Квантование как приближенное описание некоторого диффузионного процесса

Е. М. Бениаминов

Аннотация

Рассматривается некоторый диффузионный процесс для волновой функции в фазовом пространстве. Показывается, что за время порядка 10^{-12} с этот процесс сходится к процессу, который описывается уравнением Шредингера.

1 Описание и некоторые свойства модели

Рассматривается некоторая математическая модель процесса, состояние которого в каждый момент времени задается волновой функцией – комплекснозначной функцией $\varphi(x,p)$, где $(x,p) \in R^{2n}$, 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 и от импульсов. Так же, как в квантовой механике, предполагается, что для волновых функций выполняется принцип суперпозиции, и плотность вероятности $\rho(x,p)$ на фазовом пространстве, соответствующая волновой функции $\varphi(x,p)$, задается стандартной формулой

$$\rho(x,p) = \varphi^*(x,p)\varphi(x,p) = |\varphi(x,p)|^2. \tag{1}$$

В работе рассматривается классическая модель диффузионного процесса для волновой функции $\varphi(x,p)$ на фазовом пространстве. Предполагается, что каждый комплексный вектор волновой функции одновременно находится в 4-х движениях:

точка приложения вектора движется по классической траектории, заданной функцией Гамильтона $H(x,p)$;

точка приложения вектора перемещается случайно по координатам и импульсам, находясь в диффузионном процессе с постоянными коэффициентами диффузий a^2 и b^2 по координатам и импульсам, соответственно;

точка приложения каждого вектора движется по случайной траектории в результате движений, описанных в двух предыдущих пунктах, а сам вектор вращается с постоянной угловой скоростью $\omega = mc^2/\hbar$ в системе координат, связанной с этой точкой, где m – масса частицы, c – скорость света, $\hbar$ – постоянная Планка;

длина всех комплексных векторов волновой функции в момент времени t умножается на $\exp(abnt/\hbar)$ (это чисто техническое требование, которое не сказывается на относительных вероятностях нахождения частицы в фазовом пространстве).

Предполагается, что волновой вектор $\varphi(x,p,t)$ в точке (x,p) в момент времени t по принципу суперпозиции равен сумме волновых векторов, заданных распределением векторов $\varphi^0(x,p)$ в начальный момент времени и попавших в результате описанных выше движений в точку (x,p) в момент времени t.

Процесс описывается дифференциальным уравнением диффузионного типа. Анализ дифференциального уравнения модели показывает, что движение в модели раскладывается на быстрое и медленное. В результате быстрого движения система, начиная с произвольной волновой функции на фазовом пространстве, переходит к функции, принадлежащей некоторому особому подпространству. Элементы этого подпространства параметризуются волновыми функциями, зависящими только от координат. Медленное движение по подпространству описывается уравнением Шредингера.

Исходя из предположений о тепловой причине диффузий и соответствии следствий модели известным физическим экспериментам Лэмба - Резерфорда [2] (сдвиг Лэмба в спектре атома водорода), в работе делается оценка коэффициентов диффузий и времени переходного процесса от классического описания процесса, в котором принцип неопределенности Гейзенберга может не выполняться, к квантовому, в котором принцип Гейзенберга уже выполняется. Время переходного процесса имеет порядок $1/T \cdot 10^{-11}$с, где T — температура среды.

2 Основные результаты

Рассмотрим диффузионный процесс на фазовом пространстве, в котором волновая функция $\varphi(x,p,t)$ в момент времени t удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\sum_{k=1}^{n}\Big(\frac{\partial H}{\partial x_k}\frac{\partial\varphi}{\partial p_k}-\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}\Big)-\frac{i}{\hbar}\Big(H-\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial H}{\partial p_k}p_k\Big)\varphi+\Delta_{a,b}\varphi, \qquad (2)$$

$$\text{где}\qquad \Delta_{a,b}\varphi=a^2\sum_{k=1}^{n}\Big(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ip_k}{\hbar}\Big)^2\varphi+b^2\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial p_k^2}\varphi+\frac{abn}{\hbar}\varphi, \qquad (3)$$

где $H(x,p)$ — функция Гамильтона; a^2 и b^2 — коэффициенты диффузий по координатам и импульсам, соответственно.

