Уточнение уравнения Шрёдингера с учетом диссипации волн в фазовом пространстве

Е. М. Бениаминов

В работе приводится пример математической модели для описания квантово-механических процессов, взаимодействующих со средой. В качестве модели рассматривается процесс теплового рассеяния волновой функции, заданной на фазовом пространстве. Рассматривается случай, когда тепловая диффузия задается только по импульсам. Приводится и исследуется соответствующее модифицированное уравнение Крамерса для этого процесса. Рассматриваются последовательные приближения к этому уравнению по степеням величины, обратной к величине сопротивления среды на единицу массы частицы процесса. Приближения строятся аналогично тому, как в статистической физике из обычного уравнения Крамерса, описывающего изменение плотности распределения вероятностей для броуновского движения частицы в фазовом пространстве, строится приближенное описание этого процесса в виде уравнение Фоккера-Планка для плотности распределения вероятностей в конфигурационном пространстве.

Доказано, что нулевым (обратимым) приближением к рассматриваемой модели по большому параметру сопротивления среды является обычное квантово-механическое описание в виде уравнения Шрёдингера со стандартным оператором Гамильтона. В статье выводится следующее приближение к модели по отрицательной степени коэффициента сопротивления среды. В результате строится модифицированное уравнение Шредингера, учитывающее диссипацию процесса в исходной модели.

1 Введение

В этой статье продолжается исследование обобщенного уравнения Крамерса, введенного в статье [1].

В работе [1] обобщенное уравнение Крамерса возникло в качестве математической модели процесса рассеяния волн в фазовом пространстве под действием среды, находящейся в тепловом равновесии. В [1] было показано, что при некоторых параметрах модели процесс, описываемый обобщенным уравнением Крамерса, представляется в виде композиции быстрого переходного процесса и медленного процесса. Медленный процесс, как было доказано, приближенно описывается уравнением Шрёдингера, применяемым для описания квантовых процессов. Таким образом показано, что квантово-механическое описание возникает как асимптотическое описание процессов теплового рассеяния волн в фазовом пространстве.

Целью этой статьи является построение приближенного уравнения, описывающего медленную составляющую процесса, заданного обобщенным уравнением Крамерса, с точностью, при которой проявляются диссипативные эффекты в этом процессе.

Статья состоит из четырех разделов и приложения.

В следующем разделе приводятся постановка задачи, обобщенное уравнение Крамерса для процесса теплового рассеяния волн на фазовом пространстве и свойства операторов, входящих обобщенное уравнение Крамерса.

В разделе 3 приводятся ранее полученные результаты для описания процесса, заданного обобщенным уравнением Крамерса, дается метод для приближенного описания этого процесса по отрицательным степеням коэффициента сопротивления среды и формулируется основной результат статьи в виде теоремы 4. В теореме приводится уравнение, описывающее медленную составляющую исследуемого процесса с учетом диссипации. Этим уравнением является модифицированное уравнение Шрёдингера, учитывающее необратимость процесса. Показано, что следствием модифицированного уравнения Шрёдингера являются эффекты декогеренции и спонтанных перескоков между уровнями.

В разделе 4 сформулированы некоторые дальнейшие направления работы и возможности сравнения предлагаемой модели с экспериментами.

Доказательство основной теоремы работы представлено в приложении.

2 Математическая постановка задачи и основные свойства операторов уравнения

Итак, рассматривается следующая математическая модель процесса. Состояние процесса в каждый момент времени $t \in R$ задается комплексно-значной функцией $\varphi[x,p,t]$ на фазовом пространстве $(x,p) \in R^{2n}$, где n — размерность конфигурационного пространства. Координаты в конфигурационном пространстве задаются набором чисел $x \in R^n$, а импульсы набором чисел $p \in R^n$. (Далее всюду аргументы функции будет писаться в квадратных скобках, чтобы отличать аргумент функции от умножения на переменную.)

Обобщенным уравнением Крамерса для функции $\varphi[x,p,t]$ называется уравнение вида:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = A\varphi + \gamma B\varphi, \tag{1}$$

где

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

и

$$B\varphi = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p_j}\left(\Big(p_j + i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\Big)\varphi + k_B T m\frac{\partial \varphi}{\partial p_j}\right); \tag{3}$$

m — масса частицы; $V[x]$ — потенциальная функция внешних сил, действующих на частицу; i — мнимая единица; $\hbar$ — постоянная Планка; $\gamma = \beta/m$ — коэффициент сопротивления среды β на единицу массы частицы; k_B — постоянная Больцмана; T — температура среды.

Если в уравнении (1) перейти к безразмерным переменным вида:

$$p' = \frac{p}{\sqrt{k_B T m}}, \qquad x' = \frac{\sqrt{k_B T m}}{\hbar}x, \qquad V'[x] = \frac{V[x]}{k_B T}, \tag{4}$$

то в новых переменных уравнение (1) принимает вид:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = A'\varphi + \gamma B'\varphi, \tag{5}$$

где

$$A'\varphi = \frac{k_B T}{\hbar}\Big(\sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial V'}{\partial x'_j}\frac{\partial \varphi}{\partial p'_j} - p'_j\frac{\partial \varphi}{\partial x'_j}\Big) - i\Big(V' - \sum_{j=1}^{n}\frac{(p'_j)^2}{2}\Big)\varphi\Big) \tag{6}$$

и

$$B'\varphi = \sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial p'_j}\left(\Big(p'_j + i\frac{\partial}{\partial x'_j}\Big)\varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial p'_j}\right). \tag{7}$$

Заметим, что оператор A' косоэрмитов, а оператор B' не является ни косоэрмитовым, ни самосопряженным. Оператор B' определяет процесс рассеяния волновой функции по импульсам и, следовательно, необратимость процесса. В этой работе рассматривается случай, когда γ — большая величина, то есть вклад оператора B' в общий процесс изменения волновой функции велик. Свойства оператора B' представлены в следующей теореме.

Теорема 1. *Оператор B', заданный выражением (7), имеет полный набор собственных функций (в классе функций $\varphi[x,p]$, стремящихся к нулю на бесконечности) с собственными значениями $0,-1,-2,...$ Соответственно, оператор B' представляется в виде:*

$$B' = -\sum_{k=0}^{\infty} kP_k, \tag{8}$$

где P_k — операторы проекции на собственные подпространства оператора B' с собственными значениями $-k$.

Операторы P_k, как проекторы на собственные подпространства оператора B', удовлетворяют соотношениям:

$$P_kP_k = P_k, \quad P_kP_{k'} = 0 \quad \textit{при} \quad k \neq k', \quad P_kB' = B'P_k = -kP_k \tag{9}$$

$$\textit{и} \quad E = \sum_{k=0}^{\infty} P_k, \tag{10}$$

где E — тождественный оператор.

