Модель объединения классической и квантовой механики на основе уравнения Клейна-Крамерса

Евгений Михайлович Бениаминов,

зав. кафедрой математики, РГГУ, Москва

http://beniaminov.rsuh.ru

email: ebeniamin@yandex.ru

март 2016

Цель доклада

- Представить пример математической модели, основанной на естественных предположениях, в которой квантовое или классическое поведение моделируемого процесса проявляется в зависимости от значений параметров модели.

Может быть эта модель сможет послужить возникновению новых альтернатив философских взглядов на квантовый мир.

Постановка задачи

Можно считать, что мы рассматриваем движение малой частицы в тепловой среде:

- Рассматривается классическая частица, состояние которой задается координатой, импульсом и некоторыми параметрами, задающими внутреннее состояние частицы.
- Частица движется под действием поля сил в среде, находящейся в тепловом равновесии при некоторой температуре.
- Среда оказывает сопротивление движению частицы с силой пропорциональной скорости движения частицы и случайным образом меняет скорость движения частицы при столкновении частицы с частицами среды. То есть частица находится в броуновском движении.
- Предполагается, что внутреннее состояние частицы описывается некоторым параметром, величина которого совершает гармонические колебания с **большой постоянной частотой $\omega \gg 1$**.

Задача:

*нужно найти **распределение в фазовом пространстве энергии внутренних колебаний частицы,** для частицы, находящейся в броуновском движении при движении в тепловой равновесной среде и под действием поля сил, заданным потенциальной функцией.*

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

Результаты работы

- Рассматривается процесс диффузионного (теплового) рассеяния волновой функции, заданной в виде комплекснозначной функции на фазовом пространстве. Приводится модифицированное уравнение Клейна-Крамерса, описывающее это явление.
- Показывается, что в случае большого удельного сопротивления среды процесс проходит несколько стадий. В течение первой быстрой стадии функция, задающая состояния процесса, переходит в одно из квазистационарных состояний. Во второй медленной стадии функция уже меняется в подпространстве квазистационарных состояний в соответствии с уравнением Шредингера.
- Далее диссипация процесса приводит к тому, что любая суперпозиция состояний приходит к одному из собственных состояний оператора Гамильтона (декогеренции). Смешанное состояние теплового равновесия (состояние Гиббса) возникает на последней стадии за счет теплового воздействия среды и случайных переходов между собственными состояниями оператора Гамильтона.
- Если, наоборот, сопротивление среды на единицу массы частицы мало, то в рассматриваемой модели плотность распределения энергии удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля, то есть процесс ведет себя как классическая система.

<u>Основной результат:</u> Обычные квантовые описания в этой модели возникают в результате асимптотики процессов диффузионных рассеяний волн большой частоты в фазовом пространстве.

Основные положения математической модели

Рассматривается модель волнового процесса, состояние которого в момент t описывается комплекснозначной функцией $\varphi(x,p,t)$ на фазовом пространстве R^6.

Предполагается, что:

- для функций, задающих состояние процесса, выполняется принцип суперпозиции на фазовом пространстве;
- так как энергия гармонических колебаний пропорциональна квадрату амплитуды колебаний, то плотность распределения $\rho(x,p)$ энергии внутренних колебаний частицы, находящейся в некоторой области фазового пространства, пропорциональна $|\varphi(x,p)|^2$.

В модели каждый комплексный вектор $\varphi(x,p)$ одновременно находится в 2-х движениях:

- Значение волны $\varphi(x,p)$ переносится по случайной траектории частицы, находящейся в броуновском движении, определенном тепловой диффузией и действием поля сил.
- Фаза волны меняется, кроме того, с постоянной скоростью $\omega >> 1$ в собственном времени в движущейся системе координат, связанной с частицей.

Уравнение Клейна-Крамерса (броуновское движение)

- Рассматриваемое броуновское движение в фазовом пространстве R^6, которое описывается стандартным классическим уравнением Клейна-Крамерса (1922 г.; исследование Крамерса, 1940 г.):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3} \left(\frac{\partial V}{\partial x_k} \frac{\partial f}{\partial p_k} - \frac{p_k}{m} \frac{\partial f}{\partial x_k} \right) + \gamma \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial p_k} \left(p_k f + kTm \frac{\partial f}{\partial p_k} \right),$$

где $f\,(x,p,t)$ – плотность вероятностей; $V(x)$ – потенциальная функция сил; m – масса частицы; $\gamma=\beta/m$ – коэффициент сопротивления среды на единицу массы; k – постоянная Больцмана; T – температура среды.

Это уравнение активно используется для задач химии и задач движения наночастиц.

