МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

Физический факультет

На правах рукописи

БУРЛАКОВ Евгений Владимирович

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ВИГНЕРА КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Специальность 01.04.02 – теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель доктор физико-математических наук Перепёлкин Е.Е.

ОГЛАВЛЕНИЕ

введение						3
ГЛАВА	1	КВАНТОВАЯ	МЕХАНИКА	В	ФАЗОВОМ	
ПРОСТІ	РАНС	TBE		•••••	•••••	18
§1.	1 Перв	вое и второе уравн	ение Власова			18
§1.2 Функция Вигнера и уравнение Моэля						29
§1	3 Аппј	роксимация Власо	ва-Моэля			34
§1.	4 Ураг	внение Шрёдингер	а в фазовом прост	рансті	ве	38
	1.4.1	Метод Торреса-В	ега			39
	1.4.2	Построение на ос	нове теоремы Гелі	ьмголі	ьца	40
	1.4.3	Использование аг	проксимации Вла	сова-М	пксоМ	52
ГЛАВА	2	СВОЙСТВА	ОТРИЦАТЕЛ	ьной	і КВАЗИ-	
ВЕРОЯТНОСТИ						62
§2.1 Вычисление средних кинематических величин						62
§2.2 P	аспред	целение полюсов ф	ункции энергии в	фазов	SOM	
пространстве						77
§2.3 P	асшир	енная функция Ви	гнера и обратимос	ть по	времени	81
ГЛАВА	3 ФУІ	нкция вигнер	А КВАНТОВОЙ	СИСТ	гемы С	
ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ						98
§3.1 Представление функции Вигнера						98
§3.2 Энергетический спектр квантовой системы						120
§3.3 Э	ффект	гивный численный	алгоритм нахожд	ения ф	рункции	
Вигнера						127
ЗАКЛЮ	ЧЕНІ	1Е		• • • • • •		135
ЛИТЕРА	ΑТУР	4		• • • • • • •		136

ВВЕДЕНИЕ

Обзор литературы историческая справка и актуальность темы исследования

Фазовое пространство, содержащее информацию о координате и импульсе, имеет широкий спектр применения при рассмотрении макросистем. Описание поведения макросистем в фазовом пространстве используется в статистической физике, механике сплошных сред, квантовой статистике и ускорительной физике при моделировании динамики пучка. Центральным понятием для макросистем является теорема Лиувилля, связанная с законом сохранения фазового объема и постоянством функции плотности вероятностей $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ вдоль фазовых траекторий.

Рассмотрение микросистем в фазовом пространстве в рамках квантовой механики имеет особенность, обусловленную принципом неопределенности Гейзенберга. Понятие фазовой траектории, которая требует для своего построения одновременного знания значений координаты и импульса теряет смысл. Уравнение Шрёдингера позволяет найти волновую функцию Ψ квантовой системы, определяющую плотность распределения вероятности по координате $|\Psi|^2$ или по импульсу $|\tilde{\Psi}|^2$. Волновые функции $\Psi(\vec{r},t)$ и $\tilde{\Psi}(\vec{p},t)$ связаны Фурье преобразованием и соответствуют координатному и импульсному представлению.

В 1930-1932 г.г. Г. Вейлем и Е. Вигнером феноменологическим способом в виде интеграла Фурье от композиции волновых функций была построена функция W квази-плотности вероятностей квантовой системы в фазовом пространстве [1, 2]. Функция W получила название функции Вигнера, а термин «квази-плотности» вызван наличием отрицательных значений у функции W [3-5]. Функция Вигнера может быть представлена через матрицу плотности $\hat{\rho}$:

$$W(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho}(t) \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^3 s.$$
 (i.1)

Интегрирование функции W по пространству импульсов и координат дает функции $\left|\Psi\right|^2$ и $\left|\tilde{\Psi}\right|^2$ соответственно:

$$\int_{(\infty)} W(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3 p = \left| \Psi(\vec{r}, t) \right|^2, \int_{(\infty)} W(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3 r = \left| \tilde{\Psi}(\vec{p}, t) \right|^2.$$
 (i.2)

Вопрос отрицательности квази-плотности вероятности обсуждался во многих работах [3-9]. В качестве альтернативы функции Вигнера для некоторых классов задач феноменологически построены различные варианты P,Q – функций распределения [10-13], обладающих положительностью в фазовом пространстве. Существует подход построения аналога уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве [14-17], решения которого $\Psi_2(\vec{r},\vec{p},t)$ могут дать положительную функцию распределения в фазовом пространстве $|\Psi_2|^2 = f(\vec{r},\vec{p},t)$. Открытым остается вопрос о существовании физического смысла отрицательной квази-вероятности и возможных вариантов ее интерпретации.

Эволюция функции Вигнера $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ описывается уравнением Моэля [18, 19], которое непосредственно получается из уравнения фон Неймана для матрицы плотности $\hat{\rho}$ и предположения, что потенциал U является аналитической функцией

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{m} (\vec{p}, \nabla_r) W - (\nabla_r U, \nabla_p W) = \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l (\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} U(\vec{\nabla}_r, \vec{\nabla}_p)^{2l+1} W. \quad (i.3)$$

Уравнение Моэля (i.3) является обобщением уравнения Лиувилля для классической функции плотности вероятностей $f(\vec{r},\vec{p},t)$. В отличие от уравнения Лиувилля уравнение Моэля имеет ненулевую правую часть в виде ряда по степеням постоянной Планка \hbar^{2l} . Члены ряда содержат производные высших порядков от функции распределения W и потенциала U квантовой системы: $\frac{\partial^{2l+1}W}{\partial p_{\lambda}^{2l+1}}\frac{\partial^{2l+1}U}{\partial x_{\lambda}^{2l+1}}$. В классическом пределе при $\hbar \to 0$ и при условии

ограниченности производных $\frac{\partial^{2l+1}W}{\partial p_{\lambda}^{2l+1}}\frac{\partial^{2l+1}U}{\partial x_{\lambda}^{2l+1}}$ уравнение Моэля (i.3) формально переходит в уравнение Лиувилля. Наличие ненулевой правой части в уравнении Моэля приводит к непостоянству (существованию диссипаций по вероятности у квантовой системы) функции Вигнера вдоль фазовой траектории.

Несмотря на необычность идеи рассмотрения квантовой механики в фазовом пространстве, за последние десятилетия существенно был развит ее математический аппарат [22-34]. Функция Вигнера получила широкое применение в квантовой томографии [35-38], квантовой связи и криптографии [39, 40], квантовой информатике [41-43], в задачах обработки сигнала [44-46].

Знание функции Вигнера необходимо для вычисления средних значений характеристик квантовых систем [47-50]. Для нахождения функции Вигнера (i.1) необходимы волновые функции Ψ квантовой системы. Явное решение уравнения Шрёдингера удается получить только для узкого класса потенциалов U, поэтому в большинстве случаев приходится использовать численные методы для нахождения волновых функций Ψ .

Квантовые системы с потенциальными ямами могут иметь дискретный набор собственных функции Ψ_s , отвечающий различным энергетическим состояниям s. При увеличении номера состояния s усложняется характер поведения волновой функции Ψ_s (увеличивается число осцилляций в

потенциальной яме), что приводит к необходимости увеличения числа узлов аппроксимирующей функции, соответствующую функцию Ч . Для одномерной сеточной волновой функции с числом узлов Nсоответствующая сеточная функция Вигнера (i.1) будет иметь порядка $\,N^2\,$ узлов. Значения сеточной функции Вигнера в каждом из N^2 узлов вычисляется путем численного интегрирования (i.1) сеточных волновых функций. Найденная таким образом сеточная функция Вигнера требует повторного интегрирования по всему фазовому пространству для усреднения квантовых характеристик системы. Учитывая требует описанная процедура большого численная количества вычислительных операций и контроля точности конечного результата.

Широкий класс [51-58] достаточно гладких потенциалов U может быть описан или приближен с необходимой точностью полиномиальным потенциалом $U_N(x) = \sum_{n=1}^N a_n x^n$, являющимся частным случаем аналитического потенциала, используемого при выводе уравнения Моэля (i.3). Простейшим полиномиальным потенциалом U_N является потенциал гармонического осциллятора $U_2(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Для гармонического осциллятора уравнение Моэля (i.3) имеет нулевую правую часть и совпадает с уравнением Лиувилля.

Таким образом, гармонический осциллятор является простейшей уникальной физической системой, для которой квантовое уравнение Моэля совпадает с классическим уравнением Лиувилля [47, 59]. Собственные функции $\{\psi_k\}$ квантового гармонического осциллятора известны в явном виде и образуют базис в пространстве L_2 . Следовательно, волновая функция $\Psi \in L_2$, соответствующая квантовой системе с потенциалом U_N может быть разложена по базису $\{\psi_k\}$, то есть $\Psi = \sum_{k=0}^{+\infty} c_k \psi_k$. Коэффициенты разложения

 c_k непосредственно находятся из уравнения Шрёдингера путем решения задачи на собственные значения для линейной алгебраической системы [60]. Такой подход требует существенно меньшее количество операций, чем, например, метод Б.В. Нумерова [61]. Подставляя разложение функции Ψ по функциям $\{\psi_k\}$ в представление функции Вигнера (i.1) можно произвести интегрирование в явном виде [62]. Найденные таким образом аналитические выражения для интегралов существенно ускорят описанную выше процедуру численного усреднения квантовых характеристик.

Цель работы

Целью работы было получение явного выражения для представления функции Вигнера через оператор Вейля квантовой системы с полиномиальным потенциалом и исследование свойств отрицательности значений квази-плотности вероятностей.

Научная новизна

- Построена новая аппроксимация Власова-Моэля для среднего потока вероятностей $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$, необходимая для обрыва бесконечной цепочки уравнений Власова, и исследованы ее свойства.
- Разработан новый эффективный численно-аналитический метод нахождения функции Вигнера квантовой системы с полиномиальным потенциалом.
- Получены новые явные выражения для матричных элементов оператора Вейля в базисе собственных функций гармонического осциллятора.
- Введена новая функция квази-плотности вероятностей расширенная функция Вигнера, удовлетворяющая волновому уравнению, интерпретирующая положительную и отрицательную квази-

вероятность как отклонение от положения равновесия колеблющейся 2D мембраны в фазовой плоскости.

Методология и методы исследования

Явные выражения матричных элементов оператора Вейля в базисе собственных функций гармонического осциллятора ищутся путем явного взятия интеграла Фурье от некой композиции собственных функций осциллятора. Интеграл удается выразить через специально введенные в работе полиномы двух комплексных переменных. В результате функция Вигнера представляется в виде разложения по некоторым известным «базисным» специальным функциям. Коэффициенты разложения могут быть найдены численным методом путем решения задачи на собственные значения для уравнения Шрёдингера.

Положения, выносимые на защиту

- Уравнение Моэля является частным случаем второго уравнения Власова с аппроксимацией Власова-Моэля для среднего потока вероятностей $\langle \vec{v} \rangle$.
- Выражения для матричных элементов kernel-оператора в базисе собственных функций гармонического осциллятора в явном виде выражаются через комплекснозначные функции, являющиеся композицией экспоненциальной функции и полиномов двух комплексных переменных.
- Знание явных выражений для матричных элементов kernel-оператора в базисе гармонического осциллятора позволяет построить эффективный численно-аналитический метод нахождения функции Вигнера квантовой системы с полиномиальным потенциалом.
- Уравнению Моэля для гармонического осциллятора можно поставить в соответствие волновое уравнение, описывающее колебание 2D

мембраны в фазовой плоскости. Положительную и отрицательную квази-вероятность можно трактовать как отклонение от положения равновесия колеблющейся 2D мембраны в фазовой плоскости.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая работы определяется значимость следующими Исходя положениями. первых двух уравнений, принадлежащих ИЗ бесконечной цепочки уравнений Власова, полученной из первых принципов, произведено рассмотрение классических и квантовых систем в фазовом пространстве. Первое уравнение Власова соответствует уравнению Шрёдингера. Частным случаем второго уравнения Власова является уравнение Моэля для функции Вигнера квантовой системы в фазовом пространстве. В явном виде получены матричные элементы оператора Вейля в базисе собственных функций гармонического осциллятора. Знание явных произвести выражений матричных элементов позволяет анализ диссипативных (по вероятности) свойств квантовых систем. Показано, что в области отрицательных значений функции Вигнера расположены полюса функции энергии квантовой системы. Полюса создают бесконечные энергетические барьеры, разбивая потенциальную яму на систему ям. Количество потенциальных ям соответствует номеру состояния квантовой системы. В каждой «новой» яме существует локализованное распределение плотности вероятностей квантовой системы. Предложена интерпретация положительной И отрицательной квази-плотности вероятностей как положения равновесия некоторой колеблющейся 2D отклонение от фазовой плоскости. Получен новый мембраны в аналог уравнения пространстве, найдено Шрёдингера фазовом его решение ДЛЯ гармонического осциллятора.

Практическая значимость работы определяется предложенным эффективным численно-аналитическим методом нахождения функции

Вигнера для квантовых систем с полиномиальным потенциалом, позволяющим на порядок сократить количество вычислительных операций при нахождении функции Вигнера и при усреднении квантовых величин.

Степень разработанности темы исследования

Поставленные в диссертационной работе цели и задачи полностью выполнены.

Достоверность и обоснованность результатов

Достоверность выносимых на защиту диссертационной работы результатов обеспечивается использованием строгих математических методов, подкрепляемых численной проверкой полученных в работе формул.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка литературы. Материал изложен на 143 страницах, включает 21 рисунок, содержит 84 библиографических ссылок.

Основные результаты диссертации опубликованы в 3 работах.

Статьи, опубликованные в журналах Scopus, WoS, RSCI

- 1. Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V. Explicit form for the kernel operator matrix elements in eigenfunction basis of harmonic oscillator // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. − 2020. − №023109, c. 023109-1−023109-17 (impact factor WoS: 2.215)
- Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V. Extended
 Wigner Function for the Harmonic Oscillator in the Phase Space // Results in
 Physics. 2020. №103546, c. 103546-1–103546-8 (impact factor
 WoS: 4.019)

3. *Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V.* Wigner function of a quantum system with polynomial potential // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. − 2020. − №053105, c. 053105-1−053105-18 (impact factor WoS: 2.215)

Публикации из списка ВАК

1. Перепёлкин Е.Е., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г., Бурлаков Е.В. Уравнение Шрёдингера в фазовом пространстве на основе аппроксимации Власова-Моэля // Ученые записки физического факультета Московского университета. — 2020. — №4, с. 2040101-1—2040101-12 (impact factor RINC: 0.063).

Иные публикации (сборники тезисов)

- 1. Перепелкин Е.Е., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г., Бурлаков Е.В. Квантовая система с полиномиальным потенциалом в фазовом пространстве // Молодежная конференция по теоретической и экспериментальной физике (МКТЭФ-2020). Сборник аннотаций докладов. НИЦ "Курчатовский институт" ИТЭФ. 2020. Т. 1. С. 15.
- 2. Бурлаков Е.В. Представление функции Вигнера в базисе собственных функций гармонического осциллятора [Электронный ресурс] // XXVII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов-2020". Материалы конференции. Секция «Физика». М.: МАКС Пресс, 2020. Режим доступа: https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2020/data/19493/uid115272_23693b24e452d8a7af3512051098ae834a0c450b.doc
- 3. Бурлаков Е.В., Перепелкин Е.Е., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г., Полякова Р.В. Функция Вигнера произвольной квантовой системы с потенциалом в виде полинома // XIV Международная научно-

- практическая конференция PTSCIENCE. Сборник докладов. ОНР Всероссийское общество научно-исследовательских разработок ПТСАЙНС. 2020. С. 292.
- 4. Перепелкин Е.Е., Бурлаков Е.В. Квантовая система с полиномиальным потенциалом в фазовом пространстве // Научная конференция «Ломоносовские чтения». Секция физики. Октябрь 2020. Сборник тезисов и докладов. Физический факультет МГУ. 2020. С. 105.

Краткое содержание работы

Во введении дано обоснование актуальности темы диссертации, формулируется цель диссертационной работы, а также приводится ее краткое содержание.

Глава 1 содержит описание общих первых принципов, позволяющих связать рассмотрение классических и квантовых систем в пространстве. Первым принципом является закон сохранения вероятностей в обобщенном фазовом пространстве [63-67], на основании которого А.А. Власовым была получена бесконечная самозацепляющаяся уравнений для функций плотности распределений высших кинематических величин $f_1(\vec{r},t), f_2(\vec{r},\vec{v},t), f_3(\vec{r},\vec{v},\dot{\vec{v}},t),...$ [68-70]. В §1.1 рассматриваются первое и второе уравнение Власова для функций распределения $f_1(\vec{r},t)$ и $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ соответственно. Первое уравнение Власова для функции $f_1(\vec{r},t)$ получается из второго уравнения путем интегрирования его по пространству скоростей. Формально первое уравнение Власова схоже с уравнением непрерывности, но имеет существенные отличие, позволяющие построить из него уравнение Шрёдингера для волновой функции $\Psi_1(\vec{r},t)$ [17, 67, 71]. Частный случай [66, 68-70] второго уравнения Власова для функции $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t)$ известен как уравнение Власова для самосогласованного поля и имеет широкое применение в физике плазмы, астрофизике, ускорительной

физике в задачах термоядерного синтеза. Используя аппроксимацию Власова для средней кинематической величины $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$, в §1.1 строится точное решение второго уравнения Власова для квантового гармонического осциллятора в фазовом пространстве. Полученное решение совпадает с функцией Вигнера гармонического осциллятора. В §1.2 описан вывод уравнения Моэля для функции Вигнера из уравнения фон Неймана, на основании которого в §1.3 вводится аппроксимация Власова-Моэля для средней кинематической величины $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$. Аппроксимация Власова-Моэля является расширением аппроксимации Власова для $\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle$ и переводит второе уравнение Власова в уравнение Моэля. Тем самым уравнение Моэля является частным случаем второго уравнения Власова. В §1.3 получены выражения для средних значений источников диссипации квантовой системы $\langle Q_2 \rangle$ и $\langle \langle Q_2 \rangle \rangle$. Показано, что при усреднении по пространству скоростей аппроксимация Власова-Моэля переходит в обычную аппроксимацию Власова, тем самым информация о квантовых поправках «нивелируется» в гидродинамическом приближении. В §1.4 описано построение трёх вариантов аналога уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве. Первый вариант был построен феноменологическим способом в работах Торреса-Вега [14-16]. Второй вариант основан на первом принципе (законе сохранения вероятностей) из второго уравнения Власов с разложением векторного поля $\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle$ по теореме Гельмгольца. Третий вариант использует второе уравнение Власова с аппроксимацией Власова-Моэля. Для всех трех вариантов рассмотрены и построены точные решения $\Psi_2(\vec{r},\vec{v},t)$ для квантового гармонического осциллятора в фазовом пространстве. Проведен анализ и сравнение полученных решений.

В главе 2 исследуются области отрицательных значений функции квази-плотности вероятностей (функции Вигнера) гармонического

осциллятора. В $\S 2.1$ по функции Вигнера $W_{\scriptscriptstyle n}(x,p)$ для гармонического осциллятора получены точные выражения для средних кинематических $\langle\langle x^2 \rangle\rangle_n, \langle\langle v^2 \rangle\rangle_n, \langle x^2 \rangle_n(v), \langle v^2 \rangle_n(x)$. В §2.2 показано, «кинетическая» энергия $T_n \sim \left\langle v^2 \right\rangle_n (x)$ как функция координаты имеет полюса в точках x_{ℓ} ($\ell=1,...,n$), совпадающих с нулями волновых функций ψ_n . Полюса x_{ℓ} расположены в области отрицательных значений функции Вигнера. Наличие полюсов приводит к бесконечным энергетическим потенциальным барьерам, локализованным в областях, где функция Вигнера имеет отрицательные значение. В результате потенциальная яма осциллятора разбивается на несколько потенциальных ям, разделенных бесконечными энергетическими барьерами. Количество таких ям определяется номером положение энергетических барьеров областями состояния n, отрицательных значений функции Вигнера. В каждой такой «новой» энергетической яме, по сути, существует свой осциллятор. В §2.3 уравнению Моэля с квадратичным потенциалом ставится в соответствие уравнение колебаний 2D мембраны в фазовой плоскости. Отклонение мембраны относительно положения равновесия в положительную или отрицательную сторону можно трактовать как отрицательную или положительную квазиплотность вероятности квантового гармонического осциллятора в фазовом пространстве. Поучено нестационарное точное решение для расширенной функции Вигнера $W_{\ell}^{(n)}(x,p,t)$ гармонического осциллятора в виде стоячей волны. Стоячая волна возникает вдоль круговых фазовых траекторий осциллятора. Фазовая скорость волны равна частоте осциллятора ω (угловая скорость). Частота волны Ω_{ℓ} кратна частоте ω , то есть $\Omega_{\ell} = 2\omega\ell$, где $\ell \in \mathbb{N}$. Рассмотрены свойства полученных решений. Основное состояние (n=0)имеет положительную функцию $W_{\ell}^{(0)}(x,p,t)$ при этом отличную от гауссова распределения, что не противоречит теореме Хадсона [72], из-за наличия

особой точки в начале координат фазовой плоскости. Расширенная нестационарная функция Вигнера $W_{\ell}^{(n)}(x,p,t)$ обладает обратимостью по времени, в отличие от решений уравнения Моэля.