Доказательство этой теоремы будет дано вместе с доказательством следующей теоремы, в которой описывается вид операторов проекции P_k.

Обозначим через $H^k_{k_1...k_n}[p] \stackrel{def}{=} H_{k_1}[p_1]...H_{k_n}[p_n]$ — произведение полиномов Эрмита [7] от соответствующих переменных, где $k = k_1 + ... + k_n$ — сумма степеней полиномов Эрмита, входящих в произведение. По определению полином Эрмита $H_{k_j}[p_j]$ задается выражением:

$$H_{k_j}[p_j] \stackrel{def}{=} \exp\left(\frac{p^2}{2}\right)\left(-\frac{\partial}{\partial p_j}\right)^{k_j} \exp\left(-\frac{p^2}{2}\right) \tag{11}$$

Пусть $S_{k_1,...,k_n}$ и $I_{k_1,...,k_n}$ — операторы, которые задаются выражениями:

$$\psi_{k_1,...,k_n} = S_{k_1,...,k_n}[\varphi] \stackrel{def}{=} \int\limits_{R^n} H^k_{k_1...k_n}\left[p'' + i\frac{\partial}{\partial x''}\right]\varphi[x'',p'']dp'', \tag{12}$$

$$\varphi_{k_1,\ldots,k_n}=I_{k_1,\ldots,k_n}[\psi_{k_1,\ldots,k_n}]\stackrel{def}{=}\qquad(13)$$
$$\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\psi_{k_1,\ldots,k_n}[x'']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''.$$

Теорема 2. *Операторы проекции P_k имеют вид:*

$$P_k=\sum_{\substack{k_1,\ldots,k_n=0\\ k_1+\ldots+k_n=k}}^{k}I_{k_1,\ldots,k_n}S_{k_1,\ldots,k_n},\qquad(14)$$

и операторы $S_{k'_1,\ldots,k'_n}$, $I_{k_1,\ldots,k_n}$ удовлетворяют соотношениям:

$$S_{k'_1,\ldots,k'_n}I_{k_1,\ldots,k_n}\psi_{k_1,\ldots,k_n}=\delta_{k'_1,k_1}\ldots\delta_{k'_n,k_n}\psi_{k_1,\ldots,k_n},\qquad(15)$$

где $\delta_{k'_ik_i}$ равны 0, если $k'_i\neq k_i$, и равны 1, если $k'_i=k_i$.

В частности, из форрмул (12), (13) и теоремы 2 следует, что

$$\psi[x']=S_{\bar 0}[\varphi]\stackrel{def}{=}\int\limits_{R^n}\varphi[x',p']dp',\qquad(16)$$

$$\varphi_0[x',p']=I_{\bar 0}[\psi]\stackrel{def}{=}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{2n}}\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx'',\qquad(17)$$

$$P_0\varphi=\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}}\varphi[x'',p'']dp''e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx'',\qquad(18)$$

$$\begin{aligned}P_1\varphi &= \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}}\left(p''_j+i\frac{\partial}{\partial x''_j}\right)\varphi[x'',p'']dp''\times\\ &\quad(p'_j-s'_j)e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx'',\end{aligned}\qquad(19)$$

Заметим, что операторы $I_{\bar 0}$ и $S_{\bar 0}$, заданные формулами (17) и (16), устанавливают биекцию между множеством функций $\psi[x']$ и множеством собственных функций $\varphi_0[x',p']$ оператора B' с собственным значением, равным 0. Функцию $\psi[x']=S_{\bar 0}[\varphi_0[x',p']]$ будем называть представлением собственной функции $\varphi_0[x',p']$.

Доказательство теорем 1 и 2. Подставим в выражение (7) представление $\varphi[x',p',t']$ в виде интеграла Фурье по x' и обратного преобразования Фурье:

$$\varphi[x',p',t']=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\int_{R^n}\tilde\varphi[s',p',t']e^{is'x'}ds',\qquad(20)$$

$$\text{где} \quad \tilde{\varphi}[s',p',t'] \stackrel{def}{=} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{R^n} \varphi[x'',p',t'] e^{-is'x''} dx'', \tag{21}$$

и через $s'x'$ обозначено выражение $s'x' \stackrel{def}{=} \sum_{j=1}^n s'_j x'_j$.

Получим, что оператор B' имеет вид:

$$B'[\varphi[x'',p']] = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{R^{2n}} \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial p'_j} \Big((p'_j - s'_j)\varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial p'_j} \Big) e^{is'(x'-x'')} ds' dx''. \tag{22}$$

Вычисляя в левой части полученного выражения интеграл по x'' , с учетом равенства (21) получим:

$$B'[\varphi[x'',p']] = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{R^n} \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial p'_j} \Big((p'_j - s'_j)\tilde{\varphi} + \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial p'_j} \Big) e^{is'x'} ds'. \tag{23}$$

Оператор

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial p'_j} \Big((p'_j - s'_j)\tilde{\varphi} + \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial p'_j} \Big), \tag{24}$$

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

$$\tilde{\varphi}_0[s',p'] = \tilde{\psi}[s'] e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}},$$

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

Остальные собственные функции получаются (что легко проверяется) дифференцированием функций $\tilde{\varphi}_0[s',p']$ по p'_j, $j = 1, \ldots, n$, и имеют собственные значения, равные $-1, -2, ...$, соответственно, в зависимости от степени производной. Таким образом, собственными функциями с собственным значением $-k = -(k_1 + ... + k_n)$ являются функции вида:

$$\tilde{\psi}_{k_1 \ldots k_n}[s'](-1)^k \frac{\partial^{k_1}}{\partial p_1'^{k_1}} \cdots \frac{\partial^{k_n}}{\partial p_n'^{k_n}} e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}} = \tilde{\psi}_{k_1 \ldots k_n}[s'] H^k_{k_1 \ldots k_n}[p'-s'] e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}},$$

где $\tilde{\psi}_{k_1...k_n}[s']$ — произвольные комплекснозначные функции от $s' \in R^n$, $H^k_{k_1...k_n}[p'] = H_{k_1}[p'_1]...H_{k_n}[p'_n]$ — произведение полиномов Эрмита от соответствующих переменных, и $k = k_1+...+k_n$ — сумма степеней полиномов. При этом полиномы Эрмита малых степеней имеют вид:

$$H_0 = 1, \quad H_1[p_j] = p_j, \quad H_2[p_j] = p_j^2 - 1. \tag{25}$$

Представим, в свою очередь, функции $\tilde{\psi}_{k_1...k_n}[s']$ в виде интегралов Фурье:

$$\tilde{\psi}_{k_1...k_n}[s'] = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{R^n} \psi_{k_1...k_n}[x''] e^{-is'x''} dx''.$$

