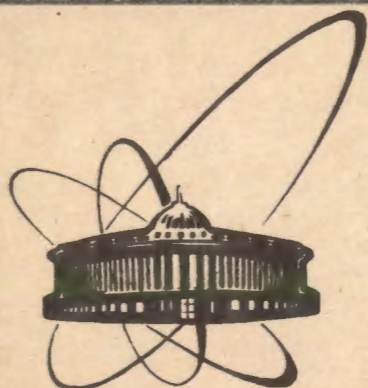


91-446



СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P17-91-446

В. И. Лушиков, А. Е. Савельев\*

КВАНТОВО-КИНЕТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА  
И МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

---

\*Казахский химико-технологический институт,  
Чимкент

1991

## Введение

Уравнение Шредингера, приведенное в работе <sup>1/1</sup> к соответствию с гипотезой взаимодействия тел с вакуумом, обобщено к шестимерному фазовому пространству Больцмана:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_k^2} - i\hbar F_k \frac{\partial \Psi}{\partial p_k} + (U + U_v) \Psi. \quad (1)$$

При этом принцип неопределенности Гейзенберга отнесен к среднеквадратичным значениям координат и импульсов:

$$\delta q \delta p \geq \hbar. \quad (2)$$

В уравнении (1) по повторяющимся индексам, как и в дальнейшем, подразумевается суммирование; радиус-вектор частицы  $\vec{r} = \vec{e}_k x_k$ ,  $k=1,2,3$ ;  $\vec{e}_k$  - орты в декартовой системе координат;  $\vec{p} = \vec{e}_k p_k$  - импульс частицы и его компоненты; сила, действующая на частицу,  $\vec{F} = \vec{e}_k F_k$ ;  $U$  - потенциал внешних сил. Потенциал взаимодействия частицы с вакуумом определяется формулой:

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

Здесь  $\omega_0$  - циклическая частота, определяющая интенсивность взаимодействия частицы с вакуумом;  $\vec{u}$  - скорость частицы, имеющая классический смысл. Выражение (3) соответствует кинематическому преобразованию

$$\vec{r} = \vec{r}' + \int_s^t \vec{u}(\tau) d\tau, \quad (4)$$

определяющему положение частицы в любой момент времени  $t \geq s$ . Значения  $\vec{r}$  в (3) и (4) в общем случае, конечно, не совпадают.

Фундаментальное решение уравнения (1) - функция Грина - в пространстве Больцмана имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi_B(s, \vec{r}; \vec{p}'; t, \vec{r}, \vec{p}) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(s, \vec{r}'; t, \vec{r})\right] * \\ &* (\pi \chi_q)^{-3/4} \exp\left[-\frac{\left(\vec{r} - \int_s^t \vec{u}(\tau) d\tau - \vec{r}'\right)^2}{2 \chi_q}\right] * \\ &* (\pi \chi_p)^{-3/4} \exp\left[-\frac{\left(\vec{p} - \int_s^t \vec{F}(\tau) d\tau - \vec{p}'\right)^2}{2 \chi_p}\right]. \end{aligned} \quad (5)$$

функция (5) найдена в предположении, что действие частицы  $S'$  допускает существование идеальных решений уравнений классической механики, т.е. зависимости координат и импульсов частицы только от времени. Это предположение вполне соответствует сути уравнений Гамильтона. Средне-квадратичные разбросы в функции (5) определяются соотношениями

$$\delta q^2 = X q = \frac{\hbar}{m \omega_0}, \quad \delta p^2 = X p = m \hbar \omega_0. \quad (6)$$

Плотность вероятности перехода физической кинетики выражается непосредственно через функцию Грина (5) соотношением:

$$P(s, \vec{r}; \vec{p}; t, \vec{r}; \vec{p}) = \psi_B^*(s, \vec{r}; \vec{p}; t, \vec{r}; \vec{p}) \psi_B(s, \vec{r}; \vec{p}; t, \vec{r}; \vec{p}). \quad (7)$$

При этом функция (7) тождественно удовлетворяет однородному уравнению переноса Больцмана:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + u_k \frac{\partial P}{\partial x_k} + F_k \frac{\partial P}{\partial p_k} = 0. \quad (8)$$

Существенно отметить еще, что уравнение (1) и его решение (5) правомерны, если потенциал  $U$ , входящий в уравнение (1), имеет первые непрерывные производные по всем динамическим переменным. Только в этом случае из уравнения (1) следуют уравнения Гамильтона-Якоби и уравнение (8). Действие частицы, входящее в формулу (5), принято в традиционном виде<sup>[2]</sup>

$$S' = \sum_{k=1}^3 \int_{x'_k}^{x_k} p_k dx_k - \int_S H(\vec{r}) d\tau, \quad (9)$$

в котором  $H$  - гамильтониан частицы. Каждый из интегралов от компонент импульса  $p_k$  можно рассматривать как независимый, если потенциал внешних сил  $U$  допускает полное разделение переменных; в противном случае совокупность интегралов

$$S_0 = \sum_{k=1}^3 \int_{x'_k}^{x_k} p_k dx_k = \int_{e(\vec{r})} \vec{p} d\vec{r}, \quad \frac{d\vec{r}}{de} = \vec{n} de \quad (10)$$

представляет собой интеграл по контуру  $e$ , совпадающему или не совпадающему с классической траекторией частицы; интегрирование в (10) можно проводить в виде  $d\vec{r} = \vec{n} de$ , где  $\vec{n}$  - касательная к контуру  $e$  (единичный вектор), а  $de$  - элемент контура.