Об изменении фазы для колебаний с большой постоянной частотой

Так как частота внутренних колебаний ω для частицы предполагается большой, то приходится учитывать замедление внутренних колебаний для частиц, двигающихся с разными импульсами (скоростями), то есть учитывать эффект релятивистской теории даже для частиц, движущихся с малыми скоростями.

- По формулам СТО собственное время $\tau = (Et - xp)/(mc^2)$ и

$$\varphi(x,p,t) = \varphi_0 \exp(-i\omega\tau) = \varphi_0 \exp\left(-i\frac{Et - xp}{\hbar}\right),$$

где $\boxed{\hbar \overset{def}{=} mc^2/\omega}$.

Поэтому при параллельном переносе вектора φ_0 из точки (x,p) на Δx при неизменном t с учетом синхронизации часов вектор φ_0 нужно умножить на $\exp(-i\Delta xp/\hbar)$.

Соответственно, оператор бесконечно малого сдвига $\partial/\partial x_k$ заменяется на $\partial/\partial x_k - ip_k/\hbar$. (Сдвиги частицы по импульсам и координатам не коммутируют из-за расхождения в фазах внутренних колебаний.)

Основное уравнение модели

- *Волновая функция φ(x,p,t) удовлетворяет уравнению:*

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\sum_{k=1}^{3}\left(\frac{\partial V}{\partial x_k}\frac{\partial\varphi}{\partial p_k}-\frac{p_k}{m}\left(\frac{\partial}{\partial x_k}-\frac{ip_k}{\hbar}\right)\varphi\right)-\frac{i}{\hbar}\left(mc^2+\sum_{k=1}^{3}\frac{p_k^2}{2m}+V\right)\varphi+\gamma B\varphi,$$

где $$B\varphi=\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial p_k}\left(\left(p_k+i\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}\right)\varphi+kTm\frac{\partial\varphi}{\partial p_k}\right). \qquad (1)$$

- Если в уравнении отбросить последнее слагаемое, то получим детерминированную составляющую процесса
- Последнее слагаемое описывает диффузионную составляющую процесса.
- Величина $\gamma=\beta/m$ >> 1 предполагается большой величиной. Быстрое движение в (1) приводит к стационарным решениям уравнения $\partial\varphi/\partial t=\gamma B\varphi$.

Стационарные решения диффузионного уравнения

Теорема 1. *Пусть φ(x,p,0) – произвольная функция, преобразование Фурье которой по x стремится к 0 при x → ∞. Решение φ(x,p,t) диффузионного уравнения (1) экспоненциально по времени (с показателем -γ) стремится к “квазистационарному”, которое после нормирования имеет вид:*

$$\varphi(x,p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\limits_{R^3}\psi(y)\chi(x-y)e^{-i(y-x)p/\hbar}dy,$$

где

$$\psi(y)=\int\limits_{R^3}\varphi(y,p,0)dp,$$

и $$\chi(x-y)=\left(\frac{kTm}{\pi\hbar^2}\right)^{3/4}e^{-\frac{kTm(x-y)^2}{2\hbar^2}}.$$ *То есть* $\chi^2(x\text{-}y)$ *–*

плотность нормального распределения с дисперсией $\hbar^2/(2kTm)$.

Уравнение Шредингера

Теорема 2. *Движение, описываемое дифференциальным уравнением (1) модели, распадается при $\gamma \to \infty$ на быстрое и медленное. За время порядка $1/\gamma$ начальное распределение $\varphi(x,p,0)$ переходит к квазистационарному теоремы 1. Подпространство квазистационарных распределений параметризуются волновыми функциями $\psi(x)$ от координат. Медленное движение происходит по этому подпространству и описывается уравнением Шредингера $i\hbar\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$, где*

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

– самосопряженный оператор, отличающийся от стандартного оператора Гамильтона слагаемыми-константами.

Обратимость квантовых процессов – это результат <u>приближенного описания процесса в 0-приближении.</u>

Описание декогеренции

<u>Теорема 3</u>. *Если $kT/(\gamma\hbar) \ll 1$, то любое решение уравнения (1) в общем случае экспоненциально по времени с показателем экспоненты пропорциональным $(kT)^2/(\gamma\hbar^2)$ стремится к одному из собственных состояний оператора Гамильтона.*

Таким образом, в процессе, описываемом уравнением (1) проявляется диссипация. Через время порядка $\gamma\,(\hbar/(kT))^2$ система переходит в одно из собственных состояний оператора $\hat{H}$ (явление декогеренции).

Смешанное состояние теплового равновесия возникает за счет переходов между собственными состояниями системы под действием тепловой среды.

Случай γ <<1

- В случае *γ=β/m <<1* (масса большая), когда в обобщенном уравнении Клейна-Крамерса

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\sum_{k=1}^{3}\left(\frac{\partial V}{\partial x_k}\frac{\partial\varphi}{\partial p_k}-\frac{p_k}{m}\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}\right)-\frac{i}{\hbar}\left(mc^2+V-\sum_{k=1}^{n}\frac{p_k^2}{2m}\right)\varphi+\gamma B\varphi,$$

диффузионным членом *γBφ* можно пренебречь, верна следующая теорема.