Отсюда, с учетом представления (20) функции $\varphi[x', p', t']$ через $\tilde{\varphi}[s', p', t']$, получаем, что собственные функции $\varphi_{k_1...k_n}[x', p']$ оператора B' имеют вид:

$$\varphi_{k_1...k_n}[x', p'] = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{R^{2n}} \psi_{k_1...k_n}[x''] H^k_{k_1...k_n}[p' - s'] e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}} e^{is'(x'-x'')} ds' dx''.$$

Известно [7], что полиномы Эрмита образуют полную систему функций и удовлетворяют следующим соотношениям ортогональности:

$$\frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \frac{1}{k_1!} \cdots \frac{1}{k_n!} \int_{R^n} H^{k'}_{k'_1...k'_n}[p'] H^k_{k_1...k_n}[p'] e^{-\frac{p'^2}{2}} dp' = \delta_{k'_1 k_1} ... \delta_{k'_n k_n}, \tag{26}$$

где $\delta_{k'_i k_i}$ равны 0, если $k'_i \neq k_i$, и равны 1, если $k'_i = k_i$ (в этих формулах предполагается, что 0!=1).

Отсюда непосредственно следуют утверждения теорем 1 и 2. В частности, последнее равенство теоремы 1 следует из полноты набора собственных подпространств оператора B'.

Заметим, что в представлении собственных функций оператора B' в виде формулы (13) можно выполнить интегрирование по s'. Для этого подставим в эту формулу выражение для определения полиномов Эрмита (11). Получим:

$$\begin{gathered} \varphi_{k_1,...,k_n} = I_{k_1,...,k_n}[\psi_{k_1,...,k_n}] = \\ \frac{1}{(2\pi)^{3n/2}} \frac{1}{k_1!} \cdots \frac{1}{k_n!} \frac{(-1)^k \partial^k}{\partial {p'_1}^{k_1} ... \partial {p'_n}^{k_n}} \int\limits_{R^{2n}} \psi_{k_1,...,k_n}[x''] e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}} e^{is'(x'-x'')} ds' dx''. \end{gathered} \tag{27}$$

Далее, под интегралом сделаем замену переменных $s' = s'' + p'$ и выполним интегрирование по s'', воспользовавшись известным равенством, что преобразование Фурье от функции $\exp(-s''/2)$ есть функция этого же вида. Получим:

$$\varphi_{k_1,\ldots,k_n} = I_{k_1,\ldots,k_n}[\psi_{k_1,\ldots,k_n}]=$$
$$\frac{1}{(2\pi)^n}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\frac{(-1)^k\partial^k}{\partial {p'_1}^{k_1}\ldots\partial {p'_n}^{k_n}}\int\limits_{R^n}\psi_{k_1,\ldots,k_n}[x'']e^{-\frac{(x'-x'')^2}{2}}e^{ip'(x'-x'')}dx'' =$$
$$\frac{(-i)^k}{(2\pi)^n}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^n}\psi_{k_1,\ldots,k_n}[x'']\prod_{j=1}^{n}(x'-x'')^{k_j}e^{-\frac{(x'-x'')^2}{2}}e^{ip'(x'-x'')}dx''. \qquad (28)$$

Последнее равенство получено после выполнения требуемых в формуле дифференцирований по p', но под знаком интеграла.

Из последнего равенства в частном случае для собственных функций оператора B' с собственным значением, равным нулю, имеем выражение:

$$\varphi_0 = I_{\bar{0}}[\psi_0]=\frac{1}{(2\pi)^n}\int\limits_{R^n}\psi_0[x'']e^{-\frac{(x'-x'')^2}{2}}e^{ip'(x'-x'')}dx''. \qquad (29)$$

3 Уравнение Шрёдингера для процесса рассеяние волн и его уточнение

В работах [1, 3] была доказана следующая теорема.

Теорема 3. *Движение, описываемое уравнением (1), асимптотически распадается при большой величине γ 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 $\varphi_0 = P_0\varphi$, которая после нормирования и в исходных координатах имеет вид:

$$\varphi_0[x,p] = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}\int\limits_{R^n}\psi[y,0]\chi[x-y]e^{ip(x-y)/\hbar}dy, \qquad (30)$$

где $\quad ||\psi|| = 1 \quad$ *и* $\quad \chi[x-y] = \left(\frac{k_BTm}{\pi\hbar^2}\right)^{n/4} e^{-k_BTm(x-y)^2/(2\hbar^2)}. \qquad (31)$

Волновые функции вида (30) образуют линейное подпространство собственных функций оператора B, заданного выражением (3), с собственным значением, равным нулю. Элементы этого подпространства параметризуются волновыми функциями $\psi[y,0] = \int_{R^n}\varphi[y,p]dp$, зависящими только от координат $y \in R^n$.

2) Медленное движение, начинающееся с волновой функции $\varphi_0[x,p]$ вида (30) с ненулевой функцией $\psi[y,0]$, происходит по подпространству таких функций и параметризуется волновой функцией $\psi[y,t]$, зависящей от времени. Функция $\psi[y,t]$ при этом удовлетворяет уравнению Шрёдингера вида $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$, где действие оператора $\hat{H}$ при $\gamma \to \infty$ имеет вид:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2\psi}{\partial y_k^2}\Big) + V[y]\psi - \frac{k_B T}{2}n\psi. \tag{32}$$

Доказательство первой части теоремы 3 приведено в [3]. Доказательство второй части этой теоремы приведено в [1], однако там была допущена ошибка при вычислении знака перед $(k_B T/2)n\psi$.

Теорема 3 описывает решение уравнения (1) и, соответственно, уравнения (5) в нулевом детерминированном приближении по параметру $1/\gamma$ после переходного процесса через время порядка $1/\gamma$. Целью этой работы являет доказательство теоремы, уточняющий результат теоремы 3 в части, описывающей медленное движение. Для этого строится следующее приближение уравнения (5) по параметру $1/\gamma$.

Итак, перейдем к приближенному описанию обобщенного уравнения Крамерса (5) для больших γ с помощью систематического разложения по степеням γ^{-1}. Метод, который мы здесь используем, аналогичен методу, изложенному в книге Ван Кампена [5]. В ней из уравнения Крамерса, описывающего броуновское движение частицы в фазовом пространстве, выводится уравнение Фоккера-Планка, приближенно описывающее этот же процесс, но в виде броуновского движения частицы в конфигурационном пространстве после некоторого времени переходного процесса, во время которого устанавливается распределение Максвелла по импульсам.

