Письма в ЭЧАЯ. 2011. Т. 8, № 1(164). С. 7–18

ЭЛЕМЕНТЫ НЕРАВНОВЕСНОЙ $(\hbar, k)$-ДИНАМИКИ ПРИ НУЛЕВОЙ И КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

О. Н. Голубева [а,1], *А. Д. Суханов* [б,2]

[а] Российский университет дружбы народов, Москва

[б] Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Предложен метод, позволяющий развить элементы неравновесной $(\hbar, k)$-динамики без использования уравнения Шредингера. Он основан на обобщении уравнений Фоккера–Планка и Гамильтона–Якоби путем последовательного учета стохастического воздействия вакуума (квантотермостата). Показано, что неравновесные волновые функции при наличии квантово-тепловой диффузии в вакууме описывают приближение к состоянию обобщенного теплового равновесия как при нулевой, так и при конечных температурах. Они могут быть использованы как основа универсального описания процессов переноса.

We suggest a method which allows developing some elements of non-equilibrium $(\hbar, k)$-dynamics without use of Schrödinger equation. It is based on the generalization of Fokker–Planck and Hamilton–Jacobi equations. Sequential considering of stochastic influence of vacuum is realized in the quantum heat bath model. We show that at the presence of quantum-thermal diffusion non-equilibrium wave functions describe the process of nearing to generalized state of thermal equilibrium at zero and finite temperatures. They can be used as a ground for universal description of transport phenomena.

PACS: 05.10.Gg

1. ЭФФЕКТИВНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ КАК УНИВЕРСАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА

Как показано в развиваемой нами $(\hbar, k)$-динамике [1], обобщенной характеристикой стохастического воздействия вакуума в состоянии теплового равновесия служит специфический макропараметр — эффективное воздействие J_{eff}. Будучи связанной с фундаментальной комбинированной мировой постоянной $\varkappa \equiv \hbar/2k_B$, эта величина учитывает совместное квантовое и тепловое влияние окружения:

$$J_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\alpha_{\text{eff}}^2 + 1} = \frac{\hbar}{2}\Upsilon, \tag{1}$$

где

$$\alpha_{\text{eff}} \equiv \operatorname{sh}^{-1}\varkappa\frac{\omega}{T}; \quad \Upsilon \equiv \operatorname{cth}\varkappa\frac{\omega}{T}. \tag{2}$$

[1] E-mail: ogol@oldi.ru

[2] E-mail: ogol@mail.ru

В равновесном случае через J_{eff} выражаются наиболее важные макропараметры — эффективная температура, внутренняя энергия и эффективная энтропия [2]. В частности,

$$T_{\mathrm{eff}} = \frac{\omega}{k_B} J_{\mathrm{eff}}, \tag{3}$$

причем минимальное значение $T_{\mathrm{eff}}^{\min}$ отлично от нуля

$$T_{\mathrm{eff}}^{\min} \equiv \frac{\hbar\omega}{2k_B}. \tag{4}$$

Однако этим все не исчерпывается. Имеется возможность распространить эти представления на неравновесные процессы и продемонстрировать универсальную природу транспортных коэффициентов, связав их с характеристикой стохастического воздействия вакуума J_{eff}. В качестве модели явлений переноса рассмотрим самодиффузию, возникающую за счет флуктуаций плотности при однородной температуре. В качестве наводящего соображения обратимся к соотношению неопределенностей Шредингера для квантового осциллятора, находящегося в тепловом равновесии с вакуумом (квантотермостатом) [3],

$$(\Delta p_{\mathrm{eff}})^2\ (\Delta q_{\mathrm{eff}})^2 = \left[\frac{\hbar}{2}\Upsilon\right]^2, \tag{5}$$

где

$$(\Delta q_{\mathrm{eff}})^2 = (\Delta q_0)^2\Upsilon; \quad (\Delta p_{\mathrm{eff}})^2 = (\Delta p_0)^2\Upsilon.$$

При высоких температурах, когда $k_BT \gg \hbar\omega/2$, оно принимает вид

$$(\Delta p_T)^2\ (\Delta q_T)^2 = (mD_T)^2, \tag{6}$$

где

$$D_T = \frac{k_BT}{m\omega} \tag{7}$$

совпадает с коэффициентом чисто тепловой диффузии броуновского осциллятора [4, 5].