Глава 3 посвящена представлению функции Вигнера для квантовой системы с полиномиальным потенциалом в виде разложения

$$W(x,p) = \sum_{n,k=0}^{+\infty} \rho_{k,n} w_{n,k}(x,p) = \operatorname{Tr}\left[\rho W(x,p)\right], \qquad (i.4)$$

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{\left(-1\right)^k}{\pi \hbar} e^{-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2 \kappa^2}} \mathcal{P}_{n,k}\left(-\kappa x - i\frac{p}{\hbar \kappa}, \kappa x - i\frac{p}{\hbar \kappa}\right),$$

где $\mathcal{W} = \{w_{n,k}\}; \ \mathcal{P}_{n,k}(z_1, z_2)$ — специально введенные полиномы

$$\mathcal{P}_{n,k}(z_1, z_2) \stackrel{\text{det}}{=} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} n! k!}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{1}{2^s s!} \frac{\partial^{2s}}{\partial z_1^s \partial z_2^s} \Big[(2z_1)^n (2z_2)^k \Big],$$

получены в явном виде через собственные функции гармонического осциллятора $\{\psi_k\}$. В §3.1 получен явный вид функций $w_{n,k}$ и рассмотрены их свойства. На главной диагонали матрицы $\mathcal W$ расположены элементы $w_{n,n}$, которые полностью совпадают с функциями Вигнера гармонического осциллятора, то есть $w_{n,n}(x,p) = W_n(x,p)$. Элементы $w_{n,k}$ ($\varpi_{n,k} = n - k \neq 0$) являются комплекснозначными функциями, имеющими фазу $\varpi_{n,k}\varphi$, где φ – полярный угол на фазовой плоскости (x,p). Чем дальше от основной диагонали, тем выше частота осцилляций $\varpi_{n,k}$ фаз функций $w_{n,k}$. Количество и величина недиагональных элементов в матрице плотности ρ показывает степень ангармоничности квантовой системы относительно гармонического

осциллятора. В §3.2 приведен вывод выражения для полной энергии $\left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle$ квантовой системы с полиномиальным потенциалом $U_{\scriptscriptstyle N}(x)$:

$$\left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \left| \rho_{n,n} \right| \left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle_n + \tag{i.5}$$

$$+ \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \cos(\alpha_k - \alpha_n) \sum_{\frac{n-k+l}{2} \in \mathbb{Z}, \ l \ge |n-k|}^{N} a_l \left(\frac{\hbar}{4m\omega} \right)^{l/2} C_l^{\frac{n-k+l}{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s \left(\frac{k+n+l}{2} - s \right)!}{2^s s! (k-s)! (n-s)!},$$

Величина $\langle\langle\mathcal{E}\rangle\rangle$ представима в виде суперпозиции энергий $\langle\langle\mathcal{E}\rangle\rangle_n$ – состояний гармонического осциллятора (основная диагональ матрицы \mathcal{W} , $\varpi_{\scriptscriptstyle n,n} = 0$) и энергий «смешанных» состояний (верхние и нижние диагонали матрицы $\mathcal{W},\ \varpi_{n,n}\neq 0$). В §3.3 приведено описание эффективного численного метода нахождения функции Вигнера для квантовой системы потенциалом $U_{\scriptscriptstyle N}$. Для волновой функции полиномиальным соответствующей состоянию с номером з ищутся коэффициенты разложения $C^{(s)} = \left\{c_0^{(s)}, c_1^{(s)}, ..., c_M^{(s)}\right\}$ по базису собственных функций гармонического осциллятора $\{\psi_k\}$. Количество слагаемы M в разложении определяет точность аппроксимации. Коэффициенты $C^{(s)}$ являются собственными векторами матрицы $J_{n,k} = \left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle_n I_{n,k}^{(0)} + \sum_{l=2}^N a_l I_{n,k}^{(l)}$, в которой величины $I_{n,k}^{(l)}$ известны заранее и не зависят от коэффициентов a_l потенциала $U_{\scriptscriptstyle N}.$ Собственные значения $\mathcal{E}^{(s)}$ матрицы $J_{n,k}$ являются собственными энергиями квантовой системы с полиномиальным потенциалом $U_{\scriptscriptstyle N}$. Зная коэффициенты $C^{(s)}$, остается только подставить их в разложение (i.4). В качестве примера в $\S 3.3$ рассмотрен потенциал пятой степени U_5 , для которого получены функции Вигнера и проведен анализ их свойств.

Заключение содержит основные результаты работы.

ГЛАВА 1 КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В данной главе на основе первого и второго уравнения Власова рассматриваются классические и квантовые системы в фазовом пространстве.

§1.1 Первое и второе уравнение Власова

Рассмотрим первых два уравнения из бесконечной самозацепяющейся цепочки уравнений А.А. Власова [68, 69] для функций распределений плотности вероятностей $f_1(\vec{r},t)$ и $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1(\vec{r}, t) + \operatorname{div}_r \left[\langle \vec{v} \rangle (\vec{r}, t) f_1(\vec{r}, t) \right] = 0, \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) + \operatorname{div}_r \left[\vec{v} f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) \right] + \operatorname{div}_v \left[\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle (\vec{r}, \vec{v}, t) f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) \right] = 0, \quad (1.2)$$

где

$$f_1(\vec{r},t) = \int_{(\infty)} f_2(\vec{r},\vec{v},t) d^3v, N(t) = \int_{(\infty)} f_1(\vec{r},t) d^3r, \qquad (1.3)$$

$$f_1(\vec{r},t)\langle \vec{v}\rangle(\vec{r},t) = \int_{(\infty)} \vec{v} f_2(\vec{r},\vec{v},t) d^3v, \ f_2(\vec{r},\vec{v},t)\langle \dot{\vec{v}}\rangle(\vec{r},\vec{v},t) = \int_{(\infty)} \dot{\vec{v}} f_3(\vec{r},\vec{v},\dot{\vec{v}},t) d^3\dot{v}.$$

Векторные поля $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r},t)$ и $\langle \dot{\vec{v}} \rangle (\vec{r},\vec{v},t)$ соответствуют скорости и ускорению потоков вероятностей. Функция N(t) определяет число частиц в системе, которое может быть нецелым [68, 69]. При постоянном числе частиц (N=const) величина N используется как нормировочный множитель при вычислении полной вероятности. Функция распределения $f_3(\vec{r},\vec{v},\dot{\vec{v}},t)$ удовлетворяет третьему уравнению Власова. Отметим, что переменные $\vec{r},\vec{v},\dot{\vec{v}},\ddot{\vec{v}},\ldots$ являются независимыми кинематическими величинами.

По аналогии с выражениями (1.3) можно ввести двойное и тройное усреднение векторных полей $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r},t)$ и $\langle \dot{\vec{v}} \rangle (\vec{r},\vec{v},t)$:

$$N(t)\langle\langle\dot{v}\rangle\rangle(t) = \int_{(\infty)} \langle\dot{v}\rangle(\vec{r},t) f_1(\vec{r},t) d^3r,$$

$$f_1(\vec{r},t)\langle\langle\dot{v}\rangle\rangle(\vec{r},t) = \int_{(\infty)} \langle\dot{v}\rangle(\vec{r},\vec{v},t) f_2(\vec{r},\vec{v},t) d^3v,$$

$$N(t)\langle\langle\langle\dot{v}\rangle\rangle\rangle(t) = \int_{(\infty)} \langle\langle\dot{v}\rangle\rangle(\vec{r},t) f_1(\vec{r},t) d^3r.$$

$$(1.4)$$

Если ассоциировать функцию распределения плотности $f_1(\vec{r},t)$ с плотностью массы, то вектор $\langle\langle\vec{v}\rangle\rangle(t)$ соответствует скорости центра масс системы, а векторное поле $\langle\vec{v}\rangle(\vec{r},t)$ – распределению скоростей среды.

Первое уравнение Власова (1.1) получается из второго уравнения (1.2) при интегрировании его по пространству скоростей, используя соотношения (1.2) и условие достаточно быстрого стремления к нулю функций распределения на бесконечности [68, 69]. Аналогичная процедура перехода от одного уравнения к другому применима для всех уравнений из цепочки Власова.

В работах [17, 71] показано, что из первого уравнения Власова (1.1) можно построить уравнение Шрёдингера с учётом электромагнитного поля. Положительная функция плотности вероятностей $f_1(\vec{r},t)$ представляется в виде:

$$f_1(\vec{r},t) = |\Psi_1(\vec{r},t)|^2 \ge 0,$$
 (1.5)

где $\Psi_1(\vec{r},t)$ некоторая комплекснозначная функция. Векторное поле потока вероятностей $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r},t)$ по теореме Гельмгольца раскладывается в виде суперпозиции потенциального $-\nabla_r \Phi_1(\vec{r},t)$ и вихревого поля $\vec{A}_1(\vec{r},t)$:

$$\langle \vec{v} \rangle (\vec{r}, t) = -\alpha_1 \nabla_r \Phi_1(\vec{r}, t) + \gamma_1 \vec{A}_1(\vec{r}, t), \tag{1.6}$$

где α_1, γ_1 — некоторые постоянные величины. Подставляя представления (1.5) и (1.6) в уравнение (1.1) получается уравнение [17, 71]:

$$\frac{i}{\beta_{1}} \frac{\partial \Psi_{1}}{\partial t} = -\alpha_{1} \beta_{1} \left(\hat{\mathbf{p}}_{1} - \frac{\gamma_{1}}{2\alpha_{1}\beta_{1}} \vec{A}_{1} \right)^{2} \Psi_{1} + \tilde{U}_{1} \Psi_{1}, \qquad (1.7)$$

$$\tilde{U}_{1} \stackrel{\text{det}}{=} \frac{1}{2\alpha_{1}\beta_{1}} \frac{\left| \gamma_{1} \vec{A}_{1} \right|^{2}}{2} + U_{1}, \quad \hat{\mathbf{p}}_{1} \stackrel{\text{det}}{=} -\frac{i}{\beta_{1}} \nabla_{r}, \quad \hat{\mathbf{p}}_{1}^{2} = -\frac{1}{\beta_{1}^{2}} \Delta_{r}.$$

При выборе свободных констант $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ в виде

$$\alpha_1 = -\frac{\hbar}{2m}, \quad \beta_1 = \frac{1}{\hbar}, \qquad \gamma_1 = -\frac{e}{m},$$
 (1.8)

уравнение (1.7) переходит в известное уравнение Шрёдингера для скалярной частицы в электромагнитном поле. Функция $\Psi_1(\vec{r},t)$ является волновой функцией. Вихревое поле потока вероятностей $\vec{A}_1(\vec{r},t)$ (1.6) соответствует векторному потенциалу магнитного поля $\vec{B}_1(\vec{r},t)$ и удовлетворяет условию $\vec{B}_1(\vec{r},t) = \operatorname{rot}_r \vec{A}_1(\vec{r},t)$. Потенциал $\Phi_1(\vec{r},t)$ связан с фазой $\varphi_1(\vec{r},t)$ волновой функции $\Psi_1(\vec{r},t) = |\Psi_1| e^{i\varphi_1}$ и действием:

$$\langle \vec{v} \rangle = -\alpha_1 \nabla_r \Phi_1 + \gamma_1 \vec{A}_1 = i^2 \alpha_1 \nabla_r \Phi_1 + \gamma_1 \vec{A}_1 =$$

$$= i\alpha_1 \nabla_r \left(0 + i\Phi_1 \right) + \gamma_1 \vec{A}_1 = i\alpha_1 \nabla_r \left(\ln \left| \frac{\Psi_1}{\overline{\Psi}_1} \right| + i\Phi_1 \right) + \gamma_1 \vec{A}_1,$$

$$\Phi_1(\vec{r}, t) = 2\varphi_1(\vec{r}, t) + 2\pi k, \ k \in \mathbb{Z}.$$

$$(1.9)$$

Уравнение Гамильтона-Якоби принимает:

$$-\hbar \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} = \frac{m}{2} \left| \left\langle \vec{v} \right\rangle \right|^2 + e \chi_1 = H_1, \tag{1.10}$$

$$e\chi_1^{\text{det}} = U_1 + Q_1 + \frac{e^2}{2m} |\vec{A}_1|^2, \quad Q_1 = Q = \frac{\alpha_1}{\beta_1} \frac{\Delta_r |\Psi_1|}{|\Psi_1|} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r |\Psi_1|}{|\Psi_1|}, \quad (1.11)$$

где величина \mathbf{Q}_1 — квантовый потенциал из теории «волны-пилота» де'Бройля-Бома [73-76]. Квантовый потенциал \mathbf{Q}_1 позволяет определить тензор квантового давления $P_{\mu\lambda}^{(q)}$:

$$-\frac{1}{f_1}\frac{\partial P_{\mu\lambda}^{(q)}}{\partial x^{\lambda}} = 2\alpha_1^2 \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \left(\frac{1}{\sqrt{f_1}} \frac{\partial^2 \sqrt{f_1}}{\partial x^{\lambda} \partial x^{\lambda}} \right) = 2\alpha_1 \beta_1 \frac{\partial Q_1}{\partial x^{\mu}}.$$
 (1.12)

Заметим, что потенциал $e\chi_1$ (1.11) из уравнения Гамильтона-Якоби (1.10) в классической механике (при $\hbar \to 0$) и в отсутствии вихревого поля ($\vec{A}_1 = \vec{\theta}$) переходит в потенциал U_1 .

Гамильтониан H_1 (1.10) связан с функцией Лагранжа L_1 через преобразование Лежандра

$$L_1 + H_1 = m(\langle \vec{v} \rangle, \langle \vec{v}_p \rangle),$$

где $\left\langle \vec{v}_{p}\right\rangle =-\alpha_{1}\nabla_{r}\Phi_{1}$ — безвихревая компонента векторного поля потока вероятностей (1.6).

Уравнения движения имеют вид:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = -\gamma_1 \left(\vec{E}_1 + \langle \vec{v} \rangle \times \vec{B}_1 \right),$$

$$\vec{E}_1 = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}_1 - \nabla_r \chi_1.$$
(1.13)

Заметим, что в научной литературе известен обратный переход от уравнения Шрёдингера (1.7) к уравнению непрерывности вида (1.1). Уравнение (1.7) записывается для волновых функций Ψ_1 и $\overline{\Psi}_1$. Полученные уравнения умножаются на функции Ψ_1 и $\overline{\Psi}_1$ соответственно и складываются. При таком переходе «теряется» информация о потенциале U_1 . Здесь приведен нетривиальный переход [71] из первых принципов от уравнения (1.1) к уравнению (1.7), который требует введения потенциала U_1 .

В теории «волны-пилота» де'Бройля-Бома строятся уравнения движения (1.10) и (1.13) с помощью представления Маделунга для волновой функции $\Psi = |\Psi| e^{i\varphi}$, но как и в предыдущем случае переход делается от уравнения Шрёдингера к уравнениям движения.

Первое уравнение Власова (1.1) формально схоже с уравнением непрерывности, но имеет более сложную структуру. Векторное поле потока вероятностей $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r},t)$, входящее в уравнение (1.1) определяется функцией плотности вероятностей $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ в соответствии с выражением (1.3). Функция $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ удовлетворяет второму уравнению Власова (1.2), в котором стоит неизвестное векторное поле ускорений $\langle \dot{\vec{v}} \rangle (\vec{r},\vec{v},t)$, а функция $f_1(\vec{r},t)$ связана с $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ через соотношение (1.3). Если зафиксировать векторное поле $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r},t)$ в уравнении (1.1) можно подобрать множество

функций распределений $f(\vec{r},t)$, удовлетворяющих уравнению (1.1). Но не любая функция $f(\vec{r},t)$ из такого множества будет «усреднением» функции $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ (1.3), удовлетворяющей уравнению (1.2).

Таким образом уравнение (1.1) не может быть «самостоятельным» оно связано со всеми уравнениями бесконечной самозацепляющейся цепочки уравнений Власова.

Перейдем к рассмотрению второго уравнения Власова (1.2). Перепишем уравнение (1.2) в виде [17, 66]:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_2 + \vec{v} \cdot \nabla_r f_2 + \left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle \cdot \nabla_v f_2 = -f_2 \operatorname{div}_v \left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle, \tag{1.14}$$

ИЛИ

$$\frac{d_{2}S_{2}}{dt} \stackrel{\text{det}}{=} \Pi_{2}S_{2} \stackrel{\text{det}}{=} \frac{\partial}{\partial t}S_{2} + \vec{v} \cdot \nabla_{r}S_{2} + \langle \dot{\vec{v}} \rangle \cdot \nabla_{v}S_{2} = -Q_{2},$$

$$S_{2} \stackrel{\text{det}}{=} \operatorname{Ln} f_{2}, Q_{2} \stackrel{\text{det}}{=} \operatorname{div}_{v} \langle \dot{\vec{v}} \rangle.$$

Функция Q_2 имеет физический смысл источников диссипаций вероятностей. Если источники отсутствуют ($Q_2=0$), тогда уравнение (1.14) переходит в известное уравнение Лиувилля и вдоль фазовой траектории плотность вероятностей остается постоянной ($\frac{d_2f_2}{dt}=0$). Наличие источников ($Q_2\neq 0$) у векторного поля ускорений $\langle \dot{\vec{v}} \rangle (\vec{r},\vec{v},t)$ в пространстве скоростей приводит к нарушению теоремы Лиувилля. Таким образом второе уравнение Власова качественно отличается от уравнения Лиувилля и только в частном случае для недиссипативных систем переходит в него.

Определяя $H_2(t)$ - функцию Больцмана [17, 67]

$$H_2(t) \stackrel{\text{det}}{=} -\frac{1}{N} \int_{(\infty)(\infty)} f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) \ln f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v = -\langle\langle S_2 \rangle\rangle(t), \quad (1.15)$$

можно получить уравнение эволюции

$$\frac{d}{dt} \left[N(t) H_2(t) \right] = N(t) \left\langle \left\langle Q_2 \right\rangle \right\rangle (t). \tag{1.16}$$

Как видно из уравнения (1.16) при постоянном числе частиц (N=const) изменение H_2 -функции Больцмана напрямую определяется наличием усредненных источников диссипаций $\left<\left< Q_2 \right>\right>$.

Зная функцию распределения $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t)$ можно переписать уравнения движения (1.13) в гидродинамическом представлении [17, 68, 69]:

$$f_1 \left\langle \left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle \right\rangle = f_1 \frac{d_1}{dt} \left\langle \vec{v} \right\rangle + \int_{(\infty)} \left(\vec{v} - \left\langle \vec{v} \right\rangle \right) \left(\vec{v} - \left\langle \vec{v} \right\rangle, \nabla_r f_2 \right) d^3 v, \tag{1.17}$$

$$P_{\mu\lambda} = \int_{(\infty)} f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) \Big(v_{\mu} - \langle v_{\mu} \rangle \Big) \Big(v_{\lambda} - \langle v_{\lambda} \rangle \Big) d^3 v, \tag{1.18}$$

$$\frac{d_1}{dt} \left\langle v_{\mu} \right\rangle^{\det} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \left\langle v_{\kappa} \right\rangle \frac{\partial}{\partial x_{\kappa}} \right) \left\langle v_{\mu} \right\rangle = -\frac{1}{f_1} \frac{\partial P_{\mu\lambda}}{\partial x^{\lambda}} + \left\langle \left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle \right\rangle, \tag{1.19}$$

где $P_{\mu\lambda}$ — тензор давления (сравните с (1.12)). Величина $\left\langle \left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle \right\rangle$ в уравнении (1.19) ответственна за внешние силы.

Прикладное использование второго уравнения Власова (1.14) требует обрыва цепочки путем феноменологического введения аппроксимации для векторного поля ускорений $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r}, \vec{v}, t)$. По аналогии со вторым законом Ньютона А.А. Власовым была предложена простейшая аппроксимация:

$$\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle (\vec{r}, \vec{v}, t) \stackrel{\text{det}}{=} \frac{1}{m} \vec{F}(\vec{r}, t).$$
 (1.20)

Аппроксимация (1.20) имеет существенное допущение — в правой части отсутствует зависимость от скорости \vec{v} . Следовательно, нет источников диссипаций ($Q_2=0$). К тому же, как видно из выражения (1.17) векторные поля $\left\langle \left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle \right\rangle$ и $\frac{d_1}{dt} \left\langle \vec{v} \right\rangle = \frac{1}{m} \vec{F}$ в общем случае отличаются друг от друга.

При аппроксимации (1.20) уравнение (1.14) фактически переходит в уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_2 + \vec{v} \cdot \nabla_r f_2 + \frac{1}{m} \vec{F} \cdot \nabla_v f_2 = 0, \tag{1.21}$$

Уравнение (1.21) известно как уравнение Власова и имеет широкое применение в физике плазмы, астрофизике, статистической физике, в задачах термоядерного синтеза, ускорительной физике.

Проведем следующее рассуждение. С одной стороны функция $f_1(\vec{r},t)$ связана с квантовой механикой, так как может быть выражена через волновую функцию $\Psi_1(\vec{r},t)$ (1.5), удовлетворяющей уравнению Шрёдингера (1.7). С другой стороны функция $f_1(\vec{r},t)$ может быть найдена по функции $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ (1.3), которая удовлетворяет уравнению Власова (1.2), (1.14). Функция $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$ имеет область определения в фазовом пространстве, что с позиций квантовой механики в силу принципа неопределенности Гейзенберга выглядит необычно, но с математической точки зрения принципиальных противоречий нет.

