# Моделирование квантово-механических процессов процессами распределения энергии внутренних колебаний наночастицы в фазовом пространстве

Е. М. Бениаминов

Рассматривается задача расчета распределения энергии внутренних гармонических колебаний наночастицы в ее фазовом пространстве, когда сама частица движется в среде, находящейся в тепловом равновесии при определенной температуре. Предполагается, что частица находится в броуновском движении по действием среды и поля сил, заданным потенциальной функцией. В работе приводится и исследуется уравнение, описывающее задачу, обобщающее уравнение Клейна-Крамерса. Показано, что при большой величине сопротивления среды процесс распределения энергии внутренних гармонических колебаний наночастицы представляется в виде композиции быстрого переходного процесса и медленного процесса. В результате быстрого переходного процесса система переходит в квазистационарное состояние. Медленный процесс приближенно описывается стандартным уравнением Шрёдингера, применяемым для описания квантовых процессов. Таким образом, исследуемый процесс может служить моделью квантовых процессов.

**Ключевые слова:** квантовая механика; броуновское движение; фазовое пространство; уравнение Клейна-Крамерса; волны в фазовом пространстве; асимптотические решения.

# 1 Введение

Цель статьи — представить пример математической модели, основанной на естественных предположениях, в которой квантовое или классическое поведение моделируемого процесса проявляется в зависимости от значений параметров модели.

В этой статье рассматривается и изучается математическая модель распределения некоторой характеристики (энергии внутренних гармонических колебаний) наночастицы в фазовом пространстве частицы. Предполагается, что частица движется в среде и находится в броуновском движении под воздействием среды и поля внешних сил, заданным некоторой потенциальной функцией. При этом нас будет интересовать не распределение вероятностей нахождения частицы в фазовом пространстве (как в стандартной задаче броуновского движения), а распределение энергии внутренних гармонических колебаний наночастицы в ее фазовом пространстве. Предполагается также, что частота внутренних колебаний в наночастице велика.

Более точно. В работе рассматривается классическая частица, состояние которой задается координатами импульсами и некоторыми параметрами, задающими внутреннее состояние частицы.

Частица движется под действием поля сил в среде, находящейся в тепловом равновесии при некоторой температуре.

Среда оказывает сопротивление движению частицы с силой пропорциональной скорости движения частицы и случайным образом меняет скорость движения частицы при столкновении частицы с частицами среды. То есть частица находится в броуновском движении.

Предполагается, что внутреннее состояние частицы описывается некоторым параметром, величина которого совершает гармонические колебания с большой постоянной не меняющейся в собственном времени частицы частотой $\omega \gg 1$.

**Задача:** *Найти распределение энергии внутренних гармонических колебаний частицы в ее фазовом пространстве, для частицы, находящейся в броуновском движении в тепловой среде и под действием поля внешних сил, заданным потенциальной функцией.*

Состояние такого процесса естественно описывается распределением амплитуд и фаз внутренних колебаний на фазовом пространстве, то есть комплекснозначной функцией на фазовом пространстве.

В работе приводится математическая модель изучаемого явления в виде модифицированного уравнения Клейна-Крамерса. Уравнение Клейна-Крамерса [1, 2] описывает броуновское движение частицы в фазовом пространстве. Далее построенная математическая модель исследуется в зависимости от различных значений параметров модели. Показывается, что в случае большого удельного сопротивления среды процесс проходит несколько стадий по времени. В течение первой быстрой стадии функция, задающая состояния процесса, переходит в одно из квазистационарных состояний. Во второй медленной стадии функция уже меняется в подпространстве квазистационарных состояний в соответствии со стандартным уравнением Шредингера.

Далее диссипация процесса приводит к тому, что любая суперпозиция собственных состояний оператора Гамильтона приходит к одному из собственных состояний (процесс декогеренции). Смешанное состояние теплового равновесия (состояние Гиббса) возникает на последней стадии за счет теплового воздействия среды и переходов между собственными состояниями оператора Гамильтона за счет больших случайных уклонений.

Если, наоборот, сопротивление среды на единицу массы частицы мало, то показывается, что в рассматриваемой модели плотность распределения энергии удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля, то есть процесс ведет себя как классическая система.

**Основной результат:** *Представленный процесс в зависимости от значений параметров может моделировать квантовые процессы.*

# 2 Математическая модель процесса

Итак, в этой работе рассматривается частица, движущаяся в тепловой среде. Состояние частицы определяются классическими координатами $x \in R^3$ и импульсами $p \in R^3$, а также параметрами, определяющими внутреннее состояние частицы. Причем предполагается, что внутреннее состояние совершает малые колебания с большой частотой $\omega$ и в рассматриваемом приближении описывается вектором $\bar{a} \in V$ из векторного пространства $V$, изменяющимся в соответствии с законом гармонических колебаний с частотой $\omega$.