В связи с этим входящую в общем случае в правую часть (5) величину

$$D_{\mathrm{eff}} = \frac{\hbar}{2m}\Upsilon \equiv \frac{J_{\mathrm{eff}}}{m} \tag{8}$$

естественно назвать эффективным коэффициентом диффузии, имеющим смысл эффективного воздействия на единицу массы. В пределе низких температур, когда $k_BT \ll \hbar\omega/2$, самодиффузия в вакууме не прекращается, причем

$$D_{\mathrm{eff}} \to D_q \equiv \frac{\hbar}{2m}, \tag{9}$$

где D_q — квантовый коэффициент диффузии в холодном вакууме. Подобная величина ранее вводилась Нельсоном в версии квантовой механики, названной им стохастической механикой [6].

Исходя из формулы (8), через J_{eff} можно выразить и все остальные транспортные коэффициенты. В частности, эффективный коэффициент сдвиговой вязкости принимает вид

$$\eta_{\mathrm{eff}} = D_{\mathrm{eff}}\ \rho_m = \frac{J_{\mathrm{eff}}}{\mathcal{V}}, \tag{10}$$

где ρ_m — плотность массы; $\mathcal{V}$ — объем, так что η_{eff} имеет смысл удельного эффективного воздействия.

2. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА В ЛАГРАНЖЕВОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ

Формулировка квантовой механики, основанная на уравнении Шредингера, не поддается непосредственному обобщению на неравновесные процессы, ибо его решения являются обратимыми. В то же время при построении неравновесной $(\hbar, k)$-динамики мы предпочитаем, как и в равновесном случае, использовать язык волновых функций.

Чтобы найти неравновесные волновые функции без использования уравнения Шредингера, будем исходить из лагранжевой формулировки квантовой механики, более пригодной, на наш взгляд, для обобщения. При этом мы не будем исходно вводить плотность лагранжиана, зависящую от комплексных функций $\psi(q,t)$ и $\psi^*(q,t)$, играющих роль нерелятивистских полей. Вместо этого в качестве функциональных аргументов мы введем вещественные функции $\rho(q,t)$ и $\theta(q,t)$, представляющие собой плотность вероятности и фазу волновой функции, согласно соотношению

$$\psi(q,t) = \sqrt{\rho(q,t)}\exp\{i\theta(q,t)\}. \tag{11}$$

В качестве плотности лагранжиана в стандартной квантовой механике (при $T = 0$) выберем выражение

$$\mathcal{L}_0[\rho;\theta] = -\hbar\,\frac{\partial\theta}{\partial t}\rho - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\theta}{\partial q}\right)^2\rho - \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2\frac{1}{\rho} - U(q)\rho, \tag{12}$$

где $U(q)$ — потенциальная энергия.

Независимо варьируя функционал действия с $\mathcal{L}_0[\rho;\theta]$ по θ и ρ, получим систему уравнений

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}\left(\rho\frac{\hbar}{m}\,\frac{\partial\theta}{\partial q}\right) = 0; \tag{13}$$

$$\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\theta}{\partial q}\right)^2 + U(q) - \frac{\hbar^2}{8m}\left[\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2 + 2\frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{1}{\rho}\,\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)\right] = 0. \tag{14}$$

Эти уравнения совпадают с уравнениями, которые обычно [7] выводятся непосредственно из уравнений Шредингера для $\psi(q,t)$ и $\psi^*(q,t)$ при замене в них волновых функций согласно (11). Однако теперь понятно, что уравнения (13) и (14) имеют смысл уравнений Лагранжа–Эйлера для функционала действия с $\mathcal{L}_0[\rho;\theta]$ вида (12).

Традиционно считается, что уравнение (13) — это уравнение непрерывности для плотности вероятности $\rho(q,t)$. В свою очередь, уравнение (14), ввиду того, что величина $\hbar\theta(q,t)$ имеет размерность действия, представляет собой аналог уравнения Гамильтона–Якоби. При этом последнее слагаемое в формуле (14) иногда трактуют как оператор $U_q(q)$ некой стохастической энергии квантового характера, исчезающий в пределе $\hbar \to 0$. Градиент этой величины компенсирует градиент потенциальной энергии $U(q)$, характеризующий регулярное воздействие окружения, что обеспечивает устойчивость стационарного состояния.