Уравнение (1) применимо непосредственно к описанию движения отдельной частицы. Цель данной работы состоит в том, чтобы уравнение (1) трансформировать к виду, в котором оно станет применимым к описанию ансамбля взаимодействующих частиц. Поскольку уравнение (1) не учитывает принцип Паули, то рассмотрение будет отнесено к бозе-системам. На осно-

ве такой трансформации уравнения (1) естественно попытаться построить "макроскопическую" волновую функцию. Уравнение (8), применяемое в физической кинетике для описания движений систем упруго взаимодействующих частиц, наряду с уравнением классической механики Гамильтона-Якоби, следует непосредственно из уравнения (1). Это обстоятельство позволяет надеяться, что уравнение (1), в полной аналогии с уравнением (8), может быть трансформировано к описанию бозе-систем. Однако сразу же следует принять во внимание, что уравнение (1) характеризуется своеобразной специфичностью. Последняя связана с тем, что потенциал  $U$ , учитывающий взаимодействие частицы с вакуумом, синхронно закоррелирован с движением частицы. Если рассматривать движение частицы с учетом хаотического воздействия на нее со стороны ансамбля других частиц, то ее взаимодействие с вакуумом, конечно, будет проявляться в усредненном виде. Уже отсюда видно, что возникает необходимость введения эффективного потенциала взаимодействия частицы с вакуумом в усредненном виде, что и будет учтено в дальнейшем.

Сам смысл макроскопической волновой функции, которая до сей поры лишь "постулировалась" в различных ее формах (см., например, <sup>[3]</sup>), но проявляла себя как мощный фактор в процессе систематизации экспериментальных данных, скажем, в теории сверхтекучести и сверхпроводимости, говорит о том, что она должна одновременно учитывать как движение одной частицы, так и коллективные эффекты системы. Волновую функцию с такими характеристиками можно построить с помощью функции Грина (5), если определить начальные условия системы, достаточно детально учитывающие ее макроскопические свойства. Применение функции Грина (5) при описании движений систем многих частиц вполне правомерно, поскольку каждая частица ведет себя как самостоятельный физический объект. Не конкретизируя пока вид начальных условий системы, попытаемся выяснить возможные варианты уравнений, которым должна удовлетворять макроскопическая волновая функция.

### 1. Уравнения для макроскопической волновой функции

Прежде всего примем, что потенциал  $U$ , входящий в уравнение (1), представляет собой самосогласованный потенциал, определяемый ансамблем взаимодействующих частиц. Иначе говоря, потенциал  $U$  далее будет применяться в представлении Власова. Ясно, что такой потенциал должен быть функционалом плотности числа частиц, а также и других макрохарактеристик системы. Как и при поиске решений уравнения (1), примем, что самосогласованный потенциал имеет первые непрерывные производные по всем динамическим переменным, что обеспечивает, в частности, непрерывность

компонент силы  $F_k$ , действующей на частицу. Кроме того, будем считать, что потенциал  $U$ , определяющий свойства действия частицы (9), допускает существование идеальных решений уравнений классической механики, т.е. зависимости координат и импульсов частицы только от времени. Это обстоятельство находится в полном соответствии со смыслом канонических уравнений механики Гамильтона. Именно потому и в данном случае допустима запись функции Грина в виде (5), где векторы  $\vec{r}$  и  $\vec{p}$  являются функциями только времени.

Принимая во внимание только что сказанное, уравнение для функции Грина, отнесенной к системе взаимодействующих частиц, запишем в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_B}{\partial x_k^2} - i\hbar F_k \frac{\partial \psi_B}{\partial p_k} + U_e \psi_B + U_V \psi_B. \quad (11)$$

Здесь введен эффективный самосогласованный потенциал  $U_e$  в представлении Власова; потенциал  $U_V$  по-прежнему имеет вид (3). Функция Грина (5) соответствует тем требованиям, которые наложены на потенциал  $U_e(\vec{r}, t)$ . Поэтому ее можно считать решением уравнения (11). Структура аргументов функций (3) и (5) соответствует преобразованию (4), а также динамическому преобразованию

$$\vec{P} = \vec{P}' + \int_s^t \vec{F}(\vec{r}) d\tau. \quad (12)$$

Аддитивность гауссовско-марковских процессов и сама суть функции Грина (5) позволяют записать макроскопическую волновую функцию в виде

$$\Psi_M = \int \varphi(s, \xi, \vec{r}', \vec{p}') \psi_B(s, \vec{r}; \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{r}' d^3 \vec{p}' d\xi. \quad (13)$$

Структура функции  $\varphi$ , входящей в выражение (13), отображает физические условия, в которых находится система в начальный момент времени  $t=s$ . При этом, наряду с микропеременными  $\vec{r}'$  и  $\vec{p}'$ , функция  $\varphi$  зависит от совокупности макропеременных

$$\xi = (\vec{r}_0, \vec{p}_0), \quad \vec{p}_0 = m \vec{v}(\vec{r}_0), \quad (14)$$

в которых  $\vec{r}_0$  - центр инерции минимально возможного макроэлемента, допускающего определение концентрации числа частиц  $n(\xi)$ , температуры  $T(\xi)$  и гидродинамической скорости  $\vec{v}(\vec{r}_0)$ . Импульс  $\vec{p}_0$  макроэлемента нормирован так, чтобы он был отнесен к одной частице. Если система существенно неоднородна, то может оказаться более рациональным заменить интегрирование по переменным  $\xi$  в (13) на суммирование по дискретным макроэлементам, на которые удобно разбить систему. Более того, если движения системы таковы, что число частиц в макроэлементе можно считать адиабатическим инвариантом по отношению к микропеременным, в частности,

для несжимаемой среды, то интегрирование в (13) по переменным  $\xi$  можно отнести к минимально возможному макроэлементу, что эквивалентно локальному определению функции  $\Psi_M$ , поскольку она будет зависеть от макропеременных  $\xi$  как от адиабатических параметров. Некоторым существенным вариантам представления функции (13) будет уделено внимание ниже.

