сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-91-271

В.И.Горделий, А.Е.Савельев*

ОБОБЩЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА К ФАЗОВОМУ ПРОСТРАНСТВУ БОЛЬЦМАНА

*Казахский химико-технологический институт, Чимкент

1991

Горделий В.И., Савельев А.Е. P17-91-271

Обобщение уравнения Шредингера к фазовому пространству Больцмана

Исходное уравнение Шредингера, приведенное к соответствию гипотезой взаимодействия тел с вакуумом, обобщено к шестимерному фазовому пространству Больцмана. Принцип неопределенности Гайзенберга отнесен к среднеквадратичным значениям координат и импульсов частицы, что сохранило его физический смысл, но устранило экстремальность его исходной формулировки. Из обобщенного уравнения Шредингера однозначно и точно следуют три уравнения: однородное уравнение переноса Больцмана в его полном виде, уравнение Гамильтона — Якоби и исходное уравнение Шредингера, соответствующее гипотезе взаимодействия тел с вакуумом. Найдено фундаментальное решение обобщенного уравнения — функция Грина, имеющая когерентный вид в пространстве Больцмана. Предложен общий вид структуры макроскопической волновой функции для бозе-систем.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1991

Перевод Т.А. Филимонычевой

Gordeliy V.I., Savel'ev A.E. P17-91-271

The Generalization of the Schrödinger Equation to the Bolzman Phase Space

The Schrödinger equation brought into correspondence with the hypothesis of the particle interaction with vacuum has been generalized to the 6-m Bolzman phase space. The Heizenberg principle of undeterminity has been connected with the rootmean-square values of the particle coordinates and momentum, that allows us to conserve its physical sense to avoid the extremity of its primary wording. Three equations: the homogeneous Bolzman equation of translation in its complete form, Hamilton—Yacobi equation and Schrödinger equation corresponding to the hypothesis of particle interaction with the vacuum follow from the generalized Schrödinger equation. It was found that Green's function having a coherent view in Bolzman's space is the fundamental solution of the generalized Schrödinger equation. The general view of a microscopic wave function structure for the Bose-system has been suggested.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1991

Введение

На основе гипотезы взаимодействия тел с вакуумом уравнение Шредингера было обобщено в работе [1] к виду

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial X_k^2}+U\psi+U_v\psi;\ k=1,2,3. \tag{1}$$

Потенциал U_V, отображающий в сглаженном виде взаимодействие частицы с вакуумом, вычислен и представлен в форме

$$U_v=\frac{m\omega_o^2}{2}\Big(\vec{r}-\int_s^t\vec{u}(\tau)d\tau\Big)^2-\frac{3}{2}\hbar\omega_o. \tag{2}$$

Как видно, он представляет собой бегущий осцилляторный потенциал, связанный с центром инерции ансамбля состояний частицы, которая движется со скоростью $\vec{u}(t)$. Второй член в формуле (2) определяет глубину энергетического погружения частицы в вакуум, измеряемую частотой циклических колебаний частицы ω_o. В уравнении (1) по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, как и в дальнейшем, если это не оговорено особо; остальные обозначения стандартны. Уравнение Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\Big(\frac{\partial S}{\partial X_k}\Big)^2+U(\vec{r},t)=0 \tag{3}$$

находится в однозначном соответствии с уравнением (1). При поиске решения уравнения (1) в работе [1] предположено, что действие S, входящее в уравнение (3), допускает существование идеальных решений уравнений классической механики, т.е. зависимости скорости частицы

$$u_k(t)=\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial X_k} \tag{4}$$

только от времени. Решение уравнения (1)

$$\psi=e^{i\frac{S}{\hbar}}(\pi\chi)^{-3/4}exp\Big[-\frac{(\vec{r}-\int_s^t\vec{u}(\tau)d\tau)^2}{2\chi}\Big], \tag{5}$$

$$\chi=\frac{\hbar}{m\omega_o}$$

имеет когерентный вид для любого потенциала внешних сил U, имеющего первые непрерывные производные по всем динамическим переменным. Функция (5) определена не только решением уравнения (3) – действием частицы S , но и решением однородного уравнения переноса Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t}+u_k\frac{\partial f}{\partial x_k}=0 \tag{6}$$

в его частичном представлении. Действительно, полагая

$$f=g^2,\ g=(\pi X)^{-3/4}\exp\left[-\frac{(\vec{r}-\int_s^t\vec{u}(\tau)d\tau)^2}{2X}\right], \tag{7}$$