Предполагается, что при движении частицы колеблющийся вектор внутреннего состояния $\bar{a} \in V$ переносится параллельно сам себе с тривиальной связностью. Поэтому, если мы зафиксируем $\bar{e}$ — направление вектора $\bar{a}$, то оставшиеся степени свободы колеблющегося в собственном времени $\tau$ вектора $\bar{a} = \bar{e}A\cos(\omega\tau + \alpha)$ задаются амплитудой $A$ и фазой $\omega\tau + \alpha$. Амплитуда и фаза стандартным образом задают комплексное число $\varphi = A\exp(-i(\omega\tau + \alpha)) \in C$, где $i$ — мнимая единица. Минус под экспонентой выбран для того, чтобы окончательные выражения принимали форму, принятую в физике. По комплексному числу $\varphi \in C$ вектор внутреннего состояния восстанавливается однозначно по формуле $\bar{a} = \bar{e} * Re(\varphi)$, где $Re(\varphi)$ — действительная часть комплексного числа $\varphi$.

Таким образом, в рассматриваемых предположениях состояние процесса в момент времени $t$ описывается распределением $\varphi(x, p, t) \in C$, где $(x, p) \in R^6$ — координаты и импульсы частицы, а $\varphi$ комплексное число, задающее вектор внутреннего состояния частицы в точке фазового пространства частицы в момент времени $t$.

Величина $|\varphi(x, p, t)|^2 = A^2(x, p, t)$ пропорциональна распределению энергии внутренних колебаний частицы в фазовом пространстве в момент времени $t$, где через $|\varphi|$ обозначен модуль комплексного числа $\varphi$, и $A$ —амплитуда внутренних гармонических колебаний. В статье исследуется процесс изменения распределения $\varphi$ и, соответственно, $|\varphi|^2$.

Перейдем теперь к предположениям о действиях на частицу, вынуждающих ее изменять свое состояние.

На частицу действует поле внешних сил, заданное потенциальной функцией $V(x)$. Кроме того, частица движется в среде, находящейся в тепловом равновесии с температурой $T$ и сопротивлением среды $\beta$. Частица совершает броуновское движение. Если через $f(x, p, t)$ обозначить плотность вероятности распределения частицы в фазовом пространстве в момент времени $t$, то такая плотность $f(x, p, t)$ для нашего броуновского движения должна удовлетворять стандартному уравнению Клейна -Крамерса [1, 2]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3}\Big(\frac{\partial H}{\partial x_k}\frac{\partial f}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial f}{\partial x_k}\Big) + \frac{\beta}{m}\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial p_k}\Big(p_k f + k_B T m\frac{\partial f}{\partial p_k}\Big), \quad (1)$$

где $H = c\sqrt{m^2c^2 + p^2} + V(x)$ — функция Гамильтона; $m$ — масса частицы; $k_B$ — постоянная Больцмана.

Таким образом, точка приложения вектора внутреннего состояния частицы находится в броуновском движении, описываемом уравнением (1).

Рассмотрим теперь, как меняется фаза вектора внутреннего состояния частицы.

Предполагается, что фаза вектора внутреннего состояния частицы меняется с постоянной большой скоростью $\omega$ в системе координат, связанной с движущейся частицей. То есть в этой системе координат комплексное число $\varphi$, соответствующее вектору внутреннего состояния частицы, меняется по формуле $\varphi = \varphi_0 \exp(-i\omega\tau)$, где $i$ — мнимая единица $\tau$ — собственное время частицы.

Предполагается также, что скорость $\omega$ столь велика, что эффекты специальной теории относительности могут сказаться на фазе вектора внутреннего состояния частицы даже при малых скоростях движения самой частицы.

Выразим собственное время частицы $\tau$, то есть время в системе координат, связанной с движущейся частицей, через время неподвижной системы координат $t$ по формулам специальной теории относительности. Если частица с координатами $x = (x_1, x_2, x_3)$ движется со скоростью $v = (v_1, v_2, v_3)$, то в соответствии с формулами специальной теории относительности собственное время выражается через время наблюдателя $t$ по формуле:

$$\tau = \frac{t - (xv/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}, \text{ соответственно, } \quad d\tau = \frac{dt - (v/c^2)dx}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}, \tag{2}$$

где $xv = x_1v_1 + x_2v_2 + x_3v_3$ — скалярное произведение векторов $x$ и $v$; $c$ — скорость света. Заметим, что в соответствии со специальной теорией относительности собственное время частицы не меняется при изменении ее скорости. Поэтому в последней формуле отсутствует слагаемое с множителем $dv$.