Перепишем уравнение (5) в виде:

$$B'\varphi = \frac{1}{\gamma}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} - A'\varphi\right). \tag{33}$$

Будем искать решение этого уравнения в виде:

$$\varphi = \varphi_0 + \gamma^{-1}\varphi_1 + \gamma^{-2}\varphi_2 + ... \tag{34}$$

Подставим выражение (34) в уравнение (33) и выпишем уравнения для коэффициентов при одинаковых степенях γ^{-1}. Получим:

$$\text{для } \gamma^0 : \qquad B'\varphi_0 = 0; \tag{35}$$

$$\text{для } \gamma^{-1}: \qquad B'\varphi_1 = \frac{\partial\varphi_0}{\partial t} - A'\varphi_0; \tag{36}$$

$$\text{для } \gamma^{-2}: \qquad B'\varphi_2 = \frac{\partial\varphi_1}{\partial t} - A'\varphi_1; ... \tag{37}$$

Из уравнения (35) следует, что φ_0 принадлежит подпространству собственных функций оператора B' с собственным значением 0, то есть $\varphi_0 = P_0\varphi_0$, где P_0 — оператор проекции на собственное подпространство оператора B' с собственным значением 0.

Применим слева к обеим частям равенства (36) оператор проекции P_0. С учетом равенств $P_0B' = 0$ и $\varphi_0 = P_0\varphi_0$ получим:

$$0 = \frac{\partial\varphi_0}{\partial t} - P_0A'P_0\varphi_0. \tag{38}$$

(Заметим, что оператору $P_0A'P_0$ соответствует оператор Шрёдингера H' в теореме 3.)

При условии выполнения равенства (38) уравнение (36) имеет решение, которое мы представим в виде:

$$\begin{aligned} \varphi_1 = \varphi_{1,0} + f_1, \quad \text{где } P_0 f_1 = 0, \quad \varphi_{1,0} = P_0\varphi_1 = P_0\varphi_{1,0}, \\ f_1 = B^{'-1}(P_0A'P_0\varphi_0 - A'P_0\varphi_0), \end{aligned} \tag{39}$$

и $B^{'-1}$ — обратный оператор к оператору B' на подпространстве, порожденном собственными функциями оператора B' с ненулевыми собственными значениями. Из формулы (8) для оператора B' следует, что оператор $B^{'-1}$ имеет вид:

$$B^{'-1} = -\sum_{k=1}^{\infty} k^{-1}P_k. \tag{40}$$

Отсюда и из свойств операторов проекции (9) следует, что $P_0B^{'-1} = 0$ и $P_kB^{'-1} = -k^{-1}P_k$.

С учетом равенства $B^{'-1}P_0 = 0$ выражение для f_1 в формуле (39) принимает вид

$$f_1 = -B^{'-1}A'P_0\varphi_0. \tag{41}$$

Подставим выражение $\varphi_1 = \varphi_{1,0} + f_1$ формулы (39) в равенство (37) и применим слева к обеим частям равенства (37) оператор проекции P_0. С учетом равенств $P_0 B' = 0$, $P_0 f_1{=}0$ и $\varphi_{1,0} = P_0\varphi_{1,0}$ и равенства (41) после перечисленных подстановок и раскрытия скобок получим:

$$0 = P_0\left(\frac{\partial\varphi_1}{\partial t} - A'\varphi_1\right) \quad \text{или}$$

$$0 = \frac{\partial\varphi_{1,0}}{\partial t} - P_0 A' P_0 \varphi_{1,0} + P_0 A' B'^{-1} A' P_0 \varphi_0. \tag{42}$$

Сложим, теперь, уравнения (38) и (42), умноженные, соответственно, на 1 и γ^{-1}. Тогда для функции $\varphi_{\gamma 1,0}$, по определению заданной равенством

$$\varphi_{\gamma 1,0} \stackrel{def}{=} \varphi_0 + \gamma^{-1}\varphi_{1,0}, \tag{43}$$

получим следующее уравнение с точностью до слагаемых порядка γ^{-1}:

$$0 = \frac{\partial\varphi_{\gamma 1,0}}{\partial t} - P_0 A' P_0 \varphi_{\gamma 1,0} + \gamma^{-1} P_0 A' B'^{-1} A' P_0 \varphi_{\gamma 1,0} + O[\gamma^{-2}]. \tag{44}$$

Соответственно, для функции $\varphi_{\gamma 1} \stackrel{def}{=} \varphi_0 + \gamma^{-1}\varphi_1$, учитывающей только два первых слагаемых в разложении (34) для φ, используя равенство $\varphi_1 = \varphi_{1,0} + f_1$ в выражении (39) и подставив в него выражение (41) для f_1, получаем следующее равенство с точностью до слагаемых порядка γ^{-1}:

$$\varphi_{\gamma 1} \;=\; \varphi_{\gamma 1,0} - \gamma^{-1} B'^{-1} A' P_0 \varphi_{\gamma 1,0} + O[\gamma^{-2}] \tag{45}$$

Так как $\varphi_{\gamma 1,0} = P_0\varphi_{\gamma 1,0}$, то есть $\varphi_{\gamma 1,0}$ — собственная функция оператора B' с собственным значением, равным 0, то в соответствии с формулами (16) и (17) и теоремой 2 она полностью определяется функцией $\psi \stackrel{def}{=} S_{\bar 0}[\varphi_{\gamma 1,0}]$ по формуле $\varphi_{\gamma 1,0} = I_{\bar 0}[\psi]$, где $S_{\bar 0}$ и $I_{\bar 0}$ — операторы, определенные формулами (16) и (17). Как и ранее, эту функцию ψ будем называть представление собственной функции $\varphi_{\gamma 1,0}$.

