Рассеяние волн в фазовом пространстве, квантовая механика и необратимость

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.

Нулевым (обратимым) приближением к рассматриваемой модели по большому параметру сопротивления среды оказывается 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 Шрёдингера, учитывающее диссипацию процесса в исходной модели и объясняющее декогеренцию волновой функции.

Ключевые слова: квантовая механика; уравнение Крамерса; волны в фазовом пространстве; диффузионное рассеяние; асимптотические решения; декогеренция.

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. Этот процесс является необратимым. 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. Полученное приближения медленного процесса является обратимым. Таким образом, был предъявлен пример необратимого процесса (тепловое рассеяние волн в фазовом пространстве), для которого показано, что стандартное обратимое квантово-механическое описание движения частицы возникает в виде асимптотического описания этого процесса в нулевом приближении.

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. В результате выводится модифицированное уравнение Шрёдингера, учитывающее диссипацию процесса.

Статья состоит из четырех разделов и приложения.

В следующем разделе приводится постановка задачи, а также обобщенное уравнение Крамерса для процесса теплового рассеяния волн на фазовом пространстве и свойства операторов, входящих в 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. Показано, что следствием полученного 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 комплекснозначной 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 $0, -1, -2, \ldots$ Соответственно, оператор B' представляется в виде:*

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

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:

$$P_k P_k = P_k, \quad P_k P_{k'} = 0 \quad \textit{при} \quad k \neq k', \quad P_k B' = B' P_k = -k P_k \tag{9}$$

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

где E — тождественный оператор.

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

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

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

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

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

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

Теорема 2. *Операторы проекции P_k имеют вид:*

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

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

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

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

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

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

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

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

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 композиции интеграла Фурье по x' и обратного преобразования Фурье:

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

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

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:

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

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 (отличающийся лишь несущественными числовыми множителями от формулы (13) теоремы 1):

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

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

$$\frac{1}{(2\pi)^{n/2}}\frac{1}{k_1!}\,...\frac{1}{k_n!}\int_{R^n}H^{k'}_{k'_1...k'_n}[p']H^k_{k_1...k_n}[p']e^{-\frac{p'^2}{2}}dp'=\delta_{k'_1k_1}...\delta_{k'_nk_n}, \tag{26}$$

где $\delta_{k'_ik_i}$ 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:

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

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:

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

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:

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

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 $\varphi[x,p,0]$ приближается за время порядка $1/\gamma$ к функции $\varphi_0 = P_0\varphi$, которая имеет вид:

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

$$\text{где} \quad \psi[x] = \left(\frac{1}{4\pi k_B T m}\right)^{n/4} \int\limits_{R^n} \varphi[x,p,0]dp \quad \text{и} \qquad (31)$$

$$\chi[x-y] = \left(\frac{k_B T m}{\pi\hbar^2}\right)^{n/4} e^{-k_B T m (x-y)^2/(2\hbar^2)}. \qquad (32)$$

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 $\psi[y]$, зависящими только от координат $y \in R^n$.

2) Медленное движение, начинающееся в момент времени $t = 0$ с функции $\varphi_0[x,p]$ вида (30) с ненулевой функцией $\psi[y] = \psi[y,t]|_{t=0}$, происходит по подпространству таких функций и параметризуется функцией $\psi[y,t]$, зависящей от координат и 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:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2\psi}{\partial y_k^2}\Big) + V[y]\psi - \frac{k_B T}{2} n\psi + O(\gamma^{-1}). \qquad (33)$$

Коэффициент в формуле (32) выбран так, чтобы отображение, заданное формулой (30), сохраняло стандартное скалярное произведение гильбертовых пространствах функций ψ и φ_0.

Доказательство первой части теоремы 3 приведено в [3]. Доказательство второй части этой теоремы приведено в [1] . (Эта формула будет получена также в приложении к данной статье при доказательстве теоремы 4.)