Для свободной частицы с импульсом $p = (p_1, p_2, p_3)$ и массой покоя $m$, энергия $E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$ и, соответственно,

$$v = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{pc}{\sqrt{p^2 + m^2c^2}}, \qquad \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{mc}{\sqrt{p^2 + m^2c^2}} = \frac{mc^2}{E}. \tag{3}$$

Подставив эти выражения в (2), после преобразований получим:

$$\tau = \frac{Et - xp}{mc^2} \quad \text{и} \quad d\tau = \frac{Edt - pdx}{mc^2}. \tag{4}$$

Следующее важное предположение состоит в том, что мы будем считать формулу (4) верной не только для свободного движения частицы, но и для движения в потенциальном поле сил (по крайней мере, в случае, когда потенциальная энергия существенно меньше энергии покоя частицы, то есть когда $V(x) \ll mc^2$), если вместо $E$ в эту формулу подставить функцию Гамильтона $H = E + V(x)$. Получим:

$$\tau = \frac{Ht - xp}{mc^2} \quad \text{и} \quad d\tau = \frac{Hdt - pdx}{mc^2}. \tag{5}$$

Рассмотрим распределение на фазовом пространстве комплексных векторов $\varphi(x, p, t)$, аргументы которых меняются с постояннной скоростью $\omega$ в собственном времени. Если $\varphi(x, p, t) = \varphi_0$, при $\tau = 0$, то

$$\varphi(x, p, t) = \varphi_0 \exp(-i\omega\tau). \tag{6}$$

Подставив в это выражение формулу (4) и используя обозначение

$$\hbar \overset{def}{=} mc^2/\omega, \tag{7}$$

получим

$$\varphi(x, p, t) = \varphi_0 \exp(-i\omega\tau) = \varphi_0 \exp\left(\frac{-i\omega(Ht - xp)}{mc^2}\right) = \varphi_0 \exp\left(\frac{-i(Ht - xp)}{\hbar}\right). \tag{8}$$

Обозначим через $D_{x_k}$ и $D_{p_k}$, для $k = 1, 2, 3$, операторы дифференцирования $\varphi(x, p, t) = \varphi_0 \exp(-i\omega\tau)$ при параллельном бесконечно малом переносе (сдвиге) $\varphi$ на $dx_k$ и $dp_k$, соответственно, без изменения собственного времени $\tau$. Из формул (4) и (8) следует, что

$$D_{x_k} = \partial/\partial x_k - ip_k/\hbar \;\; \text{и} \;\; D_{p_k} = \partial/\partial p_k, \quad \text{где} \;\; k = 1, 2, 3. \tag{9}$$

Заметим также, что такие операторы сдвига по координатам и импульсам не коммутируют. Коммутаторы их дифференциальных операторов имеют вид:

$$\left[D_{p_k}, D_{x_k}\right] = -i/\hbar \text{ и } \left[D_{p_k}, D_{x_j}\right] = 0, \text{ где } k \neq j \text{ и } k, j = 1, 2, 3.$$

Таким образом, такие сдвиги по импульсам и координатам волновых функций $\varphi$ на фазовом пространстве реализуют представление группы Гейзенберга. Это представление рассматривалось Э. Пруговецким в работе [3].

Теперь мы совсем готовы к тому, чтобы представить модифицированное уравнение Клейна-Крамерса, моделирующее исследуемый процесс распределения амплитуд и фаз внутренних гармонических колебаний в фазовом пространстве. Состояние процесса в каждый момент времени $t$, как мы видели, задается комплекснозначной функцией $\varphi(x,p,t)$ на фазовом пространстве $(x,p) \in R^6$. Распределение энергии этих гармонических колебаний в фазовом пространстве пропорционально $|\varphi(x,p,t)|^2$, а изменение функции $\varphi(x,p,t)$ по времени задается модифицированным уравнением Клейна-Крамерса вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \sum_{k=1}^{3} \Big( \frac{\partial H}{\partial x_k} D_{x_k}\varphi - \frac{\partial H}{\partial p_k} D_{p_k}\varphi \Big) - \frac{i}{\hbar} H\varphi + \\ &\quad + \frac{\beta}{m} \sum_{k=1}^{3} D_{p_k} \Big( i\hbar D_{x_k}\varphi + k_B T m D_{p_k}\varphi \Big), \end{aligned} \tag{10}$$

где $\hbar = mc^2/\omega$.

Модифицированное уравнение Клейна-Крамерса получается из уравнения Клейна-Крамерса (1) заменой операторов $\partial/\partial x_k$ и $\partial/\partial p_k$ на операторы дифференцирования (9) $D_{x_k}$ и $D_{p_k}$, соответственно, добавлением в правую часть слагаемого вида $-(i/\hbar)H\varphi$ и заменой в операторе диффузии умножения функции $\varphi$ на $p_k$ действием оператора $i\hbar D_{x_k} = (p_k + i\hbar\partial/\partial x_k)$ на функцию $\varphi$.