Чтобы получить ψ-представление уравнения (44), подставим в него вместо функции $\varphi_{\gamma 1,0}$ равное ей выражение $I_{\bar 0}[\psi]$, подействуем на обе части уравнения оператором $S_{\bar 0}$ и воспользуемся следующими равенствами, вытекающими из соотношений теоремы 2:

$$P_0\varphi_{\gamma 1,0} = I_{\bar 0} S_{\bar 0}[\varphi_{\gamma 1,0}] = I_{\bar 0}[\psi], \quad S_{\bar 0} P_0 = S_{\bar 0} \quad \text{и} \quad \psi = S_{\bar 0} I_{\bar 0}[\psi].$$

Получим:

$$0 \;=\; \frac{\partial\psi}{\partial t} - S_{\bar{0}}A'I_{\bar{0}}\psi + \gamma^{-1}S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}\psi + O[\gamma^{-2}]. \qquad (46)$$

Соответственно, выражение (45) функции $\varphi_{\gamma 1}[x', p']$, представленное через функцию $\psi[x']$, без учета слагаемых порядка γ^{-2} имеет вид:

$$\varphi_{\gamma 1} \;=\; I_{\bar{0}}[\psi] - \gamma^{-1}B'^{-1}A'I_{\bar{0}}[\psi] + O[\gamma^{-2}] \qquad (47)$$

Заметим, что из этого равенства следует, что $S_{\bar{0}}\varphi_{\gamma 1} = \psi$. Таким образом, выражение (47) и оператор $S_{\bar{0}}$ устанавливают взаимно обратные биекции между множеством функций $\varphi_{\gamma 1}[x', p']$ и множеством функций $\psi[x']$. Таким образом, функция $\psi[x']$ является также и представлением функции $\varphi_{\gamma 1}[x', p']$ по формуле (47). При этом, функция $\psi[x']$ меняется во времени в соответствии с уравнением (46).

Итак, из уравнения (46) и соотношения $P_0 = I_{\bar{0}}S_{\bar{0}}$ теоремы 2 получаем следующее приближенное уравнение с учетом слагаемых до порядка γ^{-1} для медленного подпроцесса в процессе, описываемом модифицированным уравнением Крамерса (5):

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = S_{\bar{0}}A'I_{\bar{0}}\psi - \gamma^{-1}S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}\psi + O[\gamma^{-2}] \qquad (48)$$

(Вид первого слагаемого правой части уравнения — оператора $S_{\bar{0}}A'I_{\bar{0}}$, нам известен из теоремы 3.) Полное описание правой части этого уравнения дается следующей теоремой.

Теорема 4. *Медленное движение, о котором говорится в теореме 3, начинающееся с волновой функции $\varphi_0[x, p]$ вида (30) с ненулевой функцией $\psi[y, 0]$ и параметризуемое волновой функцией $\psi[y, t]$, удовлетворяет модифицированному уравнению Шрёдингера вида $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}_1\psi$, где действие оператора $\hat{H}_1$ имеет вид:*

$$\hat{H}_1\psi \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2\psi}{\partial y_k^2} + V\psi - \frac{k_B T n}{2}\psi + \frac{i\gamma^{-1}}{4}\Big(\sum_{j=1}^{n}\frac{\hbar}{m}\frac{\partial^2 V}{\partial y_j^2} - \frac{(k_B T)^2 n}{\hbar}\Big)\psi + O[\gamma^{-2}]. \qquad (49)$$

Доказательство теоремы 4 приведено в приложении 1.

Константами в операторах $\hat{H}$ и $\hat{H}_1$ теорем 3 и 4 можно пренебречь, они несущественны. Используя стандартный метод теории возмущений [9], вычислим поправки к собственным значениям и функциям оператора Гамильтона для оператора $\hat{H}_1$.

Пусть $E_n^{(0)}$ — собственные значения оператора Гамильтона $\hat{H}$, и $\psi_n^{(0)}$ — соответствующие им собственные функции. Пусть E_n и ψ_n собственные значения и собственные функции оператора $\hat{H}_1$. Тогда по определению собственных функций верны равенства $\hat{H}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ и $\hat{H}_1\psi_n = E_n\psi_n$. Будем искать E_n и ψ_n в виде:

$$E_n = E_n^{(0)} + \gamma^{-1}E_n^{(1)} + O(\gamma^{-2}) \tag{50}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \gamma^{-1}\sum_{\substack{m \\ m\neq n}} c_{nm}\psi_m^{(0)} + O(\gamma^{-2}). \tag{51}$$

Подставим эти выражения в равенство (49). Приравняем в полученном выражении коэффициенты при соответствующих степенях γ^{-1} и возьмем скалярные произведения от обеих частей полученных равенств с $\psi_n^{(0)}$ или $\psi_k^{(0)}$. Воспользовавшись ортонормированностью системы собственных функций $\psi_k^{(0)}$ относительно скалярного произведения $\langle\ ;\ \rangle$, где

$$\langle\psi_k;\psi_m\rangle = \int\limits_{R^n}\psi_k[y]\psi_k^*[y]dx, \tag{52}$$

получим:

$$E_n^{(1)} = \frac{i\hbar}{4m}\langle\Delta^2 V\psi_n^{(0)};\psi_n^{(0)}\rangle \tag{53}$$

$$c_{nk} = \frac{i\hbar}{4m}\frac{\langle\Delta^2 V\psi_n^{(0)};\psi_k^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \tag{54}$$

$$\text{где}\quad \Delta^2 V = \sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2 V}{\partial y_k^2}. \tag{55}$$

Тогда, из этих равенств и модифицированного уравнения Шрёдингера $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}_1\psi$ следует, что собственная функция ψ_n меняется во времени в соответствии со следующим выражением:

$$\psi_n[t] = \psi_n[0]\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) = \psi_n[0]\exp\left(-\frac{iE_n^{(0)}t}{\hbar} - \frac{i\gamma^{-1}E_n^{(1)}t}{\hbar}\right),$$

где $\quad -\dfrac{i\gamma^{-1}E_n^{(1)}}{\hbar} = \dfrac{\gamma^{-1}}{4m}\langle\Delta^2 V\psi_n^{(0)};\psi_n^{(0)}\rangle \quad$ — действительная величина. Следовательно, модуль собственной функции ψ_n экпоненциально меняется во времени с показателем экспоненты $(\gamma^{-1}/4m)\langle\Delta^2 V\psi_n^{(0)};\psi_n^{(0)}\rangle t$.

Таким образом, если система в начальный момент времени находится в состоянии $\psi[0]$, где $\psi[0]=\sum_n^\infty a_n\psi_n$ — некоторая суперпозиция собственных состояний оператора $\hat{H}_1$, то через время t система будет находиться в состоянии $\psi[t]/|\psi[t]|$, где $\psi[t]=\sum_n^\infty a_n\psi_n[t]$. Так как модули собственных состояний $\psi_n[t]$ экпоненционально меняются с разными скоростями, то через достаточно большое время сотояние $\psi[t]/|\psi[t]|$ будет близко к некоторому собственному состоянию ψ_k, для которого величина $-iE_k^{(1)}$ наибольшая среди величин $-iE_n^{(1)}$ для n с ненулевыми a_n в сумме $\sum_n^\infty a_n\psi_n$. Такое явление получило название декогеренции и изучалось в ряде работ [10, 11, 12]. Время декогеренции в нашей модели может быть оценено, как время t, при котором $a_k\exp(-iE_k^{(1)t/\hbar}) >> a_{k_1}\exp(-iE_{k_1}^{(1)}t/\hbar)$, где $-iE_{k_1}^{(1)}$ — следующее по величене число после $-iE_k^{(1)}$ среди чисел $-iE_n^{(1)}$ для n с ненулевыми a_n в сумме $\sum_n^\infty a_n\psi_n$.