Свойства макроскопической волновой функции (13), отмеченные выше, позволяют записать для нее уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_M}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_M}{\partial x_k^2} - i\hbar F_k \frac{\partial \Psi_M}{\partial p_k} + U_e \Psi_M + \quad (15)$$

$$+ \int \varphi(s, \xi, \vec{r}', \vec{p}') U_V(\vec{r}, \vec{r}', t) \psi_B(s, \vec{r}; \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{r}' d^3 \vec{p}' d\xi,$$

в котором  $\psi_B$  определена уравнением (11) и задана формулой (5). Действительно, если домножить уравнение (11) на функцию  $\varphi(s, \xi, \vec{r}', \vec{p}')$  и проинтегрировать его по переменным  $\vec{r}'$ ,  $\vec{p}'$  и  $\xi$ , то, учитывая формулу (13), получим уравнение (15). Появление последнего члена в уравнении (15), очевидно, связано с синхронной корреляцией потенциала  $U_V$  с движением частицы. Этот член фактически означает усреднение потенциала  $U_V$  по ансамблю состояний системы. Таким образом, для нахождения макроскопической волновой функции необходимо решить два уравнения: уравнение (11), определяющее квантово-механическую функцию Грина для самосогласованного потенциала  $U_e$ , а также уравнение (15), учитывающее макроскопические характеристики системы. Поскольку решение уравнения (11) уже найдено, то нетрудно убедиться, что подстановка функции (13) в уравнение (15) обратит его в тождество. Как видно, аддитивный характер функции (13) не противоречит виду уравнения (15), хотя учет синхронной корреляции потенциала  $U_V$  с движением частицы привел уравнение (15) к некоторому отличию от уравнения (1). Отсюда следует, что уравнение (15) можно положить в основу дальнейшего рассмотрения.

Для детализации волновой функции (13) и соответствующих начальных условий будем придерживаться в дальнейшем условия:

$$\Psi_M^* \Psi_M = f(t, \vec{r}, \vec{p}). \quad (16)$$

Здесь функция  $f$  - плотность вероятности найти частицу в момент времени  $t$  и в окрестности точки фазового пространства  $(\vec{r}, \vec{p})$ ; она удовлетворяет уравнению Больцмана (8); общее решение уравнения (8) найдено в работе [4]. Условие (16) соответствует соотношению (7) для фундаментальных решений уравнений (8) и (11). Однако реализация условия (16) не столь проста и очевидна, как это имеет место для соотношения (7), ибо речь идет о произведении интегралов вида (13). При этом должна быть обеспечена аддитивность структуры функции  $f$ , как это имеет место для функции (13).

## 2. Квантово-кинетическая функция Грина

В физической кинетике плотность вероятности  $f$  определяется по отношению к локально-равновесному макроэлементу. Такой минимально возможный по размеру макроэлемент допускает введение макропеременных  $\xi$ , которые являются адиабатическими параметрами по отношению к микропеременным  $\vec{r}$  и  $\vec{p}$ . Соответственно, как отмечалось ранее, возможно определение величин  $n(\xi)$ ,  $T(\xi)$  и  $\vec{v}_d$ . Поскольку необходимо придерживаться условия (16), то и макроскопическую волновую функцию  $\Psi_M$  следует определить в тех же условиях. Смысл локально-равновесного макроэлемента допускает определение локальной макроскопической волновой функции в виде:

$$\Psi_M = \int \varphi(s, \xi, \vec{r}', \vec{p}') \psi_B(s, \vec{r}', \vec{p}'; t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{r}' d^3 \vec{p}' \quad (17)$$

Здесь в отличие от выражения (13) интегрирование по переменным  $\xi$  снимается. Нелишне отметить, что обмен частицами между макроэлементами может быть весьма интенсивным, поскольку температура среды  $T(\xi)$  не равна нулю в общем случае, но движения частиц в различных макроэлементах будут характеризоваться подобием [4].

Учитывая сказанное, а также вид функции Грина (5), запишем начальные условия в форме:

$$\varphi(s, \xi, \vec{r}', \vec{p}') = \left[ \frac{\Delta N}{\Delta V_q \Delta V_p} \right]^{1/2} \exp\left[ \frac{i}{\hbar} S_0(\vec{r}', \vec{p}') \right] * \\ * (\pi 2 \sigma_q'^2)^{-3/4} \exp\left[ -\frac{(\vec{r}' - \vec{x})^2}{4 \sigma_q'^2} \right] \cdot (\pi 2 \sigma_p'^2)^{-3/4} \exp\left[ -\frac{(\vec{p}' - \vec{p})^2}{4 \sigma_p'^2} \right] \quad (18)$$

Здесь ради удобства обозначено

$$\xi = (\vec{r}_0, \vec{p}_0) = (\vec{x}, \vec{p}); \quad (14')$$

$N$  - полное число частиц системы;  $\Delta N$  - число частиц в макроэлементе, который характеризуется объемом  $\Delta V_q$  в евклидовом пространстве и объемом  $\Delta V_p$  в пространстве импульсов. Распределения, входящие в выражение (18), соответствуют смыслу локально равновесного макроэлемента. Среднеквадратичный разброс  $\sigma_q'$  имеет порядок величины длины свободного пробега частицы. Величина  $\sigma_p'$  определяется температурой (см. ниже). Укороченное действие частицы  $S_0(\vec{r}', \vec{p}')$  фиксирует точку отсчета движения частицы формально от центра инерции макроэлемента  $\vec{r}_0 = \vec{x}$ , что согласуется с распределениями, входящими в (18).