В качестве примера рассмотрим задачу о квантовом гармоническом осцилляторе с потенциалом $U_1(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Решение стационарного уравнения (1.7) имеет вид:

$$\psi_{n}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^{n} n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^{2}}{2\hbar}} H_{n}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \ n \in \mathbb{N}_{0} = \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad (1.22)$$

$$\tilde{\psi}_{n}(p) = \frac{\left(-i\right)^{n}}{\sqrt{2^{n} n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{m\omega}} e^{-\frac{p^{2}}{2m\omega\hbar}} H_{n}\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right),$$

где H_n — полиномы Эрмита, а волновые функции координатного $\psi_n(x)$ и импульсного $\tilde{\psi}_n(p)$ представления связаны преобразованием Фурье:

$$\widetilde{\psi}_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_n(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx, \ \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \widetilde{\psi}_n(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp.$$

Функция $f_1(\vec{r},t)$ в соответствии с (1.22) и (1.5) примет вид:

$$f_{1,n}(x) = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \tag{1.23}$$

Построим функции $f_{2,n}(x,v)$, удовлетворяющие второму уравнению Власова и дающие при интегрировании (1.3) функцию (1.23). Используя аппроксимацию Власова (1.20) и заменяя $\vec{F} = -\nabla_r U_1$, получим

$$v\frac{\partial}{\partial x}f_{2,n}(x,v) - \omega^2 x \frac{\partial}{\partial v}f_{2,n}(x,v) = 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x,v)dv = f_{1,n}(x). \tag{1.24}$$

Решение уравнения (1.24) может быть найдено методом характеристик. Характеристиками будут являться концентрические фазовые траектории, вдоль которых энергия системы остаётся постоянной

$$\varepsilon(x,p) = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) = const,$$

$$f_{2,n}(x,v) = F_n(\varepsilon(x,mv)),$$
(1.25)

где F_n некоторая функция, вид которой необходимо определить из условия (1.24), то есть

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F_n(\varepsilon(x,p)) dp = \frac{m}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} H_n^2\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \tag{1.26}$$

В правой (1.26)части выражения стоит произведение экспоненциальной функции на многочлен. Простейшей функцией, интегрирование которой даёт произведение экспоненциальной функции и многочлена является функция такого же вида. Взятие интеграла от такой функции сводится к методу интегрирования по частям. Таким образом функцию F_n можно представить в виде

$$F_{n}(\varepsilon) = C \cdot e^{-A\varepsilon} P_{n}(\varepsilon) = C \cdot e^{-A\frac{m\omega x^{2}}{2\hbar}} e^{-\frac{A}{\hbar\omega}\frac{p^{2}}{2m}} P_{n}\left(\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}x^{2}}{2}\right)\right), \quad (1.27)$$

где C — некоторая константа, а $P_n(\varepsilon) = \sum_{k=0}^n a_k^{(n)} \varepsilon^k$ — некоторый полином степени n, вид которого необходимо определить. Подставляя представление (1.27) в выражение (1.26), получим

$$C \cdot e^{-A\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{A}{\hbar\omega}\frac{p^2}{2m}} P_n \left(\frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \right) dp = \frac{m}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right),$$

отсюда
$$A=2$$
, $C=\frac{m}{2^n n! \sqrt{\hbar \omega m}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\overline{p}^2} P_n \left(\frac{\overline{p}^2}{2} + \frac{\overline{x}^2}{2} \right) d\overline{p} = H_n^2 (\overline{x}), \tag{1.28}$$

где произведена замена переменных $\overline{p} = \frac{p}{\sqrt{\hbar \omega m}}, \overline{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$. Рассмотрим выражение (1.28) для различных значений n. Преобразуем выражение (1.28)

$$\sum_{k=0}^{n} a_{k}^{(n)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^{2}} \left(\frac{\bar{p}^{2}}{2} + \frac{\bar{x}^{2}}{2} \right)^{k} d\bar{p} = \sum_{s,l=0}^{n} b_{s}^{(n)} b_{l}^{(n)} \bar{x}^{s+l},$$

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{a_{k}^{(n)}}{2^{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^{2}} \left(\bar{p}^{2} + \bar{x}^{2} \right)^{k} d\bar{p} = \sum_{k=0}^{n} \frac{a_{k}^{(n)}}{2^{k}} \sum_{j=0}^{k} C_{k}^{j} \bar{x}^{2(k-j)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^{2}} \bar{p}^{2j} d\bar{p} = \sum_{s,l=0}^{n} b_{s}^{(n)} b_{l}^{(n)} \bar{x}^{s+l}, (1.29)$$

где $b_s^{(n)}$ — известные коэффициенты полиномов Эрмита; C_k^j —число сочетаний. При вычислении интеграла (1.29) воспользуемся формулой

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\overline{p}^2} \, \overline{p}^{2j} d\overline{p} = \frac{|2j-1|!!}{2^j} \sqrt{\pi},$$

$$\sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{n} \frac{a_k^{(n)}}{2^k} \sum_{j=0}^{k} C_k^j \frac{|2j-1|!!}{2^j} \overline{x}^{2(k-j)} = \sum_{s,l=0}^{n} b_s^{(n)} b_l^{(n)} \overline{x}^{s+l}.$$
(1.30)

Приравнивая коэффициенты, справа и слева в выражении (1.30) при одинаковых степенях \overline{x} получим значения искомых коэффициентов $a_k^{(n)}$,

которые соответствуют коэффициентам полиномов Лагерра $L_n(4\varepsilon)$. В результате искомая функция $F_n(\varepsilon)$ (1.27) принимает вид:

$$F_{n}(\varepsilon) = \frac{\left(-1\right)^{n} m}{\pi \hbar} e^{-2\varepsilon} L_{n}(4\varepsilon), \qquad (1.31)$$

или

$$f_{2,n}(x,v) = \frac{(-1)^n m}{\pi \hbar} e^{-\frac{m}{\hbar \omega} (v^2 + \omega^2 x^2)} L_n \left(\frac{2m}{\hbar \omega} (v^2 + \omega^2 x^2) \right).$$

Полученная функция (1.31) называется функцией Вигнера для квантового гармонического осциллятора $W_n(x,p) = \frac{1}{m} f_{2,n}\left(x,\frac{p}{m}\right)$ в фазовом пространстве (x,p). Так как полиномы Лагерра имеют области отрицательных значений, то функцию (1.31) называют функцией квазиплотности вероятностей.

§1.2 Функция Вигнера и уравнение Моэля

Заметим, что приведенный в §1.1 метод построения функции $f_{2,n}(x,v)$ отличен от исторического подхода, в котором Е. Вигнер сначала феноменологически определил функцию [1]

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi\left(x + \frac{s}{2}\right) \overline{\Psi}\left(x - \frac{s}{2}\right) \exp\left(-i\frac{ps}{\hbar}\right) ds, \tag{1.32}$$

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\tilde{\Psi}}\left(p - \frac{\xi}{2}\right) \tilde{\Psi}\left(p + \frac{\xi}{2}\right) \exp\left(i\frac{x\xi}{\hbar}\right) d\xi,$$

подставляя в которую волновые функции (1.32) можно получить выражение (1.31). В обоих случаях получается одно и то же выражение (1.31), но в

приведенном здесь подходе отсутствует феноменология, кроме аппроксимации Власова (1.20).

Функция Вигнера (1.32) удовлетворяет уравнению Моэля, которое получается из уравнения фон Неймана для матрицы плотности $i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]$. Для этого функция Вигнера $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ определяется через матрицу плотности:

$$W(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho}(t) \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^3 s, \qquad (1.33)$$

где обозначения $| \ \rangle, \langle \ | \$ соответствуют векторам состояния в терминах Дираковского формализма. Используя выражение для гамильтонана $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_1 \Big(\hat{r}\Big)$ и уравнение фон Неймана, сделаем следующие преобразования [10]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho}(t) \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle = \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \left[\hat{H}, \hat{\rho} \right] \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\vec{r}, \vec{p}, t) = -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3 \hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \left[\hat{H}, \hat{\rho} \right] \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^3 s =$$

$$= -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3 \hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \frac{1}{2m} \left(\hat{p}^2 \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{p}^2 \right) + U_1 \left(\hat{r} \right) \hat{\rho} - \hat{\rho} U_1 \left(\hat{r} \right) \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^3 s,$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \mathcal{T} + \mathcal{U},\tag{1.34}$$

где

$$\mathcal{T} = -\frac{i}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}\hbar} \frac{1}{2m} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{p}^{2}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{p}^{2} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s, \tag{1.35}$$

$$\mathcal{U} = -\frac{i}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}\hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| U_{1}\left(\hat{r}\right)\hat{\rho} - \hat{\rho}U_{1}\left(\hat{r}\right) \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s. \quad (1.36)$$

Выразим выражения (1.35) и (1.36) через W. Преобразуем выражения (1.35) и (1.36)

$$\left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| U_1(\hat{r}) \hat{\rho} - \hat{\rho} U_1(\hat{r}) \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle = \left[U_1(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}) - U_1(\vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}) \right] \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle, \tag{1.37}$$

Разложим выражение U_1 в ряд Тейлора

$$U_1\left(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}\right) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\vec{s}}{2} \cdot \nabla_r\right)^n U_1\left(\vec{r}\right), \quad U_1\left(\vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}\right) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^n}{n!} \left(\frac{\vec{s}}{2} \cdot \nabla_r\right)^n U_1\left(\vec{r}\right),$$

получим

$$U_{1}\left(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}\right) - U_{1}\left(\vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}\right) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1 - \left(-1\right)^{n}}{n!} \left(\frac{\vec{s}}{2} \cdot \nabla_{r}\right)^{n} U_{1}(\vec{r}) =$$

$$= 2\sum_{l=0}^{+\infty} \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{\vec{s}}{2} \cdot \nabla_{r}\right)^{2l+1} U_{1}(\vec{r}) = i\hbar \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(i\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} \left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar} \cdot \nabla_{r}\right)^{2l+1} U_{1}(\vec{r}).$$

$$(1.38)$$

Справедливо следующее соотношение

$$\exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)\left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar}\cdot\nabla_{r}\right)^{2l+1}U_{1}(\vec{r}) = \left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)^{2l+1}\exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)U_{1}(\vec{r}). \tag{1.39}$$

Выражения (1.39) можно проверить непосредственным дифференцированием, действительно

$$\begin{split} &\left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)^{2l+1}\exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)U_{1}(\vec{r}) = \underbrace{\left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)...\left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)}_{2l+1}\exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)U_{1}(\vec{r}) = \\ &= \underbrace{\left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)...\left(\nabla_{p}\exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)\cdot\nabla_{r}\right)}_{2l+1}U_{1}(\vec{r}) = \underbrace{\left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)...\left(\nabla_{p}\cdot\nabla_{r}\right)}_{2l}\exp\left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar}\cdot\nabla_{r}\right)U_{1}(\vec{r}) = \\ &= ... = \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)\underbrace{\left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar}\cdot\nabla_{r}\right)...\left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar}\cdot\nabla_{r}\right)}_{2l+1}U_{1}(\vec{r}) = \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right)\left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar}\cdot\nabla_{r}\right)^{2l+1}U_{1}(\vec{r}). \end{split}$$

Подставим (1.39), (1.38), (1.37) в (1.36), получим

$$\mathcal{U} = -\frac{i}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}\hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left[U_{1}\left(\vec{r} + \frac{\vec{s}}{2}\right) - U_{1}\left(\vec{r} - \frac{\vec{s}}{2}\right) \right] \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \right| \hat{\rho} \left| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s =$$

$$= \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\left(i\hbar/2\right)^{2l}}{\left(2l+1\right)!} \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left(-i\frac{\vec{s}}{\hbar} \cdot \nabla_{r}\right)^{2l+1} U_{1}(\vec{r}) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \right| \hat{\rho} \left| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s =$$

$$= \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\left(i\hbar/2\right)^{2l}}{\left(2l+1\right)!} \left(\nabla_{p} \cdot \nabla_{r}\right)^{2l+1} U_{1}(\vec{r}) \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3}} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar}\right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \right| \hat{\rho} \left| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s =$$

$$= \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{l} \left(\hbar/2\right)^{2l}}{\left(2l+1\right)!} \left(\nabla_{p} \cdot \nabla_{r}\right)^{2l+1} U_{1}(\vec{r}) W(\vec{r}, \vec{p}, t). \tag{1.40}$$

Заметим, что в выражении оператор ∇_r действует только на потенциал $U(\vec{r})_1$ и не действует на функцию $W(\vec{r},\vec{p},t)$. Поэтому перепишем (1.40) в виде

$$\mathcal{U} = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{l} \left(\hbar/2\right)^{2l}}{\left(2l+1\right)!} U_{1}(\vec{r}) \left(\vec{\nabla}_{r} \cdot \vec{\nabla}_{p}\right)^{2l+1} W(\vec{r}, \vec{p}, t). \tag{1.41}$$

Преобразуем выражение (1.35). Введем обозначения $x'_{\mu}=x_{\mu}-\frac{s_{\mu}}{2},\ x''_{\mu}=x_{\mu}+\frac{s_{\mu}}{2},\ \text{отсюда}\ \ x_{\mu}=\frac{x'_{\mu}+x''_{\mu}}{2},\ \ s_{\mu}=x''_{\mu}-x'_{\mu}.$ Производные по компонентам будут иметь вид

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial \left(x_{\mu} + s_{\mu}/2\right)} &= \frac{\partial}{\partial x_{\mu}''} = \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{\partial x_{\mu}}{\partial x_{\mu}''} + \frac{\partial}{\partial s_{\mu}} \frac{\partial s_{\mu}}{\partial x_{\mu}''} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{\partial}{\partial s_{\mu}}, \\ \frac{\partial}{\partial \left(x_{\mu} - s_{\mu}/2\right)} &= \frac{\partial}{\partial x_{\mu}''} = \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{\partial x_{\mu}}{\partial x_{\mu}''} + \frac{\partial}{\partial s_{\mu}} \frac{\partial s_{\mu}}{\partial x_{\mu}''} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} - \frac{\partial}{\partial s_{\mu}}, \\ \frac{\partial^{2}}{\partial \left(x_{\mu} + s_{\mu}/2\right)^{2}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\mu}^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\mu}\partial s_{\mu}} + \frac{\partial^{2}}{\partial s_{\mu}^{2}}, \\ \frac{\partial^{2}}{\partial \left(x_{\mu} - s_{\mu}/2\right)^{2}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\mu}^{2}} - \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\mu}\partial s_{\mu}} + \frac{\partial^{2}}{\partial s_{\mu}^{2}}. \end{split}$$

Выражение (1.35) примет вид:

$$\left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{p}^{2} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{p}^{2} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle = -2\hbar^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\alpha} \partial s_{\alpha}} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle =$$

$$= -2\hbar^{2} \left(\nabla_{r}, \nabla_{s} \right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle,$$

$$\mathcal{T} = -\frac{i}{\left(2\pi\hbar \right)^{3} \hbar} \frac{1}{2m} \int_{(\infty)}^{\infty} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar} \right) \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{p}^{2} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{p}^{2} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s,$$

$$\mathcal{T} = \frac{i}{\left(2\pi\hbar \right)^{3} \hbar} \frac{\hbar^{2}}{m} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \int_{(\infty)}^{\infty} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar} \right) \frac{\partial}{\partial s_{\mu}} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle d^{3}s =$$

$$= \frac{i}{\left(2\pi\hbar \right)^{3} \hbar} \frac{\hbar^{2}}{m} \left(i\frac{p_{\mu}}{\hbar} \right) \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \int_{(\infty)}^{\infty} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar} \right) d^{3}s =$$

$$= -\frac{p_{\mu}}{m} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{1}{\left(2\pi\hbar \right)^{3}} \int_{(\infty)}^{\infty} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar} \right) d^{3}s =$$

$$= -\frac{p_{\mu}}{m} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{1}{\left(2\pi\hbar \right)^{3}} \int_{(\infty)}^{\infty} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar} \right) d^{3}s =$$

$$= -\frac{p_{\mu}}{m} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{1}{\left(2\pi\hbar \right)^{3}} \int_{(\infty)}^{\infty} \left\langle \vec{r} + \frac{\vec{s}}{2} \middle| \hat{\rho} \middle| \vec{r} - \frac{\vec{s}}{2} \right\rangle \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{s}}{\hbar} \right) d^{3}s =$$

$$\mathcal{T} = -\frac{1}{m} (\vec{p} \cdot \nabla_r) W(\vec{r}, \vec{p}, t). \tag{1.42}$$

Подставляя (1.41) и (1.42) в (1.34) получим уравнение Моэля для $W(\vec{r},\vec{p},t)$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{m} (\vec{p} \cdot \nabla_r) W = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^l \left(\hbar/2\right)^{2l}}{\left(2l+1\right)!} U_1 (\vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_p)^{2l+1} W, \tag{1.43}$$

ИЛИ

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{m} \vec{p} \cdot \nabla_r W - \nabla_r U_1 \cdot \nabla_p W = \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^l \left(\hbar/2\right)^{2l}}{\left(2l+1\right)!} U_1 \left(\vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_p\right)^{2l+1} W.$$

В классическом пределе при $\hbar \to 0$ уравнение Моэля (1.43) переходит в уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\{W, H\},\,$$

где $\{\cdot,\cdot\}$ — скобки Пуассона. Заметим, что уравнение Моэля (1.43) получено в предположении, что потенциал U_1 является аналитической функцией.

§1.3 Аппроксимация Власова-Моэля

Сравнивая уравнение Моэля (1.43) и второе уравнение Власова (1.14) видно, что уравнение Моэля является частным случаем уравнения Власова с аппроксимацией векторного поля ускорений $\langle \vec{v} \rangle (\vec{r}, \vec{v}, t)$:

$$\left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_{\mu}^{2n+1}} \frac{1}{f_2} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_{\mu}^{2n}}, \tag{1.44}$$

которая называется аппроксимация Власова-Моэля [60]. Действительно, подставляя аппроксимацию (1.44) в уравнение Власова (1.14), получим

$$\frac{\partial f_{2}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{r} f_{2} - \frac{1}{m} \nabla_{r} U_{1} \cdot \nabla_{v} f_{2} =
= -\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_{1}}{\partial x_{\mu}^{2n+1}} \left[f_{2} \frac{\partial}{\partial v_{\mu}} \left(\frac{1}{f_{2}} \frac{\partial^{2n} f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n}} \right) + \frac{1}{f_{2}} \frac{\partial f_{2}}{\partial v_{\mu}} \frac{\partial^{2n} f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n}} \right],$$
(1.45)

Учитывая, что $f_2 \frac{\partial}{\partial v_\mu} \left(\frac{1}{f_2} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} \right) + \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} = \frac{\partial^{2n+1} f_2}{\partial v_\mu^{2n+1}}$, выражение (1.45) переходит в уравнение Моэля (1.43).

Заметим, что первое слагаемое в ряде (1.44) при $n\!=\!0$ совпадает с аппроксимацией Власова (1.20) $\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle = -\frac{1}{m} \nabla_r U_1$. Последующие слагаемые ряда (1.44) имеют множители \hbar^{2n} и при классическом переходе ($\hbar\!\to\!0$) дают малый вклад (при условии ограниченности производных от функции f_2 и U_1). Таким образом аппроксимация (1.20) может быть применима в классической физике. На микроуровне аппроксимация Власова-Моэля (1.44) является корректнее, так как содержит дополнительную информацию о зависимости $\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle (\vec{r}, \vec{v}, t)$ от переменных скорости \vec{v} , что влечет за собой наличие источников диссипаций Q_2 (1.14), (1.16):

$$Q_{2} = \frac{\partial}{\partial v_{\mu}} \langle \dot{v}_{\mu} \rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_{1}}{\partial x_{\mu}^{2n+1}} \frac{\partial}{\partial v_{\mu}} \left(\frac{1}{f_{2}} \frac{\partial^{2n} f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n}}\right), \tag{1.46}$$

Вычислим среднее значение $\langle Q_2 \rangle$. Из выражения (1.46) получим

$$f_{1}\langle Q_{2}\rangle = \int_{(\infty)} f_{2}Q_{2}d^{3}v = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1}U_{1}}{\partial x_{\mu}^{2n+1}} \int_{(\infty)} \frac{\partial^{2n+1}f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n+1}} d^{3}v + \\ + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1}U_{1}}{\partial x_{\mu}^{2n+1}} \int_{(\infty)} \frac{1}{f_{2}} \frac{\partial f_{2}}{\partial v_{\mu}} \frac{\partial^{2n}f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n}} d^{3}v.$$

$$(1.47)$$

Первый интеграл в выражении (1.47) равен нулю. Вычислим второй интеграл

$$\int_{(\infty)} \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v = \int_{(\infty)} \frac{\partial S_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v = \frac{\partial S_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n-1} f_2}{\partial v_\mu^{2n-1}} \bigg|_{\infty} - \int_{(\infty)} \frac{\partial^2 S_2}{\partial v_\mu^2} \frac{\partial^{2n-1} f_2}{\partial v_\mu^{2n-1}} d^3 v = \\
= -\int_{(\infty)} \frac{\partial^2 S_2}{\partial v_\mu^2} \frac{\partial^{2n-1} f_2}{\partial v_\mu^{2n-1}} d^3 v, \tag{1.48}$$

где учтено, что частные производные $\frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v^{2n}}$ стремятся к нулю бесконечности достаточно быстро [68, 69]. Повторяя процедуру (1.48) kраз (k = 2n), получим

$$\int_{(\infty)} \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v = \left(-1\right)^k \int_{(\infty)} \frac{\partial^{k+1} S_2}{\partial v_\mu^{k+1}} \frac{\partial^{2n-k} f_2}{\partial v_\mu^{2n-k}} d^3 v = \left(-1\right)^{2n} \int_{(\infty)} f_2 \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} d^3 v = f_1 \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} \right\rangle,$$

$$\left\langle Q_2 \right\rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^n \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} \right\rangle.$$
(1.49)

(1.49)

Используя выражение (1.49), вычислим среднее значение $\left\langle \left\langle Q_{\scriptscriptstyle 2} \right\rangle \right\rangle$

$$N(t)\langle\langle Q_2\rangle\rangle(t) = \int_{(\infty)} f_1\langle Q_2\rangle d^3r = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^n \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \int_{(\infty)} f_1 \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} \right\rangle d^3r,$$

$$\left\langle \left\langle Q_{2} \right\rangle \right\rangle \left(t\right) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} U_{1}}{\partial x_{\mu}^{2n+1}} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n+1}} \right\rangle \right\rangle. \tag{1.50}$$

Все члены ряда (1.50) содержат множители \hbar^{2n} , поэтому при ограниченных производных от функций U_1 и S_2 , будут вносить малый вклад при классическом переходе ($\hbar \to 0$). Следовательно, H_2 -функция Больцмана (см. уравнение (1.16)) в системе с постоянным числом частиц будет почти стационарной в классическом пределе.