нетрудно убедиться, что функция f удовлетворяет уравнению (6). Из формул (5) и (7) вытекает очевидное соотношение

$$\psi^*\psi=g^2=f. \tag{8}$$

Из работы /1/ и, в частности, из приведенных здесь результатов следует, что классическая механика, физическая кинетика и квантовая теория, если исходить из уравнения (1), однозначно соответствуют друг другу. Тем не менее, не избежать констатации факта, что такое гармоничное сочетание трех разделов физики еще не является полным. Действительно, из уравнения (1) следует лишь уравнение (6), а не полное однородное уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t}+u_k\frac{\partial f}{\partial x_k}+F_k\frac{\partial f}{\partial p_k}=0;\ k=1,2,3. \tag{9}$$

Этот факт вполне соответствует принципу неопределенности Гайзенберга, согласно которому фиксация координат частицы исключает возможность применения понятия ее импульса, ибо в этом случае импульс является полностью неопределенным; совершенно так же фиксация компонент импульса частицы исключает возможность говорить о пространственной локализации ее движения; именно поэтому традиционно принято, что волновую функцию следует представлять либо в евклидовом пространстве, что и соответствует уравнению (1), либо в пространстве импульсов (p -представление). Уже в работе /1/ констатировано, что неопределенности в значениях координат частицы и ее импульса обусловлены взаимодействием частицы с вакуумом, которое по самой своей сути является хаотичным. Это обстоятельство не противоречит соотношению неопределенности Гайзенберга, но не в его экстремальной формулировке. С гипотезой взаимодействия тел с вакуумом вполне совместимо описание движения частицы в шестимерном пространстве Больцмана, т.е. возможно одновременное привлечение понятий и координат частицы, и ее импульса. При этом и координаты, и компоненты импульса частицы реализуются лишь с некоторой конечной вероятностью в любой момент времени. Следовательно, гипотеза взаимодействия тел с вакуумом и принцип неопределенности Гайзенберга совместимы лишь в том случае, если принцип неопределенности отнести к средне-

квадратичным значениям координат и импульсов. Значения этих величин, согласно примененной в работе /1/ гипотезе, являются всегда конечными и положительно определенными. Тем самым экстремальность принципа неопределенности устраняется. Более детальной конкретизации принципа неопределенности в только что отмеченном виде будет уделено внимание ниже.

Принимая во внимание только что сказанное, естественно попытаться обобщить уравнение Шредингера в форме (1) так, чтобы оно оказалось в полном соответствии с уравнениями (9) и (3). Такое обобщение рационально произвести на основе фундаментальных решений уравнений (1) и (9). Для этого необходимо определить функцию Грина, удовлетворяющую уравнению (1), чему и будет уделено внимание в следующем пункте. Плотность вероятности перехода $\rho(s,\vec{r}',\vec{p}';t,\vec{r},\vec{p})$ - фундаментальное решение уравнения (9) - уже найдено в работе /2/. Там же найдено и общее решение уравнения (9), что существенно для дальнейшего.

1. Квантово-механическая функция Грина

Для определения функции Грина необходимо уделить некоторое внимание структуре действия частицы S. Очевидно, действие частицы следует определить в таком виде, который обеспечит достаточную мобильность функции (5) в ее дальнейших применениях. Волновая функция (5) подразумевает, что частица движется по классической траектории, но каждая такая траектория реализуется лишь с некоторой конечной вероятностью. Таким образом, необходимо, чтобы действие частицы имело достаточно явную зависимость от координат и времени. Наиболее приемлемой представляется традиционная запись действия в виде /3/:

$$S=\sum_{k=1}^{3}\int_{x'_k}^{x_k}p_k\,dx_k-\int_s^t H(\tau)d\tau=S(s,\vec{r}';t,\vec{r}). \tag{10}$$

Здесь принято

$$x'_k=x_k\big|_{t=s},\quad \vec{r}'=\vec{r}\big|_{t=s}, \tag{11}$$

что соответствует кинематическому преобразованию

$$\vec{r}=\vec{r}'+\int_s^t\vec{u}(\tau)d\tau, \tag{12}$$

которое учитывает как начальное положение частицы (11), так и любое ее положение в момент времени t. В соотношении (10) H - гамильтониан частицы, а $\vec{p}=\vec{i}_k p_k$ - ее импульс ($\vec{i}_k$ - орты в декартовой системе координат). В этом соотношении подчеркнуто, что первый член зависит явно лишь от координат частицы, а второй - только от времени.