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:

$$B'\varphi = \frac{1}{\gamma}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} - A'\varphi\right). \tag{34}$$

Будем искать решение этого уравнения в виде:

$$\varphi = \varphi_0 + \gamma^{-1}\varphi_1 + \gamma^{-2}\varphi_2 + ... \tag{35}$$

Подставим выражение (35) в уравнение (34) и выпишем уравнения для коэффициентов при одинаковых степенях γ^{-1}. Получим:

$$\text{для } \gamma^0: \qquad B'\varphi_0 = 0; \tag{36}$$

$$\text{для } \gamma^{-1}: \qquad B'\varphi_1 = \frac{\partial\varphi_0}{\partial t} - A'\varphi_0; \tag{37}$$

$$\text{для } \gamma^{-2}: \qquad B'\varphi_2 = \frac{\partial\varphi_1}{\partial t} - A'\varphi_1; ... \tag{38}$$

Из уравнения (36) 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 (37) оператор проекции P_0. С учетом равенств $P_0B' = 0$ и $\varphi_0 = P_0\varphi_0$ получим:

$$0 = \frac{\partial\varphi_0}{\partial t} - P_0A'P_0\varphi_0, \quad \text{то есть} \quad \frac{\partial\varphi_0}{\partial t} = P_0A'P_0\varphi_0. \tag{39}$$

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

При условии выполнения равенства (39) уравнение (37) имеет решение, которое мы представим в виде:

$$\varphi_1 = \varphi_{1,0} + f_1, \quad \text{где } P_0 f_1 = 0, \quad \varphi_{1,0} = P_0\varphi_1 = P_0\varphi_{1,0},$$
$$f_1 = B^{'-1}(P_0 A' P_0 \varphi_0 - A' P_0 \varphi_0), \tag{40}$$

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:

$$B^{'-1} = -\sum_{k=1}^{\infty} k^{-1} P_k. \tag{41}$$

Отсюда и из свойств операторов проекции (9) следует, что $P_0 B^{'-1} = 0$ и $P_k B^{'-1} = -k^{-1} P_k$.

С учетом равенства $B^{'-1} P_0 = 0$ выражение для f_1 в формуле (40) принимает вид

$$f_1 = -B^{'-1} A' P_0 \varphi_0. \tag{42}$$

Подставим выражение $\varphi_1 = \varphi_{1,0} + f_1$ формулы (40) в равенство (38) и применим слева к обеим частям равенства (38) 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 (42) после перечисленных подстановок и раскрытия скобок получим:

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

$$0 = \frac{\partial \varphi_{1,0}}{\partial t} - P_0 A' P_0 \varphi_{1,0} + P_0 A' B^{'-1} A' P_0 \varphi_0. \tag{43}$$

Сложим, теперь, уравнения (39) и (43), умноженные, соответственно, на 1 и γ^{-1}. Тогда для функции $\varphi_{\le 1,0}$, по определению заданной равенством

$$\varphi_{\le 1,0} \overset{def}{=} \varphi_0 + \gamma^{-1} \varphi_{1,0}, \tag{44}$$

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

$$0 = \frac{\partial \varphi_{\le 1,0}}{\partial t} - P_0 A' P_0 \varphi_{\le 1,0} + \gamma^{-1} P_0 A' B^{'-1} A' P_0 \varphi_{\le 1,0} + O[\gamma^{-2}]. \tag{45}$$

Соответственно, для функции $\varphi_{\leq 1} \stackrel{def}{=} \varphi_0 + \gamma^{-1}\varphi_1$, учитывающей только два первых слагаемых в разложении (35) для φ, используя равенство $\varphi_1 = \varphi_{1,0} + f_1$ в выражении (40) и подставив в него выражение (42) для f_1, получаем следующее равенство с точностью до слагаемых порядка γ^{-1}:

$$\varphi_{\leq 1} \;\; = \;\; \varphi_{\leq 1,0} - \gamma^{-1} B'^{-1} A' P_0 \varphi_{\leq 1,0} + O[\gamma^{-2}] \qquad (46)$$

Так как $\varphi_{\leq 1,0} = P_0 \varphi_{\leq 1,0}$, то есть $\varphi_{\leq 1,0}$ — собственная функция оператора B' с собственным значением, равным 0, то в соответствии с формулами (16) и (17) и теоремой 2 она полностью определяется функцией $\psi \stackrel{def}{=} S_{\bar{0}}[\varphi_{\leq 1,0}]$ по формуле $\varphi_{\leq 1,0} = I_{\bar{0}}[\psi]$, 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 $\varphi_{\leq 1,0}$.