В гидродинамическом представлении уравнение движения (1.19) содержит внешнюю силу, определяемую слагаемым $\left\langle \left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle \right\rangle$. Используя аппроксимацию Власова-Моэля (1.44) можно вычислить значение $\left\langle \left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle \right\rangle$

$$\begin{split} f_1 \left\langle \left\langle \dot{v}_\mu \right\rangle \right\rangle &= \int\limits_{(\infty)} \left\langle \dot{v}_\mu \right\rangle f_2 d^3 v = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x_\mu} f_1 + \frac{\left(\hbar/2\right)^2}{3! m^3} \frac{\partial^3 U_1}{\partial x_\mu^3} \int\limits_{(\infty)} \frac{\partial^2 f_2}{\partial v_\mu^2} d^3 v - \\ &- \frac{\left(\hbar/2\right)^4}{5! m^5} \frac{\partial^5 U_1}{\partial x_\mu^5} \int\limits_{(\infty)} \frac{\partial^4 f_2}{\partial v_\mu^4} d^3 v + \ldots + \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1} \left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \int\limits_{(\infty)} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v + \ldots = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x_\mu} f_1, \end{split}$$
 таким образом

$$\left\langle \left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle \right\rangle = -\frac{1}{m} \frac{\partial U_{1}}{\partial x_{\mu}}.$$
 (1.51)

Из выражения (1.51) следует, что на макроуровне (в гидродинамическом приближении) информация о «квантовых поправках» нивелируется, так как выражение (1.51) получается и при использовании обычной аппроксимации Власова (1.20) $\left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle = -\frac{1}{m} \frac{\partial U_1}{\partial x_{\mu}}$.

§1.4 Уравнение Шрёдингера в фазовом пространстве

Особенностью функции Вигнера *W* как функции квази-плотности вероятностей квантовой системы в фазовом пространстве является наличие отрицательных значений (1.31). По теореме Хадсона [72] только гауссово распределение функции (1.32), соответствующее основному состоянию гармонического осциллятора является положительным, в остальных случаях функция Вигнера всегда будет иметь области отрицательных значений.

Построение положительной функции плотности вероятности $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ в фазовом пространстве возможно произвести различными феноменологическими способами [27-30]. Приведем пример. Функция Вигнера $W_n(x,p)$ для гармонического осциллятора имеет вид (1.31). В силу построения функции Вигнера выражение (1.31) удовлетворяет условиям:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W_n(x,p) dp = \left| \psi_n(x) \right|^2, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} W_n(x,p) dx = \left| \tilde{\psi}_n(p) \right|^2, \quad (1.52)$$

где ψ_n и $\tilde{\psi}_n$ — волновые функции гармонического осциллятора в координатном и импульсном представлении соответственно (1.22). Основному состоянию (n=0) соответствует функция $W_0(x,p)$, которая является положительной во всей фазовой плоскости. Функции $W_n(x,p)$ при n>0 имеют области отрицательных значений. Вместо функций $W_n(x,p)$, n>0 рассмотрим функции

$$f_n(x,p) = |\psi_n(x)|^2 |\tilde{\psi}_n(p)|^2,$$
 (1.53)

которые являются положительными во всей фазовой плоскости и удовлетворяют условиям (1.52). Множество функций (1.53) можно

расширить путем добавления к f_n функций $g_n(x,p)$, для которых $\int g_n dp = \int g_n dx = 0 \text{ и } |g_n| < f_n \, .$

1.4.1 Метод Торреса-Вега

Другим способом построения положительной функции $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ является введение аналога уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве для волновой функции $\Psi(\vec{r}, \vec{p}, t)$, зависящей от координаты и импульса. В этом случае функция $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ представима в виде $\left|\Psi(\vec{r}, \vec{p}, t)\right|^2 \ge 0$. В работах [14-15] феноменологическим способом, на основе Ворр-операторов [77], было предложено построение уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_{T-V}\left(x + i\hbar\frac{\partial}{\partial p}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi = \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V\left(q + i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\Psi, \quad (1.54)$$

где $\hat{\mathbf{H}}_{T-V}$ оператор Гамильтона (Torres-Vega), который для гармонического осциллятора имеет вид:

$$\hat{H}_{T-V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} \left(x + i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^2.$$
 (1.55)

Уравнения (1.54) с гамильтонианом (1.55) дает решение:

$$\Psi_{n}(x,p) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar^{n+1}\pi n!\omega^{n}}} \left(\sqrt{\frac{m\omega^{2}}{2}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m}}\right)^{n} e^{-\frac{1}{2\hbar\omega}\left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}x^{2}}{2}\right) + i\frac{px}{2\hbar}}.$$
 (1.56)

Волновым функциям (1.56) соответствуют функции плотности вероятностей $f_n(x,p)$:

$$f_{n}(x,p) = \left|\Psi_{n}(x,p)\right|^{2} = \frac{1}{2\pi\hbar n!} \varepsilon(x,p)^{n} e^{-\varepsilon(x,p)},$$

$$\varepsilon(x,p) = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}x^{2}}{2}\right).$$
(1.57)

Заметим, что функции (1.57) не удовлетворяют условиям (1.52) даже для основного состояния (n=0).

1.4.2 Построение на основе теоремы Гельмгольца

Рассмотрим построение аналога уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве из первых принципов. В качестве первого принципа возьмем закон сохранения вероятностей. Построение аналога уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве произведем на основе второго уравнения Власова (1.14) для функции распределения $f_2(\vec{r},\vec{v},t)$. Представим положительную функцию плотности вероятностей $f_2 = |\Psi_2|^2 = \Psi_2 \overline{\Psi}_2 \ge 0$, а векторное поле потока вероятностей $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$ разложим по теореме Гельмгольца в пространстве скоростей:

$$\langle \dot{\vec{v}} \rangle (\vec{r}, \vec{v}, t) = -\alpha_2 \nabla_v \Phi_2(\vec{r}, \vec{v}, t) + \gamma_2 \vec{A}_2(\vec{r}, \vec{v}, t), \operatorname{div}_v \vec{A}_2 = 0.$$
 (1.58)

где α_2, γ_2 — некоторые действительные константы, а Φ_2 — скалярный потенциал поля $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$, а \vec{A}_2 — вихревая компонента поля $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$. Преобразуем выражение (1.58)

$$\left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle = i^2 \alpha_2 \nabla_v \Phi_2 + \gamma_2 \vec{A}_2 = i \alpha_2 \nabla_v \left(\ln \left| \frac{\Psi_2}{\overline{\Psi}_2} \right| + i \Phi_2 \right) + \gamma_2 \vec{A}_2. \tag{1.59}$$

Так как функция Ψ_2 является комплексной, то для нее справедлива показательная форма представления в виде:

$$\Psi_2(\vec{r}, \vec{v}, t) = |\Psi_2(\vec{r}, \vec{v}, t)| e^{i\varphi_2(\vec{r}, \vec{v}, t)}, \qquad (1.60)$$

где φ_2 – фаза. Учитывая представление (1.60) функция $\frac{\Psi_2}{\overline{\Psi}_2}$ примет вид:

$$\frac{\Psi_2}{\overline{\Psi}_2} = e^{i2\varphi_2} \Rightarrow \operatorname{Arg}\left[\frac{\Psi_2}{\overline{\Psi}_2}\right] = 2\varphi_2 + 2\pi k \stackrel{\text{det}}{=} \Phi_2. \tag{1.61}$$

Таким образом, потенциал Φ_2 поля $\left\langle \vec{v} \right\rangle$ в (1.61) был определен как аргумент комплексной функции $\frac{\Psi_2}{\overline{\Psi}_2}$. Учитывая введенное обозначение (1.61), перепишем выражение (1.59), получим:

$$\langle \dot{\vec{v}} \rangle = i\alpha_{2}\nabla_{v} \left(\ln \left| \frac{\Psi_{2}}{\overline{\Psi}_{2}} \right| + i \operatorname{Arg} \left[\frac{\Psi_{2}}{\overline{\Psi}_{2}} \right] \right) + \gamma_{2}\vec{A}_{2} = i\alpha_{2}\nabla_{v} \operatorname{Ln} \left[\frac{\Psi_{2}}{\overline{\Psi}_{2}} \right] + \gamma_{2}\vec{A}_{2} = i\alpha_{2}\nabla_{v} \left[\operatorname{Ln} (\Psi_{2}) - \operatorname{Ln} (\overline{\Psi}_{2}) \right] + \gamma_{2}\vec{A}_{2} = i\alpha_{2} \left[\frac{\nabla_{v}\Psi_{2}}{\Psi_{2}} - \frac{\nabla_{v}\overline{\Psi}_{2}}{\overline{\Psi}_{2}} \right] + \gamma_{2}\vec{A}_{2}.$$

$$(1.62)$$

Подставляя (1.62) в уравнение (1.14) и учитывая независимость переменных \vec{r} и \vec{v} , получим

$$\bar{\Psi}_{2} \frac{\partial \Psi_{2}}{\partial t} + \Psi_{2} \frac{\partial \bar{\Psi}_{2}}{\partial t} + \bar{\Psi}_{2} (\vec{v}, \nabla_{r} \Psi_{2}) + \Psi_{2} (\vec{v}, \nabla_{r} \bar{\Psi}_{2}) +
+ i\alpha_{2} \operatorname{div}_{v} \left[\bar{\Psi}_{2} \nabla_{v} \Psi_{2} - \Psi_{2} \nabla_{v} \bar{\Psi}_{2} - i \frac{\gamma_{2}}{\alpha_{2}} \Psi_{2} \bar{\Psi}_{2} \vec{A}_{2} \right] = 0,$$
(1.63)

Учитывая, что

$$\operatorname{div}_{v}\left[\overline{\Psi}_{2}\nabla_{v}\Psi_{2} - \Psi_{2}\nabla_{v}\overline{\Psi}_{2}\right] = \overline{\Psi}_{2}\Delta_{v}\Psi_{2} - \Psi_{2}\Delta_{v}\overline{\Psi}_{2},$$

$$\operatorname{div}_{v}\left[\Psi_{2}\overline{\Psi}_{2}\vec{A}_{2}\right] = \overline{\Psi}_{2}\left(\vec{A}_{2},\nabla_{v}\Psi_{2}\right) + \Psi_{2}\left(\vec{A}_{2},\nabla_{v}\overline{\Psi}_{2}\right),$$

уравнение (1.63) примет вид:

$$\begin{split} & \bar{\Psi}_{2} \frac{\partial \Psi_{2}}{\partial t} + \Psi_{2} \frac{\partial \bar{\Psi}_{2}}{\partial t} + \bar{\Psi}_{2} (\vec{v}, \nabla_{r} \Psi_{2}) + \Psi_{2} (\vec{v}, \nabla_{r} \bar{\Psi}_{2}) + \\ & + i \alpha_{2} (\bar{\Psi}_{2} \Delta_{v} \Psi_{2} - \Psi_{2} \Delta_{v} \bar{\Psi}_{2}) + \bar{\Psi}_{2} (\gamma_{2} \vec{A}_{2}, \nabla_{v} \Psi_{2}) + \Psi (\gamma_{2} \vec{A}_{2}, \nabla_{v} \bar{\Psi}_{2}) = 0. \end{split}$$

или

$$\bar{\Psi}_{2} \left[\frac{\partial \Psi_{2}}{\partial t} + (\vec{v}, \nabla_{r} \Psi_{2}) + i\alpha_{2} \Delta_{v} \Psi_{2} + \gamma_{2} (\vec{A}_{2}, \nabla_{v} \Psi_{2}) \right] +
+ \Psi_{2} \left[\frac{\partial \bar{\Psi}_{2}}{\partial t} + (\vec{v}, \nabla_{r} \bar{\Psi}_{2}) - i\alpha_{2} \Delta_{v} \bar{\Psi}_{2} + \gamma_{2} (\vec{A}_{2}, \nabla_{v} \bar{\Psi}_{2}) \right] = 0.$$
(1.64)

Введем обозначение дифференциальных операторов:

$$\hat{\mathbf{p}}_{1} \stackrel{\text{det}}{=} -\frac{i}{\beta_{1}} \nabla_{r}, \, \hat{\mathbf{p}}_{1}^{2} = -\frac{1}{\beta_{1}^{2}} \Delta_{r}, \, \hat{\mathbf{p}}_{2} \stackrel{\text{det}}{=} -\frac{i}{\beta_{2}} \nabla_{v}, \quad \hat{\mathbf{p}}_{2}^{2} = -\frac{1}{\beta_{2}^{2}} \Delta_{v}, \quad (1.65)$$

где $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$, $\beta_k \neq 0$, k = 1, 2. Используя обозначения (1.65) выражение (1.64) примет вид:

$$\begin{split} & \bar{\Psi}_{2} \left[\frac{1}{\beta_{2}} \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\beta_{1}}{\beta_{2}} (\vec{v}, \hat{p}_{1}) - i \alpha_{2} \beta_{2} \left(\hat{p}_{2}^{2} - \frac{\gamma_{2}}{\alpha_{2} \beta_{2}} (\vec{A}_{2}, \hat{p}_{2}) \right) \right] \Psi_{2} + \\ & + \Psi_{2} \left[\frac{1}{\beta_{2}} \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{\beta_{1}}{\beta_{2}} (\vec{v}, \bar{\hat{p}}_{1}) + i \alpha_{2} \beta_{2} \left(\bar{\hat{p}}_{2}^{2} - \frac{\gamma_{2}}{\alpha_{2} \beta_{2}} (\vec{A}_{2}, \bar{\hat{p}}_{2}) \right) \right] \bar{\Psi}_{2} = 0. \end{split}$$

$$(1.66)$$

Выражение (1.66) можно записать в другом виде, если учесть, что

$$\hat{p}_{2}^{2} - \frac{\gamma_{2}}{\alpha_{2}\beta_{2}} (\vec{A}_{2}, \hat{p}_{2}) = \left(\hat{p}_{2} - \frac{\gamma_{2}}{2\alpha_{2}\beta_{2}} \vec{A}_{2} \right)^{2} - \frac{\gamma_{2}^{2}}{4\alpha_{2}^{2}\beta_{2}^{2}} |\vec{A}_{2}|^{2},$$

тогда

$$\overline{\Psi}_{2} \left[\frac{1}{\beta_{2}} \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\beta_{1}}{\beta_{2}} (\vec{v}, \hat{p}_{1}) - i \alpha_{2} \beta_{2} \left(\hat{p}_{2} - \frac{\gamma_{2}}{2\alpha_{2}\beta_{2}} \vec{A}_{2} \right)^{2} \right] \Psi_{2} +
+ \Psi_{2} \left[\frac{1}{\beta_{2}} \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{\beta_{1}}{\beta_{2}} (\vec{v}, \overline{\hat{p}}_{1}) + i \alpha_{2} \beta_{2} \left(\overline{\hat{p}}_{2} - \frac{\gamma_{2}}{2\alpha_{2}\beta_{2}} \vec{A}_{2} \right)^{2} \right] \overline{\Psi}_{2} = 0.$$
(1.67)

Таким образом, можно работать как с выражением (1.66), так и с выражением (1.67). Рассмотрим выражением (1.66). Введем обозначение линейного оператора \mathcal{L} :

$$\mathcal{L} = -\frac{i}{\beta_2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\beta_1}{\beta_2} (\vec{v}, \hat{p}_1) - \alpha_2 \beta_2 \left(\hat{p}_2^2 - \frac{\gamma_2}{\alpha_2 \beta_2} (\vec{A}_2, \hat{p}_2) \right), \tag{1.68}$$

Используя обозначение (1.68) уравнение (1.66) примет вид:

$$\overline{\Psi}_2 \mathcal{L} \Psi_2 - \Psi_2 \overline{\mathcal{L}} \overline{\Psi}_2 = 0,$$

или

$$M - \overline{M} = 0, \tag{1.69}$$

где $M = \overline{\Psi}_2 \mathcal{L} \Psi_2$. Выражение (1.69) означает, что Im M = 0. Если мнимая часть равна нулю, значит, M является действительной величиной, то есть:

$$M = m \in \mathbb{R}$$
,

или

$$\overline{\Psi}_{2}\mathcal{L}\Psi_{2} = m, \ \mathcal{L}\Psi_{2} = \frac{m}{\overline{\Psi}_{2}} = \frac{m}{\overline{\Psi}_{2}} \frac{\Psi_{2}}{\Psi_{2}} = \frac{m}{|\Psi_{2}|^{2}} \Psi_{2} = -U_{2}\Psi_{2}, \ U_{2}(\vec{r}, \vec{v}, t) \in \mathbb{R},$$

$$\mathcal{L}\Psi_2 + U_2\Psi_2 = 0. \tag{1.70}$$

В результате уравнение для функции Ψ_2 примет вид:

$$\frac{i}{\beta_2} \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \frac{\beta_1}{\beta_2} (\vec{v}, \hat{p}_1) \Psi_2 - \alpha_2 \beta_2 \left(\hat{p}_2^2 - \frac{\gamma_2}{\alpha_2 \beta_2} (\vec{A}_2, \hat{p}_2) \right) \Psi_2 + U_2 \Psi_2. \tag{1.71}$$

Проделывая аналогичные выкладки для уравнения (1.67), получим уравнения для Ψ_2 в виде:

$$\frac{i}{\beta_{2}} \frac{\partial \Psi_{2}}{\partial t} = \frac{\beta_{1}}{\beta_{2}} (\vec{v}, \hat{p}_{1}) \Psi_{2} - \alpha_{2} \beta_{2} \left(\hat{p}_{2} - \frac{\gamma_{2}}{2\alpha_{2}\beta_{2}} \vec{A}_{2} \right)^{2} \Psi_{2} + V_{2} \Psi_{n}, \qquad (1.72)$$

$$V_{2} = \frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}} \frac{\left| \gamma_{2} \vec{A}_{2} \right|^{2}}{2} + U_{2}.$$

Уравнение (1.71)/(1.72) и есть искомое уравнение для волновой функции $\Psi_2(\vec{r},\vec{v},t)$. Не ограничивая общности, постоянные величины $\alpha_2,\beta_2,\gamma_2$ определим следующим образом

$$\alpha_2 = -\frac{\hbar_2}{2m}, \quad \beta_2 = \frac{1}{\hbar_2}, \qquad \gamma_2 = -\frac{q}{m},$$
 (1.73)

где h_2, q — некоторые постоянные значения.