Если потенциал внешних сил, действующих на частицу, не зависит явно от времени, то энергия частицы

$$E = H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{r}) \tag{13}$$

сохраняется вне зависимости от того, будет ли движение частицы финитным или инфинитным. В этом случае действие частицы принимает вид:

$$S = S_0 - E(t-s), \quad S_0 = \sum_{k=1}^{3} \int_{x'_k}^{x_k} p_k \, dx_k. \tag{14}$$

Величину S_0 обычно называют "укороченным действием" (мопертюи). Как видно, выражение (10) для действия частицы вполне применимо для описания как стационарных, так и нестационарных движений, что и необходимо для дальнейшего. Нелишне отметить, что функция (10), если учесть соотношения

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = p_k = m u_k, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H(t), \tag{15}$$

удовлетворяет уравнению (3), что эквивалентно совпадению соотношения (13) и уравнения (3).

Теперь можно приступить непосредственно к определению квантово-механической функции Грина. Поскольку волновая функция (5), удовлетворяющая уравнению Шредингера (1), находится в однозначном соответствии с классической механикой и физической кинетикой, то естественно принять, что квантовая функция Грина $\psi(s,\vec{r}\,';t,\vec{r})$ находится в однозначном соответствии с функцией плотности вероятности перехода $\rho(s,\vec{r}\,';t,\vec{r})$ физической кинетики, удовлетворяющей в данном случае уравнению

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_k \frac{\partial \rho}{\partial x_k} = 0. \tag{16}$$

Совершенно аналогично соотношениям (7) и (8) можно записать:

$$\psi^*(s,\vec{r}\,';t,\vec{r})\, \psi(s,\vec{r}\,';t,\vec{r}) = \rho(s,\vec{r}\,';t,\vec{r}). \tag{17}$$

Плотность вероятности перехода имеет вид [2]:

$$\rho(s,\vec{r}\,';t,\vec{r}) = (\pi\chi)^{-3/2} \exp\Big[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u}(\tau)d\tau - \vec{r}\,')^2}{\chi}\Big]. \tag{18}$$

В том, что функция (18) тождественно удовлетворяет уравнению (16), можно убедиться прямой подстановкой. Непосредственно из формул (5), (17) и (18) можно заключить, что квантовая функция Грина имеет вид:

$$\psi(s,\vec{r}\,';t,\vec{r}) = \exp\Big[\frac{i}{\hbar} S(s,\vec{r}\,';t,\vec{r})\Big] * \\ * (\pi\chi)^{-3/4} \exp\Big[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u}(\tau)d\tau - \vec{r}\,')^2}{2\chi}\Big]. \tag{19}$$

В формуле (19) действие определено соотношением (10), а структура аргументов соответствует преобразованию (12). Если функцию (19) подставить в левую часть (17), то она совпадет с функцией (18), что является необходимым, но недостаточным. Ясно, что функция (19) должна удовлетворять уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k^2} + U\psi + U_v \psi, \tag{20}$$

в котором теперь

$$U_v = \frac{m\omega_0^2}{2} (\vec{r} - \int_s^t \vec{u}(\tau)d\tau - \vec{r}\,')^2 - \frac{3}{2}\hbar\omega_0. \tag{21}$$

Запись потенциала, учитывающего взаимодействие частицы с вакуумом, в виде (21) связана с тем, что функция (5) была найдена при начальных условиях

$$x_k\big|_{t=s} = x'_k = 0,$$

что и соответствует записи потенциала в виде (2); здесь же положение частицы в начальный момент времени соответствует условиям (11), где x'_k могут принимать произвольные значения.

С помощью прямой подстановки функции (19) в уравнение (20) при значении потенциала (21) необходимо убедиться в том, что она тождественно удовлетворяет этому уравнению. Вычисляя соответствующие производные и учитывая, что скорость частицы $\vec{u} = \vec{u}(t)$ является функцией только времени, запишем соотношение, следующее из уравнения (20):

$$-\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{i\hbar}{\chi} \vec{\varphi}\vec{u} = \frac{1}{2m}\Big(\frac{\partial S}{\partial x_k}\Big)^2 + \frac{i\hbar}{\chi} \vec{u}\vec{\varphi} - \frac{\hbar^2}{2m\chi^2} \vec{\varphi}^{\,2} + \\ + \frac{3\hbar^2}{2m\chi} + U + \frac{\hbar^2}{2m\chi^2}\vec{\varphi}^{\,2} - \frac{3\hbar^2}{2m\chi}. \tag{22}$$

В соотношении (22) общий множитель ψ опущен, учтена формула (5) для χ и обозначено

$$\vec{\varphi} = \vec{r} - \int_s^t \vec{u}(\tau)d\tau - \vec{r}\,'. \tag{23}$$

Нетрудно видеть, что соотношение (22) точно совпадает с уравнением (3). Таким образом, функцию (19) можно считать квантово-механической функцией Грина.

Чтобы увидеть возможности обобщения уравнения Шредингера (1) к шестимерному пространству Больцмана, сначала следует рассмотреть простейший случай – свободное движение частицы. Это позволит достаточно явно фиксировать причины, определяющие соответствие уравнения (1) с уравнением (6), а не (9). Именно этому и уделяется внимание в следующем пункте.

