., Simoni A., Ventriglia F. *On the Tomographic Picture of Quantum Mechanics.* Journal-ref: Phys.Lett.A374:2614-2617. 2010. arXiv:1004.0102v1.

[14] Khrennikov A. Quantum Randomness as a Result of Random Fluctuations at the Planck Time Scale? Int. J. Theor. Phys.2008.**47**, N 1, P.114-124. arXiv:hep-th/0604011v3.

[15] Маслов В.П. *Уравнения Колмогорова - Феллера и вероятностная модель квантовой механики.* // Итоги науки и техники. Теор. вер., мат. стат. и кибернет. 1982. Т. 19. С. 55-85.

[16] Маслов В.П Квантование термодинамики и ультравторичное квантование. М.: Институт компьютерных исследований, 2001. 384 с.