Выражение для потенциала $\,U_{_2}\,$ согласно (1.70) имеет вид

$$U_2 = -\frac{\overline{\Psi}_2 \mathcal{L} \Psi_2}{f_2}.$$
 (1.74)

Покажем, что выражение (1.74) определяет аналог уравнения Гамильтона-Якоби. Выполним промежуточные преобразования. Вычисляя $\Delta_{\nu}\Psi_{2}$

$$\Delta_{\nu}\Psi_{2} = e^{i\varphi_{2}}\left\{\Delta_{\nu}\left|\Psi_{2}\right| - \left|\Psi_{2}\right|\left|\nabla_{\nu}\varphi_{2}\right|^{2} + i\left[2\left(\nabla_{\nu}\varphi_{2},\nabla_{\nu}\left|\Psi_{2}\right|\right) + \left|\Psi_{2}\right|\Delta_{\nu}\varphi_{2}\right]\right\},$$

и подставляя в (1.74), получаем

$$\begin{split} & \bar{\Psi}_{2}\mathcal{L}\Psi_{2} = \frac{1}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|^{2}\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t} + \frac{1}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|^{2}\left(\vec{v},\nabla_{r}\varphi_{2}\right) + \frac{1}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|^{2}\left(\vec{v},\nabla_{v}\varphi_{2}\right) + \frac{\gamma_{2}}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|^{2}\left(\vec{A}_{2},\nabla_{v}\varphi_{2}\right) + \\ & + \frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|\left(\Delta_{v}\left|\Psi_{2}\right| - \left|\Psi_{2}\right|\left|\nabla_{v}\varphi_{2}\right|^{2}\right) - \frac{i}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|\frac{\partial\left|\Psi_{2}\right|}{\partial t} - \frac{i}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|\left(\vec{v},\nabla_{r}\left|\Psi_{2}\right|\right) + \\ & + i\frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|\left[2\left(\nabla_{v}\varphi_{2},\nabla_{v}\left|\Psi_{2}\right|\right) + \left|\Psi_{2}\right|\Delta_{v}\varphi_{2}\right] - i\frac{\gamma_{2}}{\beta_{2}}\left|\Psi_{2}\right|\left(\vec{A}_{2},\nabla_{v}\left|\Psi_{2}\right|\right), \end{split}$$

$$\begin{split} U_{2} &= -\frac{\overline{\Psi}_{2}\mathcal{L}\Psi_{2}}{\left|\Psi_{2}\right|^{2}} = -\frac{1}{\beta_{2}}\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t} - \frac{1}{\beta_{2}}\left(\vec{v},\nabla_{r}\varphi_{2}\right) - \frac{\gamma_{2}}{\beta_{2}}\left(\vec{A}_{2},\nabla_{v}\varphi_{2}\right) - \frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}}\frac{\Delta_{v}\left|\Psi_{2}\right|}{\left|\Psi_{2}\right|} + \frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}}\left|\nabla_{v}\varphi_{n}\right|^{2} + \frac{i}{\beta_{2}}\frac{1}{\left|\Psi_{2}\right|}\frac{\partial\left|\Psi_{2}\right|}{\partial t} + i\frac{\gamma_{2}}{\beta_{2}}\frac{1}{\left|\Psi_{2}\right|}\left(\vec{A}_{2},\nabla_{v}\left|\Psi_{2}\right|\right) - i\frac{2\alpha_{2}}{\beta_{2}}\frac{1}{\left|\Psi_{2}\right|}\left(\nabla_{v}\varphi_{2},\nabla_{v}\left|\Psi_{2}\right|\right) - i\frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}}\Delta_{v}\varphi_{2} + \frac{i}{\beta_{2}}\frac{1}{\left|\Psi_{2}\right|}\left(\vec{v},\nabla_{r}\left|\Psi_{2}\right|\right). \end{split} \tag{1.75}$$

Согласно определению (1.70) функция U_2 является вещественной, следовательно, мнимая часть выражения (1.75) должна обращаться в ноль, проверим это условие. Действительно, учитывая выражения (1.59), (1.61) и уравнение (1.14), получим:

$$\begin{split} &2\beta_{2}\left|\Psi_{2}\right|^{2}\operatorname{Im}U_{2} = \frac{\partial f_{2}}{\partial t} + \left(\gamma_{2}\vec{A}_{2},\nabla_{\nu}f_{2}\right) + \left(-\alpha_{2}\nabla_{\nu}\Phi_{2},\nabla_{\nu}f_{2}\right) - \alpha_{2}f_{2}\Delta_{\nu}\Phi_{2} + \left(\vec{\nu},\nabla_{r}f_{2}\right) = \\ &= \frac{\partial f_{2}}{\partial t} + \left(\vec{\nu},\nabla_{r}f_{2}\right) + \left(-\alpha_{2}\nabla_{\nu}\Phi_{2} + \gamma_{2}\vec{A}_{2},\nabla_{\nu}f_{2}\right) + f_{2}\left(\nabla_{\nu},-\alpha_{2}\nabla_{\nu}\Phi_{2} + \gamma_{2}\vec{A}_{2}\right) = \\ &= \frac{\partial f_{2}}{\partial t} + \left(\vec{\nu},\nabla_{r}f_{2}\right) + \left(\left\langle\dot{\vec{\nu}}\right\rangle,\nabla_{\nu}f_{2}\right) + f_{2}\left(\nabla_{\nu},\left\langle\dot{\vec{\nu}}\right\rangle\right) = 0. \end{split}$$

В результате для функции U_2 получаем представление:

$$U_{2}(\vec{r}, \vec{v}, t) = -\frac{1}{\beta_{2}} \frac{\partial \varphi_{2}}{\partial t} - Q_{2} + \frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}} \left| \nabla_{\nu} \varphi_{2} \right|^{2} - \frac{1}{\beta_{2}} \left(\gamma_{2} \vec{A}_{2}, \nabla_{\nu} \varphi_{n} \right) - \frac{1}{\beta_{2}} \left(\vec{v}, \nabla_{r} \varphi_{2} \right), \quad (1.76)$$

где

$$Q_{2} = \frac{\alpha_{2}}{\beta_{2}} \frac{\Delta_{\nu} |\Psi_{2}|}{|\Psi_{2}|} = \frac{\alpha_{2}}{2\beta_{2}} \left(\Delta_{\nu} S_{2} + \frac{1}{2} |\nabla_{\nu} S_{2}|^{2} \right), \quad S_{2} = \operatorname{Ln} f_{2},$$

где Q_2 — аналог квантового потенциала в теории «волны-пилота» де Бройля-Бома [73-76]. Выражение (1.76) можно переписать через оператор $\Pi_2 \varphi_2 = \frac{d_2 \varphi_2}{dt} \ [17, 66],$ действительно

$$\begin{split} &-\beta_{2}\boldsymbol{U}_{2}=\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t}+\left(\vec{\boldsymbol{v}},\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\varphi}_{2}\right)+\left(-2\alpha_{2}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\varphi}_{2},\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\varphi}_{2}\right)+\alpha_{2}\left(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\varphi}_{2},\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\varphi}_{2}\right)+\\ &+\left(\boldsymbol{\gamma}_{2}\vec{\boldsymbol{A}}_{2},\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\varphi}_{2}\right)+\alpha_{2}\frac{\Delta_{\boldsymbol{v}}\left|\boldsymbol{\Psi}_{2}\right|}{\left|\boldsymbol{\Psi}_{2}\right|}=\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t}+\left(\vec{\boldsymbol{v}},\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\varphi}_{2}\right)+\left(-\alpha_{2}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\Phi}_{2}+\boldsymbol{\gamma}_{2}\vec{\boldsymbol{A}}_{2},\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{\varphi}_{2}\right)+\\ \end{split}$$

$$\begin{split} &+\alpha_{2}\left(\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2},\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2}\right)+\alpha_{2}\frac{\Delta_{\mathbf{v}}\left|\Psi_{2}\right|}{\left|\Psi_{2}\right|}=\alpha_{2}\left(\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2},\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2}\right)+\alpha_{2}\frac{\Delta_{\mathbf{v}}\left|\Psi_{2}\right|}{\left|\Psi_{2}\right|}+\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t}+\\ &+\left(\vec{\mathbf{v}},\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2}\right)+\left(\left\langle\dot{\vec{\mathbf{v}}}\right\rangle,\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2}\right)=\alpha_{2}\left|\nabla_{\mathbf{v}}\varphi_{2}\right|^{2}+\alpha_{2}\frac{\Delta_{\mathbf{v}}\left|\Psi_{2}\right|}{\left|\Psi_{2}\right|}+\frac{d_{2}\varphi_{2}}{dt}, \end{split}$$

$$U_{2} = -\frac{1}{\beta_{2}} \left\{ \frac{d_{2}\varphi_{2}}{dt} + \alpha_{2} \left[\frac{\Delta_{\nu} |\Psi_{2}|}{|\Psi_{2}|} + \left| \nabla_{\nu} \varphi_{2} \right|^{2} \right] \right\}. \tag{1.77}$$

Из выражения (1.77) можно получить представление для Лагранжиана L_2 , действительно

$$-\frac{1}{\beta_{2}}\frac{d_{2}\varphi_{2}}{dt} = \frac{1}{4\alpha_{2}\beta_{2}}\left|\alpha_{2}\nabla_{\nu}\Phi_{2}\right|^{2} + U_{2} + Q_{2} = \frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\frac{1}{2}\left|\left\langle \dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle\right|^{2} + U_{2} + Q_{2} \stackrel{\text{det}}{=} -L_{2}, \quad (1.78)$$
 или

$$\hbar_2 \frac{d_2 \varphi_2}{dt} = \frac{m}{2} \left| \left\langle \dot{\vec{v}}_p \right\rangle \right|^2 - \left(U_2 + Q_2 \right) = L_2.$$

Фаза φ_2 при этом имеет смысл аналога действия. Заметим, что лагранжиан \mathbf{L}_2 не содержит информации о вихревом поле \vec{A}_2 . Аналогичная ситуация имеет место и в классическом случае.

Получим аналог уравнения Гамильтона-Якоби. Перепишем выражение для потенциала (1.76).

$$-\frac{1}{\beta_{2}}\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t} = \frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\frac{1}{2}\left|\left\langle\dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle\right|^{2} + U_{2} + Q_{2} + \frac{1}{2\alpha_{n}\beta_{n}}\left[\left(\vec{v},\alpha_{2}\nabla_{r}\Phi_{2}\right) + \left(\left\langle\dot{\vec{v}}\right\rangle,\left\langle\dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle\right)\right],$$

$$-\frac{1}{\beta_{2}}\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t} = -\frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\left(\left\langle\dot{\vec{v}}\right\rangle - \frac{1}{2}\left\langle\dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle,\left\langle\dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle\right) + U_{2} + Q_{2} + \frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\left(\vec{v},\alpha_{2}\nabla_{r}\Phi_{2}\right),$$

$$-\frac{1}{\beta_{2}}\frac{\partial\varphi_{2}}{\partial t} = -\frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\frac{1}{2}\left|\left\langle\dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle\right|^{2} + U_{2} + Q_{2} - \frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\left(\gamma_{2}\vec{A}_{2},\left\langle\dot{\vec{v}}_{p}\right\rangle\right) + \frac{1}{2\alpha_{2}\beta_{2}}\left(\vec{v},\alpha_{2}\nabla_{r}\Phi_{2}\right),$$

$$(1.79)$$

Уравнение (1.79) можно переписать через $\left\langle \vec{v} \right\rangle$. Согласно (1.59) $\left\langle \vec{v} \right\rangle$ можно представить в виде $\left\langle \vec{v} \right\rangle = \left\langle \vec{v}_p \right\rangle + \left\langle \vec{v}_s \right\rangle$, где $\left\langle \vec{v}_p \right\rangle = -\alpha_2 \nabla_v \Phi_2$, $\left\langle \vec{v}_s \right\rangle = \gamma_2 \vec{A}_2$, тогда справедливо выражение

$$\frac{1}{2} \left| \left\langle \dot{\vec{v}}_p \right\rangle \right|^2 + \left(\gamma_2 \vec{A}_2, \left\langle \dot{\vec{v}}_p \right\rangle \right) = \frac{1}{2} \left| \left\langle \dot{\vec{v}} \right\rangle \right|^2 - \frac{\left| \gamma_2 \vec{A}_2 \right|^2}{2}. \tag{1.80}$$

Подставляя (1.80) в (1.79), получим

$$\begin{split} -\frac{1}{\beta_2}\frac{\partial\varphi_2}{\partial t} &= -\frac{1}{2\alpha_2\beta_2}\frac{1}{2}\left|\left\langle \dot{\vec{v}}\right\rangle\right|^2 + U_2 + Q_2 + \frac{1}{2\alpha_2\beta_2}\frac{\left|\gamma_2\vec{A}_2\right|^2}{2} + \frac{1}{2\alpha_2\beta_2}\left(\vec{v},\alpha_2\nabla_r\Phi_2\right) \stackrel{\text{det}}{=} \mathbf{H}_2, \end{split}$$
 или
$$-\hbar_2\frac{\partial\varphi_2}{\partial t} &= \frac{m}{2}\left|\left\langle \dot{\vec{v}}\right\rangle\right|^2 + q\chi_2 = \mathbf{H}_2, \end{split}$$

$$q\chi_2 &= U_2 + Q_2 - \frac{q^2}{2m}\left|\vec{A}_2\right|^2 + \hbar_2\left(\vec{v},\nabla_r\varphi_2\right), \end{split}$$

где функция H_2 является аналогом гамильтониана. Заметим, что гамильтониан H_2 в отличие от лагранжиана L_2 содержит информации о вихревом поле \vec{A}_2 . Аналогичная ситуация имеет место и в классическом случае. Полученное уравнение (1.81) является аналогом уравнения Гамильтона-Якоби.

Используя (1.78) и (1.81) получим преобразование Лежандра для связи L_2 и H_2 :

$$L_2 + H_2 = \hbar_2 (\vec{v}, \nabla_r \varphi_2) + m(\langle \dot{\vec{v}} \rangle, \langle \dot{\vec{v}}_p \rangle). \tag{1.82}$$

Построим комплексное действие [17, 79]:

$$i\Phi_2 = \operatorname{Ln}\left(\frac{\Psi_2}{\overline{\Psi}_2}\right) = \operatorname{Ln}\Psi_2 - \operatorname{Ln}\overline{\Psi}_2,$$
 (1.83)

$$S_2 = \operatorname{Ln} f_2 = \operatorname{Ln} (\Psi_2 \overline{\Psi}_2) = \operatorname{Ln} \Psi_2 + \operatorname{Ln} \overline{\Psi}_2,$$

$$M_2 \stackrel{\text{det}}{=} S_2 + i\Phi_2, \qquad Z_2 \stackrel{\text{det}}{=} \frac{M_2}{2} = \text{Ln}\,\Psi_2, \ \Psi_2 = e^{Z_2}.$$
 (1.84)

Учитывая соотношения (1.14) и (1.78) вычислим $\Pi_2 Z_2$

$$\Pi_2 Z_2 = \frac{d_2 Z_2}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d_2 S_2}{dt} + \frac{i}{2} \frac{d_2 \Phi_2}{dt} = -\frac{1}{2} Q_2 + \frac{i}{\hbar_2} L_2 \stackrel{\text{det}}{=} \Lambda_2.$$
 (1.85)

Функция Λ_2 является комплексным лагранжианом [17, 79]. Мнимая часть ${\rm Im}\,\Lambda_2$ соответствует лагранжиану ${\rm L}_2$, который связан с действием φ_2 . Действительная часть ${\rm Re}\,\Lambda_2$ соответствует источникам потока вероятностей (1.14), (1.59) $Q_2 = -\alpha_2 \Delta_\nu \Phi_2$. Таким образом, величина Z_2 соответствует комплексному действию (сравните выражения (1.78) и (1.85)).

Рассмотрим задачу о квантовом гармоническом осцилляторе с потенциалом $U_1=\frac{m\omega^2x^2}{2}$, для которого можно использовать аппроксимацию Власова $m\left\langle \dot{\vec{v}}\right\rangle =-\nabla_r U_1$. Учитывая аналог уравнения Гамильтона-Якоби (1.81) и $\left\langle \dot{v}\right\rangle =-\omega^2x$ для фазы $\varphi_2\left(x,v,t\right)$ можно получить представление

$$-\hbar_2 \varphi_2(x, v, t) = m\omega^2 xv + \mathcal{E}_2 t, \tag{1.86}$$

$$\mathcal{E}_2 = \frac{m}{2} \omega^4 x^2 + e\chi_2,$$

$$e\chi_2 = U_2 + Q_2 - m\omega^2 v^2 = \mathcal{E}_2 - \frac{m}{2} \omega^4 x^2,$$

$$U_{2} = \mathcal{E}_{2} + m\omega^{2} \left(v^{2} - \frac{1}{2} \omega^{2} x^{2} \right) + \frac{\hbar_{2}^{2}}{2m} \frac{1}{\sqrt{f_{2}}} \frac{\partial^{2} \sqrt{f_{2}}}{\partial v^{2}}.$$
 (1.87)

При аппроксимации $\langle \dot{v} \rangle = -\omega^2 x$ решение уравнения Власова (1.14) может быть найдено методом характеристик (1.25). Заметим, что функция F должна быть положительной функцией, так как $F = |\Psi_2|^2$. Вдоль характеристик (1.25) решение является постоянным $f_2 = const$. На рис. 1 приведён график характеристик (1.25) в системе координат $(\overline{x}, \overline{v}) = (\sqrt{m}\omega x, p/\sqrt{m})$. Если функция $f_{1,n}(x) = |\psi_n(x)|^2$ имеет нули, то есть $\exists x_k, k = 1, ..., n \colon f_{1,n}(x_k) = 0$, тогда из (1.3) следует, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x_k, v) dv = 0.$$
 (1.88)

Так как $f_{2,n}(x,v) = F_n(\varepsilon) \ge 0$, то из (1.88) следует, что $f_{2,n}(x_k,v) = 0$ почти всюду на интервале $v \in (-\infty, +\infty)$. Следовательно, на всей окружности (1.25), проходящей через точку $(x_k,0)$ функция $f_{2,n}$ также равна нулю (см. рис.1).

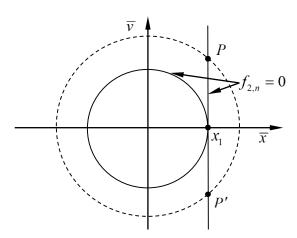


Рис. 1 Значения функции $f_{2,n}$

На рис. 1 показано положение первого нуля x_1 функции $f_{1,n}$. Все окружности (1.25) большего радиуса будут пересекать вертикальную прямую $x=x_1$, например, в точках P и P'. Следовательно, на всех таких окружностях значение функции $f_{2,n}$ будет равно нулю. То есть функция $f_{2,n}$ будет отлична от нуля только внутри круга радиуса x_1 .

Таким образом, из всех функций $f_{2,n}$ положительными во всей области будут только те функции, для которых $f_{1,n}$ не имеет нулей. Только одна функция из (1.23) не имеет нулей — это $f_{1,0}(x) = \left| \psi_0(x) \right|^2$. Поэтому из всех функций F необходимо взять $F(\varepsilon) \sim e^{-2\varepsilon}$. В результате выражение (1.87) для потенциала U_2 примет вид

$$\frac{\partial^2 \sqrt{f_2}}{\partial v^2} = const \frac{m}{\hbar \omega} \left[\frac{m}{\hbar \omega} v^2 - 1 \right] e^{-\frac{1}{\hbar \omega} \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)},$$

$$U_2 = \mathcal{E}_2 - \frac{\hbar_2^2}{2\hbar \omega} + m\omega^2 \left(1 + \frac{\hbar_2^2}{2\hbar^2 \omega^4} \right) v^2 - \frac{1}{2} m\omega^4 x^2. \tag{1.89}$$

Так как для гармонического осциллятора [17] $\omega = \omega_1 = \frac{\sigma_v}{\sigma_r} = \frac{\sigma_v}{\sigma_v} = \omega_2$, $\sigma_r \sigma_v = |\alpha_1| = \frac{\hbar}{2m}, \ \sigma_v \sigma_v = |\alpha_2| = \frac{\hbar_2}{2m} \ \text{и потенциал} \ U_2 \ \text{определен c точностью до}$ константы, то положим $\mathcal{E}_2 = \frac{\hbar_2 \omega_2}{2}$, тогда

$$U_{2}(x,v) = -\frac{\omega^{2}}{2\alpha_{2}\beta_{2}} \left[\left(1 + \frac{\alpha_{2}^{2}}{2\omega^{2}\sigma_{v}^{4}} \right) v^{2} - \frac{1}{2}\omega^{2}x^{2} \right].$$
 (1.90)

Учитывая (1.90) аналог уравнения Шрёдингера (1.71)/(1.72) примет вид:

$$\frac{i}{\beta_2} \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \frac{\alpha_2}{\beta_2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \Psi_2 - \frac{i}{\beta_2} v \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 + U_2 \Psi_2. \tag{1.91}$$

где

$$\Psi_{2}(\vec{r}, \vec{v}, t) = const \cdot \exp\left[-\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{mv^{2}}{2} + \frac{m\omega^{2}x^{2}}{2}\right) - i\left(\frac{m\omega^{2}}{\hbar_{2}}xv + \frac{\mathcal{E}_{2}}{\hbar_{2}}t\right)\right]. \tag{1.92}$$

Волновая функция (1.92) соответствует функции Вигнера основного состояния гармонического осциллятора (1.31)

$$\left|\Psi_{2}(\vec{r}, \vec{v}, t)\right|^{2} = f_{2,0}(x, v) = \frac{1}{\pi \hbar} e^{-\frac{m}{\hbar \omega} (v^{2} + \omega^{2} x^{2})}.$$
 (1.93)

Как отмечалось ранее, других решений $\Psi_2(\vec{r}, \vec{v}, t)$, отличных от решения (1.93), уравнение (1.17) иметь не может (см. рис.1).

1.4.3 Использование аппроксимации Власова-Моэля

Уравнение Власова (1.14) с аппроксимацией Власова-Моэля (1.44) [60] переходит в уравнение Моэля для функции Вигнера $f_2(\vec{r}, \vec{v}, t) = W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ (1.43). Аппроксимация (1.44) не содержит вихревого поля $\gamma_2 \vec{A}_2$, поэтому по теореме Гельмгольца справедливо представление (1.59)

$$\left\langle \dot{v}_{\mu}\right\rangle =\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\left(-1\right)^{n+1}\left(\hbar/2\right)^{2n}}{m^{2n+1}\left(2n+1\right)!}\frac{\partial^{2n+1}U_{1}}{\partial x_{\mu}^{2n+1}}\frac{1}{f_{2}}\frac{\partial^{2n}f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2n}}=-\alpha_{2}\frac{\partial}{\partial v_{\mu}}\Phi_{2}\left(\vec{r},\vec{v},t\right),$$

$$\left\langle \dot{v}_{\mu} \right\rangle = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x_{\mu}} + \frac{\left(\hbar/2\right)^{2}}{m^{3} 3!} \frac{\partial^{3} U_{1}}{\partial x_{\mu}^{3}} \frac{1}{f_{2}} \frac{\partial^{2} f_{2}}{\partial v_{\mu}^{2}} + \dots =$$

$$= -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v_{\mu}} \left[\frac{\partial U_{1}}{\partial x_{\mu}} v_{\alpha} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^{2} \frac{\partial^{3} U_{1}}{\partial x_{\mu}^{3}} \left(S_{2} + \frac{\partial S_{2}}{\partial v_{\mu}}\right) + \dots \right]$$

$$\Phi_{2} \left(\vec{r}, \vec{v}, t\right) = -\frac{2}{\hbar_{2}} \left[v_{\alpha} \frac{\partial U_{1}}{\partial x_{\mu}} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^{2} \frac{\partial^{3} U_{1}}{\partial x_{\mu}^{3}} \left(S_{2} + \frac{\partial S_{2}}{\partial v_{\mu}}\right) + \dots \right] + const, \quad (1.94)$$

где постоянная величина const не зависит от скорости, и в соответствии с уравнением Гамильтона-Якоби (1.81) может быть принята $-\frac{\mathcal{E}_2}{\hbar_2}t$.

Заметим, что аппроксимация (1.44) в общем случае накладывает другие условия на функции Φ_2 и φ_2 , чем условие (1.61).