2. Свободное движение частицы

Функция Грина для свободно движущейся частицы удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2}+U_V\psi. \tag{24}$$

Вместо уравнения (16), которое находится в однозначном соответствии с уравнением (24), запишем полное уравнение Больцмана

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+u_k\frac{\partial\rho}{\partial x_k}+F_{Vk}\frac{\partial\rho}{\partial p_k}=0, \tag{25}$$

где F_{Vk} – компоненты силы, действующей на частицу со стороны вакуума. Примем, что уравнение (24) сохраняет свой вид и в этом случае и, исходя из этого, выясним смысл компонент F_{Vk}. Согласно работе /2/, функция плотности вероятности перехода, удовлетворяющая уравнению (25),

$$\rho(s,\vec r',\vec p';t,\vec r,\vec p)=(\pi 2\sigma_q^2)^{-3/2}\exp\left[-\frac{(\vec r-\int_s^t\vec u(\tau)d\tau-\vec r')^2}{2\sigma_q^2}\right]*$$

$$*(\pi 2\sigma_p^2)^{-3/2}\exp\left[-\frac{(\vec p-\int_s^t\vec F(\tau)d\tau-\vec p')^2}{2\sigma_p^2}\right]. \tag{26}$$

В соответствии с конкретным видом (25) здесь $F_k=F_{Vk}$; σ_p,σ_q – среднеквадратичные разбросы импульсов и координат частицы.

Как видно, плотность вероятности перехода (26) факторизуется по всем координатным направлениям в шестимерном пространстве Больцмана. Этот факт полностью соответствует независимости непрерывных гауссовско-марковских случайных процессов по всем координатным направлениям. Амплитуда функции Грина (19) также характеризуется этими свойствами. Отсюда следует, что соотношение (17) естественно обобщить к шестимерному пространству Больцмана, т.е. записать:

$$\psi_B^*(s,\vec r',\vec p';t,\vec r,\vec p)\,\psi_B(s,\vec r',\vec p';t,\vec r,\vec p)=\rho(s,\vec r',\vec p';t,\vec r,\vec p). \tag{27}$$

Соотношение (27) позволяет записать квантово-механическую функцию Грина в пространстве Больцмана:

$$\psi_B(s,\vec r',\vec p';t,\vec r,\vec p)=\exp\left[\frac{i}{\hbar}S(s,\vec r';t,\vec r)\right]*$$

$$*(\pi X_q)^{-3/4}\exp\left[-\frac{(\vec r-\int_s^t\vec u(\tau)d\tau-\vec r')^2}{2X_q}\right]*$$

$$*(\pi X_p)^{-3/4}\exp\left[-\frac{(\vec p-\int_s^t\vec F(\tau)d\tau-\vec p')^2}{2X_p}\right], \tag{28}$$

$$X_q=2\sigma_q^2,\quad X_p=2\sigma_p^2.$$

Действие частицы S, входящее в (28), по-прежнему задано формулой (10), что соответствует уравнению (9). Так как правая часть (27) задана формулой (26), то подстановка в левую часть функции (28) обращает его в тождество.

Проверка достоверности структуры функции (28) весьма непроста. Естественно начать ее с простейшего случая – свободного движения частицы. Функцию (28) ради удобства запишем в виде:

$$\psi_B=\psi\cdot g_p,\quad g_p=(\pi X_p)^{-3/4}\exp\left[-\frac{(\vec p-\int_s^t\vec F(\tau)d\tau-\vec p')^2}{2X_p}\right]. \tag{29}$$

В равенствах (29) функция ψ задана формулой (19), в которой подразумевается замена $X=X_q$. Полагая в уравнении (1) $U\equiv 0$, подставим в него функцию (29). Производная по времени

$$\frac{\partial\psi_B}{\partial t}=\frac{\partial\psi}{\partial t}g_p+\psi\frac{\partial g_p}{\partial t},$$

а потому уравнение (1) приобретает вид:

$$i\hbar\psi\frac{\partial g_p}{\partial t}+i\hbar g_p\frac{\partial\psi}{\partial t}=-g_p\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2}+g_pU_V\psi. \tag{30}$$

Поскольку ψ тождественно удовлетворяет уравнению (24), то из (30) следует:

$$\frac{\partial g_p}{\partial t}=0. \tag{31}$$

Вычисляя производную (31), согласно (29), найдем:

$$\frac{\partial g_p}{\partial t}=g_p\frac{(\vec p-\int_s^t\vec F_V(\tau)d\tau-\vec p')\vec F_V(t)}{X_p}=0,$$

что эквивалентно равенству

$$\vec F_V=0. \tag{32}$$

Таким образом, принимая уравнение (24), следует рассматривать уравнение Больцмана (25) в представлении Власова по отношению к хаотическому взаимодействию частицы с вакуумом. Только в этом случае $\vec F_V$, как самосогласованная сила, естественно, окажется равной нулю, что и требует равенство (32).