Чтобы получить ψ-представление уравнения (45), подставим в него вместо функции $\varphi_{\leq 1,0}$ 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:

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

Получим:

$$0 \;\; = \;\; \frac{\partial \psi}{\partial t} - S_{\bar{0}} A' I_{\bar{0}} \psi + \gamma^{-1} S_{\bar{0}} A' B'^{-1} A' I_{\bar{0}} \psi + O[\gamma^{-2}]. \qquad (47)$$

Соответственно, выражение (46) функции $\varphi_{\leq 1}[x', p']$, представленное через функцию $\psi[x']$, без учета слагаемых порядка γ^{-2} имеет вид:

$$\varphi_{\leq 1} \;\; = \;\; I_{\bar{0}}[\psi] - \gamma^{-1} B'^{-1} A' I_{\bar{0}}[\psi] + O[\gamma^{-2}] \qquad (48)$$

Заметим, что из этого равенства следует, что $S_{\bar{0}} \varphi_{\leq 1} = \psi$. Таким образом, выражение (48) и оператор $S_{\bar{0}}$ устанавливают взаимно обратные биекции между множеством функций $\varphi_{\leq 1}[x', p']$ и множеством функций $\psi[x']$. Таким образом, функция $\psi[x']$ является также и представлением функции $\varphi_{\leq 1}[x', p']$ по формуле (48). При этом функция $\psi[x']$ меняется во времени в соответствии с уравнением (47).

Итак, из уравнения (47) 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):

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = S_{\bar{0}}A'I_{\bar{0}}\psi - \gamma^{-1}S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}\psi + O[\gamma^{-2}] \tag{49}$$

(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 $\varphi_0[x,p]$, представленной 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:*

$$\begin{aligned} \hat{H}_1\psi \;=\; & -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial^2\psi}{\partial y_k^2} + V\psi - \frac{k_BTn}{2}\psi + \frac{i\gamma^{-1}}{4}\Big(\sum_{j=1}^{n}\frac{\hbar}{m}\frac{\partial^2 V}{\partial y_j^2} - \frac{(k_BT)^2 n}{\hbar}\Big)\psi + \\ & + O[\gamma^{-2}]. \end{aligned} \tag{50}$$

Доказательство теоремы 4 приведено в приложении 1.

Так как для описания поведения системы существенны только разности между собственными значениями оператора, постоянными слагаемыми в операторах $\hat{H}$ и $\hat{H}_1$ теорем 3 и 4 можно пренебречь . 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:

$$E_n \;=\; E_n^{(0)} + \gamma^{-1}E_n^{(1)} + O(\gamma^{-2}) \tag{51}$$

$$\psi_n \;=\; \psi_n^{(0)} + \gamma^{-1}\sum_{\substack{k \\ k\neq n}} c_{nk}\psi_k^{(0)} + O(\gamma^{-2}). \tag{52}$$

Подставим эти выражения в равенство (50). 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

$$\langle \psi_k; \psi_m \rangle = \int\limits_{R^n} \psi_k[y]\psi_m^*[y]dy, \tag{53}$$

получим:

$$E_n^{(1)} = \frac{i\hbar}{4m}\langle \Delta^2 V \psi_n^{(0)}; \psi_n^{(0)} \rangle \tag{54}$$

$$c_{nk} = \frac{i\hbar}{4m}\frac{\langle \Delta^2 V \psi_n^{(0)}; \psi_k^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \tag{55}$$

$$\text{где} \quad \Delta^2 V = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 V}{\partial y_k^2}. \tag{56}$$

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 экспоненциально 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 $\psi_n[t]$ экспоненциально меняются с разными скоростями, то через достаточно большое время состояние $\psi[t]/|\psi[t]|$ 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 $a_k\exp(-iE_k^{(1)t/\hbar})$ становится больше величины $a_{k_1}\exp(-iE_{k_1}^{(1)}t/\hbar)$, где $-iE_{k_1}^{(1)}$ — следующее по величине 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 (52) и (55) следует, что собственные функции ψ_n оператора $\hat{H}_1$ в общем случае не ортогональны друг другу. Имеем:

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

Пусть $\varphi_n[x,p]$ и $\varphi_k[x,p]$ — волновые функции на фазовом пространстве, соответствующие по формуле (48) функциям ψ_n и ψ_k. В соответствии с предположениями модели квадрат модуля от скалярного произведения нормированных функций $\varphi_n[x,p]$ 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 (48) следует, что эта вероятность ненулевая, если $c_{nk}\neq 0$. Исходя из этого можно построить марковский процесс переходов между собственными состояниями оператора Гамильтона и найти стационарное смешанное состояние, соответствующее состоянию теплового равновесия системы. Это уже тема следующей статьи.

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, дополненное 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 (48). 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:

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

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

$$(\Delta E_j)^2 = \int\limits_{R^{2n}} (H[x', p'] - E_j)^2\varphi_j[x', p']\varphi_j^*[x', p']dx'dp'. \tag{58}$$

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.