Подставим теперь функции (18) и (5) в интеграл (17) и проверим соответствие таким образом определенной функции и условия (16):

$$\Psi_M = \left[ \frac{\Delta N}{\Delta V_q \Delta V_p} \right]^{1/2} \int d^3 \vec{r}' d^3 \vec{p}' \exp\left[ \frac{i}{\hbar} S_0(\vec{r}', \vec{p}') \right] * \\ * (\pi 2 \sigma_q'^2)^{-3/4} \exp\left[ -\frac{(\vec{r}' - \vec{x})^2}{4 \sigma_q'^2} \right] \cdot (\pi 2 \sigma_p'^2)^{-3/4} \exp\left[ -\frac{(\vec{p}' - \vec{p})^2}{4 \sigma_p'^2} \right] * \\ * \exp\left[ \frac{i}{\hbar} S(s, \vec{r}'; t, \vec{r}') \right] \cdot (\pi \chi_q)^{-3/4} \exp\left[ -(2\chi_q)^{-1} \left( \vec{r}' - \int_s^t \vec{u} d\tau - \vec{r}' \right)^2 \right] * \\ * (\pi \chi_p)^{-3/4} \exp\left[ -(2\chi_p)^{-1} \left( \vec{p}' - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}' \right)^2 \right]. \quad (19)$$

Объединяя экспоненты, зависящие от действия частицы, запишем:

$$S(s, \vec{x}; t, \vec{r}) = S_0(\vec{x}, \vec{r}') + S(s, \vec{r}'; t, \vec{r}) = \\ = \int_{e(\vec{r}')}^{\vec{r}} \vec{p} d\vec{r}' + \int_{e(\vec{r}')}^{\vec{r}} \vec{p} d\vec{r}' - \int_s^t H(\tau) d\tau. \quad (20)$$

В соотношении (20) момент времени  $t = s$  соответствует  $\vec{r}'/t = \vec{x}$ , т.е. отсчет времени и движения частицы осуществляется от центра инерции макроэлемента. Здесь уместно отметить, что производные от левой и правой частей (20) по переменным  $\chi_k$  ( $\vec{r}' = \vec{r}'_k \chi_k$ ) и  $t$  совпадают:

$$\frac{\partial}{\partial \chi_k} S(s, \vec{x}; t, \vec{r}) = \frac{\partial}{\partial \chi_k} S(s, \vec{r}'; t, \vec{r}), \quad \frac{\partial}{\partial t} S(s, \vec{x}; t, \vec{r}) = \frac{\partial}{\partial t} S(s, \vec{r}'; t, \vec{r}). \quad (21)$$

Равенства (21) означают, что вклад укороченного действия  $S_0(\vec{x}, \vec{r}')$  не изменяет динамику процесса, поскольку уравнение Гамильтона-Якоби сохранит свой вид. Но левая часть (20) не зависит от переменных  $\vec{r}'$  и  $\vec{p}'$ , а потому

$$\exp\left[ \frac{i}{\hbar} S_0(\vec{x}, \vec{r}') \right]$$

вносится из-под знака интеграла (19). Это дает возможность проинтегрировать по переменным  $\vec{r}'$  и  $\vec{p}'$ , применяя формулу свертки:

$$\left[ \pi(\alpha + \beta) \right]^{-3/2} \exp\left[ -\frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{\alpha + \beta} \right] = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} (\pi\alpha)^{-3/2} \exp\left[ -\frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)^2}{\alpha} \right] \cdot (\pi\beta)^{-3/2} \exp\left[ -\frac{(\vec{x} - \vec{x})^2}{\beta} \right] d^3 \xi, \\ \alpha, \beta > 0, \quad -\infty < \vec{x}, \vec{x}_0 < \infty. \quad (22)$$

С помощью (22) функция (19) принимает вид:

$$\Psi_M = \left[ \frac{\Delta N}{\Delta V_q \Delta V_p} \right]^{1/2} \exp\left[ \frac{i}{\hbar} S(s, \vec{x}; t, \vec{r}) \right] \cdot (\pi 2 \sigma_q'^2)^{-3/4} (\pi \chi_q)^{-3/4} *$$

$$\begin{aligned}
 & * \frac{(\pi 4\sigma_q'^2)^{3/2} (\pi 2X_q)^{3/2}}{[\pi(4\sigma_q'^2 + 2X_q)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u} d\tau - \vec{x})^2}{4\sigma_q'^2 + 2X_q}\right] * \\
 & * (\pi 2\sigma_p'^2)^{-3/4} (\pi X_p)^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}')^2}{4\sigma_p'^2 + 2X_p}\right] * \\
 & * \frac{(\pi 4\sigma_p'^2)^{3/2} (\pi 2X_p)^{3/2}}{[\pi(4\sigma_p'^2 + 2X_p)]^{3/2}}.
 \end{aligned} \quad (23)$$