Кроме того, из формул (51) и (54) следует, что собственные функции ψ_n оператора $\hat{H}_1$ в общем случае не ортогональны друг другу. Имеем:

$$\langle\psi_n;\psi_k\rangle = \gamma^{-1}(c_{nk}+c_{kn}^*) = 2\gamma^{-1}c_{nk}.$$

Пусть $\varphi_n[x,p]$ и $\varphi_k[x,p]$ — волновые функции на фазовом пространстве, соответствующие по формуле (47) функциям ψ_n и ψ_k. В соответствии с предположениями модели квадрат модуля от скалярного произведения нормированных фунукций $\varphi_n[x,p]$ и $\varphi_k[x,p]$ дает вероятность найти систему в состоянии ψ_k, если она находится в состоянии ψ_n. Из последнего равенства и формулы (47) следует, что эта вероятность ненулевая, если $c_{nk}\neq 0$.

4 Заключение

В этой работе было построено приближенное описание медленной фазы процесса рассеяния волновой функции на фазовом пространстве с точностью до γ^{-1}, где γ — сопротивление среды на единицу массы частицы-волны. Полученное приближение описывается уравнением Шредингера, дополненнное слагаемым с коэффициентом γ^{-1}. В этом приближение проявляются эффекты декогеренции и спонтанных перескоков с уровня на уровень.

Заметим, что для свободной частицы, когда $V = 0$, и для гармонического осциллятора, когда вторые производные от потенциала дают константу, слагаемое оператора $\hat{H}_1$ с множителем γ^{-1} в теореме 4 является константой. Следовательно, в приближении до γ^{-1} за счет этого слагаемого в этих случаях все волновые функции с одинаковой скоростью уменьшаются по амплитуде, и диссипация ненаблюдаема. Поэтому, чтобы диссипация была учтена в приближении этой модели и для свободной частицы и для гармонического осциллятора следует учитывать члены с множителями γ^{-2} и γ^{-3}. Заметим также, что использованный в этой работе принцип построения в модифицированном уравнении Шредингера слагаемого с множителем γ^{-1} позволяет, в принципе, построить слагаемые и с множителями γ^{-2} и γ^{-3}.

Следующее явление, которое может проявиться в этой модели — это появление ширины у линий спектра. Взаимодействие квантовой частицы со средой должно вызывать появления ширины у уровней энергии для оператора энергии. То есть, если ψ_j — собственная функция оператора Гамильтона с собственным значением E_j, то соответствующая ей волновая функция $\varphi_j[x',p']$ в фазовом пространстве задается формулой (47). В соответствии с предположением модели функция $\varphi_j[x',p']$ определяет функцию плотности распределения вероятностей в фазовом пространстве в виде $\varphi_j[x',p']\varphi_j^*[x',p']$. Соответственно, среднее значение функции энергии $H[x',p']$ в этом случае задается выражением:

$$E_j = \int\limits_{R^{2n}} H[x',p']\varphi_j[x',p']\varphi_j^*[x',p']dx'dp'. \tag{56}$$

Тогда $(\Delta E_j)^2$ — среднее от квадрата отклонение от среднего для энергии, вычисляется по формуле:

$$(\Delta E_j)^2 = \int\limits_{R^{2n}} (H[x',p'] - E_j)^2\varphi_j[x',p']\varphi_j^*[x',p']dx'dp'. \tag{57}$$

Эти вычисления можно провести до конца для конкретных квантовых систем и получить зависимость ΔE_j от T и γ. Затем, полученные данные можно будет сравнить с экспериментальными данными уширений линий спектра.

Приложение. Доказательство теоремы 4

Для доказательства теоремы 4 нужно вычислить правую часть уравнения (48) и перейти к исходным координатам.

Вид первого слагаемого в правой части этого уравнения вычислен в [1] (как было отмечено ранее, в этой работе знак перед последним слагаемым в этой формуле был вычислен неправильно). Он имеет вид оператора Шрёдингера, который в новых координатах (4) представляется в виде:

$$S_{\bar{0}}A'I_{\bar{0}}\psi = -i\frac{k_BT}{\hbar}\left(-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial(x'_j)^2}+V'-\frac{n}{2}\right)\psi.$$

Вид оператора $S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}$, стоящий в уравнении (48) с множителем γ^{-1}, предстоит вычислить.

Сначала преобразуем это выражение, используя полученное ранее (40) равенство $B'^{-1} = -\sum_{k=1}^{\infty}k^{-1}P_k$ и соотношения для $k>0$ вида $P_kP_0=0$, $P_k=\sum_{k_1+\ldots+k_n=k}I_{k_1,\ldots,k_n}S_{k_1,\ldots,k_n}$ теоремы 2. Получим:

$$\begin{aligned} S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}} &= -\sum_{k=1}^{\infty}k^{-1}S_{\bar{0}}A'P_kA'I_{\bar{0}} = \\ &= -\sum_{\substack{k_1,\ldots,k_n=0\\ k_1+\ldots+k_n=k\geq 1}}^{\infty}k^{-1}S_{\bar{0}}A'I_{k_1,\ldots,k_n}S_{k_1,\ldots,k_n}A'I_{\bar{0}} \end{aligned} \tag{58}$$

Вычислим, теперь, оператор $A'I_{k_1,\ldots,k_n}$, где оператор A' задается выражением (6), а оператор $I_{k_1,\ldots,k_n}$ определен выражением (13).