Теорема 4. *Если γ=β/m <<1, то ρ =* $\left|\varphi(x,p)\right|^2$ *= φφ* удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля*

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\sum_{k=1}^{3}\left(\frac{\partial V}{\partial x_k}\frac{\partial\rho}{\partial p_k}-\frac{p_k}{m}\frac{\partial\rho}{\partial x_k}\right).$$

В изолированной системе квантовые эффекты не возникают.

Функции распределения в фазовом пространстве в квантовой механике и в данной модели для $\psi(x)$

- Распределение в фазовом пространстве для волновой функции в квантовой механике задается функцией Вигнера. Она может принимать отрицательные значения. Сглаженная функция Вигнера по нормальному распределению называется функцией Хусими.
- В данной модели распределение, соответствующее волновой функции, автоматически является распределением Хусими с параметрами сглаживания, определяемыми параметрами среды.

Результаты работы

Рассматривается модель распределения энергии в фазовом пространстве для внутренних гармонических колебаний частицы, находящейся в броуновском движении.

- Процесс в рассматриваемой модели при $\gamma=\beta/m>>1$ раскладывается на быстрый (порядка $1/\gamma$), медленный и очень медленный (порядка γ). В результате быстрого движения система, начиная с произвольной функции на фазовом пространстве, переходит к функции, принадлежащей некоторому особому подпространству. Элементы этого особого подпространства определяются функциями, зависящими только от координат.
- Медленное движение, начинающееся с ненулевой функции из подпространства, происходит по подпространству и описывается обычным уравнением Шредингера.
- В результате очень медленного движения (порядка $\gamma\ (\hbar/(kT))^2$) система переходит в одно из собственных состояний оператора энергии (декогеренция). Далее происходит переход к смешанному состоянию теплового равновесия.
- Если, наоборот, сопротивление среды на единицу массы частицы мало, то в рассматриваемой модели плотность распределения энергии колебаний удовлетворяет классическому уравнению Лиувилля, что соответствует классическому процессу.

Основной результат

В представленной модели обычные **квантовые описания** возникают (как приближенные при *$\gamma=\beta/m>>1$*) в результате **асимптотики** процессов диффузионных рассеяний **волн** большой частоты **в фазовом пространстве и взаимодействия частицы со средой**.

Обратимость квантовых процессов – это результат приближенного описания необратимого процесса в 0-приближении по $1/\gamma$.

При $\gamma=\beta/m<<1$ в представленной модели изменение распределения вероятностей $\rho=\varphi\varphi^*$ описывается классическим уравнением Лиувилля, то есть процесс классический.

В изолированной системе квантовые эффекты не возникают.

Особенности рассматриваемой модели и открытые вопросы

- В предлагаемой модели $\hbar \overset{def}{=} mc^2 / \omega$ определяется массой частицы и частотой ее внутренних колебаний и, в общем случае, может быть произвольной.
- Более того, для взаимодействующих частиц у каждой частицы величина $\hbar$ может быть своей. То есть факт (?), что $\hbar$ является константой, не выводится в этой модели и требует дополнительных объяснений.
- В предлагаемой модели можно рассчитать промежуточный случай для малых частиц, когда поведение системы уже не классическое, но еще не квантовое (первое приближение к классическому поведению).

Ссылка

Тексты на русском языке и на английском языке на эту тему можно найти на странице:

http://beniaminov.rsuh.ru/Quantum_Mechanics.HTM

Список литературы

1. Бениаминов Е.М. Диффузионные процессы в фазовых пространствах и квантовая механика. // ДАН РФ, 2007, Т.416, №1, С. 31-35.
2. Beniaminov E.M. Scattering of waves in the phase space, quantum mechanics, and irreversibility. // Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 12, No. 32 (2015) 43–60. http://www.ejtp.com/articles/ejtpv12i32p43.pdf
3. Beniaminov E.M. Diffusion Scattering of Waves is a Model of Subquantum Level.//Electronic Journal of Theoretical Physics (EJTP) 11, No. 30, 35–48 (2014)

   http://www.ejtp.com/articles/ejtpv11i30p35.pdf
4. 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
5. Beniaminov E. M. Quantization as asymptotic of a diffusion process in the phase space.//Proc. Intern. Geom. Center 2(4), 7-50 (2009). http://arxiv.org/abs/0812.5116v1
6. Beniaminov E.M. A Method for Justification of the View of Observables in Quantum Mechanics and Probability Distributions in Phase Space. arXiv:quant-ph/0106112. 2001.