Вполне приемлемое соответствие уравнений (24) и (25) имеет отношение лишь к свободному движению частицы. В общем же случае, когда потенциал внешних сил $U \neq 0$, уравнение (1) находится в противоречии с уравнением (9). Действительно, подставляя функцию (29) в уравнение (1) и учитывая, что в этом случае функция φ удовлетворяет уравнению (20), снова придем к соотношению (31). Но это означает, что в уравнении (9) мы должны положить

$$F_k = 0. \tag{33}$$

Разумеется, требование (33) совершенно неприемлемо для уравнения Больцмана (9) в общем случае. С другой стороны, сама суть уравнения Шредингера (1) противоречит равенству (33). Это следует из того, что оператор силы, принятый в квантовой теории,

$$\hat{\vec{F}} = m\hat{\dot{\vec{u}}} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\hat{H}) = -\nabla U - \nabla U_V \tag{34}$$

сводится к умножению волновой функции на градиент потенциала с обратным знаком, т.е. сила с точки зрения уравнения Шредингера также имеет чисто классический смысл и в общем случае не равна нулю, что несовместимо с (33). Заметим, что величина ∇U_V, входящая в (34), если ее усреднить по волновой функции (5) или по функции Грина (19), обратится в нуль, что соответствует (32). Обозначения в (34) общеприняты /4/: $\hat{H}$ - оператор гамильтониана; $\hat{\vec{p}}$ - оператор импульса, а $\hat{\dot{\vec{u}}}$ - оператор ускорения.

Перечисленные выше противоречия понуждают к обобщению уравнения Шредингера (1) к шестимерному пространству Больцмана. При этом уравнение (1) должно быть обобщено таким образом, чтобы из обобщенного уравнения вытекали уравнение Гамильтона-Якоби, однородное уравнение переноса Больцмана (9) и само исходное уравнение (1). Кроме того, обобщенное уравнение должно устранить все фиксированные ранее противоречия. Если обобщенное уравнение удовлетворит всем этим требованиям, то его можно считать вполне приемлемым. Этой проблеме и уделяется внимание в следующем пункте.

3. Обобщение уравнения Шредингера

Принимая во внимание все приведенные ранее факты соответствия трех разделов физики - классической механики, физической кинетики и квантовой теории, - а также принимая, в частности, соотношения (32) и (34) как не противоречащие всем трем видам уравнений, представляется наиболее рациональным записать обобщенное уравнение Шредингера в форме:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2} - i\hbar F_k\frac{\partial\psi}{\partial p_k} + (U + U_V)\psi. \tag{35}$$

В уравнение (35) введены компоненты силы F_k, соответствующие (34). Сразу же обращает на себя внимание тот факт, что запись уравнения в виде (35) противоречит экстремальности формулировки принципа неопределенности Гайзенберга, чему и будет уделено внимание ниже.

Прежде всего необходимо установить, в каком соответствии находится уравнение (35) с уравнениями (1), (3) и (9). Всякую комплексную волновую функцию в ψ-плоскости можно записать в виде

$$\psi = g_B e^{i\frac{S}{\hbar}}. \tag{36}$$

Здесь g_B - действительная величина, так же, как и действие частицы S. Подставим функцию (36) в уравнение (35):

$$i\hbar\frac{\partial g_B}{\partial t} - g_B\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 g_B}{\partial x_k^2} - \frac{i\hbar}{m}\frac{\partial g_B}{\partial x_k}\frac{\partial S}{\partial x_k} + \frac{1}{2m}g_B\left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2 - $$
$$-\frac{i\hbar}{2m}g_B\frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2} - i\hbar F_k\frac{\partial g_B}{\partial p_k} + (U + U_V)g_B. \tag{37}$$

В соотношении (37) общий множитель $exp(\frac{i}{\hbar}S)$ опущен. Разделяя в (37) мнимые и действительные части, запишем два уравнения:

$$\frac{\partial g_B}{\partial t} = -\frac{1}{m}\frac{\partial g_B}{\partial x_k}\frac{\partial S}{\partial x_k} - \frac{1}{2m}g_B\frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2} - F_k\frac{\partial g_B}{\partial p_k}, \tag{38}$$

$$-g_B\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 g_B}{\partial x_k^2} + \frac{1}{2m}g_B\left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2 + (U + U_V)g_B. \tag{39}$$

Принимая, как и ранее, существование идеальных решений уравнений классической механики и учитывая соотношение (4), запишем:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2} = \frac{\partial}{\partial x_k}(m u_k(t)) = 0. \tag{40}$$

Домножая уравнение (38) на функцию g_B и принимая во внимание равенства (40), находим

$$\frac{\partial g_B^2}{\partial t} = -u_k\frac{\partial g_B^2}{\partial x_k} - F_k\frac{\partial g_B^2}{\partial p_k}. \tag{41}$$

Полагая теперь

$$f = g_B^2, \tag{42}$$

видим, что уравнение (41) совпадает с уравнением (9).