Имеем,

$$\begin{aligned} A'I_{k_1,\ldots,k_n}\psi = \frac{k_BT}{\hbar}\Bigl(\sum_{j=1}^{n}\Bigl(\frac{\partial V'}{\partial x'_j}\frac{\partial}{\partial p'_j}-p'_j\frac{\partial}{\partial x'_j}\Bigr)-i\Bigl(V'-\sum_{j=1}^{n}\frac{p_j'^2}{2}\Bigr)\Bigr)\circ \\ \frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\psi[x'']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \end{aligned} \tag{59}$$

Введем в этом выражении слагаемые оператора A' под знак интеграла и разложим под знаком интеграла функции от $(p'-s')$ по полиномам Эрмита $H^l_{l_1\ldots l_n}[p'-s']$. Учитывая следующие равенства:

$$\frac{\partial}{\partial p'_j}\left(H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}\right)\stackrel{def}{=}-H^{k+1}_{k_1\ldots k_j+1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}, \tag{60}$$

$$\frac{\partial}{\partial x'_j} e^{is'(x'-x'')} = is'_j e^{is'(x'-x'')}, \qquad (61)$$

$$p'^2_j = ((p'_j - s'_j)^2 - 1) + 2p'_j s'_j - s'^2_j + 1 = H_2[p'_j - s'_j] + 2p'_j s'_j - s'^2_j + 1, \quad (62)$$

получим:

$$A' I_{k_1,\ldots,k_n}\psi = \frac{k_B T}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial V'}{\partial x'_j}H^{k+1}_{k_1\ldots k_j+1\ldots k_n}[p'-s'] -$$
$$-i\sum_{j=1}^{n} p'_j s'_j H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] - iV'[x']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] +$$
$$+\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}(H_2[p'_j - s'_j] + 2p'_j s'_j - s'^2_j + 1)H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']\Big) \times$$
$$\times\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \qquad (63)$$

После раскрытия скобок в последнем слагаемом и приведения членов, подобных второму слагаемому, получим:

$$A' I_{k_1,\ldots,k_n}\psi = \frac{k_B T}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial V'}{\partial x'_j}H^{k+1}_{k_1\ldots k_j+1\ldots k_n}[p'-s'] -$$
$$-iV'[x']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] + \frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}H_2[p'_j - s'_j]H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] -$$
$$-\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}(s'^2_j - 1)H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']\Big)\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \quad (64)$$

Лемма 1. *Операторы $S_{\bar 0}A' I_{k_1,\ldots,k_n}$ имеют следующий вид:*

$$S_{\bar 0}A' I_{\bar 0}[\psi] = \frac{k_B T}{\hbar}\Big(-iV'\psi + \frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2\psi}{\partial x'^2_j} + \frac{in}{2}\psi\Big); \qquad (65)$$

$$S_{\bar 0}A' I_{k_1,\ldots,k_n}[\psi] = \frac{i}{2}\frac{k_B T}{\hbar}\psi, \quad \textit{когда} \quad k = k_1 + \ldots + k_n = 2$$
и только один из $k_1,\ldots,k_n$ *равен 2*; (66)

в остальных случаях $S_{\bar 0}A' I_{k_1,\ldots,k_n} = 0$.

Доказательство. В соответствии с формулой (16) оператор $S_{\bar 0}$ является интегрированием по p. Поэтому для доказательства формул леммы 1 нужно вычислить интеграл по p от выражения (64) оператора

$A'I_{k_1,...,k_n}$. Для этого воспользуемся формулой ортогональности многочленов Эрмита (26) и тем, что $H_0^0 = 1$. Отсюда получаем, что интеграл по p от первого слагаемого выражения (64) равен 0. Интеграл от $H^k_{k_1...k_n}[p'-s']$ во втором и четвертом слагаемом по $1/(2\pi)^{(n/2)}\exp[-(p'-s')^2/2]dp$ равен 1 только тогда, когда $k=0$, а в остальных случаях также равен 0. Интеграл от $H_2[p'_j - s'_j]H^k_{k_1...k_n}[p'-s']$ в третьем слагаемом по $1/(2\pi)^{(n/2)}\exp[-(p'-s')^2/2]dp$ отличен от 0 и равен 2 только тогда, когда $k=2, k_j=2$ и остальные $k_1,...,k_n$ равны 0. Затем в полученном выражении вычисляются интегралы по s' и x'', используя то, что интеграл от $1/(2\pi)^n e^{is'(x'-x'')}$ по s' есть дельта-функция в точке x', а интеграл от выражения $1/(2\pi)^n s'^2 e^{is'(x'-x'')}$ по s' есть дельта-функция в точке x' от $-\partial^2/\partial x''^2$. В результате произведенных вычислений получаем утверждение леммы 1.

Так как по лемме 1 операторы $S_{\bar{0}}A'I_{k_1,...,k_n}$ при $k=k_1+...+k_n>0$ не равны 0 только тогда, когда $k=2, k_j=2$ (и, следовательно, остальные $k_1,...,k_n$ равны 0), то для вычисления оператора $S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}$ по формуле (58) осталось вычислить операторы $S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}$ при этих же значениях $k_1,...,k_n$.

Лемма 2. *Операторы $S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}$ в случае, когда $k_j=2$ и $k_1+...+k_n=2$, имеют следующий вид:*

$$S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi] = \frac{k_BT}{\hbar}\Big(-i\frac{\partial^2 V'}{\partial x_j'^2}\psi + i\psi\Big) \tag{67}$$

Доказательство. В условиях леммы 2, когда $k=k_j=2$, оператор $S_{k_1,...,k_n}$ по формуле (12) имеет вид:

$$\begin{aligned} S_{k_1,...,k_n}[\varphi] \ &\overset{def}{=} \int\limits_{R^n} H^k_{k_1...k_n}\left[p' + i\frac{\partial}{\partial x'}\right]\varphi[x',p']dp' = \\ &= \int\limits_{R^n} H_2\left(p'_j + i\frac{\partial}{\partial x'_j}\right)\varphi[x',p']dp'. \end{aligned} \tag{68}$$

Отсюда и из формулы (64) для $A'I_{\bar{0}}$ получим:

$$S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi] = \frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}} H_2\left(p'_j + i\frac{\partial}{\partial x'_j}\right)\circ$$

$$\circ\Big(-\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial V'[x']}{\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'} - s'_{j'}] - iV'[x'] + \frac{i}{2}\sum_{j'=1}^{n}H_2[p'_{j'} - s'_{j'}] -$$

$$-\frac{i}{2}\sum_{j'=1}^{n}({s'}_{j'}^{2}-1)\Big)\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''dp'. \qquad (69)$$

Учитывая, что по определению многочлена Эрмита

$$H_2\left(p'_j+i\frac{\partial}{\partial x'_j}\right)=\left(\left(p'_j+i\frac{\partial}{\partial x'_j}\right)^2-1\right),$$