Другие направления исследований по данной теме можно найти в [13].

Приложение. Доказательство теоремы 4

Для доказательства теоремы 4 нужно вычислить правую часть уравнения (49) и перейти к исходным координатам.

Первое слагаемого в правой части этого уравнения имеет вид:

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

Вид оператора $S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}$, стоящий в уравнении (49) с множителем γ^{-1}, предстоит вычислить.

Для начала преобразуем это выражение, используя полученное ранее (41) 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:

$$S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}} = -\sum_{k=1}^{\infty} k^{-1}S_{\bar{0}}A'P_kA'I_{\bar{0}} = -\sum_{\substack{k_1,\ldots,k_n=0\\ k_1+\ldots+k_n=k\geq 1}}^{\infty} k^{-1}S_{\bar{0}}A'I_{k_1,\ldots,k_n}S_{k_1,\ldots,k_n}A'I_{\bar{0}}. \tag{59}$$

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,

$$A'I_{k_1,\ldots,k_n}\psi = \frac{k_BT}{\hbar}\Big(\sum_{j=1}^{n}\Big(\frac{\partial V'}{\partial x'_j}\frac{\partial}{\partial p'_j} - p'_j\frac{\partial}{\partial x'_j}\Big) - i\Big(V' - \sum_{j=1}^{n}\frac{p_j'^2}{2}\Big)\Big)\circ \tag{60}$$
$$\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\psi[x'']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''.$$

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:

$$\frac{\partial}{\partial p'_j}\left(H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}\right) \overset{def}{=} -H^{k+1}_{k_1\ldots k_j+1\ldots k_n}[p'-s']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}, \tag{61}$$

$$\frac{\partial}{\partial x'_j}e^{is'(x'-x'')} = is'_je^{is'(x'-x'')}, \tag{62}$$

$$p_j'^2 = ((p'_j-s'_j)^2-1)+2p'_js'_j-s_j'^2+1 = H_2[p'_j-s'_j]+2p'_js'_j-s_j'^2+1, \tag{63}$$

получим:

$$A'I_{k_1,\ldots,k_n}\psi = \frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial V'}{\partial x'_j}H^{k+1}_{k_1\ldots k_j+1\ldots k_n}[p'-s'] -$$
$$-i\sum_{j=1}^{n}p'_js'_jH^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] - iV'[x']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] +$$
$$+\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}(H_2[p'_j-s'_j]+2p'_js'_j-s_j'^2+1)H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']\Big)\times$$
$$\times\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \tag{64}$$

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

$$A'I_{k_1,\ldots,k_n}\psi = \frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\frac{1}{k_1!}\cdots\frac{1}{k_n!}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial V'}{\partial x'_j}H^{k+1}_{k_1\ldots k_j+1\ldots k_n}[p'-s'] -$$
$$-iV'[x']H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] + \frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}H_2[p'_j-s'_j]H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s'] -$$
$$-\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}(s_j'^2-1)H^k_{k_1\ldots k_n}[p'-s']\Big)\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \tag{65}$$

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

$$S_{\bar{0}}A'I_{\bar{0}}[\psi] = \frac{k_BT}{\hbar}\Big(-iV'\psi + \frac{i}{2}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_j'^2} + \frac{in}{2}\psi\Big); \tag{66}$$

$$S_{\bar{0}}A'I_{k_1,...,k_n}[\psi] = \frac{i}{2}\frac{k_BT}{\hbar}\psi, \quad \textit{когда} \quad k = k_1 + ... + k_n = 2$$

$$\textit{и только один из} \quad k_1, ..., k_n \quad \textit{равен 2}; \tag{67}$$

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

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 (65) оператора $A'I_{k_1,...,k_n}$. Для этого воспользуемся формулой ортогональности многочленов Эрмита (26) и тем, что $H_{\bar{0}}^0 = 1$. Отсюда получаем, что интеграл по p от первого слагаемого выражения (65) 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 (59) 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:*

$$S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi] = \frac{k_BT}{\hbar}\Big(-i\frac{\partial^2 V'}{\partial x_j'^2}\psi + i\psi\Big) \tag{68}$$