Эффективные объемы  $\Delta V_q$  и  $\Delta V_p$ , входящие в (19) и (23), определим теперь в виде:

$$(\Delta V_q)^{1/2} = \frac{(\pi 4\sigma_q'^2)^{3/4}}{[\frac{\sigma_q'^2}{X_q} + \frac{1}{2}]^{3/4}}, \quad (\Delta V_p)^{1/2} = \frac{(\pi 4\sigma_p'^2)^{3/4}}{[\frac{\sigma_p'^2}{X_p} + \frac{1}{2}]^{3/4}}. \quad (24)$$

Специфичный вид объемов  $\Delta V_q$  и  $\Delta V_p$  связан с тем, что распределения частиц, заданные функцией (18) для каждого макроэлемента, перекрываются, учитывая обмен частицами между ними.

С помощью (23)-(24) естественно записать макроскопическую функцию Грина. Для этого достаточно отнести локально определенную функцию  $\Psi_M$  к одной частице:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_M(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}') &= \frac{1}{(\Delta N)^{1/2}} \Psi_M = \exp\left[\frac{i}{\hbar} S'(s, \vec{x}; t, \vec{r})\right] * \\
 & * [\pi(2\sigma_q'^2 + X_q)]^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u} d\tau - \vec{x})^2}{4\sigma_q'^2 + 2X_q}\right] * \\
 & * [\pi(2mT(\xi) + X_p)]^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}')^2}{4mT(\xi) + 2X_p}\right].
 \end{aligned} \quad (25)$$

Согласно работе [4], в формуле (25) положено:

$$2\sigma_p'^2 = 2mT(\xi), \quad (26)$$

где  $T$  - температура в энергетическом измерении.

Если теперь в уравнении (11) потенциал  $U_V$  записать в виде

$$U_V = \frac{m\omega^2}{2} (\vec{r} - \int_s^t \vec{u} d\tau - \vec{x})^2 - \frac{3}{2} \hbar \omega. \quad (27)$$

и учесть, что

$$\frac{\partial \xi}{\partial X_k} = 0, \quad \frac{\partial \xi}{\partial p_k} = 0, \quad (28)$$

то подстановка функции (25) в уравнение (11) обратит его в тождество. Вид потенциала (27) фактически означает усреднение потенциала (3) в пределах локально равновесного макроэлемента, поскольку микропеременная  $\vec{r}'$  заменена на макропеременную  $\vec{x}$ .

Функция (25) учитывает два вида хаотического воздействия на движение частицы. Один из них, как и ранее, обусловлен взаимодействием частицы с вакуумом, что и фиксируют величины  $X_q$  и  $X_p$ . Другой вид хаотического воздействия на движение данной частицы связан с ее хаотическим взаимодействием с ансамблем частиц, которому она принадлежит. Такое воздействие на движение частицы учитывается величинами  $T$  и  $\sigma_q'$ . Величина  $\sigma_q'$  имеет смысл характерного размера макроэлемента или, например, гранулы сильно раздробленного кристалла; более рационально эту величину можно определить как отнесенную к минимально возможному макроэлементу, по отношению к которому можно определить самосогласованный потенциал  $U_e$ , входящий в уравнение (11). При  $T \rightarrow 0$  формально можно считать, что и  $\sigma_q' \rightarrow 0$ , поскольку характерный объем макроэлемента будет приближаться к эффективному объему, который занимает частица в системе; но этот объем при нулевой температуре характеризуется величиной  $X_q$ . Значит, при нулевой температуре функция (25) совпадает с уже найденной квантово-механической функцией Грина (5). Таким образом, функция Грина (25) имеет квантово-кинетический характер и, как видно, содержит в себе немало информации. Если в соотношении (7) произвести замену  $\vec{r}' \rightarrow \vec{x}$ ,  $\vec{p}' \rightarrow \vec{p}$ , то функция (25) удовлетворит этому соотношению, что в данном случае эквивалентно выполнению условия (16). При достаточно высокой температуре величинами  $X_q$  и  $X_p$  можно пренебречь, но тогда правая часть соотношения (7) для функции (25) представит собой обычную функцию плотности вероятности перехода физической кинетики.

### 3. Варианты макроскопической волновой функции

С помощью функции Грина (25) общее выражение для макроскопической волновой функции (13) следует записать в форме:

$$\Psi_M = \int \varphi(s, \xi') \mathcal{G}_M(s, \vec{x}', \vec{p}'; t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{x}' d^3 \vec{p}'. \quad (29)$$

Как видно, функция  $\Psi_M$  обрела существенно более компактный вид, что и позволит рассмотреть конкретные варианты макроскопических волновых функций. Существенно отметить здесь, что функция (29) теперь удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_M}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_M}{\partial X_k^2} - i\hbar F_k \frac{\partial \Psi_M}{\partial P_k} + U_0 \Psi_M + \int \varphi(s, \xi') U_V(\vec{x}', \vec{r}, t) \Psi_M(s, \vec{x}', \vec{p}'; t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{x}' d^3 \vec{p}', \quad (30)$$

в котором потенциал  $U_V$  задан формулой (27).