Для полиномиального потенциала $U_1(x) = \sum_{k=0}^4 a_k x^k$ выполнено условие $\frac{\partial^l U_1}{\partial x_\alpha^l} = 0$, $npu\ l \ge 5$, следовательно, выражение (1.94) содержит только первых два слагаемых:

$$-\hbar_{2}\varphi_{2}(x,v,t) = v \sum_{k=1}^{4} a_{k} k x^{k-1} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^{2} \left(S_{2} + \frac{\partial S_{2}}{\partial v}\right) \sum_{k=3}^{4} a_{k} k (k-1)(k-2) x^{k-3} + \mathcal{E}_{2} t.$$

$$(1.95)$$

В частном случае потенциала гармонического осциллятора $U_1(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \ \text{выражение (1.95) переходит в представление (1.90)}.$

С одной стороны по теореме Хадсона [72] только основное состояние гармонического осциллятора будет иметь положительную функцию распределения $W_0(x,p)$ (1.31). С другой стороны, решение уравнения

Шрёдингера (1.54) с оператором Гамильтона (1.55) будет иметь множество решений (1.56) с функциями плотности вероятностей (1.57).

Построим аналог уравнения Шрёдингера из уравнения Моэля (1.43) методом, описанным в пункте 1.4.2, и найдем для него точные решения для случая гармонического осциллятора [80]. Заметим, что полученные таким образом решения будут отличаться от решений (1.59) из-за наличия условия в виде аппроксимации Власова-Моэля (1.44).

Представим функцию Вигнера в виде $W = \left| \Psi_2 \right|^2$ и подставим в уравнение (1.43)

$$\bar{\Psi}_{2} \frac{\partial \Psi_{2}}{\partial t} + \Psi_{2} \frac{\partial \bar{\Psi}_{2}}{\partial t} + \bar{\Psi}_{2} (\vec{v}, \nabla_{r} \Psi_{2}) + \Psi_{2} (\vec{v}, \nabla_{r} \bar{\Psi}_{2}) +
+ \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{\left(2n+1\right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_{1}}{\partial x_{\beta}^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1} |\Psi_{2}|^{2}}{\partial p_{\beta}^{2n+1}} = 0.$$
(1.96)

Преобразуем выражение $\frac{\partial^{2n+1} |\Psi_2|^2}{\partial p_{\beta}^{2n+1}}$ в уравнении (1.96)

$$\frac{\partial^{2n+1} |\Psi_{2}|^{2}}{\partial p_{\beta}^{2n+1}} = 2 \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left(|\Psi_{2}| \frac{\partial |\Psi_{2}|}{\partial p_{\beta}} \right) = 2 \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left(|\Psi_{2}|^{2} \frac{1}{|\Psi_{2}|} \frac{\partial |\Psi_{2}|}{\partial p_{\beta}} \right) = \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left(|\Psi_{2}|^{2} \frac{1}{|\Psi_{2}|} \frac{\partial |\Psi_{2}|}{\partial p_{\beta}} \right) = \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left[|\Psi_{2}|^{2} \frac{\partial}{\partial p_{\beta}} \left(\ln |\Psi_{2}| + \ln |\Psi_{2}| \right) \right] = \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left[|\Psi_{2}|^{2} \frac{\partial}{\partial p_{\beta}} \left(\ln |\Psi_{2}| + i \operatorname{Arg} \Psi_{2} + \ln |\Psi_{2}| - i \operatorname{Arg} \Psi_{2} \right) \right] = \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left[|\Psi_{2}|^{2} \frac{\partial}{\partial p_{\beta}} \left(\operatorname{Ln} \Psi_{2} + \operatorname{Ln} \overline{\Psi}_{2} \right) \right], \qquad \qquad \frac{\partial^{2n+1} |\Psi_{2}|^{2}}{\partial p_{\beta}^{2n+1}} = \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left(|\Psi_{2}|^{2} \frac{\partial \operatorname{Ln} \Psi_{2}}{\partial p_{\beta}} + |\Psi_{2}|^{2} \frac{\partial \operatorname{Ln} \overline{\Psi}_{2}}{\partial p_{\beta}} \right). \tag{1.97}$$

Подставляя (1.97) в уравнение (1.96) и производя группировку слагаемых, получим

$$\begin{split} & \bar{\Psi}_{2} \left[\frac{\partial \Psi_{2}}{\partial t} + \left(\vec{v}, \nabla_{r} \Psi_{2} \right) + \frac{\Psi_{2}}{\left| \Psi_{2} \right|^{2}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1 \right)^{n+1} \left(\hbar/2 \right)^{2n}}{\left(2n+1 \right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_{1}}{\partial x_{\beta}^{2n+1}} \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left(\left| \Psi_{2} \right|^{2} \frac{\partial \operatorname{Ln} \Psi_{2}}{\partial p_{\beta}} \right) \right] + \\ & + \Psi_{2} \left[\frac{\partial \bar{\Psi}_{2}}{\partial t} + \left(\vec{v}, \nabla_{r} \bar{\Psi}_{2} \right) + \frac{\bar{\Psi}_{2}}{\left| \Psi_{2} \right|^{2}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1 \right)^{n+1} \left(\hbar/2 \right)^{2n}}{\left(2n+1 \right)!} \frac{\partial^{2n+1} U_{1}}{\partial x_{\beta}^{2n+1}} \frac{\partial^{2n}}{\partial p_{\beta}^{2n}} \left(\left| \Psi_{2} \right|^{2} \frac{\partial \operatorname{Ln} \bar{\Psi}_{2}}{\partial p_{\beta}} \right) \right] = 0 \end{split}$$

$$(1.98)$$

Преобразуем выражение (1.98) тем же способом, что и в пункте 1.4.2

$$\begin{split} &\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} + \left(\vec{v}, \nabla_r \Psi_2\right) + \frac{\Psi_2}{\left|\Psi_2\right|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\beta^{2n+1}} \frac{\partial^{2n}}{\partial p_\beta^{2n}} \left(\left|\Psi_2\right|^2 \frac{\partial \operatorname{Ln} \Psi_2}{\partial p_\beta}\right) = \frac{i}{\hbar} L \Psi_2, \\ &i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -i\hbar \left(\vec{v}, \nabla_r \Psi_2\right) - i\hbar \frac{\Psi_2}{\left|\Psi_2\right|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\left(-1\right)^{n+1} \left(\hbar/2\right)^{2n}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\beta^{2n+1}} \frac{\partial^{2n}}{\partial p_\beta^{2n}} \left(\left|\Psi_2\right|^2 \frac{\partial \operatorname{Ln} \Psi_2}{\partial p_\beta}\right) - L \Psi_2, \\ &i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \vec{v} \, \hat{p}_1 \Psi_2 - \frac{\Psi_2}{\left|\Psi_2\right|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\hat{p}_{1,\beta}^{2n+1} U_1}{2^{2n} (2n+1)!} \frac{\left(-i\hbar\right)^{2n}}{\left(-i\hbar\right)^{2n+1}} \frac{\partial^{2n}}{\partial p_\beta^{2n}} \left(\left|\Psi_2\right|^2 \left(-i\hbar\right) \frac{\partial \operatorname{Ln} \Psi_2}{\partial p_\beta}\right) - L \Psi_2, \end{split}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_{2}}{\partial t} = \vec{v}\,\hat{p}_{1}\Psi_{2} - \frac{i}{\hbar}\frac{\Psi_{2}}{|\Psi_{2}|^{2}}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\left(-1\right)^{n}U_{1}\,\hat{\bar{p}}_{1,\beta}^{2n+1}}{\left(2\hbar\right)^{2n}\left(2n+1\right)!}\vec{p}_{2,\beta}^{2n}\left(\left|\Psi_{2}\right|^{2}\,\hat{\bar{p}}_{2,\beta}\,\mathrm{Ln}\,\Psi_{2}\right) - L\Psi_{2},\quad(1.99)$$

где оператор $\vec{\hat{p}}_{2,\beta}$ отличается от оператора $\vec{\hat{p}}_2$, введенного ранее в пункте 1.4.2 множителем массы. Уравнение (1.99) является искомым уравнением для волновой функции Ψ_2 .

Рассмотрим частный случай уравнения (1.99) для одномерного гармонического осциллятора.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -i\hbar v \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} + i\hbar \omega^2 x \frac{\partial \Psi_2}{\partial v} - L\Psi_2. \tag{1.100}$$

Решение уравнения (1.100) будем искать в виде $\Psi_2(x,v,t) = \psi(x,v)e^{-i\frac{\mathcal{E}}{\hbar}t}$

$$-i\hbar v \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \omega^2 x \frac{\partial \Psi}{\partial v} - (L + \mathcal{E})\Psi = 0. \tag{1.101}$$

Уравнение (1.101) должно содержать решение, соответствующее основному состоянию $W_0(x,p)$ (1.31), поэтому возьмем

$$\psi(x,v) = const \cdot \exp\left[-\frac{v^2}{4\sigma_v^2} - \frac{\omega^2 x^2}{4\sigma_v^2} + i\lambda xv\right],\tag{1.102}$$

где λ, σ_v — постоянные величины. Подставляя (1.102) в уравнение (1.101) получаем выражение для функции L(x,v)

$$L = \hbar \lambda \left(v^2 - \omega^2 x^2 \right), \tag{1.103}$$

которая при $\lambda = \frac{m}{2\hbar}$ будет соответствовать функции Лагранжа гармонического осциллятора. Проверим возможность расширения множества решений (1.102) функциями вида:

$$\psi_n(x,v) = C \cdot (ax - ibv)^n \exp\left(-\frac{v^2}{4\sigma_v^2} - \frac{\omega^2 x^2}{4\sigma_v^2} + i\lambda xv\right), \quad (1.104)$$

где C,a,b – некоторые постоянные величины. Подставляя функции (1.104) в уравнение (1.101), в котором функция L(x,v) имеет вид (1.103), получим

$$\frac{\partial \psi_{n}}{\partial x} = Ce^{-\left(\frac{v^{2}}{4\sigma_{v}^{2}} + \frac{\omega^{2}x^{2}}{4\sigma_{v}^{2}} - i\lambda xv\right)} \left(ax - ibv\right)^{n-1} \left[na - \frac{a\omega^{2}x^{2}}{2\sigma_{v}^{2}} + b\lambda v^{2} + i\left(a\lambda + \frac{\omega^{2}b}{2\sigma_{v}^{2}}\right)xv\right] \quad (1.105)$$

$$\frac{\partial \psi_{n}}{\partial v} = Ce^{-\left(\frac{v^{2}}{4\sigma_{v}^{2}} + \frac{\omega^{2}x^{2}}{4\sigma_{v}^{2}} - i\lambda xv\right)} \left(ax - ibv\right)^{n-1} \left[-\left(\frac{a}{2\sigma_{v}^{2}} - b\lambda\right)xv + i\left(a\lambda x^{2} + \frac{b}{2\sigma_{v}^{2}}v^{2} - nb\right)\right] \quad (1.106)$$

Подставляя (1.105), (1.106) и (1.104) в уравнение (1.101), получим

$$\begin{split} -i\hbar v \frac{\partial \psi_n}{\partial x} + i\hbar \omega^2 x \frac{\partial \psi_n}{\partial v} - \left(\frac{mv^2}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \mathcal{E}_{2,n}\right) \psi_n &= 0, \\ -i\hbar v \Bigg[na - \frac{a\omega^2 x^2}{2\sigma_v^2} + b\lambda v^2 + i \bigg(a\lambda + \frac{\omega^2 b}{2\sigma_v^2} \bigg) xv \bigg] + \\ + i\hbar \omega^2 x \Bigg[- \bigg(\frac{a}{2\sigma_v^2} - b\lambda \bigg) xv + i \bigg(a\lambda x^2 + \frac{b}{2\sigma_v^2} v^2 - nb \bigg) \bigg] + \\ + \bigg(\frac{m\omega^2 x^2}{2} - \frac{mv^2}{2} - \mathcal{E}_{2,n} \bigg) \bigg(ax - ibv \bigg) &= 0, \\ -ina\hbar v + i \frac{a\hbar \omega^2}{2\sigma_v^2} x^2 v - ib\hbar \lambda v^3 + \hbar \bigg(a\lambda + \frac{\omega^2 b}{2\sigma_v^2} \bigg) xv^2 - i\hbar \omega^2 \bigg(\frac{a}{2\sigma_v^2} - b\lambda \bigg) x^2 v - \hbar \omega^2 a\lambda x^3 - \\ -\hbar \omega^2 \frac{b}{2\sigma_v^2} xv^2 + n\hbar \omega^2 bx + \frac{am\omega^2}{2} x^3 - \frac{am}{2} xv^2 - a\mathcal{E}_{2,n} x + \\ + i \bigg(-\frac{bm\omega^2}{2} x^2 v + \frac{bm}{2} v^3 + \mathcal{E}_{2,n} bv \bigg) &= 0 \end{split}$$

$$\left(\frac{m}{2} - \hbar\lambda\right) a\omega^{2} x^{3} + \left[\hbar\left(a\lambda + \frac{\omega_{1}^{2}b}{2\sigma_{v}^{2}}\right) - \frac{am}{2} - \hbar\omega^{2} \frac{b}{2\sigma_{v}^{2}}\right] xv^{2} - \left(-nb\hbar\omega^{2} + a\mathcal{E}_{2,n}\right) x + i\left[-\left(\hbar\lambda - \frac{m}{2}\right)bv^{3} + \left(\frac{a\hbar\omega_{1}^{2}}{2\sigma_{v}^{2}} - \hbar\omega^{2}\left(\frac{a}{2\sigma_{v}^{2}} - b\lambda\right) - \frac{bm\omega^{2}}{2}\right) x^{2}v - \left(-b\mathcal{E}_{2,n} + na\hbar\right)v\right] = 0$$
(1.107)

Учитывая, что $\lambda = \frac{m}{2\hbar}$ выражение (1.107) принимает вид

$$\left(-nb\hbar\omega^2 + a\mathcal{E}_{2,n}\right)x + i\left(-b\mathcal{E}_{2,n} + na\hbar\right)v = 0. \tag{1.108}$$

В силу независимости переменных x и v из выражения (1.108) следует, что

$$\begin{cases} -nb\hbar\omega^2 + a\mathcal{E}_{2,n} = 0\\ -b\mathcal{E}_{2,n} + na\hbar = 0 \end{cases} \Rightarrow \omega = \frac{a}{b}, \ \mathcal{E}_{2,n} = \hbar\omega n. \tag{1.109}$$

В качестве a,b можно взять $\frac{\omega}{\sqrt{2}\sigma_v}$ и $\frac{1}{\sqrt{2}\sigma_v}$ соответственно. Функция плотности вероятностей примет вид

$$f_{2,n}(x,v) = \left| \psi_n(x,v) \right|^2 = C^2 \left(\frac{v^2}{2\sigma_v^2} + \frac{\omega^2 x^2}{2\sigma_v^2} \right)^n e^{-\left(\frac{v^2}{2\sigma_v^2} + \frac{\omega^2 x^2}{2\sigma_v^2} \right)}, \quad (1.110)$$

или

$$f_{2,n}(x,v) = C^2 \left[\frac{2}{\hbar \omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \right]^n e^{-\frac{2}{\hbar \omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)}.$$

Заметим, что выражение (1.110) отличается от выражения (1.57) в «правильную» сторону. Корректировка выражения (1.57) возможна путем искусственного введения поправочного множителя $\sigma(n) = \frac{n+1}{n+1/2}$ [14-16]

$$f_{\text{T-V},n}^{\text{corrected}}\left(x,v\right) = c_{\text{T-V}}^{2} \left[\frac{\sigma(n)}{\hbar\omega} \left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega_{1}^{2}x^{2}}{2}\right)\right]^{n} e^{-\frac{\sigma(n)}{\hbar\omega} \left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega_{1}^{2}x^{2}}{2}\right)}.$$
 (1.111)

На рис. 2 изображены графики распределений $|\psi_n(x)|^2$ (1.22) и $f_{1,n}(x)$, соответствующих функциям (1.110). Для основного состояния (n=0) распределения $|\psi_0(x)|^2$ и $f_{1,0}(x)$ полностью совпадают. При n>0 распределения $|\psi_n(x)|^2$ и $f_{1,n}(x)$ будут различными. Функции $f_{1,n}(x)$ в отличие от $|\psi_n(x)|^2$ не имеют нулей.

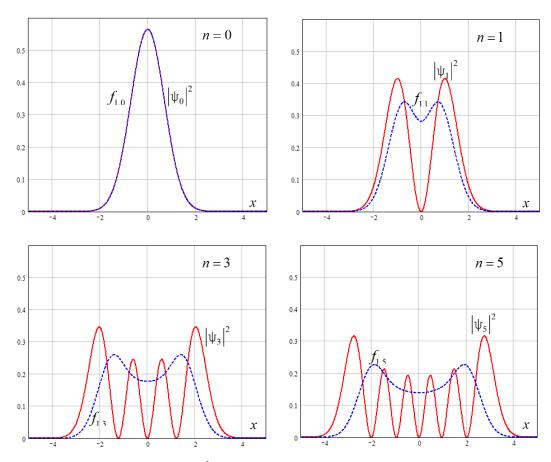


Рис. 2 Распределения $\left|\psi_{n}(x)\right|^{2}$ и $f_{1,n}(x)$ при n=0,1,3,5

Замечание

Шрёдингера Рассмотренные аналоги уравнения В фазовом пространстве (1.54), (1.72) и (1.99) имеют отличия и как следствие их решения (1.56), (1.92), (1.104) имеют отличия. Построение уравнения (1.54) делалось феноменологическим методом и даже для основного состояния гармонического осциллятора не дает известного решения $|\psi_0(x)|^2$. Уравнение (1.72) строилось из первых принципов на основе второго уравнения Власова (1.14) и приводит к точному решению (1.92) для основного состояния гармонического осциллятора. Других решений уравнение (1.72) иметь не может, так как на уравнение Власова (1.14) было наложено условие положительности функции распределения (см. рис. 1). Уравнение (1.54) напротив имеет множество решений (1.56), которые не соответствуют известным решениям $|\psi_n(x)|^2$.

Так как функции (1.56) и функция (1.92) зависят только от переменной ε , то исходя из метода характеристик (ε =const) они удовлетворяют уравнению Моэля (1.44) для гармонического осциллятора. Но функции (1.56) не приводят к решениям $|\psi_n(x)|^2$. Проблема в том, что не любое решение уравнения Моэля/Власова будет давать квантовые решения. При построении уравнения Шрёдингера из первого уравнения Власова (1.1) используется условие связи (1.9) фазы волновой функции φ_1 и скалярного потенциала Φ_1 в разложении векторного поля потока вероятностей $\langle \vec{v} \rangle$. Аналогичное условие связи (1.61) между фазой φ_2 и полем $\langle \vec{v} \rangle$ используется при построении уравнения (1.72) из второго уравнения Власова (1.2). При построении уравнения (1.54) таких условий не накладывалось. Фазы функций (1.56) отличаются от фазы (1.92), следовательно, уравнения (1.54) и (1.72) имеют разные фазовые траектории при решении уравнения Гамильтона-Якоби (1.81).

Уравнение (1.99) строилось по уравнению Моэля и в отличие от уравнения (1.72) на векторное поле $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$ накладывалось условие в виде аппроксимации Власова-Моэля (1.44). В общем случае уравнение (1.99) является нелинейным и лишь для гармонического осциллятора имеет линейный вид и первый порядок (1.100). Как и следовало ожидать, решение уравнения (1.100), соответствующее основному состоянию гармонического осциллятора, полностью совпадает с функцией Вигнера $W_0(x,p)$. По аналогии с уравнением (1.54) уравнение (1.100) имеет множество решений (1.110), для которых функции $f_{1,n}(x)$ не имеют нулей (см. рис. 2).

ГЛАВА 2. СВОЙСТВА ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ КВАЗИ-ВЕРОЯТНОСТИ

На примере гармонического осциллятора рассматривается вопрос наличия отрицательных значений у функции кваз-плотности вероятностей квантовой системы в фазовом пространстве. Показывается наличие полюсов функции энергии квантовой системы в областях, где функция Вигнера имеет отрицательные значения. Показана аналогия между значениями квазиплотности вероятностей и отклонениями 2D мембраны от положения равновесия в фазовом пространстве.

§2.1 Вычисление средних кинематических величин

Знание функций распределения квази-плотности вероятностей $f_{2,n}(x,v)$ (1.31) позволяет вычислить средние значения (математическое ожидание) энергии (1.25) $E = \hbar\omega \langle \langle \varepsilon \rangle \rangle = \hbar\omega \mathrm{M}\,\varepsilon$ и ее среднеквадратичное отклонение (дисперсию) $\sigma_E = \hbar\omega \sqrt{\mathrm{D}\,\varepsilon}$.

Несмотря на некорректность рассуждений о кинетической и потенциальной энергии квантовой системы, с математической точки зрения формально можно вычислить эти величины и проиллюстрировать ряд интересных взаимосвязей между классической и квантовой механикой в фазовом пространстве.