Добавление слагаемого $-(i/\hbar)H\varphi$ связано с тем, что $\varphi$ описывает гармонические колебания в точке $(x,p)$ с частотой $\omega$ в виде $\varphi = \varphi_0 \exp(-i\omega\tau)$ в собственном времени частицы $\tau$ или в виде $d\varphi = -i\omega\varphi d\tau$. При этом согласно формуле (5) $d\tau = (H/(mc^2))dt$ при $dx = 0$.

После подстановки в (10) выражений (9) для $D_{x_k}$ и $D_{p_k}$ модифицированное уравнение Клейна-Крамерса представляется в виде:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = A\varphi + \gamma B\varphi, \tag{11}$$

где
$$A\varphi = \sum_{k=1}^{3} \Big( \frac{\partial H}{\partial x_k}\frac{\partial \varphi}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k}\Big( \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{i p_k}{\hbar} \Big)\varphi \Big) - \frac{i}{\hbar} H\varphi \tag{12}$$

и
$$B\varphi = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial p_k} \left( \Big( p_k + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \Big)\varphi + k_B T m \frac{\partial \varphi}{\partial p_k} \right); \tag{13}$$

$H(x,p) = c\sqrt{m^2c^2 + p^2} \approx mc^2 + p^2/(2m)$ — функция Гамильтона системы; $i$ — мнимая единица; $\hbar$ по определению равно $mc^2/\omega$; параметр $\gamma = \beta/m$

— удельный коэффициент сопротивления среды, то есть коэффициент сопротивления среды $\beta$, приходящейся на единицу массы частицы $m$; $k_B$ — постоянная Больцмана; $T$ — температура среды, в которой движется частица.

Модифицированное уравнение Клейна-Крамерса рассматривалось в [5, 6, 7]. Некоторые результаты из этих статей для полноты будут приведены в настоящей статье.

Рассмотрим сначала случай, когда $\gamma = \beta/m$ — большая величина, то есть вклад оператора $B$ в общий процесс изменения волновой функции велик. Основной результат, который получен при этом предположении состоит в том, что движение, описываемое уравнением (11), асимптотически распадается на быстрое движение и медленное. В результате быстрого движения произвольная волновая функция $\varphi(x,p,0)$ приближается за время порядка $1/\gamma$ к подпространству собственных функций оператора $B$ с собственным значением 0. Это подпространство параметризуется функциями $\psi(x)$, зависящими только от координат $x$. Медленное движение уже происходит по подпространству таких функций. То есть быстрое движение приводит к стационарным решениям диффузионного уравнения

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \gamma B\varphi = \gamma\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial p_k}\left(\left(p_k + i\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}\right)\varphi + k_B Tm\frac{\partial\varphi}{\partial p_k}\right) = 0. \tag{14}$$

Сформулируем более точное утверждение.

**Теорема 1.** *Пусть $\varphi(x,p,0)$ — комплекснозначная функция на фазовом пространстве, преобразование Фурье которой по $x$ стремится к 0 при $p \to \infty$. Решение $\varphi(x,p,t)$ диффузионного уравнения (14) экспоненциально по времени с показателем $-\gamma t$, то есть за время порядка $1/\gamma$, переходит к функции $\varphi_0 = P_0\varphi$, вида:*

$$\varphi_0 = P_0\varphi \;=\; \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{k_B Tm}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\int\limits_{R^3}\psi(y)e^{-\frac{k_B Tm(x-y)^2}{2\hbar^2}}e^{\frac{ip(x-y)}{\hbar}}dy, \tag{15}$$

$$\text{где}\;\; \psi(y) = \left(\frac{\pi\hbar^2}{k_B Tm}\right)^{3/2}\int\limits_{R^3}\varphi(y,p,0)dp. \tag{16}$$

*Функции вида (15) образуют линейное подпространство стационарных функций для уравнения (14) в пространстве функций $\varphi(x,p)$. Это подпространство параметризуется функциями $\psi(y)$, зависящими только* *от координат $y \in R^3$. Оператор $P_0$ является оператором проекции на это подпространство.*

Доказательство теоремы 1 приводится в приложении 1 к этой статье.

Константа перед интегралом в формуле (16) подобрана так, чтобы выполнялось равенство:

$$\int_{R^6} |\varphi_0(x,p)|^2 dxdp = \int_{R^3} |\psi(y)|^2 dy.$$

Представление группы Галилея на подпространстве функций вида (15), но без использования параметра температуры среды в формуле рассматривалось Э. Пруговецким в [3], а обобщение этого представления использовалось им в [4] для объединения квантовой механики и теории относительности.