Если в уравнении (2) отбросить последнее слагаемое, то получим дифференциальное уравнение в частных производных первого порядка. Эта часть уравнения (2) описывает детерминированную составляющую движения комплексных векторов $\varphi(x,p,t)$. Согласно уравнению, в этом движении точка приложения каждого вектора движется по классической траектории, заданной гамильтонианом $H(x,p)$, а сам вектор при этом вращается в каждой точке траектории с угловой скоростью $\omega'=\frac{1}{\hbar}\Big(H-\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial H}{\partial p_k}p_k\Big)$.

Заметим, что в случае, когда конфигурационное пространство трехмерно и $H=c\sqrt{m^2c^2+p^2}$, то $\omega' dt=\frac{mc^2}{\hbar}\frac{mc^2dt}{H}=\frac{mc^2}{\hbar}d\tau$, где τ — собственное время в системе координат, связанной с частицей, движущейся с импульсом p. То есть в этом случае, вектор, точка приложения которого движется по классической траектории, вращается с постоянной угловой скоростью $\omega=mc^2/\hbar$ в системе координат, связанной с этой точкой.

Наоборот, если в правой части уравнения (2) оставить только последнее слагаемое вида (3), то получим уравнение

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=a^2\sum_{k=1}^{n}\Big(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ip_k}{\hbar}\Big)^2\varphi+b^2\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial p_k^2}\varphi+\frac{abn}{\hbar}\varphi. \qquad (4)$$

Это уравнение описывает диффузионную составляющую движения векторов $\varphi(x,p,t)$ на фазовом пространстве. В этом движении точки приложения векторов перемещаются в соответствии с классическим однородным диффузионным процессом с коэффициентами диффузий по координатам и импульсам равными a^2 и b^2, соответственно. При этом сам вектор при малых случайных перемещениях из точки (x,p) в точку $(x{+}dx, p{+}dp)$ переносится параллельно, а его длина в момент времени t умножается на $\exp(abnt/\hbar)$. Заметим, что параллельный перенос векторов на фазовом пространстве задается связностью, которая выражается формулой: $L_{(dx,dp)}\varphi(x,p) - \varphi(x,p) \approx -(i/\hbar)\varphi(x,p)pdq$, где $L_{(dx,dp)}\varphi(x,p)$ — параллельный перенос вектора $\varphi(x,p)$ из точки (x,p) по бесконечно малому вектору (dx,dp). В частном случае, когда конфигурационное пространство трехмерно, такая связность на фазовом пространстве вызвана синхронизацией движущихся часов в точках фазового пространства.

Правая часть уравненния (4) — самосопряженный оператор. Задача на собственные значения для этого оператора преобразованием Фурье по координатам сводится к стационарному уравнению Шредингера для гармонических колебаний. Отсюда показывается, что собственные значения оператора уравнения (4) неположительны, и верна следующая теорема.

Теорема 1. *Пусть $\varphi(x,p,0)$ — произвольная функция, преобразование Фурье которой по p стремится к нулю при $x \to \infty$. Тогда решение $\varphi(x,p,t)$ диффузионного уравнения (4) экспоненциально по времени (с показателем равным $-abt/\hbar$) стремится к стационарному решению вида:*

$$\varphi(x,p) = \lim_{t\to\infty} \varphi(x,p,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int\limits_{R^n} \psi(y)\chi(x,y)e^{-i(y-x)p/\hbar}dy, \tag{5}$$

$$\text{где} \quad \psi(y) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int\limits_{R^{2n}} \varphi(x,p,0)e^{i(y-x)p/\hbar}\chi(x,y)dpdx, \tag{6}$$

$$\text{и} \qquad \chi(x,y) = \left(\frac{b}{a\pi\hbar}\right)^{n/4} e^{-b(x-y)^2/(2a\hbar)}. \tag{7}$$

Заметим, что $\chi^2(x,y)$ представляет собой плотность вероятностей нормального распределения по x с математическим ожиданием y, и дисперсией $a\hbar/(2b)$. Если величина $a\hbar/(2b)$ мала, то функция $\chi^2(x,y)$ близка к дельта-функции от $x-y$.

Композиция выражений (6) и (5) строит проектор из пространства всех волновых функций, заданных на фазовом пространстве, на некоторое подпространство. Элементы этого подпространства параметризуются функциями вида $\psi(y)$, где $y \in R^n$, т. е. волновыми функциями на конфигурационном пространстве.