В силу радиальной зависимости функции распределения $F_n(\varepsilon)$ (1.31) перейдем в полярную систему координат в фазовой плоскости (x, p):

$$x = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\tilde{x}, \ p = \tilde{p}\sqrt{2m\hbar\omega}, \ \tilde{x}^2 + \tilde{p}^2 = \varepsilon(x,p), \ \varphi = \operatorname{arctg}\left(\frac{\tilde{p}}{\tilde{x}}\right) = \operatorname{arctg}\left(\frac{p}{m\omega x}\right),$$
$$dxdp = 2\hbar d\tilde{x}d\tilde{p} = 2\hbar\sqrt{\varepsilon}d\sqrt{\varepsilon}d\varphi = \hbar d\varepsilon d\varphi. \tag{2.1}$$

Для каждой функции распределения $F_n(\varepsilon)$ вычислим свою среднюю энергию E_n , получим:

$$E_{n} = \hbar \omega \left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_{n} = \frac{\hbar \omega}{m} \int_{(\infty)} dx \int_{(\infty)} f_{2,n} \left(x, \frac{p}{m} \right) \varepsilon \left(x, p \right) dp = \frac{\hbar^{2} \omega}{m} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} F_{n} \left(\varepsilon \right) \varepsilon d\varepsilon =$$

$$= 2(-1)^{n} \hbar \omega \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} L_{n} \left(4\varepsilon \right) \varepsilon d\varepsilon = 2(-1)^{n} \hbar \omega (-1)^{n} \frac{2n+1}{4},$$

$$E_{n} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \tag{2.2}$$

Выражение (2.2) совпадает с известными значениями энергетического спектра квантового гармонического осциллятора. Аналогичным образом вычислим среднеквадратичные отклонения энергии для каждого состояния:

$$\sigma_{E_n}^2 = \hbar^2 \omega^2 \left[\mathbf{M} \, \varepsilon^2 - \left(\mathbf{M} \, \varepsilon \right)^2 \right] = \hbar^2 \omega^2 \left[\mathbf{M} \, \varepsilon^2 - \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right], \tag{2.3}$$

Вычислим слагаемое $M \varepsilon^2$

$$\mathbf{M}\varepsilon^{2} = \frac{\hbar}{m} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} F_{n}(\varepsilon) \varepsilon^{2} d\varepsilon = 2(-1)^{n} \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} L_{n}(4\varepsilon) \varepsilon^{2} d\varepsilon = 2(-1)^{n} \sum_{k=0}^{n} C_{n}^{k} \frac{4^{k}(-1)^{k}}{k!} I_{k+2},$$

где I_{k+2} интеграл, который можно найти по итерационной формуле

$$I_{n} \stackrel{\text{det}}{=} \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{n} d\varepsilon = \frac{n}{2} I_{n-1} = \frac{n!}{2^{n}} I_{0}, \quad I_{0} = \frac{1}{2}, \quad I_{n} = \frac{n!}{2^{n+1}},$$

$$M \varepsilon^{2} = 2(-1)^{n} \sum_{k=0}^{n} C_{n}^{k} \frac{4^{k} (-1)^{k}}{k!} \frac{(k+2)!}{2^{k+3}} = \frac{(-1)^{n}}{4} \sum_{k=0}^{n} C_{n}^{k} (-2)^{k} (k+1)(k+2). \quad (2.4)$$

Сумму, стоящую в выражении (2.4), можно посчитать в явном виде используя операцию дифференцирования и формулу бинома Ньютона:

$$M \varepsilon^{2} = \frac{\left(-1\right)^{n}}{4} \frac{d^{2}}{dx^{2}} \sum_{k=0}^{n} C_{n}^{k} \left(-2\right)^{k} x^{k+2} \bigg|_{x=1} = \frac{\left(-1\right)^{n}}{4} \frac{d^{2}}{dx^{2}} x^{2} \sum_{k=0}^{n} C_{n}^{k} \left(-2x\right)^{k} 1^{n-k} \bigg|_{x=1} = \frac{\left(-1\right)^{n}}{4} \frac{d^{2}}{dx^{2}} x^{2} \left(1-2x\right)^{n} \bigg|_{x=1},$$

$$M \varepsilon^{2} = \frac{\left(-1\right)^{n}}{2} \left[\left(1-2x\right)^{n} - 4xn \left(1-2x\right)^{n-1} + 2x^{2}n \left(n-1\right) \left(1-2x\right)^{n-2} \right] \bigg|_{x=1},$$

$$M \varepsilon^{2} = \frac{1}{2} \left[\left(-1\right)^{2n} - 4n \left(-1\right)^{2n-1} + 2n \left(n-1\right) \left(-1\right)^{2n-2} \right] = \frac{1}{2} + n + n^{2}. \tag{2.5}$$

Подставляя (2.5) в выражение (2.3), получим

$$\sigma_{E_n} = \frac{\hbar\omega}{2}.\tag{2.6}$$

Для каждого состояния величина среднеквадратичного отклонения энергии (2.6) одинакова. При этом расстояния между средними значениями энергии E_n согласно выражениям (2.2) и (2.6) равны $2\sigma_{E_n}$.

Таким образом, с позиции квантовой механики в фазовом пространстве «существуют» различные (непрерывный спектр) значения энергии $\hbar\omega\varepsilon$, но их множество средних значений (по функции распределения Вигнера) является счётным и совпадает с собственными значениями гамильтониана. Использование фазового пространства позволяет наглядным образом интерпретировать связь между классической и квантовой механикой.

Вычислим средние значение «кинетической» $T=\frac{mv^2}{2}$ и «потенциальной» $U_1=\frac{m\omega^2x^2}{2}$ энергии квантового гармонического осциллятора [81]. Усреднение можно произвести по координате x, скорости v или по всему фазовому пространству (по обеим переменным x,v). Найдем значения $\left\langle x^2\right\rangle$, $\left\langle v^2\right\rangle$, $\left\langle \left\langle x^2\right\rangle \right\rangle$, для разных состояний системы n, которые описываются функцией распределения $f_{2,n}(x,v)$ (1.31). Заметим, что в силу симметрии функции распределения $f_{2,n}(x,v)$ средние значения $\left\langle x\right\rangle = \left\langle \left\langle x\right\rangle \right\rangle = 0$ и $\left\langle v\right\rangle = \left\langle \left\langle v\right\rangle \right\rangle = 0$.

Для удобства дальнейших выкладок введем обозначения $\sigma_x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$ и $\sigma_v^2 = \frac{\hbar\omega}{2m}$, которые соответствуют среднеквадратичным отклонениям для основного состояния $(n\!=\!0)$ гармонического осциллятора. Величины σ_x , σ_v имеют связь с принципом неопределенности Гейзенберга

$$\sigma_x \sigma_v = |\alpha| = \frac{\hbar}{2m}, \ \omega = \frac{\sigma_v}{\sigma_x}.$$
 (2.7)

Используя величины σ_x и σ_v выражение для энергии (1.25) и представления функций распределений (1.23) и (1.31) примут вид:

$$2\varepsilon(x,p) = \tilde{\varepsilon}(x,v) = \frac{v^2}{2\sigma_v^2} + \frac{x^2}{2\sigma_x^2}.$$

$$f_{1,n}(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x}\right),$$
(2.8)

$$f_{2,n}(x,v) = \frac{(-1)^n}{2\pi\sigma_v\sigma_x} e^{\frac{-v^2}{2\sigma_v^2} - \frac{x^2}{2\sigma_x^2}} L_n \left(2\left(\frac{v^2}{2\sigma_v^2} + \frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) \right).$$

Из уравнений (1.11), (1.13), (1.18), (1.19), (1.51) и (1.24) для гармонического осциллятора следует, что

$$\frac{1}{f_1}\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{1}{f_1}\int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \frac{\partial f_{2,n}}{\partial x} dv = -\frac{1}{m}\frac{\partial U_1}{\partial x} = -\omega^2 x,$$

где в одномерном случае в выражении (1.18) сделана замена обозначений $P_{\mu\lambda}$ на P.

$$\frac{x}{\sigma_{x}^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2} F_{n}'(\tilde{\varepsilon}) dv = -\omega^{2} x f_{1,n} = -\omega^{2} x \int_{-\infty}^{+\infty} F_{n}(\tilde{\varepsilon}) dv,$$

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(v^{2} F_{n}'(\tilde{\varepsilon}) + \sigma_{x}^{2} \omega^{2} F_{n}(\tilde{\varepsilon})\right) dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(v^{2} \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} + \sigma_{x}^{2} \omega^{2}\right) F_{n}(\tilde{\varepsilon}) dv = f_{1,n} \left\langle v^{2} \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} + \sigma_{x}^{2} \omega^{2}\right\rangle,$$

$$\left\langle v^{2} \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} + \sigma_{x}^{2} \omega^{2}\right\rangle = 0, \quad \left\langle v^{2} \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}}\right\rangle = -\sigma_{x}^{2} \omega^{2}.$$
(2.9)

Переписывая условие (1.12) в виде $P_{\mu\lambda} = -\alpha^2 f_{1,n} \frac{\partial^2 S_{1,n}}{\partial x^\mu \partial x^\lambda}$, получаем

$$\frac{1}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 f_{2,n}(x,v) dv = -\alpha^2 \frac{\partial^2 S_{1,n}}{\partial x^2},$$

$$\langle v^2 \rangle = -\alpha^2 \frac{\partial^2 S_{1,n}}{\partial x^2}.$$
(2.10)

Подставим функции распределения (2.8) в выражения (2.9) и (2.10). Начнем с выражения (2.9).

$$S_{2,n} = \ln F_n(\tilde{\varepsilon}) = \ln B_n - \tilde{\varepsilon} + \ln L_n(2\tilde{\varepsilon}), \quad \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} = -1 + 2\frac{L_n'(2\tilde{\varepsilon})}{L_n(2\tilde{\varepsilon})}, \quad (2.11)$$

где $B_n = \frac{(-1)^n}{2\pi\sigma}$. Усредним выражение (2.11) по формуле (2.9), получим

$$\sigma_{x}^{2}\omega^{2} = \left\langle v^{2} \right\rangle - 2\left\langle v^{2}\frac{L_{n}'}{L_{n}} \right\rangle = \frac{B_{n}}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}}L_{n}(2\tilde{\varepsilon})dv - 2\frac{B_{n}}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}}L_{n}'(2\tilde{\varepsilon})dv =$$

$$= \frac{B_{n}}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}}\left(L_{n}(2\tilde{\varepsilon}) - 2\left[L_{n-1}'(2\tilde{\varepsilon}) - L_{n-1}(2\tilde{\varepsilon})\right]\right)dv =$$

$$= \frac{B_{n}}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}}\left(L_{n} - 2\left[L_{0}' - L_{0} - \dots - L_{n-3} - L_{n-2} - L_{n-1}\right]\right)dv = \frac{B_{n}}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}}\left(L_{n} + 2\sum_{k=0}^{n-1}L_{k}\right)dv,$$

$$\sigma_{x}^{2}\omega^{2} = \frac{B_{n}}{f_{1}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}}\left(L_{n}(2\tilde{\varepsilon}) + 2L_{n-1}^{(1)}(2\tilde{\varepsilon})\right)dv, \tag{2.12}$$

где учтено, что $L_n' = L_{n-1}' - L_{n-1}$, $L_s^{(\mu+1)} = \sum_{k=1}^{3} L_k^{(\mu)}$. Учитывая выражение $L_n^{(\mu)}(x) = L_n^{(\mu+1)}(x) - L_{n-1}^{(\mu+1)}(x)$ при $\mu = 0$, то $L_n(x) = L_n^{(1)}(x) - L_{n-1}^{(1)}(x)$, выражение (2.12) примет вид:

$$\frac{\sigma_{\nu}^{2}}{B_{n}}f_{1,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2}e^{-\tilde{\varepsilon}} \left(L_{n}^{(1)}\left(2\tilde{\varepsilon}\right) + L_{n-1}^{(1)}\left(2\tilde{\varepsilon}\right)\right)dv. \tag{2.13}$$

(2.12)

Для обобщенных полиномов Лагерра справедливо соотношение

$$L_n^{(\mu+\lambda+1)}(x+y) = \sum_{k=0}^n L_k^{(\mu)}(x) L_{n-k}^{(\lambda)}(y),$$

отсюда

$$L_{n}^{(1)}(2\tilde{\varepsilon}) = \sum_{k=0}^{n} L_{k} \left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right) L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right),$$

$$L_{n-1}^{(1)}(2\tilde{\varepsilon}) = \sum_{k=0}^{n-1} L_{k} \left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right) L_{n-1-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right).$$

$$(2.14)$$

Подставляя (2.14) в (2.14), получим

$$\begin{split} &\frac{\sigma_{v}^{2}}{B_{n}}f_{1,n} = e^{-\frac{x^{2}}{2\sigma_{x}^{2}}}\sum_{k=0}^{n}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}v^{2}e^{-\frac{v^{2}}{2\sigma_{v}^{2}}}L_{k}\left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right)dv + \\ &+e^{-\frac{x^{2}}{2\sigma_{x}^{2}}}\sum_{k=0}^{n-1}L_{n-1-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}v^{2}e^{-\frac{v^{2}}{2\sigma_{v}^{2}}}L_{k}\left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right)dv, \\ &\left(-1\right)^{n}\frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1}n!}H_{n}^{2}\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right) = \sum_{k=0}^{n}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)J_{k} + \sum_{k=0}^{n-1}L_{n-1-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)J_{k}, \end{split}$$

или

$$(-1)^{n} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1} n!} H_{n}^{2} \left(\frac{x}{\sqrt{2} \sigma_{x}} \right) = \sum_{k=1}^{n} L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \right) J_{k} + \sum_{s=1}^{n} L_{n-s} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \right) J_{s-1} + L_{n} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \right) J_{0},$$

$$(-1)^{n} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1} n!} H_{n}^{2} \left(\frac{x}{\sqrt{2} \sigma_{x}} \right) = \sum_{k=1}^{n} L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \right) (J_{k} + J_{k-1}) + L_{n} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \right) J_{0}.$$

$$(2.15)$$

где

$$J_{k} = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k} \left(2\tau^{2} \right) d\tau, \ \tau = \frac{v}{\sqrt{2}\sigma_{v}}.$$
 (2.16)

Выражение (2.15) позволяет представить квадрат полиномов Эрмита H_n^2 через полиномы Лагерра L_k . Вычислим интеграл (2.16).

$$J_{k} = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k} (2\tau^{2}) d\tau = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau e^{-\tau^{2}} L_{k} (2\tau^{2}) d\tau^{2} = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau L_{k} (2\tau^{2}) de^{-\tau^{2}} =$$

$$= -\frac{1}{2} \left[\tau L_{k} (2\tau^{2}) e^{-\tau^{2}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^{2}} \left(L_{k} (2\tau^{2}) + 4\tau^{2} L_{k}' (2\tau^{2}) \right) d\tau \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^{2}} L_{k} (2\tau^{2}) d\tau + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} \left[L_{k-1}' (2\tau^{2}) - L_{k-1} (2\tau^{2}) \right] d\tau =$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^{2}} L_{k} (2\tau^{2}) d\tau + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-1}' (2\tau^{2}) d\tau - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-1} (2\tau^{2}) d\tau,$$

$$J_{k} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^{2}} L_{k} (2\tau^{2}) d\tau - 2 J_{k-1} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-1}' (2\tau^{2}) d\tau$$

$$(2.17)$$

Интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau$ берется в соответствии с (1.26) при x = 0

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{v^{2}}{2\sigma_{v}^{2}}} L_{n} \left(2 \frac{v^{2}}{2\sigma_{v}^{2}} \right) dv = \sqrt{2}\sigma_{v} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^{2}} L_{n} \left(2\tau^{2} \right) d\tau = \left(-1 \right)^{n} \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_{v}}{2^{n} n!} H_{n}^{2} \left(0 \right),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^{2}} L_{k} \left(2\tau^{2} \right) d\tau = \left(-1 \right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k} k!} H_{k}^{2} \left(0 \right). \tag{2.18}$$

Учитывая (2.18) выражение (2.17) принимает вид

$$J_{k} = \left(-1\right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1} k!} H_{k}^{2}\left(0\right) - 2J_{k-1} + 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-1}'\left(2\tau^{2}\right) d\tau, \tag{2.19}$$

Из выражения (2.19) следует, что

$$J_{k-1} = \left(-1\right)^{k-1} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k} (k-1)!} H_{k-1}^{2}(0) - 2J_{k-2} + 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-2}'(2\tau^{2}) d\tau. \tag{2.20}$$

Подставим (2.20) в выражение (2.17), получим

$$J_{k} = (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1} k!} H_{k}^{2}(0) + (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1} (k-1)!} H_{k-1}^{2}(0) + 4J_{k-2} - 4 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-2}'(2\tau^{2}) d\tau + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} \left[L_{k-2}'(2\tau^{2}) - L_{k-2}(2\tau^{2}) \right] d\tau,$$

$$J_{k} = (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1} k!} H_{k}^{2}(0) + (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1} (k-1)!} H_{k-1}^{2}(0) + 2J_{k-2} - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-2}'(2\tau^{2}) d\tau.$$

$$(2.21)$$

Проделаем аналогичную процедуру с подстановкой для интегралов J_{k-2} и J_{k-3} :

$$J_{k-2} = (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1}(k-2)!} H_{k-2}^{2}(0) - 2J_{k-3} + 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L'_{k-3}(2\tau^{2}) d\tau,$$

$$J_{k} = (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1}k!} H_{k}^{2}(0) + (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1}(k-1)!} H_{k-1}^{2}(0) + (-1)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-2}(k-2)!} H_{k-2}^{2}(0) - 2J_{k-3} + 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L'_{k-3}(2\tau^{2}) d\tau.$$

$$(2.22)$$

$$J_{k-3} = -\left(-1\right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-2}(k-3)!} H_{k-3}^{2}(0) - 2J_{k-4} + 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-4}'\left(2\tau^{2}\right) d\tau,$$

$$J_{k} = \left(-1\right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1}k!} H_{k}^{2}(0) + \left(-1\right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1}(k-1)!} H_{k-1}^{2}(0) + \left(-1\right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-2}(k-2)!} H_{k-2}^{2}(0) + \left(-1\right)^{k} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-2}(k-2)!} H_{k-3}^{2}(0) + 2J_{k-4} - 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{k-4}'\left(2\tau^{2}\right) d\tau. \tag{2.23}$$

Выражение для J_0 имеет вид

$$J_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_0(2\tau^2) d\tau = \frac{1}{2\sqrt{2}\sigma_v^3} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}} dv = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$
 (2.24)

Рассмотрим чётные (k=2m) и нечётные (k=2m+1) значения для выражения J_k . Продолжая итерационную процедуру, выражение (2.23) для J_{2m} примет вид:

$$J_{2m} = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+1}(2m)!} H_{2m}^{2}(0) + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-1}(2m-1)!} H_{2m-1}^{2}(0) + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-2}(2m-2)!} H_{2m-2}^{2}(0) + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-3}(2m-3)!} H_{2m-3}^{2}(0) + \dots + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{1}1!} H_{1}^{2}(0) + 2J_{0} - 2\int_{-\infty}^{+\infty} \tau^{2} e^{-\tau^{2}} L_{0}'(2\tau^{2}) d\tau,$$

$$J_{2m} = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+1}(2m)!} H_{2m}^{2}(0) + \sqrt{\pi} \sum_{s=1}^{2m-1} \frac{H_{2m-s}^{2}(0)}{2^{2m-s}(2m-s)!} + \sqrt{\pi},$$

$$J_{2m} = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+1}(2m)!} H_{2m}^{2}(0) + \sqrt{\pi} \sum_{s=1}^{2m} \frac{H_{2m-s}^{2}(0)}{2^{2m-s}(2m-s)!}$$
(2.25)

Для \boldsymbol{J}_{2m+1} аналогично получаем

$$\begin{split} J_{2m+1} &= -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2} (2m+1)!} H_{2m+1}^2(0) - \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m} (2m)!} H_{2m}^2(0) - \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-1} (2m-1)!} H_{2m-1}^2(0) - \\ &- 2I_{2m-2} + 2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_{2m-2}'(2\tau^2) d\tau = \\ &= -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2} (2m+1)!} H_{2m+1}^2(0) - \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m} (2m)!} H_{2m}^2(0) - \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-1} (2m-1)!} H_{2m-1}^2(0) - \dots - \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{2^1 (1)!} H_1^2(0) - 2J_0 + 2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_0'(2\tau^2) d\tau, \\ &J_{2m+1} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2} (2m+1)!} H_{2m+1}^2(0) - \sqrt{\pi} \sum_{s=0}^{2m} \frac{H_{2m-s}^2(0)}{2^{2m-s} (2m-s)!}, \end{split}$$

или

$$J_{2m+1} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2}(2m+1)!}H_{2m+1}^{2}(0) - \sqrt{\pi}\sum_{q=1}^{2m+1} \frac{H_{2m+1-q}^{2}(0)}{2^{2m+1-q}(2m+1-q)!}.$$
 (2.26)

Сравнивая (2.25) и (2.26) получим общее выражение для $J_{\scriptscriptstyle k}$

$$J_{k} = (-1)^{k} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{1}{2^{k+1} k!} H_{k}^{2}(0) + \sum_{s=1}^{k} \frac{H_{k-s}^{2}(0)}{2^{k-s} (k-s)!} \right\}.$$
 (2.27)

Для преобразования выражения (2.15) вычислим сумму $J_{\scriptscriptstyle k}+J_{\scriptscriptstyle k-1}$, используя (2.27)

$$\begin{split} J_{k} + J_{k-1} &= \left(-1\right)^{k} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{1}{2^{k+1}k!} H_{k}^{2}\left(0\right) + \sum_{s=1}^{k} \frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} \right\} - \\ &- \left(-1\right)^{k} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{1}{2^{k}\left(k-1\right)!} H_{k-1}^{2}\left(0\right) + \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-1-s}^{2}\left(0\right)}{2^{k-1-s}\left(k-1-s\right)!} \right\} = \\ &= \left(-1\right)^{k} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{H_{k}^{2}\left(0\right)}{2^{k+1}k!} - \frac{2kH_{k-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k+1}k!} + \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} + H_{0}^{2}\left(0\right) - \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-1-s}^{2}\left(0\right)}{2^{k-1-s}\left(k-1-s\right)!} \right\} = \\ &= \left(-1\right)^{k} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{H_{k}^{2}\left(0\right) - 2kH_{k-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k+1}k!} + H_{0}^{2}\left(0\right) + \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right) - 2\left(k-s\right)H_{k-s-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} \right\}, \\ J_{k} + J_{k-1} &= \left(-1\right)^{k} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{H_{k}^{2}\left(0\right) - 2kH_{k-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k+1}k!} + \sum_{s=1}^{k} \frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right) - 2\left(k-s\right)H_{k-s-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} \right\}. (2.28) \end{split}$$

Подставляя (2.28) в (2.15), получим

$$\frac{\left(-1\right)^{n}}{2^{n+1}n!}H_{n}^{2}\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right) = \frac{1}{2}L_{n}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right) + \\
+ \sum_{k=1}^{n}\left(-1\right)^{k}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right) \left\{\frac{H_{k}^{2}(0) - 2kH_{k-1}^{2}(0)}{2^{k+1}k!} + \sum_{s=1}^{k}\frac{H_{k-s}^{2}(0) - 2(k-s)H_{k-s-1}^{2}(0)}{2^{k-s}(k-s)!}\right\}.$$
(2.29)

Выражение (2.29) можно переписать в компактной форме, если воспользоваться функцией Хевисайда

$$\eta(s) = \begin{cases} 0, & s = 0, \\ 1, & s > 0. \end{cases} \frac{1 + \eta(s)}{2} = \begin{cases} \frac{1}{2}, & s = 0, \\ 1, & s > 0. \end{cases}$$
(2.30)

Используя (2.30) выражение (2.29) примет вид

$$\frac{\left(-1\right)^{n}}{2^{n+1}n!}H_{n}^{2}\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right) = \sum_{k=0}^{n}\left(-1\right)^{k}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\sum_{s=0}^{k}\frac{1+\eta(s)}{2}\frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right)-2(k-s)H_{k-s-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}(k-s)!}.$$
(2.31)

или

$$\frac{(-1)^n}{2^{n+1}n!}H_n^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x}\right) = \sum_{k=0}^n \bar{C}_k L_{n-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right),\tag{2.32}$$

где

$$\bar{C}_k = (-1)^k \sum_{s=0}^k \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{H_{k-s}^2(0) - 2(k-s)H_{k-s-1}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!}.$$

Для вычисления коэффициентов $\bar{C}_{\scriptscriptstyle k}$ удобно пользоваться свойства нулей полиномов Эрмита

$$H_{2k}^{2}(0) = \frac{(2k)!(2k)!}{k!k!}, \ H_{2k+1}^{2}(0) = 0.$$
 (2.33)

Формула (2.32) задает разложение полиномов $H_n^2(x/\sqrt{2}\sigma_x)$ по полиномам Лагерра $L_s(x^2/\sigma_x^2)$. Выражение (2.32) получилось как следствие из выражения (2.9).