Рассмотрим теперь такой вариант функции (29), который непосредственно можно сравнить с постулированными волновыми функциями в теории сверхтекучести и сверхпроводимости. Для этого в формуле (29) положим

$$\varphi(s, \xi') = \varphi_0(\xi') \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{x}_0, \vec{x}')\right]. \quad (31)$$

Действие  $S_0(\vec{x}_0, \vec{x}')$  (укороченное), входящее в (31), имеет тот же смысл, что и в формуле (18), т.е. соответствует переносу точки отсчета движения частицы в момент  $t=s$  от точки  $\vec{x}'$  к точке  $\vec{x}_0$ ; последнюю можно выбрать как совпадающую с центром инерции (или геометрическим центром) некоторого достаточно большого объема среды  $V_0$  ( $V_0 \gg \Delta V_0$  согласно (24)) и, в частности, положить  $\vec{x}_0 = 0$ ; нелишне отметить, что произвольное, но конечное значение  $S_0$  не вносит никакого вклада в динамику движения частицы. Индекс  $\delta$  у функции  $\varphi$  в (31) отмечает, что она отнесена к макроэлементу с характерным размером  $\delta$ .

Согласно предыдущему, будем считать, что гидродинамическая скорость  $\vec{v}$  является адиабатическим параметром по отношению к переменным  $\vec{r}$  и  $\vec{p}$ , характеризующим движение частицы. Тогда можно принять, что

$$\varphi_0(\xi') = \varphi_0(\vec{x}', \vec{p}') = \varphi_0 \delta(\vec{x}') \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \quad \vec{p}' = m\vec{v}. \quad (32)$$

Подстановка функций (25) и (31)-(32) в интеграл (29) приводит к выражению:

$$\Psi_M = \int d^3 \vec{x}' \varphi_0 \delta(\vec{x}') \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_0(s, \vec{x}_0; t, \vec{r})\right] * \left[ \pi(2mT_0 + X_p) \right]^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{v} d\tau - \vec{x}')^2}{4\sigma_p^2 + 2X_p}\right] * \left[ \pi(2mT(\vec{x}', \vec{p}) + X_p) \right]^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}')^2}{4mT(\vec{x}', \vec{p}) + 2X_p}\right]. \quad (33)$$

Функция  $\varphi_0 \delta(\vec{x}')$ , входящая в (33), имеет своеобразный характер. Достаточно ясно ее смысл можно увидеть, если в интеграле (33) положить, что в объеме  $V_0$  температура  $T(\vec{x}', \vec{p}) = T_0 = const$ . Тогда выражение (33) записывается в виде:

$$\Psi_M = [n(t, \vec{r})]^{1/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_0(s, \vec{x}_0; t, \vec{r})\right] * \left[ \pi(2mT_0 + X_p) \right]^{-3/4} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}')^2}{4mT_0 + 2X_p}\right], \quad (34)$$

$$[n(t, \vec{r})]^{1/2} = \int d^3 \vec{x}' \varphi_0 \delta(\vec{x}') \left[ \pi(2\sigma_p^2 + X_p) \right]^{-3/4} * \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{v} d\tau - \vec{x}')^2}{4\sigma_p^2 + 2X_p}\right]. \quad (35)$$

В формуле (35)  $n(t, \vec{r})$  - концентрация числа частиц. Как видно,  $\varphi_0 \delta$  является коэффициентом интегрально-функционального разложения функции  $n^{1/2}$ .

Существенно отметить здесь, что первые два множителя в функции (34) по своему смыслу и форме совпадают с той макроскопической волновой функцией, которая постулирована в работе <sup>13/</sup> и применена для систематизации многих экспериментальных данных в сверхтекучести и сверхпроводимости. Однако функция (34) содержит еще распределение по импульсам (динамическое), а функция работы <sup>13/</sup> такого распределения не содержит. Именно потому следует уделить некоторое внимание на ту информацию, которую содержит в себе функция (34), если ее отнести, например, к явлениям сверхпроводимости.

Подставляя функцию (34) в условие (16), найдем:

$$f(t, \vec{r}, \vec{p}) = \Psi_M^* \Psi_M = n(t, \vec{r}) \left[ \pi(2mT_0 + X_p) \right]^{-3/2} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}')^2}{2mT_0 + X_p}\right]. \quad (36)$$

Функция (36) совпадает с функцией плотности вероятности, найденной в работе <sup>14/</sup> при фиксированных выше условиях. Конечно, в работе <sup>14/</sup> не учитывались величины  $X_p$  и  $X_r$ . Тем не менее, традиционная нормировка функции  $f$ , принятая в физической кинетике, выполняется, поскольку распределение по импульсам, входящее в (36), нормировано на единицу:

$$\int f(t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{p} = n(t, \vec{r}). \quad (37)$$

Соответственно плотность потока частиц

$$\vec{J} = n(t, \vec{r}) \vec{v} = \frac{1}{m} \int \vec{p} f(t, \vec{r}, \vec{p}) d^3 \vec{p}. \quad (38)$$

Учитывая структуру распределения по импульсам в (36) и записывая формально

$$\vec{p} = (\vec{p} - \int_s^t \vec{F} d\tau - \vec{p}) + \int_s^t \vec{F} d\tau + \vec{p},$$

вычислим интеграл (38):

$$\vec{J} = \frac{n(t, \vec{r})}{m} (\vec{p} + \int_s^t \vec{F} d\tau). \quad (39)$$

Здесь, как и в (36),  $\vec{p} = m\vec{v}(s) = m\vec{v}_e$ , т.е. отсчет импульса частицы производится от начального значения гидродинамической скорости, умноженной на массу частицы. Сила  $\vec{F}$ , входящая в соотношения (34), (36) и (39), соответствует самосогласованному потенциалу, учитывающему коллективные эффекты системы - температуру  $T_0$ , концентрацию числа частиц  $n(t, \vec{r})$  и в общем случае распределение гидродинамических скоростей. Построение такого потенциала имеет смысл проводить для каждой конкретной системы в однозначно фиксированных физических условиях. Здесь же ограничимся простейшим случаем, пренебрегая коллективными эффектами в явном виде. Это необходимо сделать для того, чтобы увидеть связь волновой функции (34) с реальными явлениями.