**Теорема 2**. *Движение, описываемое уравнением (11), асимптотически распадается при большом $\gamma$ на быстрое движение и медленное. В результате быстрого движения функция $\varphi(x,p,0)$ переходит за время порядка $1/\gamma$ к функции $P_0\varphi$ теоремы 1.*

*Медленное движение, начинающееся с функции $P_0\varphi$ вида (15) с ненулевой функцией $\psi(y)$ происходит по подпространству таких функций и параметризуется 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*

$$\hat{H}\psi = -\sum_{k=1}^{3} \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial y_k^2} + V(y)\psi + mc^2\psi - \frac{3kT}{2}\psi + O(1/\gamma); \qquad (17)$$

*$\hat{H}$ — оператор, отличающийся от стандартного оператора Гамильтона слагаемыми-константами.*

Доказательство теоремы 2 приводится в приложении 2 к этой статье.

Заметим, что обратимость квантового процесса, заданного оператором (17), в этой модели является результатом описания необратимого процесса, заданного уравнениями (11, 12, 13), но в 0-приближении по параметру $1/\gamma$.

Мы этим пользоваться не будем, но хочется упомянуть, что в [7] рассматривается приближение оператора $\hat{H}$ теоремы 2 с точность до $O(1/\gamma^2)$ и утверждается, что в движении, описываемом уравнением (11), есть ещё более медленное движение, определенное диссипацией процесса, в результате которого любая суперпозиция собственных состояний оператора Гамильтона приходит к одному из собственных состояний. Такое движение соответствует в квантовой механике процессу декогеренции [8]. В этой же работе было сделано предположение, что смешанное состояние теплового равновесия (состояние Гиббса) возникает в еще более медленном движении этого процесса за счет теплового воздействия среды и переходов между собственными состояниями оператора Гамильтона за счет больших случайных уклонений.

Статей, посвященных исследованию процессов, описываемых уравнением Клейна-Крамерса, очень много. Замечательными обзорами на эту тему являются статьи [9, 10]. Для таких процессов характерно их представление в виде быстрых и медленных движений, а также появление скачков между квазистационарными состояниями.

Рассмотрим, теперь, случай, когда $\gamma = 0$. В этом случае, модифицированное уравнение Клейна-Крамерса (11, 12, 13) представляется в виде:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3} \Big( \frac{\partial H}{\partial x_k} \frac{\partial \varphi}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \Big( \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{i p_k}{\hbar} \Big) \varphi \Big) - \frac{i}{\hbar} H \varphi. \tag{18}$$

Введем обозначение $\rho = |\varphi|^2 = \varphi\varphi^*$, где знаком $*$ обозначена операция комплексного сопряжения. В соответствии с нашими определениями функция $\rho$ описывает распределение энергии внутренних гармонических колебаний частицы в фазовом пространстве.

**Теорема 3.** *Если функция $\varphi$ удовлетворяет модифицированному уравнению Клейна-Крамерса при $\gamma = 0$, то есть уравнению (18), то $\rho = \varphi\varphi^*$ удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3} \Big( \frac{\partial H}{\partial x_k} \frac{\partial \rho}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \Big). \tag{19}$$

**Доказательство.** Применим к обеим частям уравнения (18) операцию комплексного сопряжения. Получим:

$$\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3} \Big( \frac{\partial H}{\partial x_k} \frac{\partial \varphi^*}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \Big( \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{i p_k}{\hbar} \Big) \varphi^* \Big) + \frac{i}{\hbar} H \varphi^*. \tag{20}$$

По свойству производной от произведения имеем:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial (\varphi\varphi^*)}{\partial t} = \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial t}.$$

Если в это выражение подставить вместо $\partial\varphi/\partial t$ и $\partial\varphi^*/\partial t$ их выражения по формулам (18) и (20), соответственно, раскрыть скобки, привести подобные члены и сгруппировать, вынеся $\partial H/\partial x_k$ и $\partial H/\partial p_k$ за скобки, то получим требуемое выражение (19).

Из теоремы 3 следует, что, если частица, находящаяся в среде, не взаимодействует со средой ($\gamma = 0$), то распределение энергии внутренних гармонических колебаний частицы движется по классическим траекториям частицы. То есть в этой модели для изолированной частицы, не взаимодействующей со средой, квантовые эффекты не возникают.

# 3 Заключение

В статье рассмотрена математическая модель процесса распределения энергии в фазовом пространстве для внутренних гармонических колебаний частицы, находящейся в броуновском движении. Состояние такого процесса описывается комплекснозначной функцией на фазовом пространстве частицы.

Показано, что процесс в рассматриваемой модели при $\gamma = \beta/m \gg 1$ раскладывается на быстрое (порядка $1/\gamma$) и медленное движения. В результате быстрого движения система, начиная с состояния, представленного произвольной функцией на фазовом пространстве, переходит к состояниям, представленным функциями, принадлежащими некоторому особому подпространству. Элементы этого особого подпространства соответствуют функциям, зависящим только от координат (или только импульсов). Медленное движение, начинающееся с ненулевой функции из этого подпространства, происходит по подпространству и описывается обычным уравнением Шредингера.

Если, наоборот, сопротивление среды на единицу массы частицы мало, то в рассматриваемой модели плотность распределения энергии колебаний удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля, что соответствует классическому процессу.