Если же предполагать, что диффузия вызывается тепловыми воздействиями на электрон, то коэффициенты диффузий по координатам и импульсам выражаются в статистической физике (см., например [4], гл.7, §4 и §9) через температуру T по формулам: $a^2 = kT/(m\gamma)$ и $b^2 = \gamma kTm$, где k — постоянная Больцмана, m — масса электрона, γ — коэффициент трения среды на единицу массы. Отсюда, $a/b = (\gamma m)^{-1}$ и $ab = kT$. То есть, в этом случае, величина a/b, которая входит в выражение (7), не зависит от температуры. С другой стороны, t — время переходного процесса, определенное в теореме 1, имет вид: $t \sim \hbar/(ab) = \hbar/(kT) = T^{-1} \cdot 7.638 \cdot 10^{-12}$ с.

С учетом этой оценки, будем считать в уравнении (2) величину $\hbar/(ab)$ малым параметром и предполагать, что координаты и импульсы мало меняются за это время при классическом движении, определенном гамильтонианом $H(x,p)$.

Теорема 2. *Движение, описываемое уравнением (2), асимптотически распадается при $\hbar/(ab) \to 0$ на быстрое движение и медленное движение. В результате быстрого движения произвольная волновая функция $\varphi(x,p,0)$ переходит за время порядка $\hbar/(ab)$ к виду (5). Волновые функции вида (5) образуют линейное подпространство. Элементы этого подпространства параметризуются волновыми функциями $\psi(y)$, зависящими только от координат $y \in R^n$. Медленное движение, начинающееся с ненулевой волновой функции из этого подпространства, происходит по подпространству и параметризуется волновой функцией $\psi(y,t)$, зависящей от времени. Функция $\psi(y,t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера вида $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$, где*

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi \quad = \quad & \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int\limits_{R^{3n}}\Big(H(x,p) - \sum_{k=1}^{n}\Big(\frac{\partial H}{\partial x_k} + \frac{ib}{a}\frac{\partial H}{\partial p_k}\Big)(x_k - y'_k)\Big) \times \\ & \times\chi(x,y)\chi(x,y')e^{\frac{i}{\hbar}(y-y')p}\psi(y',t)dy'dxdp,\end{aligned}$$

и $\chi(x,y)$ задается формулой (7).

Теорема 3. *Если $\frac{a\hbar}{b}$ — малая величина и $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, то оператор $\hat{H}$ с точностью до членов порядка $a\hbar/b$ имеет вид:*

$$\hat{H} \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial y_k^2}\Big) + V(y) - \frac{a\hbar}{4b}\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2 V}{\partial y_k^2} + \frac{3nb\hbar}{4ma}. \tag{8}$$

Первые два слагаемые в формуле (8) дают стандартный оператор Гамильтона. Последнее слагаемое — константа, и ею можно пренебречь.

Предпоследнее слагаемое рассмотрим (ввиду малости $a\hbar/b$) как возмущение к оператору Гамильтона.

Считая, что отклонения в спектре атома водорода (сдвиг Лэмба), наблюдаемые в экспериментах Лэмба-Резерфода [2], вызываются предпоследним слагаемым в формуле (8), можно оценить величину a/b. Расчеты стандартным методом возмущений, аналогичные расчетам, выполненным в [5], дают следующую оценку: $a/b = 3.41 \cdot 10^4$с/г. Отсюда, стандартное отклонение для нормального распределения χ^2, по которому производится сглаживание волновых функций, имеет вид $\sqrt{a\hbar/(2b)} = 4.24 \cdot 10^{-12}$см. Эта величина существенно меньше радиуса атома водорода и близка к комптоновской длине волны электрона $\hbar/(mc) = 3.86 \cdot 10^{-11}$см.

Таким образом, расчеты показывают, что предложенная модель в виде дифференциального уравнения (2) достаточно адекватно описывает физические процессы в стандартных случаях для стандартного гамильтониана. Но эту модель можно применить и для расчетов процессов с нестандартным гамильтонианом или с гамильтонианом, быстро меняющимся во времени, как при внезапных возмущениях или для периодически меняющегося потенциала с частотой порядка $ab/\hbar$, и сравнить с экспериментальными данными.

Список литературы

[1] *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.

[2] *Lamb W.E., Retherford R.C. Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method* // Phys. Rev. 1947. V. 72. P. 241-243.

[3] *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.

[4] *Исихара А* Статистическая физика. М.: Мир, 1973. 472 с.

[5] *Welton T.A. Some Observable Effects of The Quantum-Mechanical Fluctuations of the Electromagnetic Field* // Phys. Rev. 1948. V. 74. P. 1157-1167.