Разумеется, полученные уравнения (13), (14) для ρ и θ и уравнения Шредингера для $\psi(q,t)$ и $\psi^*(q,t)$ физически эквивалентны. Принято, однако, считать, что решение уравнений (13), (14) представляет собой более сложную задачу. Поэтому чаще всего эти уравнения обсуждаются в рамках квазиклассического приближения. Ниже мы покажем, что для самодиффузии как неравновесного процесса решение этих уравнений вполне возможно. Подобный подход позволит нам независимо найти функции ρ и θ и тем самым неравновесную волновую функцию $\widetilde{\psi}_{\text{eff}}(q,t)$ в ситуации, когда уравнение Шредингера неприменимо.

3. ОБОБЩЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ПРИ НУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

В качестве первого шага представим выражение (12) и уравнение (13) в несколько ином виде. В соответствии с терминологией, предложенной Нельсоном [6], назовем величину

$$v \equiv \frac{\hbar}{m}\frac{\partial\theta}{\partial q} \tag{15}$$

дрейфовой, а величину

$$u \equiv -D_q\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q} \tag{16}$$

диффузионной скоростью в холодном вакууме. С помощью этих величин формулам (12) и (13) можно придать вид

$$\mathcal{L}_0[\rho,\theta] = -\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t}\rho - \frac{m}{2}(v^2+u^2)\rho - U\rho; \tag{12a}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}\,(\rho v) = 0, \tag{13a}$$

открывающий возможность для обобщения.

Действительно, из уравнения (13a) следует, что стандартное уравнение непрерывности, согласованное с уравнением Шредингера, носит квазиклассический характер, ибо в нем плотность потока вероятности зависит только от дрейфовой скорости v. В то же время диффузионная скорость u, порождаемая стохастическим воздействием холодного вакуума, в (13a) не учитывается. Между тем наиболее общим уравнением непрерывности для плотности вероятности является, как известно, уравнение Фоккера–Планка [8]

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}(\rho V) = 0. \tag{17}$$

Здесь скорость потока вероятности имеет вид

$$V \equiv v + u = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial\theta}{\partial q} - D_q\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q}, \tag{18}$$

причем для холодного вакуума величины v и u определяются формулами (15) и (16) соответственно. Необходимо также заметить, что входящее в (12a) выражение $\frac{m}{2}u^2 = \frac{m}{2}\left(D_q\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2$ можно трактовать и как энергию диффузионного давления холодного вакуума, и как вклад в кинетическую энергию. Поэтому входящая в формулу (12a) комбинация $\frac{m}{2}(v^2 + u^2)$ отчасти напоминает выражение для кинетической энергии в целом, но все же выглядит явно неполной по сравнению с $\frac{m}{2}V^2 = \frac{m}{2}(v+u)^2$.

Таким образом, стандартная квантовая механика допускает возможность обобщения. В рамках неравновесной $(\hbar, k)$-динамики можно более полно учесть квантовое стохастическое воздействие холодного вакуума, включая возникновение флуктуаций плотности вероятности основного состояния и их рассасывание в процессе самодиффузии. В итоге удается получить неравновесные волновые функции, описывающие релаксацию системы к основному состоянию.

Осуществим такое обобщение сначала при $T = 0$. Для этого заменим в плотности лагранжиана вида (12а) выражение $(v^2 + u^2)$ на V^2. Тогда получим

$$\tilde{\mathcal{L}}_0[\rho;\theta] = -\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t}\rho - \frac{m}{2}V^2\rho - U\rho = \mathcal{L}_0[\rho;\theta] - mvu\rho = \mathcal{L}_0[\rho;\theta] + \frac{\hbar}{2m}\frac{\partial\theta}{\partial q}\frac{\partial\rho}{\partial q}. \qquad (19)$$

Варьирование по θ функционала действия с $\tilde{\mathcal{L}}_0[\rho;\theta]$ автоматически приводит к уравнению Фоккера–Планка (17) с квантовым коэффициентом диффузии D_q. В то же время варьирование по ρ практически не меняет уравнения (14), лишь добавляя в него слева слагаемое $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\theta}{\partial q^2}$.