применим этот оператор в предыдущем выражении с учетом формулы для производной по $\partial/\partial x'_j$ от произведения функций, зависящих от x', и равенства

$$i\frac{\partial}{\partial x'_j}e^{is'(x'-x'')}=-s'e^{is'(x'-x'')}.$$

Получим:

$$S_{k_1,\dots,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi]=\frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}}H_2\left(p'_j-s'_j\right)\times$$
$$\times\Big(-\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial V'[x']}{\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'}-s'_{j'}]-iV'[x']+\frac{i}{2}\sum_{j'=1}^{n}H_2[p'_{j'}-s'_{j'}]-$$
$$-\frac{i}{2}\sum_{j'=1}^{n}({s'}_{j'}^{2}-1)\Big)\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''dp'+ \qquad (70)$$
$$+\frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}}\Big(-2i(p'_j-s'_j)\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial^2V'[x']}{\partial x'_j\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'}-s'_{j'}]+$$
$$+\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial^3V'[x']}{\partial^2x'_j\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'}-s'_{j'}]+2(p'_j-s'_j)\frac{\partial V'[x']}{\partial x'_j}+i\frac{\partial^2V'[x']}{\partial {x'_j}^2}\Big)\times$$
$$\times\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''dp' \qquad (71)$$

Далее, в полученном выражении в каждом интеграле произведем интегрирование по p', учитывая соотношение ортогональности многочленов Эрмита (26) и равенства $1=H_0(p'_j-s'_j)$ и $(p'_j-s'_j)=H_1(p'_j-s'_j)$. Получим:

$$S_{k_1,\dots,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi]=\frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{n}}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-0-0+\frac{i}{2}2-0\Big)\psi[x'']e^{is'(x'-x'')}ds'dx''+$$
$$+\frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{n}}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-2i\frac{\partial^2V'[x']}{\partial {x'_j}^2}+0+0+i\frac{\partial^2V'[x']}{\partial {x'_j}^2}\Big)\psi[x'']e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \qquad (72)$$

После вычисления интегралов в полученном выражении по s' и x'' и приведения подобных членов, получим требуемое в лемме 2 равенство

$$S_{k_1,\ldots,k_n} A' I_{\bar{0}}[\psi] = \frac{k_B T}{\hbar}\Big(-i\frac{\partial^2 V'[x']}{\partial x_j'^2}\psi[x'] + i\psi[x']\Big). \tag{73}$$

Теперь мы готовы к тому, чтобы с помощью лемм 1 и 2 вычислить $S_{\bar{0}} A' B'^{-1} A' I_{\bar{0}}$ по формуле (58). По лемме 1 слагаемые в формуле (58) могут быть ненулевыми только, если $k_j = 2$ для некоторого $j \in \{1, \ldots, n\}$, а остальные $k_1, \ldots, k_n$ равны 0. Леммы 1 и 2 дают выражения операторов $S_{\bar{0}} A' I_{k_1,\ldots,k_n}$ и $S_{k_1,\ldots,k_n} A' I_{\bar{0}}$ в этом случае. Итак, по формуле (58) и леммам 1, 2 имеем:

$$\begin{aligned}
S_{\bar{0}} A' B'^{-1} A' I_{\bar{0}}[\psi] &= -\sum_{\substack{k_1,\ldots,k_n=0\\ k_1+\ldots+k_n=k\geq 1}}^{\infty} k^{-1} S_{\bar{0}} A' I_{k_1,\ldots,k_n} S_{k_1,\ldots,k_n} A' I_{\bar{0}}[\psi] \\
&= -\sum_{\substack{k_1,\ldots,k_n\in\{0;2\}\\ k_1+\ldots+k_n=2}} 2^{-1} S_{\bar{0}} A' I_{k_1,\ldots,k_n} S_{k_1,\ldots,k_n} A' I_{\bar{0}}[\psi] \\
&= -\sum_{j=1}^{n} 2^{-1}\frac{i}{2}\frac{k_B T}{\hbar}\frac{k_B T}{\hbar}\Big(-i\frac{\partial^2 V'}{\partial x_j'^2}\psi + i\psi\Big) \\
&= -\frac{1}{4}\Big(\frac{k_B T}{\hbar}\Big)^2\Big(\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 V'}{\partial x_j'^2}\psi - n\psi\Big).
\end{aligned} \tag{74}$$

Если в этом выражении вернуться к старым координатам по формулам (4), то получим равенство

$$S_{\bar{0}} A' B'^{-1} A' I_{\bar{0}})[\psi] = -\frac{1}{4}\Big(\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 V}{\partial x_j^2} - \Big(\frac{k_B T}{\hbar}\Big)^2 n\Big)\psi. \tag{75}$$

Таким образом, мы вычислили оператор во втором слагаемом в уравнении (48). Этот оператор после умножения на $-ih\gamma^{-1}$ дает второе слагаемое в операторе $\hat{H}_1$ теоремы 4.

Благодарности. Автор благодарен профессору Г.Л. Литвинову за поддержку работ в этом направлении и скорбит в связи с утратой замечательного человека и друга.

Список литературы

[1] Beniaminov E.M. Quantum Mechanics as Asymptotics of Solutions of Generalized Kramers Equation. // Electronic

Journal of Theoretical Physics (EJTP) 8, No. 25 195-210 (2011) http://www.ejtp.com/articles/ejtpv8i25p195.pdf.

[2] Бениаминов Е.М. *Диффузионные процессы в фазовых пространствах и квантовая механика* // Доклады академии наук. 2007. Т. 416. № 1. С. 31-35. (Beniaminov E. M. *Diffusion processes in phase spaces and quantum mechanics* // Doklady Mathematics (Proceedings of the Russian Academy of Sciences), 2007, vol.76, No. 2, 771–774.)

[3] Бениаминов Е.М. *Квантование как асимптотика некоторого диффузионного процесса в фазовом пространстве*// Proc. Intern. Geom. Center 2(4), 7-50 (2009) (текст на англ. яз. http://arxiv.org/abs/0812.5116v1). (2008)

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

[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. (Kamke E., Differentialgleichungen: Losungsmethoden und Losungen, I, Gewohnliche Differentialgleichungen, B. G. Teubner, Leipzig, 1977.)

[7] Weisstein Eric W. Hermite PolynomialFrom MathWorld–A Wolfram Web Resource.

http://mathworld.wolfram.com/HermitePolynomial.html

[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] Landau L. D., Lifschitz E. M., Quantum mechanics (non-relativistic theory). Theoretical physics, vol. 3, Nauka, Moscow, 1989 (in Russian).

[10] 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).

[11] 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)).

[12] Менский М.Б. *Диссипация и декогеренция квантовых систем.*// УФН. 2003. Т.173. С.1199-1219. (Menskij M. B. *Dissipation and decoherence of quantum systems.* Physics-Uspekhi (Advances in Physical Sciences), 2003, vol.173, 1199-1219.)