Если речь идет о сверхпроводнике, на который воздействует лишь внешнее магнитное поле  $\vec{H}$ , то в самом сверхпроводнике можно принять

$$\vec{F} = 2e\vec{E} = -\frac{2e}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - 2e \text{grad} \varphi, \quad (40)$$

где  $\vec{E}$  - напряженность электрического поля, а  $2e$  - заряд куперовской пары. Здесь подразумевается, что

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}, \quad (41)$$

т.е. векторный потенциал  $\vec{A}$  соответствует магнитной индукции  $\vec{B}$  в пределах самого сверхпроводника, а не внешнему магнитному полю  $\vec{H}$ . Ясно, что индукция  $\vec{B}$  есть проявление поля  $\vec{H}$  через коллективные характеристики системы. Но здесь они, как было отмечено, не учитываются в явном виде. Поскольку на сверхпроводник воздействует только внешнее поле  $\vec{H}$ , то, учитывая мобильность куперовских пар в сверхпроводящем состоянии, можно принять, что скалярный потенциал  $\varphi = \text{const}$ . Но тогда

$$\vec{F} = -\frac{2e}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (42)$$

Принимая в (39), что  $n(t, \vec{r})$  - концентрация куперовских пар, а  $m = 2m_e$  - их массы, равные удвоенным массам электронов, и подставляя (42) в (39), запишем:

$$\vec{J} = \frac{n(t, \vec{r})}{2m_e} [2m_e \vec{v}_0 - \frac{2e}{c} (\vec{A}(t) - \vec{A}(s))]. \quad (43)$$

Значение векторного потенциала  $\vec{A}$  в момент времени  $t=s$  может быть выбрано произвольно, поскольку это не повлияет на значение силы (42), действующей на куперовскую пару. В частности, можно положить:

$$2m_e \vec{v}_0 + \frac{2e}{c} \vec{A}(s) = 0. \quad (44)$$

Таким образом, соотношение (43) записывается в виде:

$$\vec{J} = -n(t, \vec{r}) \frac{e}{m_e c} \vec{A}(t). \quad (45)$$

Соответственно для плотности потока электронов запишем:

$$\vec{J}_e = 2e\vec{J} = -n(t, \vec{r}) \frac{2e^2}{m_e c} \vec{A}(t). \quad (46)$$

Как видно, применение макроскопической волновой функции (34) и следующего из нее соотношения (39) даже в таких упрощенных условиях, отмеченных выше, приводит к весьма адекватному реальности уравнению Лондонов (46). С другой стороны, отсюда же видно, что если уделить должное внимание детализации зависимости силы  $\vec{F}$ , действующей, например, на куперовскую пару, от макроскопических характеристик системы, то вместо уравнения Лондонов (46) возникнет иное уравнение, содержащее в себе много больше информации. Конечно, при этом обобщенное уравнение должно содержать в себе уравнение (46) как частный или предельный случай. Ясно также, что должна быть применена волновая функция в более общем виде, нежели (34).

Далее, волновые функции (33) и (34) вполне соответствуют принятому в теории сверхтекучести и сверхпроводимости алгоритму квантования:

$$\frac{1}{\hbar c} \oint \nabla \varphi d\vec{r} = 2\pi n. \quad (47)$$

Здесь  $C$  - замкнутый контур, охватывающий отверстие, например, в сверхпроводнике;  $d\vec{r}$  - элемент контура;  $n$  - принимает положительные целочисленные значения. Действительно, добавка величины (47) к действию входящему в (33)-(34), никак не изменит эти волновые функции. Исходя из смысла волновых функций (33)-(34), естественно считать, что интеграл в соотношении (47) соответствует условно замкнутой траектории частицы (в частности, куперовской пары). Детализации алгоритма квантования (47) конечно, следует уделить особое внимание, учитывая самосогласованный потенциал и перекрытие волновых функций вида (33)-(34) для соседних квантовых состояний.



Наконец, учитывая изложенное, следует рассмотреть достаточно общий вариант макроскопической волновой функции. Ранее, ради удобства, применялся формальный сдвиг в значении укороченного действия  $S_0$  для того, чтобы изменить точку отсчета движения частицы, не изменяя его динамики. Теперь же запишем волновую функцию (29) в виде:

$$\Psi_M = \int \varphi_0(\xi) \psi_M(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}) d\xi, \quad d\xi = d^3\vec{x} d^3\vec{p}. \quad (48)$$

Здесь, в соответствии с (31), формально положено  $S_0(\vec{x}_0, \vec{x}) = 0$  и подразумевается, что  $\varphi_0$  - действительная и положительно определенная величина, отнесенная к макроэлементу с характерным размером  $\delta$ . Комплексно сопряженная волновая функция

$$\Psi_M^* = \int \varphi_0^*(\xi) \psi_M^*(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}) d\xi. \quad (49)$$