4. ЛАГРАНЖЕВА ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Произведем теперь дальнейшее обобщение квантовой механики, распространив предложенную выше лагранжеву формулировку на случай системы, испытывающей воздействие квантовотеплового вакуума в модели квантотермостата ($T \neq 0$). С этой целью введем плотность лагранжиана $\tilde{\mathcal{L}}_T[\rho;\theta]$, зависящую от температуры и учитывающую наличие квантово-тепловой самодиффузии с коэффициентом D_{eff} вида (8). Соответствующее выражение выберем так, чтобы при $T \to 0$ оно переходило в выражение $\tilde{\mathcal{L}}_0[\rho;\theta]$ вида (19).

Для этого достаточно в выражении для диффузионной скорости (16) заменить коэффициент D_q на D_{eff} и ввести в плотность лагранжиана дополнительный член $U_T(q)$, учитывающий вклад в энергию диффузионного давления теплого вакуума. По нашим соображениям, это выражение должно иметь вид, аналогичный $\frac{m}{2}u^2$ (при $T = 0$), позволивший выше, в формуле (12а), учитывать энергию диффузионного давления холодного вакуума:

$$U_T(q) = -\frac{m}{2}\left[\frac{\alpha_{\text{eff}}}{\Upsilon}\right]^2 u^2 = -\frac{\hbar^2}{8m}\alpha_{\text{eff}}^2\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2. \qquad (20)$$

Иными словами, в качестве $\tilde{\mathcal{L}}_T[\rho;\theta]$ выберем выражение

$$\tilde{\mathcal{L}}_T(\rho,\theta) = -\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t}\rho - \frac{m}{2}(v+u)^2\rho - U\rho - U_T\rho. \qquad (21)$$

Для дальнейших вычислений в формуле (21) удобно вернуться к явной зависимости $\tilde{\mathcal{L}}_T(\rho,\theta)$ от ρ и θ:

$$\tilde{\mathcal{L}}_T(\rho,\theta) = -\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t}\rho - \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\theta}{\partial q}\right)^2\rho + \frac{\hbar^2}{2m}\Upsilon\frac{\partial\theta}{\partial q}\frac{\partial\rho}{\partial q} + \frac{\hbar^2}{8m}\Upsilon^2\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2\right\} - \\ - U\rho - \frac{\hbar^2}{8m}\alpha_{\text{eff}}^2\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2.$$

Варьирование функционала действия с $\tilde{\mathcal{L}}_T(\rho,\theta)$ по θ вновь приводит к уравнению Фоккера–Планка, но уже с эффективным коэффициентом диффузии D_{eff}:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q}\left(\rho\frac{\hbar}{m}\frac{\partial\theta}{\partial q}\right) - D_{\text{eff}}\frac{\partial^2\rho}{\partial q^2} = 0. \tag{22}$$

Соответственно, варьирование по ρ приводит к уравнению Гамильтона–Якоби, учитывающему совместное квантово-тепловое воздействие вакуума:

$$\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\theta}{\partial q}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\Upsilon\frac{\partial^2\theta}{\partial q^2} + U(q) - \frac{\hbar^2}{8m}(\Xi_T)\left[\frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2 + 2\frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)\right] = 0, \tag{23}$$

где

$$\Xi_T = 2\Upsilon^2 - 1.$$

Система уравнений (22), (23), будучи обобщением уравнений (13), (14), представляет собой нетривиальное обобщение уравнения Шредингера. Возвращение в этих уравнениях к волновым функциям ψ и ψ^* — самостоятельная и непростая задача. В данной работе мы сосредоточимся непосредственно на решении уравнений (22), (23).

5. ПЛОТНОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ НЕРАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Традиционно считается, что решение уравнений типа (22), (23) довольно бесперспективно ввиду их запутанности и нелинейности. Мы покажем, что в случае модели квантового осциллятора это возражение можно обойти, используя метод последовательных приближений. Нахождение решения для такой модели представляет существенный интерес, поскольку она имеет значительную область применимости. В частности, эта модель позволяет получить неравновесные волновые функции теплого вакуума в модели квантотермостата.

Обратим внимание на то, что зацепление уравнений (22) и (23) связано со слагаемым в уравнении (22), содержащим дрейфовую скорость v. Поскольку регулярная скорость поступательного движения центра масс осциллятора отсутствует и среднее значение скорости его внутреннего движения в тепловом равновесии также равно нулю, сделаем предположение, что в нулевом приближении $v \ll u$. Это означает, что учет стандартного отклонения Δv для дрейфовой скорости мы будем считать эффектом следующего приближения. Обоснование этого предположения мы приведем в разд. 7.