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

$$S_{k_1,...,k_n}[\varphi] \overset{def}{=} \int\limits_{R^n} H^k_{k_1...k_n}\left[p' + \frac{i\partial}{\partial x'}\right]\varphi[x', p']dp' = \int\limits_{R^n} H_2\Big(p_j' + \frac{i\partial}{\partial x_j'}\Big)\varphi[x', p']dp'. \tag{69}$$

Отсюда и из формулы (65) для $A'I_{\bar{0}}$ получим:

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

Учитывая, что по определению многочлена Эрмита

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

и равенства $\quad i\dfrac{\partial}{\partial x'_j}e^{is'(x'-x'')} = -s'_j e^{is'(x'-x'')},\quad$ получим:

$$S_{k_1,\dots,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi] = \frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}} H_2\left(p'_j - s'_j\right)\times$$
$$\times\Big(-\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial V'[x']}{\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'}-s'_{j'}] - iV'[x'] + \frac{i}{2}\sum_{j'=1}^{n}H_2[p'_{j'}-s'_{j'}] -$$
$$-\frac{i}{2}\sum_{j'=1}^{n}({s'}^2_{j'}-1)\Big)\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''dp' + \tag{71}$$
$$+\frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^{3n/2}}\int\limits_{R^{3n}}\Big(-2i(p'_j-s'_j)\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial^2 V'[x']}{\partial x'_j\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'}-s'_{j'}] +$$
$$+\sum_{j'=1}^{n}\frac{\partial^3 V'[x']}{\partial^2 x'_j\partial x'_{j'}}H_1[p'_{j'}-s'_{j'}] + 2(p'_j-s'_j)\frac{\partial V'[x']}{\partial x'_j} + i\frac{\partial^2 V'[x']}{\partial {x'_j}^2}\Big)\times$$
$$\times\psi[x'']e^{-\frac{(p'-s')^2}{2}}e^{is'(x'-x'')}ds'dx''dp' \tag{72}$$

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:

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

$$+\frac{k_BT}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^n}\int\limits_{R^{2n}}\Big(-2i\frac{\partial^2 V'[x']}{\partial {x'_j}^2}+0+0+i\frac{\partial^2 V'[x']}{\partial {x'_j}^2}\Big)\psi[x'']e^{is'(x'-x'')}ds'dx''. \quad (73)$$

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

$$S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi]=\frac{k_BT}{\hbar}\Big(-i\frac{\partial^2 V'[x']}{\partial x_j'^2}\psi[x']+i\psi[x']\Big). \quad (74)$$

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 (59). По лемме 1 слагаемые в формуле (59) могут быть ненулевыми только, если $k_j=2$ для некоторого $j\in\{1,...,n\}$, а остальные $k_1,...,k_n$ равны 0. Леммы 1 и 2 дают выражения операторов $S_{\bar{0}}A'I_{k_1,...,k_n}$ и $S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}$ в этом случае, и по формуле (59) имеем:

$$\begin{aligned}
S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}}[\psi] &= -\sum_{\substack{k_1,...,k_n=0\\ k_1+...+k_n=k\geq 1}}^{\infty}k^{-1}S_{\bar{0}}A'I_{k_1,...,k_n}S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi]=\\
&= -\sum_{\substack{k_1,...,k_n\in\{0;2\}\\ k_1+...+k_n=2}}2^{-1}S_{\bar{0}}A'I_{k_1,...,k_n}S_{k_1,...,k_n}A'I_{\bar{0}}[\psi]\\
&= -\sum_{j=1}^{n}2^{-1}\frac{i}{2}\frac{k_BT}{\hbar}\frac{k_BT}{\hbar}\Big(-i\frac{\partial^2 V'}{\partial x_j'^2}\psi+i\psi\Big)\\
&= -\frac{1}{4}\Big(\frac{k_BT}{\hbar}\Big)^2\Big(\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 V'}{\partial x_j'^2}\psi-n\psi\Big). \quad (75)
\end{aligned}$$

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

$$S_{\bar{0}}A'B'^{-1}A'I_{\bar{0}})[\psi]=-\frac{1}{4}\Big(\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 V}{\partial x_j^2}-\Big(\frac{k_BT}{\hbar}\Big)^2n\Big)\psi. \quad (76)$$

Таким образом, мы вычислили оператор во втором слагаемом в уравнении (49). 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.)

[13] Beniaminov E.M. *Diffusion Scattering of Waves is a Model of Subquantum Level.*//Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 8, No. 25, 195-210 (2011) Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 11, No. 30, 35–48 (2014) http://www.ejtp.com/articles/ejtpv11i30p35.pdf.