Среди выводов из этой статьи нужно отметить следующие.

В представленной модели процессы, описываемые уравнениями обычной квантовой механики, возникают как приближенные описания в результате асимптотики исследуемых здесь процессов распределения энергии внутренних гармонических колебаний частицы в ее фазовом пространстве при взаимодействии со средой. Следовательно, такие процессы могут служить удобной моделью для процессов квантовой механики.

Обратимость квантовых процессов в этой модели — это результат приближенного описания процесса в 0-приближении по параметру $1/\gamma$.

И, наконец, показано, что, если в этой модели исключить взаимодействие частицы со средой, то процесс описывается законами классической механики.

Заметим также, что в представленной модели можно рассматривать процесс с малой величиной параметра $\gamma$, когда этот процесс уже не точно описывается законами классической механики, но еще не описывается законами квантовой механики.

Важно также отметить, что в предлагаемой модели значение параметра $\hbar \stackrel{def}{=} mc^2/\omega$ определяется массой частицы и частотой ее внутренних колебаний и, в общем случае, может быть произвольным. Более того, для взаимодействующих частиц у каждой частицы величина $\hbar$ может быть своей. То есть постоянство постоянной Планка $\hbar$ в квантовой механике не выводится в этой модели, и для такого вывода требуются дополнительные условия.

Подход предлагаемый в этой статье напоминает подход, предложенный в статье [12], где рассматривалась модель квантовой механики в виде броуновского движения, но в ней используется коэффициент диффузии в виде комплексного числа, и появление комплекных чисел в модели никак не обосновывается.

# Приложение

## Приложение1. Доказательство теоремы 1

Подставим в уравнение (14) представление $\varphi(x,p,t)$ в виде интеграла Фурье по $x$ вида:

$$\varphi(x,p,t) = \mathcal{F}_\hbar\tilde{\varphi} \stackrel{def}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{R^3}\tilde{\varphi}(s,p,t)e^{isx/\hbar}ds, \tag{21}$$

$$\text{где} \quad \tilde{\varphi}(s,p,t) = \mathcal{F}_\hbar^{-1}\varphi \stackrel{def}{=} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{R^3}\varphi(x,p,t)e^{-isx/\hbar}dx. \tag{22}$$

Получим, что $\tilde{\varphi}(s,p,t)$ удовлетворяет уравнению:

$$\frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial t} = \gamma\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial p_j}\Big((p_j - s_j)\tilde{\varphi} + k_B T m\frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial p_j}\Big). \tag{23}$$

Оператор правой части этого уравнения хорошо известен (см., например [11]). 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, умноженные на $-\gamma$, то есть $0, -\gamma, -2\gamma, \ldots$ Собственному значению 0 соответствуют собственные функции вида

$$\tilde{\varphi}_0(s,p) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\tilde{\psi}(s)\exp\Big(-\frac{(p-s)^2}{2k_BTm}\Big),$$

где $\tilde{\psi}(s)$ — произвольная комплекснозначная функция для $s \in R^3$.

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

$$\tilde{\varphi}_0(s,p) = P_0\tilde{\varphi} = \frac{C}{(2\pi k_BTm)^{3/2}}\tilde{\psi}(s)e^{-\frac{(p-s)^2}{2k_BTm}}, \quad \text{где} \quad \tilde{\psi}(s) = \frac{1}{C}\int\limits_{R^3}\tilde{\varphi}(s,p)dp. \tag{24}$$

Поэтому, рассматривая уравнение (23) в базисе собственных функций, получим, что всякое решение $\tilde{\varphi}(s,p,t)$ этого уравнения экспоненциально по времени с показателем $-1/\gamma$ стремится к стационарному решению вида $\tilde{\varphi}_0$. Отсюда, с учетом представления (21) функции $\varphi_0(x,p,t)$ через $\tilde{\varphi}_0(s,p,t)$, получаем, что стационарные решения $\varphi_0(x,p)$ уравнения (14) имеют вид:

$$\varphi_0(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{C}{(2\pi k_BTm)^{3/2}}\int_{R^3}\tilde{\psi}(s)e^{-\frac{(p-s)^2}{2k_BTm}}e^{\frac{isx}{\hbar}}ds.$$

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

$$\tilde{\psi}(s) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{R^3}\psi(y)e^{-\frac{isy}{\hbar}}dy.$$

Подставив это выражение в предыдущее выражение и интегрируя по $s$, получим:

$$\varphi_0(x,p) = P_0\varphi(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{C}{(2\pi k_BTm)^{3/2}}\int_{R^6}\psi(y)e^{-\frac{(p-s)^2}{2k_BTm}}e^{\frac{is(x-y)}{\hbar}}ds\,dy =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} C \int_{R^3} \psi(y) e^{-\frac{k_B T m (x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{\frac{ip(x-y)}{\hbar}} dy, \quad \text{где} \quad \psi(s) = \frac{1}{C} \int\limits_{R^3} \varphi(s,p) dp,$$