Уравнение (39), поскольку g_B – положительно определенная величина, запишем в форме:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2+U+U_v-\frac{\hbar^2}{2mg_B}\cdot\frac{\partial^2 g_B}{\partial x_k^2}=0. \qquad (43)$$

Возвращаясь к фундаментальным решениям, запишем уже известную функцию (26) в виде

$$P=P_q P_p=g_B^2=f, \qquad (44)$$

где функция f (42) отождествлена с функцией плотности вероятности перехода P, а множители P_q и P_p совпадают с частями функции (26) в евклидовом пространстве импульсов. Согласно (44),

$$g_B=\sqrt{P_q}\sqrt{P_p}=g_q g_p,\quad g_q=\sqrt{P_q},\quad g_p=\sqrt{P_p}, \qquad (45)$$

что и соответствует сути гауссовско-марковских процессов. Отождествляя функцию (36) с фундаментальным решением, запишем:

$$\psi_B=\Psi=g_q g_p e^{i\frac{S}{\hbar}},\quad \psi_B^*\psi_B=g_q^2 g_p^2=g_B^2=P. \qquad (46)$$

Второе из соотношений (46) совпадает с принятым ранее соотношением (27), а первое соответствует общей структуре функции Грина (28). Поскольку вид функции P уже установлен, то тем самым определены и функции g_q и g_p. Следовательно, вид функции (28) можно считать вполне достоверным, хотя нелишне проверить ее и другим способом. С помощью (45) последний член в уравнении (43) преобразуется:

$$\frac{\hbar^2}{2mg_B}\frac{\partial^2 g_B}{\partial x_k^2}=\frac{\hbar^2}{2mg_q g_p}\cdot g_p\frac{\partial^2 g_q}{\partial x_k^2}=U_v. \qquad (47)$$

Последнее равенство в (47) совпадает с формулой, по которой в работе /1/ вычислен потенциал U_v. Но тогда подстановка (47) в (43) приводит это уравнение к совпадению с уравнением Гамильтона-Якоби. Таким образом, теперь можно говорить о полном соответствии классической механики и квантовой теории, если в ее основу положить уравнение (35).

Исходное уравнение Шредингера в форме (1) должно следовать из уравнения (35). В том, что это действительно имеет место, можно убедиться, подставляя функцию Грина (29) в уравнение (35). После подстановки, очевидным образом группируя члены, запишем:

$$g_p\left[i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_k^2}-(U+U_v)\psi\right]= -i\hbar\,\psi\left(\frac{\partial g_p}{\partial t}+F_k\frac{\partial g_p}{\partial p_k}\right). \qquad (48)$$

Подставим функцию g_p в виде (29) в правую часть (48):

$$\frac{\partial g_p}{\partial t}+F_k\frac{\partial g_p}{\partial p_k}=\frac{1}{\chi_p}g_p\vec{\varphi}_p\vec{F}-\frac{1}{\chi_p}g_p\vec{\varphi}_p\vec{F}\equiv 0. \qquad (49)$$

Здесь обозначено

$$\vec{\varphi}_p=\vec{p}-\int_s^t\vec{F}(\tau)d\tau-\vec{p}\,'. \qquad (50)$$

Учитывая соотношение (49), видим, что уравнение (48) эквивалентно уравнению (20), а следовательно, и уравнению (1). Соотношения (48)-(50) одновременно констатируют, что функция Грина (29) является решением уравнения (35), поскольку функция ψ является решением уравнения (20).

Все проведенное выше рассмотрение показывает, что из обобщенного уравнения Шредингера (35) однозначно следуют все три уравнения: однородное уравнение переноса Больцмана в его полном виде (9), уравнение Гамильтона-Якоби в форме (3) и само уравнение Шредингера в его исходном виде (1). При этом фундаментальным решением уравнения (35) – функцией Грина, обобщенной к шестимерному фазовому пространству Больцмана,- является функция в форме (28)-(29). Эти факты вполне убедительны и позволяют считать обобщение уравнения Шредингера к виду (35) приемлемым и достоверным.