При таком предположении уравнение (22) отщепляется от уравнения (23), принимая вид стандартного уравнения диффузии

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D_{\text{eff}} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q^2}, \tag{24}$$

линейного относительно ρ. Его решение дает выражение для плотности вероятности, которое можно было бы использовать для нахождения фазы волновой функции из уравнения (23). Однако решение уравнения (24) известно только для диффузии свободных частиц или частиц, находящихся под действием постоянной силы.

Для модели квантового осциллятора эту проблему можно, однако, решить обходным путем, рассмотрев диффузию как броуновское движение осцилляторов в апериодическом режиме (при $\omega\tau \sim 1$) и воспользовавшись интегральным уравнением Смолуховского [4, 9]. Если к тому же допустить, что начальное значение координаты осциллятора $q(0) = 0$, то соответствующая плотность вероятности принимает вид [4]

$$\tilde{\rho}_T(q,t) = [2\pi \Delta q_T^2(t)]^{-1/2} \exp\left\{-\frac{q^2}{2\Delta q_T(t)^2}\right\}, \tag{25}$$

справедливый при высоких температурах, когда $k_B T \gg \hbar\omega/2$. Здесь

$$\Delta q_T^2(t) \equiv \Delta q_T^2 \varphi(t) = \frac{D_T}{\omega}\varphi(t), \tag{26}$$

а функция

$$\varphi(t) = 1 - \mathrm{e}^{-2\omega t} \tag{27}$$

описывает процесс приближения к тепловому равновесию, достигая предельного значения $\varphi = 1$ в пределе $t \to \infty$.

Отметим, что строгое обоснование этого результата для модели классического осциллятора, достигающего состояния теплового равновесия за счет слабого взаимодействия с классической моделью термостата, было дано Боголюбовым [10] путем решения наиболее общего уравнения Фоккера–Планка для осциллятора в фазовом пространстве.

В интересующем нас случае установления теплового равновесия квантового осциллятора с квантотермостатом естественно высказать гипотезу, согласно которой для плотности вероятности $\widetilde{\rho}_{\text{eff}}(q,t)$ справедливо выражение, аналогичное (25), но с заменой коэффициента чисто тепловой диффузии D_T на эффективный коэффициент диффузии D_{eff}:

$$\tilde{\rho}_{\text{eff}}(q,t) = 2\pi \left[\Delta q_{\text{eff}}^2(t)\right]^{-1/2} \exp\left\{-\frac{q^2}{2\Delta q_{\text{eff}}^2(t)}\right\}, \tag{28}$$

где

$$\Delta q_{\text{eff}}^2(t) \equiv \Delta q_{\text{eff}}^2 \varphi(t) = \frac{D_{\text{eff}}}{\omega}\varphi(t). \tag{29}$$

Обоснованность данной гипотезы дополнительно подтверждается тем, что в пределе $t \to \infty$ выражение (28) совпадает с выражением $\rho_{\text{eff}}(q)$, следующим из полученного независимо выражения для равновесной волновой функции квантового осциллятора в квантотермостате [3][1]

$$\psi_{\text{eff}}(q) = [2\pi\Delta q_{\text{eff}}^2]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{q^2}{4\Delta q_{\text{eff}}^2}(1 - i\alpha_{\text{eff}})\right\} \exp\left\{-i\frac{\omega}{2} f_{\text{eff}}\right\}. \tag{30}$$

6. НЕРАВНОВЕСНЫЕ ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Опираясь на гипотезу (28), перейдем к решению уравнения (23) для нахождения фазы волновой функции $\theta(q,t)$. Поскольку естественно допустить, что неравновесные волновые функции квантового осциллятора в квантотермостате, как и равновесные функции типа (30), имеют смысл тепловых коррелированно-когерентных состояний (ТККС) [3, 2], фаза θ в этом случае должна квадратично зависеть от q. Это позволяет разделить уравнение (23) на два уравнения. Первое уравнение, члены которого пропорциональны q^2, имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\theta}{\partial q}\right)^2 + \frac{m\omega^2 q^2}{2} - \frac{\hbar^2}{8m}(\Xi_T)\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q}\right)^2 = 0, \tag{31}$$