что совпадает с формулой (15) теоремы 1 с точностью до значения константы $C$. Значение константы $C$ может быть произвольным, но здесь она подбирается исходя из равенства:

$$\int_{R^6} \varphi_0 \varphi_0^* dx dp = \int_{R^3} \psi \psi^* dy.$$

Простые вычисления показывают, что в этом случае

$$C = \left( \frac{k_B T m}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2}.$$

Заметим, что интеграл от полученного выражения $P_0 \varphi$ по $dp$ дает $C\psi(x)$. Отсюда следует, что $P_0^2 = P_0$. То есть $P_0$ — оператор проекции.

Теорема 1 доказана.

## Приложение2. Доказательство теоремы 2

Рассмотрим процесс, заданный уравнениями (11, 12, 13). При больших $\gamma$ основной вклад в правую часть этого уравнения дает оператор $B$. По теореме 1, если не учитывать вклада оператора $A$, состояние процесса за время порядка $1/\gamma$ будет описываться функцией вида (15).

Пусть $\varphi_0(x,p,t)$ — функция вида (15), соответствующая функции $\psi(y,t)$. Подставим это выражение $\varphi_0(x,p,t)$ в уравнения (11, 12, 13) вместо $\varphi$. Учтем, что $B\varphi_0 = 0$, согласно теореме 1. Затем применим к обеим частям полученного равенства операцию, заданную равенством (16), то есть возьмем от обеих частей интеграл по $p$, умножив его на константу, стоящую перед интегралом в формуле (16). Имеем:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int\limits_{R^6} \frac{\partial \psi(y,t)}{\partial t} e^{-\frac{k_B T m (x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dy dp =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int\limits_{R^6} A\psi(y,t) e^{-\frac{k_B T m (x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dy dp.$$

Проинтегрируем левую часть этого равенства по $p$ и по $y$, заметив, что там стоит дельта-функция, получим:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int\limits_{R^6} A\psi(y,t) e^{-\frac{k_B T m (x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dy dp.$$

Учитывая выражение (12) для оператора $A$, из последнего равенства и аддитивности интеграла получим:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{R^6}\left(\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial V}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial p_j} - \frac{p_j}{m}\frac{\partial}{\partial x_j}\right) - \frac{i}{\hbar}\left(mc^2 + V - \sum_{j=1}^{3}\frac{p_j^2}{2m}\right)\right) \times$$

$$\times\ \psi(y,t)e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dydp = I_1 + I_2 + I_3 + I_4, \text{ где} \qquad (25)$$

$$I_1 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{R^6}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial p_j}\left(\psi(y,t)e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar}\right) dydp; \qquad (26)$$

$$I_2 = -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{R^6}\sum_{j=1}^{3}\frac{p_j}{m}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\psi(y,t)e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar}\right) dydp; \qquad (27)$$

$$I_3 = -\frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{R^6}\left(mc^2 + V(x)\right)\psi(y,t)e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dydp; \qquad (28)$$

$$I_4 = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{R^6}\sum_{j=1}^{3}\frac{p_j^2}{2m}\psi(y,t)e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dydp. \qquad (29)$$

Рассмотрим интеграл $I_1$, заданный выражением (26). 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:

$$I_1 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}\int\limits_{R^6}\psi(y,t)\frac{i(x_j - y_j)}{\hbar}e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} e^{ip(x-y)/\hbar} dydp = 0 \qquad (30)$$

Рассмотрим интеграл $I_2$, заданный выражением (27). Поменяем в нем местами суммирование и интегрирование, вынесем множитель $1/m$ за знаки суммирования и интеграла, вынесем производные по $x_j$ за знак интеграла, заменим выражения $p_j \exp(ip(x-y)/\hbar)$ на равные им выражения $i\hbar\partial\ \exp(ip(x-y)/\hbar)/(\partial y_j)$ и проинтегрируем полученные интегралы по частям. Имеем:

$$I_2 = -\frac{1}{m(2\pi\hbar)^3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_j}\int\limits_{R^6}\psi(y,t)e^{-\frac{k_B T m(x-y)^2}{2\hbar^2}} i\hbar\frac{\partial}{\partial y_j}\left(e^{ip(x-y)/\hbar}\right) dydp =$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{i\hbar}{m(2\pi\hbar)^3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_j}\int\limits_{R^6}\frac{\partial\psi(y,t)}{\partial y_j}e^{-\frac{k_BTm(x-y)^2}{2\hbar^2}}e^{ip(x-y)/\hbar}dydp+\\
&+\frac{i\hbar}{m(2\pi\hbar)^3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_j}\int\limits_{R^6}\psi(y,t)\frac{k_BTm}{\hbar^2}(x_j-y_j)e^{-\frac{k_BTm(x-y)^2}{2\hbar^2}}e^{ip(x-y)/\hbar}dydp=\\
&= \frac{i\hbar}{m}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x_j^2}. \qquad (31)
\end{aligned}
$$