Тем не менее, уместно вернуться к отмеченным ранее противоречиям. Прежде всего отметим, что из уравнения (35) следует соотношение (49), а не (31). Соотношение (49) допускает существование любого конечного значения силы F_k, входящей в уравнение (9), что находится в соответствии с соотношением (34), т.е. не противоречит исходному уравнению (1). При этом как в квантовом, так и в кинетическом представлении сила имеет чисто классический смысл. Значит соотношение (31) может соответствовать только свободному движению частицы. Таким образом, экстремаль (33) устраняется. Этот факт еще раз подтверждает правомерность соотношения (27), позволившего записать функцию Грина в виде (28)-(29), что и привело к соотношению (49) и ко всем другим отмеченным выше результатам.

Теперь необходимо вернуться к принципу неопределенности Гайзенберга. Примем, как это было отмечено ранее, что принцип неопределенности Гайзенберга имеет отношение лишь к среднеквадратичным значениям координат и импульсов частицы. Проверим это сначала на характеристиках функции плотности вероятности перехода (26). Согласно работе /1/,

$$\sigma_q^2=\frac{1}{2}\cdot\frac{\hbar}{m\omega_0}. \qquad (51)$$

Среднее значение потенциала взаимодействия частицы с вакуумом, согласно той же работе,

$$\overline{U_V} = -\frac{3}{4}\hbar\omega_0. \tag{52}$$

В системе центра инерции ансамбля состояний частицы среднее значение кинетической энергии, обусловленной ее взаимодействием с вакуумом,

$$\overline{T_V} = -\overline{U_V} = \frac{3}{4}\hbar\omega_0. \tag{53}$$

Соотношения (51)-(53) соответствуют усреднению по волновой функции (5). Однако средние значения физических величин, входящих в эти соотношения, никак не изменятся, если усреднения провести по функциям (28)-(29). Это непосредственно видно из того, что имеет место соотношение

$$\int \psi_B^* \hat{f}(\vec{r},t)\psi_B\, d^3\vec{r}\, d^3\vec{p} = \int \psi^* \hat{f}(\vec{r},t)\psi\, d^3\vec{r} \cdot \int g_p^2(\vec{p},t)\, d^3\vec{p} =$$
$$= \int \psi^* \hat{f}(\vec{r},t)\psi\, d^3\vec{r}, \tag{54}$$

в котором оператор $\hat{f}$ зависит явно лишь от $\vec{r}$, а время входит в него как параметр; именно к такого рода операторам и относятся $\hat{T}_V$ и U_V; при этом в (54) подразумевается, что усреднение отнесено к системе центра инерции, где можно положить $\vec{r}'=0$, $\vec{p}'=0$.

В силу изотропии пространства на одну степень свободы в пространстве импульсов приходится 1/3 кинетической энергии частицы. Поэтому среднеквадратичный разброс импульсов, согласно (53),

$$\sigma_p^2 = 2m\frac{1}{3}\overline{T_V} = \frac{m}{2}\hbar\omega_0. \tag{55}$$

С помощью соотношений (51) и (55) запишем:

$$\sqrt{\sigma_q^2\sigma_p^2} = \sqrt{\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega_0}\cdot\frac{m}{2}\hbar\omega_0} = \frac{1}{2}\hbar, \tag{56}$$

или

$$\sigma_q\sigma_p = \frac{1}{2}\hbar. \tag{57}$$

Соотношения (55)-(57) характеризуют параметры функции плотности вероятности перехода (26), которая учитывает хаотичность взаимодействия частицы с вакуумом. Для квантово-механической функции Грина (28) среднеквадратичные разбросы координат и импульсов удваиваются:

$$\delta_q^2 = 2\sigma_q^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0} = X_q, \quad \delta_p^2 = 2\sigma_p^2 = m\hbar\omega_0 = X_p. \tag{58}$$

Аналогично (56)-(57) можно записать:

$$\sqrt{\delta_q^2\delta_p^2} = \sqrt{X_q X_p} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}\cdot m\hbar\omega_0} = \hbar,$$

т.е. окончательно

$$\delta_q\delta_p = \hbar. \tag{59}$$

Как видно, принцип неопределенности Гайзенберга, если его отнести к среднеквадратичным значениям координат и импульсов частицы, выполняется. При этом он действует как в квантовой теории, так и в физической кинетике. Из гипотезы взаимодействия тел с вакуумом следует, что величины δ_q, δ_p и σ_q, σ_p являются положительно определенными и конечными, если частица стабильна или характеризуется таким временем жизни, которое намного превосходит характерное время релаксации, соответствующее взаимодействию частицы с вакуумом. Этот факт устраняет экстремальность принципа неопределенности Гайзенберга. Следовательно, при описании движений квантово-механических систем вполне корректно привлечение полного набора динамических переменных - координат и импульсов. Ясно, что координаты и импульсы частицы могут быть произвольными, но реализуются лишь с некоторой конечной вероятностью, что и определяет функция (28). Все это полностью соответствует обобщенному уравнению (35).