где мы явно учли потенциальную энергию осциллятора $U(q)$. Соответствующее второе уравнение, члены которого от q не зависят, таково:

$$\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Upsilon\frac{\partial^2\theta}{\partial q^2} - \frac{\hbar^2}{4m}(\Xi_T)\frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q}\right) = 0. \tag{32}$$

Решение этих уравнений можно провести последовательно, сначала подставив выражение (28) в уравнение (31). Тогда получим

$$\left(\frac{\partial\theta}{\partial q}\right)^2 = \frac{m^2\omega^2 q^2}{\hbar^2}\left[(\varphi^{-2}(t) - 1) + \varphi^{-2}(t)\left(\frac{\alpha}{\Upsilon}\right)^2\right], \tag{33}$$

где $\varphi(t)$ дается формулой (27). Далее, извлекая квадратный корень и интегрируя по q (при $t = \text{const}$), находим

$$\theta_{\text{eff}}(q,t) = \frac{q^2}{4\Delta q_{\text{eff}}^2(t)}\alpha_{\text{eff}}(t), \tag{34}$$

где

$$\alpha_{\text{eff}}(t) = [(1-\varphi^2)\Upsilon^2 + \alpha_{\text{eff}}^2]^{1/2}.$$

Наконец, подставляя выражения (28) и (34) в уравнение (32), получим уравнение

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{\omega}{2\varphi(t)}\left[(\Xi_T)\frac{1}{\Upsilon} - \alpha_{\text{eff}}(t)\right], \tag{35}$$

[1] Последний множитель в (30) не является существенным. Конкретное выражение для него будет приведено в разд. 6.

интегрируя которое по t, находим

$$\theta_{\rm eff}(t) = -\frac{\omega}{2} f_{\rm eff}(t). \tag{36}$$

(Для дальнейшего точное аналитическое выражение для функции $f_{\rm eff}(t)$ несущественно.)

Объединяя выражения (28), (34) и (36), окончательно получим неравновесную волновую функцию $\widetilde{\psi}_{\rm eff}(t)$ для квантового осциллятора, находящегося в квантотермостате при $T \neq 0$:

$$\tilde{\psi}_{\rm eff}(q,t) = \left[2\pi\Delta q^2_{\rm eff}(t)\right]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{q^2}{4\Delta q^2_{\rm eff}(t)}(1 - i\alpha_{\rm eff}(t))\right\} \exp\left\{-i\frac{\omega}{2} f_{\rm eff}(t)\right\}. \tag{37}$$

При $t \to \infty$ благодаря квантово-тепловой самодиффузии она приближается к равновесной волновой функции $\psi_{\rm eff}(q)$ вида (30), характеризующей теплый вакуум.

Последняя является собственной функцией эрмитова оператора — эффективного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_{\rm eff}$ с нулевым собственным значением

$$\hat{\mathcal{H}}_{\rm eff}\,\psi_{\rm eff}(q) = \Upsilon \left\{\hat{\mathcal{H}} - \frac{\hbar\omega}{2}\frac{1}{\Upsilon}\left[\hat{I} + \alpha_{\rm eff}\frac{1}{\hbar}\{\hat{p},\hat{q}\}\right]\right\}\psi_{\rm eff} = 0, \tag{38}$$

где $\hat{\mathcal{H}}$ — гамильтониан квантового осциллятора. При этом функция $f_{\rm eff}$ в формуле (30) принимает вид

$$f_{\rm eff} = \left[(\Xi_T)\Upsilon^{-1} - \alpha_{\rm eff}\right] t, \tag{39}$$

превращаясь при $T \to 0$ просто в t.

Отметим также, что неравновесная волновая функция при $T = 0$, описывающая приближение квантового осциллятора к состоянию холодного вакуума за счет квантовой диффузии, имеет вид

$$\tilde{\psi}_0(q,t) = \left[2\pi\Delta q^2_0(t)\right]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{q^2}{4\Delta q^2_0(t)}(1 - i\alpha_0(t))\right\} \exp\left\{-i\frac{\omega}{2} f_0(t)\right\}, \tag{40}$$

где $\alpha_0(t)$ и $f_0(t)$ — значения $\alpha_{\rm eff}(t)$ и $f_{\rm eff}(t)$ в пределе $T \to 0$.

7. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Разумеется, неравновесные волновые функции $\widetilde{\psi}_{\rm eff}(q,t)$ и $\widetilde{\psi}_0(q,t)$, в отличие от равновесных функций $\psi_{\rm eff}(q)$ и $\psi_0(q)$, не удовлетворяют уравнению Шредингера. Используемые в неравновесной $(\hbar, k)$-динамике уравнения Фоккера–Планка (22) и Гамильтона–Якоби (23) описывают однонаправленный во времени процесс перехода от неравновесного состояния к равновесному за счет неустранимого стохастического воздействия вакуума, имеющего место и при $T = 0$.

В стандартной квантовой механике эти обстоятельства, существенно связанные с наличием энергии нулевых колебаний вакуума, как правило, не учитываются, что ограничивает область ее применимости даже при $T = 0$. По-видимому, учет стохастического воздействия окружения может иметь существенное значение для развития кинетической теории. Ранее Боголюбовым было высказано обоснованное утверждение, согласно которому процесс стохастизации в абсолютно изолированных системах, т. е. при пренебрежении стохастическим воздействием холодного вакуума, невозможен [12, 13]. Поскольку стохастическое воздействие холодного вакуума исключить нельзя, его наличие, по нашему мнению, является отправным пунктом описания стохастизации в таких системах, ведущей к установлению в них теплового равновесия.

Полученная волновая функция $\tilde{\psi}_{\text{eff}}(q,t)$ обеспечивает насыщенность соотношения неопределенностей Шредингера координата–импульс для квантового осциллятора в неравновесном состоянии:

$$\Delta p_{\text{eff}}^2(t)\Delta q_{\text{eff}}^2(t) = \frac{\hbar^2}{4}\Upsilon^2[2-\varphi^2(t)] = J_{\text{eff}}^2(t). \tag{41}$$

Тем самым процесс релаксации неравновесного состояния сопровождается убыванием эффективного воздействия $J_{\text{eff}}(t)$ с течением времени, которое достигает минимума J_{eff} в состоянии теплового равновесия.

Вернемся, наконец, к обоснованию допустимости сделанного приближения $v \ll u$, основываясь на следующих наводящих соображениях. Рассмотрим выражения для этих величин, следующие из формул (34) и (28), и учтем, что сами эти величины, будучи случайными, имеют смысл либо средних значений, либо стандартных отклонений. Имеем

$$v = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial\theta}{\partial q} = \omega q\Upsilon\frac{\alpha_{\text{eff}}(t)}{\varphi(t)}; \tag{42}$$

$$u = -D_{\text{eff}}\frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial q} = \frac{\omega q}{\varphi(t)}. \tag{43}$$

Сравнивая функции (42) и (43), мы видим, что если выбрать равновесное состояние (с $\varphi(t) = 1$) в качестве исходного пункта в методе последовательных приближений, то необходимо принять во внимание, что в этом пределе условие $v \ll u$ эквивалентно требованию $\Upsilon^{-2} \ll 1$. Тем самым это условие выполняется, по крайней мере, при температурах, когда $k_BT \ll \hbar\omega/2$. Наоборот, при $k_BT \gg \hbar\omega/2$ диффузионная скорость u при нулевом среднем значении дрейфовой скорости оказывается соответствующей выражению $\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{\partial\theta}{\partial q}$, имеющему смысл стандартного отклонения Δv, и, таким образом, значение диффузионной скорости эффективно удваивается.

К тому же выводу можно прийти и по-другому. Сам эффективный коэффициент диффузии D_{eff}, как и эффективное действие J_{eff}, в следующем приближении флуктуирует, причем его стандартное отклонение определяется стандартным отклонением температуры осциллятора. Иными словами, за коэффициент диффузии с учетом его флуктуаций в пределе $T \to \infty$ вместо выражения $D_{\text{eff}} \approx D_T = k_BT/m\omega$ следует принять выражение

$$D_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2m}\Upsilon \approx \frac{k_B(T+\Delta T)}{m\omega} = \frac{2k_BT}{m\omega}. \tag{44}$$

Действительно, для осциллятора при $k_BT \gg \hbar\omega/2$, согласно теории флуктуаций Эйнштейна [14, 15],

$$\Delta T = \left(\frac{k_B}{C_V}\right)^{1/2} T = T, \tag{45}$$

ибо в этом пределе $C_V = k_B$. В результате $D_T + \Delta D_T = 2D_T$.