Рассмотрим интеграл $I_3$, заданный выражением (28). Вынесем в нем за знак интеграла выражения, независящие от переменных интегрирования, и проинтегрируем оставшийся интеграл по $p$ и $y$. Получим:

$$
\begin{aligned}
I_3 &= -\frac{i}{\hbar}(mc^2+V(x))\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\limits_{R^6}\psi(y,t)e^{-\frac{k_BTm(x-y)^2}{2\hbar^2}}e^{ip(x-y)/\hbar}dydp=\\
&= -\frac{i}{\hbar}(mc^2+V(x))\psi(x,t). \qquad (32)
\end{aligned}
$$

Рассмотрим интеграл $I_4$, заданный выражением (29). Поменяем в нем местами суммирование и интегрирование, вынесем множитель $1/2m$ за знаки суммирования и интеграла, заменим выражение $p_j^2\exp(ip(x-y)\hbar)$ на равное ему выражение через вторые производные по $y_j$ вида $\hbar^2\partial^2\exp(ip(x-y)\hbar)/\partial y_j^2$ и проинтегрируем полученные интегралы по частям по $y_j$. Имеем:

$$
\begin{aligned}
I_4 &= -\frac{i}{2m\hbar}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\sum_{j=1}^{3}\int\limits_{R^6}\psi(y,t)e^{-\frac{k_BTm(x-y)^2}{2\hbar^2}}\frac{\hbar^2\partial^2}{\partial y_j^2}e^{ip(x-y)/\hbar}dydp=\\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\sum_{j=1}^{3}\int\limits_{R^6}\Big(\frac{\partial^2\psi}{\partial y_j^2}+2\frac{k_BTm}{\hbar^2}(x_j-y_j)\frac{\partial\psi}{\partial y_j}+\\
&\quad+\Big(\frac{k_BTm}{\hbar^2}\Big)^2(x_j-y_j)^2\psi-\frac{k_BTm}{\hbar^2}\psi\Big)\times e^{-\frac{k_BTm(x-y)^2}{2\hbar^2}}e^{ip(x-y)/\hbar}dydp=\\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\left(\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x_j^2}-3\frac{k_BTm}{\hbar^2}\psi(x,t)\right). \qquad (33)
\end{aligned}
$$

Подставим полученные выражения для интегралов $I_1$, $I_2$, $I_3$, $I_4$ в равенство (25), приведем подобные члены и умножим обе части равенства на $i\hbar$. Получим,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\sum_{j=1}^{3}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_j^2}+V\psi+mc^2\psi-\frac{3k_BT}{2}\psi,$$

которое совпадает требуемым в теореме 2 равенством (17).

# Список литературы


[1] H. A. Kramers, *Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions.//* Physica. 7, 284–304. (1940)

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

[3] S.T. Ali, E. Prugovecki, *Quantum statistical mechanics on stochastic phase space.//* Int. J. Theor. Phys. 16, 689–706 (1977).

[4] E. Prugovecki, Stochastic Quantum Mechanics and Quantum Spacetime – A Consistent Unification of Relativity and Quantum Theory Based on Stochastic Spaces. D. Reidel Publishing Company, Boston, 1984.

[5] E.M. Beniaminov, *Quantum Mechanics as Asymptotics of Solutions of Generalized Kramers Equation.//* Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 8, No. 25, 195-210 (2011).

[6] E.M. Beniaminov, *Diffusion Scattering of Waves is a Model of Subquantum Level.//* Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 11, No. 30, 35–48 (2014). http://www.ejtp.com/articles/ejtpv11i30p35.pdf.

[7] E.M. Beniaminov, *Scattering of Waves in the Phase Space, Quantum Mechanics, and Irreversibility.//* Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 12, No. 32, 43–60 (2015). http://www.ejtp.com/articles/ejtpv8i25p195.pdf.

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

[9] V.I. Mel'nikov, *The Kramers Problem: Fifty Years of Development*// Physics reports (Review Section of Physics Letters) 299. Nos. 1&2 (1991), 1 –71.

[10] N. Berglund, *Kramers' law: Validity, derivation and generalizations*// arxiv:1106.5799v2 (2013).

[11] Э. Камке, Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям М.:"Наука", 1976. (E. Kamke, Differentialgleichungen: Losungsmethoden und Losungen, I, Gewohnliche Differentialgleichungen, B. G. Teubner, Leipzig, 1977.)

[12] G.G. Comisar*Brownian-Motion Model of Nonrelativistic Quantum Mechanics*// Pysical Rview 138, N 5 B (1965), 1332–1337.