Заключение

Однородное уравнение переноса Больцмана (9) в физической кинетике применяется для описания движений систем многих упруго взаимодействующих частиц. Совершенно аналогично этому можно считать, что уравнение (35) также применимо в этом случае, но уже с квантово-механической точки зрения. Это обстоятельство полностью соответствует смыслу функции Грина (28). Относя уравнение (35) к системе упруго взаимодействующих частиц, общее его решение следует записать в виде

$$\Psi = \int \varphi(s,\xi,\vec{r}',\vec{p}')\,\psi_B(s,\vec{r}',\vec{p}';t,\vec{r},\vec{p})\,d^3\vec{r}'\,d^3\vec{p}'\,d\xi. \tag{60}$$

Структура функции φ, входящей в выражение (60), должна отображать физические условия, в которых находится система в начальный момент времени $t=s$, так, чтобы волновая функция (60) тождественно удовлетворяла уравнению (35). Переменные ξ представляют собой совокупность

$$\xi = (\vec{r}_c, \vec{\mathcal{P}}_c), \quad \vec{\mathcal{P}}_c = m\vec{\vartheta}(\vec{r}_c), \tag{61}$$

в которой $\vec{r}_c$ - центр инерции минимально возможного макроэлемента, допускающего определения концентрации числа частиц $n(\xi)$, температуры $T(\xi)$ и гидродинамической скорости $\vec{\vartheta}(\vec{r}_c)$. Импульс $\vec{\mathcal{P}}_c$ макроэлемента в (61) нормирован так, чтобы он был отнесен к одной частице. Как видно, переменные ξ имеют макроскопический смысл. Функция φ также имеет макроскопический характер, поскольку построение ее конкретного вида возможно лишь в том случае, если заданы величины $n(\xi)$, $T(\xi)$ и $\vec{\vartheta}$.

Если система существенно неоднородна, то может оказаться более рациональным заменить интегрирование по переменным ξ в (60) на суммирование по дискретным макроэлементам, на которые удобно разбить систему. Смысл волновой функции (60) таков, что ее можно назвать "макроскопической" волновой функцией.

Волновая функция (60) может получить широкое применение для описания движений бозе-систем. Ясно, что для построения соответствующей макроскопической волновой функции для ферми-систем, уравнение (35) следует обобщить к учету принципа Паули. Тем не менее, функцию (60) можно применять и в теории сверхпроводимости, если куперовские пары считать условно отдельными частицами. Именно в таком смысле чаще всего и применяют понятие "макроскопической" волновой функции в теории сверхтекучести и сверхпроводимости. Однако структуру макроскопической волновой функции "постулируют" [5], предполагая условно, что она удовлетворяет существующему уравнению Шредингера. Без особого труда можно увидеть, что все виды "постулированных" волновых функций как частные случаи, соответствующие конкретным физическим условиям, следуют из волновой функции (60). Уже тот факт, что с помощью "постулированных" волновых функций удается систематизировать практически все экспериментально наблюдаемые явления в процессах сверхтекучести и сверхпроводимости, говорит о том, что строгой конкретизации вида волновой функции (60) следует уделить немало внимания.

Наконец, заключая работу, имеет смысл обратить внимание на следующее обстоятельство. Если учесть хаотичность воздействия ансамбля частиц на одну из них, то вместо соотношения (59) естественно записать неравенство

$$\delta_q \delta_p \geqslant \hbar, \tag{59'}$$

также соответствующее физическому смыслу принципа неопределенности Гайзенберга. Неравенство (59') поможет выяснить физический смысл понятия "критической" температуры, применяемого в теории сверхтекучести и сверхпроводимости.

Литература

1. Горделий В.И., Савельев А.Е. Сообщение ОИЯИ, Р17-91-268, 1991, Дубна.
2. Савельев А.Е. Физическая кинетическая теория и физико-химические технологии, ч. 1, ВИНИТИ, № 2631-Ка 89, 19.04.89 - 141 с.
3. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Механика. М.: "Гос. изд. физ.-мат. лит.", 1958 - 206 с.
4. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: "Гос. изд. физ.-мат. лит.", 1963 - 702 с.
5. Тилли Д.Р., Тилли Дж. Сверхтекучесть и сверхпроводимость. Москва, "Мир", 1977 - 304 с.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 июня 1991 года.