Тем самым вкладом дрейфовой скорости в поток вероятности, грубо говоря, можно пренебречь при любых температурах. Для этого нужно принять во внимание, что при высоких температурах этот поток можно по-прежнему считать зависящим только от диффузионной скорости, величина которой лишь фактически удваивается благодаря флуктуациям коэффициента D_{eff}. Более последовательный подход к обоснованию сделанного выше предположения требует проведения вычислений по теории возмущений с учетом того, что величина θ в последующем приближении является функцией ρ в предыдущем приближении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые идея использования в квантовой теории плотности лагранжиана, зависящей от функций ρ и θ, по-видимому, была высказана Феньешем [8]. Из предложенного им выражения для функционала $\tilde{\mathcal{L}}[\rho, \theta]$ следовало уравнение Фоккера–Планка, содержащее полную скорость потока вероятности V с коэффициентом диффузии либо D_q, либо D_T (эффективный коэффициент диффузии им не вводился). При этом уравнение типа Гамильтона–Якоби в [8] было другим. Более того, в этой работе утверждалось, что полученная система уравнений для функций ρ и θ эквивалентна уравнениям Шредингера для функций ψ и ψ^*, несмотря на то, что уравнение Фоккера–Планка, в отличие от уравнения Шредингера, приводит к необратимости.

В отличие от результатов работы [8] полученные нами уравнения представляют собой нетривиальное обобщение гидродинамической формы квантовой механики на неравновесные состояния, благодаря чему было показано, что несмотря на имеющиеся возражения [16] данная форма квантовой механики также может быть эффективной. Решение этих уравнений позволило впервые найти волновые функции неравновесных состояний без использования уравнения Шредингера. Этот результат создает возможность вычислять средние значения макропараметров в этих состояниях, а также их изменение со временем и, тем самым, развивать неравновесную квантовую механику как микроскопическую основу кинетики и неравновесной термодинамики.

В заключение выражаем благодарность участникам семинаров Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ, кафедры теоретической физики РУДН, Института физики конденсированной материи (г. Львов) и Института теоретической физики им. А. И. Ахиезера (г. Харьков) за плодотворную дискуссию. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 10-01-90408).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Суханов А. Д.* // ТМФ. 2008. Т. 154, вып. 1. С. 185.
2. *Суханов А. Д., Голубева О. Н.* // ТМФ. 2009. Т. 160, вып. 2. С. 369.
3. *Суханов А. Д.* // ТМФ. 2006. Т. 148, вып. 2. С. 295.
4. *Ансельм А. И.* Основы статистической физики и термодинамики. СПб.; М., 2007. С. 338.
5. *Суханов А. Д.* // ТМФ. 2004. Т. 139, вып. 1. С. 129.

6. *Nelson E.* Dynamical Theory of Brownian Motion. Princeton: Princeton. Univ. Press, 1967.

7. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. М., 1967. Вып. 9. С. 244.

8. *Феньеш И.* Теоретико-вероятностное обоснование и истолкование квантовой механики // Вопросы причинности в квантовой механике. М., 1955. С. 244.

9. *Смолуховский М.* Несколько примеров брауновского молекулярного движения под действием внешних сил // *Эйнштейн А., Смолуховский М.* Брауновское движение. М., 1936. С. 203.

10. *Боголюбов Н. Н.* О некоторых статистических методах математической физики. Гл. 4 // Собр. науч. тр. Т. 4. М., 2006. С. 121.

11. *Umezawa H.* Advanced Field Theory. Micro-, Macro- and Thermal Physics. N. Y.: AIP, 1993.

12. *Боголюбов Н. Н.* Микроскопические решения уравнения Больцмана–Энскога в кинетической теории для упругих шаров // Собр. науч. тр. Т. 5. М., 2006. С. 608.

13. *Боголюбов Н. Н.* О некоторых проблемах, связанных с обоснованием статистической механики // Собр. науч. тр. Т. 6. М., 2006. С. 432.

14. *Эйнштейн А.* К общей молекулярной теории теплоты // Собр. науч. тр. Т. 3. М., 1966. С. 67.

15. *Суханов А. Д.* // ЭЧАЯ. 2005. Т. 36, вып. 6. С. 1281.

16. *Блохинцев Д. И.* Принципиальные вопросы квантовой механики. М., 1966. С. 54.

Получено 12 мая 2010 г.