Прежде чем констатировать выполнение условия (16), следует обратить внимание на общие свойства функций  $\Psi_M$  и  $f$ . Принцип суперпозиции, отражающий аддитивность процессов, действует как в физической кинетике, определяя структуру функции  $f$ , так и в квантовой теории для волновых функций  $\Psi_M$ , что и учитывают, в частности, выражения (48)-(49). При подстановке функций (48)-(49) в условие (16) возникнет произведение интегралов:

$$f(t, \vec{r}, \vec{p}) = \int d\xi \int d\xi' \varphi_0(\xi) \varphi_0^*(\xi') \psi_M^*(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}) * \psi_M(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}). \quad (50)$$

Свойство аддитивности структуры функции  $f$ , которая является положительно определенной, может реализоваться лишь в том случае, если под интегралом (50) останутся квадраты модулей функций

$$|\psi_M(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p})|^2$$

т.е. произойдет диагонализация интеграла (50). Кроме того, как функции  $\Psi_M$  и  $\psi_M$ , так и функции  $\Psi_M^*$  и  $\psi_M^*$  относятся к одной и той же частице, движущейся по классической траектории, которая реализуется с конечной вероятностью; но это эквивалентно равенству  $\xi = \xi'$ , т.е. диагонализации интеграла (50). Учитывая приведенные аргументы, необходимо принять формальное соотношение

$$\varphi_0(\xi) \varphi_0^*(\xi') = n_0(\xi) \delta(\xi' - \xi). \quad (51)$$

Но тогда

$$f(t, \vec{r}, \vec{p}) = \int d\xi n_0(\xi) \psi_M^*(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}) \psi_M(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}), \quad (52)$$

или, вспоминая соотношение (7), запишем:

$$f(t, \vec{r}, \vec{p}) = \int d\xi n_0(\xi) P(s, \vec{x}, \vec{p}; t, \vec{r}, \vec{p}). \quad (53)$$

Функция (53) представляет собой типичную функцию плотности вероятности физической кинетики<sup>14</sup>, удовлетворяющую однородному уравнению переноса Больцмана (8), что и подчеркивает приемлемость соотношения (51).

Интегрируя функцию (53) по импульсам  $\vec{p}$ , найдем:

$$\begin{aligned} n(t, \vec{r}) &= \int f(t, \vec{r}, \vec{p}) d^3\vec{p} = \\ &= \int d\xi n_0(\xi) [\pi(2\sigma_0^2 + X_0)]^{-3/2} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u} d\tau - \vec{x})^2}{2\sigma_0^2 + X_0}\right]. \end{aligned} \quad (54)$$

В общем случае величина  $\sigma_0^2$  может быть функцией переменных  $\xi$ . Плотность потока частиц теперь можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \vec{J} &= n(t, \vec{r}) \vec{v} = \frac{1}{m} \int \vec{p} f(t, \vec{r}, \vec{p}) d^3\vec{p} = \\ &= \frac{1}{m} \int d\xi n_0(\xi) \left(\vec{p} + \int_s^t \vec{F}(\tau, \xi) d\tau\right) [\pi(2\sigma_0^2 + X_0)]^{-3/2} * \\ &\quad * \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \int_s^t \vec{u} d\tau - \vec{x})^2}{2\sigma_0^2 + X_0}\right]. \end{aligned} \quad (55)$$

Здесь сила  $\vec{F}(\tau, \xi)$  - функция макропеременных  $\xi = (\vec{x}, \vec{p})$ . Таким образом, вместо локального соотношения (39) возникает интегральное уравнение (55). Если в соотношении (55) пренебречь зависимостью силы от макропеременных  $\xi$ , а также, аналогично (32), положить

$$n_0(\xi) = n_0(\vec{x}) \delta(\vec{p} - \vec{p}_0), \quad (56)$$

то снова приходим к соотношению вида (39), из которого следует уравнение Лондонов (46). Нетрудно видеть, что из соотношения (55) следуют уравнения типа Пиппарда, а также Рейтера и Зондхеймера<sup>13</sup>. Однако конкретный вид уравнений, вытекающих из (55), будет существенно отличаться от только что упомянутых, сохраняя при этом их смысл.

#### Заключение

Уже имеющиеся теоретические разработки, применяемые для систематизации экспериментальных данных о явлениях сверхтекучести и сверхпроводимости, показывают, что макроскопическая волновая функция даже в простейших постулированных формах позволяет осмыслить немало наблю-

даемых процессов. Макроскопические волновые функции общего вида удовлетворяют уравнениям (15) и (30), которые однозначно соответствуют уравнению (11) и исходному уравнению (1). Конкретные варианты волновых функций, приведенные в данной работе, показывают, что общая структура макроскопических волновых функций (13), (29) и (17) вполне реальна.

#### Литература

1. Савельев А.Е. ОИЯИ, Р17-91-269, Дубна, 1991.
2. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Механика. - М.: "Гос. изд. физ.-мат. лит.", 1958 - 206 с.
3. Тилли Д.Р., Тилли Дж. Сверхтекучесть и сверхпроводимость. - М.: "Мир", 1977. - 304 с.
4. Савельев А.Е. Физическая кинетическая теория и физико-химические технологии, ч. 1, ВИНТИ, № 2631 - Ка 89, 19.04.89 - 141 с.

Рукопись поступила в издательский отдел  
14 октября 1991 года.