Рассмотрим выражение (2.10). Вычислим выражение $\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2}$, стоящее в (2.10)

$$S_{1,n} = \ln f_{1,n} = \ln \frac{1}{2^{n} n!} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_{x}} - \frac{x^{2}}{2\sigma_{x}^{2}} + 2\ln H_{n} \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right),$$

$$\frac{\partial S_{1}}{\partial x} = -\frac{x}{\sigma_{x}^{2}} + \frac{\sqrt{2}H'_{n}}{\sigma_{x}H_{n}}, \frac{\partial^{2}S_{1}}{\partial x^{2}} = -\frac{1}{\sigma_{x}^{2}} \left(1 - \frac{H''_{n}H_{n} - H'_{n}H'_{n}}{H_{n}^{2}}\right),$$

$$\frac{\partial^{2}S_{1}}{\partial x^{2}} = -\frac{1}{\sigma_{x}^{2}} \left(1 - \frac{H''_{n}}{H_{n}} + \left(\frac{H'_{n}}{H_{n}}\right)^{2}\right).$$
(2.34)

Найдем $\langle v^2 \rangle$

$$\frac{f_{1,n}}{B_n} \langle v^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\varepsilon} L_n(2\varepsilon) dv = \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\varepsilon} L_n^{(1)}(2\varepsilon) dv - \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\varepsilon} L_{n-1}^{(1)}(2\varepsilon) dv = \\
= \sum_{k=0}^{n} L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\varepsilon} L_k \left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) dv - \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\varepsilon} L_k \left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) dv = \\
= \sum_{k=0}^{n} L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}} L_k \left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) dv - \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}} L_k \left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) dv,$$

$$(-1)^{n} \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_{v}}{2^{n}n!} H_{n}^{2} \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right) \langle v^{2} \rangle =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2} e^{\frac{v^{2}}{2\sigma_{v}^{2}}} L_{k} \left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right) dv - \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^{2} e^{\frac{v^{2}}{2\sigma_{v}^{2}}} L_{k} \left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right) dv,$$

$$\frac{(-1)^{n} \sqrt{\pi}}{2^{n+1} n! \sigma_{v}^{2}} H_{n}^{2} \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right) \langle v^{2} \rangle = \sum_{k=0}^{n} L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right) J_{k} - \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right) J_{k},$$

$$(2.35)$$

так как $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}v^2e^{rac{-v^2}{2\sigma_v^2}}L_kigg(rac{v^2}{\sigma_v^2}igg)dv=2\sqrt{2}\sigma_v^3J_k$. Подставляя (2.27) в (2.35), получим

$$\frac{\left(-1\right)^{n}}{2^{n+1}n!\sigma_{v}^{2}}H_{n}^{2}\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right)\left\langle v^{2}\right\rangle = \sum_{k=0}^{n}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\left(-1\right)^{k}\sum_{s=0}^{k}\frac{1+\eta\left(s\right)}{2}\frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} + \\
+\sum_{q=1}^{n}L_{n-q}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\left(-1\right)^{q}\sum_{s=0}^{q-1}\frac{1+\eta\left(s\right)}{2}\frac{2\left(q-s\right)H_{q-s-1}^{2}\left(0\right)}{2^{q-s}\left(q-s\right)!} = \\
=\sum_{k=0}^{n}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\left(-1\right)^{k}\sum_{s=0}^{k}\frac{1+\eta\left(s\right)}{2}\frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} + \\
+\sum_{q=0}^{n}L_{n-q}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\left(-1\right)^{q}\sum_{s=0}^{q}\frac{1+\eta\left(s\right)}{2}\frac{2\left(q-s\right)H_{q-s-1}^{2}\left(0\right)}{2^{q-s}\left(q-s\right)!} = \\
=\sum_{k=0}^{n}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)\left(-1\right)^{k}\sum_{s=0}^{k}\frac{1+\eta\left(s\right)}{2}\frac{H_{k-s}^{2}\left(0\right)+2\left(q-s\right)H_{q-s-1}^{2}\left(0\right)}{2^{k-s}\left(k-s\right)!} - \\
\frac{\left(-1\right)^{n}}{2^{n+1}n!\sigma_{v}^{2}}H_{n}^{2}\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_{x}}\right)\left\langle v^{2}\right\rangle = \sum_{k=0}^{n}C_{k}L_{n-k}\left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right), \tag{2.36}$$

где

$$C_{k} = \left(-1\right)^{k} \sum_{s=0}^{k} \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{H_{k-s}^{2}(0) + 2(k-s)H_{k-s-1}^{2}(0)}{2^{k-s}(k-s)!}.$$

Из выражений (2.36) и (2.32) следует, что

$$\left\langle v^{2}\right\rangle_{v,n}\left(x\right) = \sigma_{v}^{2} \frac{\sum_{k=0}^{n} C_{k} L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)}{\sum_{k=0}^{n} \bar{C}_{k} L_{n-k} \left(\frac{x^{2}}{\sigma_{x}^{2}}\right)},$$

$$(2.37)$$

где индекс (v) указывает на усреднение по пространству скоростей, а индекс (v) соответствует номеру состояния квантового гармонического осциллятора.

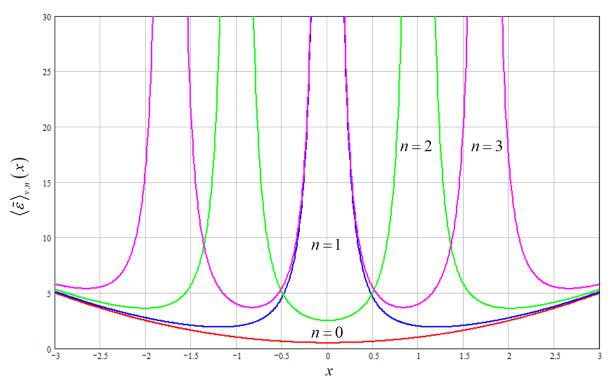


Рис. 1 Распределение плотности энергии $\left\langle \tilde{\varepsilon} \right\rangle_{v,n} (x)$

В силу симметрии функции $f_{2,n}$ по переменным x и v, по аналогии с выражением (2.37) можно записать выражение для $\left\langle x^2 \right\rangle_{x,n}$ при усреднении по пространству координат x:

$$\left\langle x^{2}\right\rangle_{x,n}\left(v\right) = \sigma_{x}^{2} \frac{\sum_{k=0}^{n} C_{k} L_{n-k} \left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right)}{\sum_{k=0}^{n} \bar{C}_{k} L_{n-k} \left(\frac{v^{2}}{\sigma_{v}^{2}}\right)}.$$

$$(2.38)$$

§2.2 Распределение полюсов функции энергии в фазовом пространстве

Проведем анализ полученных распределений (2.37) и (2.38). Особенностью выражений (2.37) и (2.38) является наличие полюсов по координате и скорости соответственно. На рис. 1 приведена зависимость энергии осциллятора $\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{v,n}(x) = \frac{\langle v^2 \rangle_{v,n}(x)}{2\sigma_v^2} + \frac{x^2}{2\sigma_x^2}$ вдоль оси координат (n=0,1,2,3), аналогичный график будет вдоль оси скоростей. Не ограничивая общности на рис. 1 значения σ_x и σ_v приняты равными единице.

На рис. 1 видно, что только основное состояние (n=0) не имеет полюсов, так как $\left\langle v^2 \right\rangle_{v,0} = \sigma_v^2$ (см. выражение (2.37)).

Обратим внимание, что полюса кинетической (2.37) и потенциальной (2.38) энергии в соответствии с выражением (2.37) расположены в нулях полиномов Эрмита и находятся в области отрицательных значений плотности вероятности функции Вигнера (см. рис. 2). На рис. 2 для состояний n = 0,1,2,3 соответственно сделано формальное наложение графиков плотности распределения вероятности $f_{1,n}(x)$ и плотности распределения энергии $\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{v,n}(x)$.

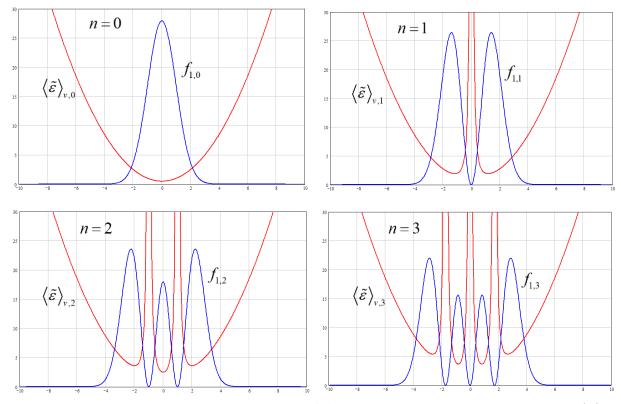


Рис. 2 Распределение плотности энергии $\left< ilde{arepsilon} \right>_{v,n} (x)$ и плотности вероятности $f_{1,n}(x)$

На рис. 2 видно, что полюса фактически «разбивают» потенциальную яму на несколько потенциальных ям, в каждой из которых происходит свой колебательный процесс. Действительно, на рис. 2 для основного состояния ($n\!=\!0$) полюса отсутствуют, поэтому присутствует только одна исходная потенциальная яма, в которой имеется гауссово распределение плотности вероятности $f_{1,0}$. При $n\!=\!1$ кинетическая энергия имеет полюс в нуле (см. рис. 1,2), что приводит к наличию энергетического «барьера» и разделению функции распределения $f_{1,0}$ на два симметричных распределения относительно нуля в виде функции распределения $f_{1,1}$ (см. рис. 2). Аналогичная ситуация наблюдается для состояний с $n\!=\!2,3...$ (см. рис. 2).

Y гармонического осциллятора переход от одного квантового состояния с номером n к состоянию с номером n+1 связан с наличием отрицательных значений y функции Вигнера.

Именно в области отрицательных значений имеются полюса у кинетической (2.37) и потенциальной энергии (2.38), которые приводят к энергетическим барьерам (см. рис. 1,2) и фактически «создают» еще один осциллятор.

Используя выражения (2.34) и (2.10) вычислим среднеквадратичные отклонения $\langle\langle x^2 \rangle\rangle_n$ и $\langle\langle v^2 \rangle\rangle_n$:

$$\left\langle \left\langle v^{2} \right\rangle \right\rangle_{n} = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,n}(x) \left\langle v^{2} \right\rangle_{v,n}(x) dx = \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} - \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,n}(x) \frac{H_{n}''}{H_{n}} dx + \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,n}(x) \left(\frac{H_{n}'}{H_{n}}\right)^{2} dx,$$

$$\left\langle \left\langle v^{2} \right\rangle \right\rangle_{n} = \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} - \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \frac{1}{2^{n} n!} \frac{\sqrt{2} \sigma_{x}}{\sqrt{2\pi} \sigma_{x}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^{2}} H_{n}(y) H_{n}''(y) dy +$$

$$+ \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \frac{1}{2^{n} n!} \frac{\sqrt{2} \sigma_{x}}{\sqrt{2\pi} \sigma_{x}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^{2}} H_{n}'(y) H_{n}'(y) dy,$$

учитывая формулу дифференцирования полиномов Эрмита $H_n'\left(y\right) = 2nH_{n-1}\left(y\right)$ и условие ортогональности, получаем

$$\left\langle \left\langle v^{2} \right\rangle \right\rangle_{n} = \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} + \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} \frac{1}{2^{n} n!} \frac{4n^{2}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! = \frac{\alpha^{2}}{\sigma_{x}^{2}} (2n+1),$$

$$\left\langle \left\langle v^{2} \right\rangle \right\rangle_{n} = \sigma_{v}^{2} (2n+1), \tag{2.39}$$

где учтено соотношение (2.7). В силу симметрии выражений (2.37) и (2.38) можно записать для $\left\langle \left\langle x^2 \right\rangle \right\rangle_n$ аналогичное выражение

$$\left\langle \left\langle x^2 \right\rangle \right\rangle_n = \sigma_x^2 (2n+1).$$
 (2.40)

Из выражений (2.39) и (2.40) видно, что для основного состояния (n=0) среднеквадратичные отклонения $\sqrt{\left\langle \left\langle v^2 \right\rangle \right\rangle_0} = \sigma_v$ и $\sqrt{\left\langle \left\langle x^2 \right\rangle \right\rangle_0} = \sigma_x$, то есть совпадают с величинами σ_v и σ_x , введенными формально выше (2.7). Следовательно, обозначения (2.7) имеют наглядную интерпретацию. При увеличении номера состояния n величины (2.39) и (2.40) растут. Зная $\left\langle \left\langle x^2 \right\rangle \right\rangle_n$ (2.40) и $\left\langle \left\langle v^2 \right\rangle \right\rangle_n$ (2.39) можно вычислить полную среднюю энергию гармонического осциллятора в состоянии n, про которую было сказано в начале параграфа

$$E = T + U_{1} = \frac{mv^{2}}{2} + \frac{m\omega^{2}x^{2}}{2},$$

$$E_{n} = \left\langle \left\langle E \right\rangle \right\rangle_{n} = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x,v) v^{2} dx dv + \frac{m\omega^{2}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x,v) x^{2} dx dv =$$

$$= \frac{m}{2} \left\langle \left\langle v^{2} \right\rangle \right\rangle_{n} + \frac{m\omega^{2}}{2} \left\langle \left\langle x^{2} \right\rangle \right\rangle_{n},$$

$$E_{n} = \frac{m}{2} \sigma_{v}^{2} (2n+1) + \frac{m\omega^{2}}{2} \sigma_{x}^{2} (2n+1) = m \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(\sigma_{v}^{2} + \omega^{2} \sigma_{x}^{2} \right),$$

$$E_{n} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{2.41}$$

где учтены соотношения (2.7). Полученное выражение (2.41) полностью совпадает с выражением (2.2). Таким образом, несмотря на некорректность рассуждения о кинетической и потенциальной энергии по отдельности с позиций принципа неопределенности Гейзенберга, для квантовой механики в фазовом пространстве такие противоречия нивелируются.

Из полученных выражений видно, что дискретный энергетический спектр гармонического осциллятора $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ является средним значением энергии $\left<\left<\varepsilon\right>\right>_n$, где $\varepsilon \sim p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$. Величина

среднеквадратичного отклонения энергии для всех уровней одинакова $\sigma_{\varepsilon_n} = \hbar \omega/2$. Полную энергию E_n можно представить в виде суммы «кинетической» $\left\langle \left\langle p^2 \right\rangle \right\rangle_n/2m$ и «потенциальной» $m\omega^2 \left\langle \left\langle x^2 \right\rangle \right\rangle_n/2$ энергии. Таким образом, с позиций квантовой механики в фазовом пространстве существует бесконечное множество фазовых траекторий $\varepsilon = const$, являющихся характеристиками уравнения Моэля, а их усреднение по соответствующей функции Вигнера $W_n(x,p)$ дает известные дискретные спектры энергий.

§2.3 Расширенная функция Вигнера и обратимость по времени

Рассмотрим уравнение Власова/Моэля для одномерного квантового осциллятора [78]. В силу отсутствия производных высших порядков у потенциала

$$U_{\alpha}(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x + \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} = \frac{m\omega^2 \overline{x}^2}{2}, \ \overline{x} = x + \frac{\alpha}{m\omega^2}, \tag{2.42}$$

уравнение Моэля/Власова и уравнение Лиувилля совпадают и имеют вид:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial x} - \left(m\omega^2 x + \alpha\right) \frac{\partial W}{\partial p} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \left(\omega^2 x + \alpha\right) \frac{\partial f}{\partial v} = 0. \quad (2.43)$$

Теорема 1. Уравнению (2.43) может быть поставлено в соответствие волновое уравнение

$$\mathbf{W}_{tt} = \omega^2 \, \mathbf{W}_{\omega\omega}, \tag{2.44}$$

где

$$W(\rho, \varphi, t) = W\left(\frac{\rho}{\omega}\cos\varphi - \frac{\alpha}{m\omega^2}, m\rho\sin\varphi, t\right).$$

Доказательство теоремы 1

Введем обозначения $u = \omega \overline{x}$, $v = \frac{p}{m}$, $W'(u,v,t) = \overline{W}(\overline{x},p,t) = W(x,p,t)$, тогда уравнение (2.43) примет вид:

$$\frac{1}{\omega} \frac{\partial W'}{\partial t} + v \frac{\partial W'}{\partial u} - u \frac{\partial W'}{\partial v} = 0, \tag{2.45}$$

Запишем уравнение (2.45) в полярной системе координат:

$$u = \rho \cos \varphi, \ v = \rho \sin \varphi, \ W'(u, v, t) = W(\rho, \varphi, t),$$

$$\frac{\partial W'}{\partial u} = W_{\rho} \cos \varphi - W_{\varphi} \frac{\sin \varphi}{\rho}, \ \frac{\partial W'}{\partial v} = W_{\rho} \sin \varphi + W_{\varphi} \frac{\cos \varphi}{\rho},$$

$$\frac{1}{\omega} \frac{\partial W}{\partial t} + \rho \sin \varphi \left(W_{\rho} \cos \varphi - W_{\varphi} \frac{\sin \varphi}{\rho} \right) - \rho \cos \varphi \left(W_{\rho} \sin \varphi + W_{\varphi} \frac{\cos \varphi}{\rho} \right) = 0,$$

$$W_{t} = \omega W_{\varphi}.$$

$$(2.47)$$

Уравнение (2.47) соответствует уравнению колебаний, которое получается из уравнения (2.47) при дифференцировании его по времени:

$$\mathbf{W}_{tt} = \omega \mathbf{W}_{\omega t} = \omega^2 \mathbf{W}_{\omega \omega}, \tag{2.48}$$

что и требовалось доказать.

Замечание

Уравнения (2.43) и (2.44) в общем случае имеют разные решения. Уравнение (2.43) соответствует уравнению переноса (2.47), которое дает решение в виде волны, движущейся вдоль характеристики $\varphi + \omega t = const$. Уравнение колебаний (2.44) помимо решений с характеристикой $\varphi + \omega t = const$ содержит решения c характеристикой $\varphi - \omega t = const$, переноса $W_t = -\omega W_{\omega}$. Движение вдоль соответствующее уравнению характеристик $\phi \pm \omega t = const$ соответствует переносу волны квази-плотности вероятностей вперед и назад по времени. Таким образом, решения уравнения Моэля/Власова является необратимым по времени, а решение W уравнения (2.44) обладает обратимостью по времени.

Уравнение (2.44) является волновым уравнением, в котором функция W соответствует величине отклонения относительно положения равновесия. Отклонение W от положения равновесия может принимать положительные и отрицательные значения. Следовательно, положительные и отрицательные значения функции квази-плотности вероятностей можно трактовать как положительные и отрицательные отклонения от положения равновесия при распространении волны плотности вероятностей.

Величина ω в уравнении (2.44) соответствует фазовой скорости волны, которая распространяется по окружности в фазовой плоскости (\overline{x}, p) . Решение уравнения (2.44) представимо в виде

$$W(\rho, \varphi, t) = F(\rho, \xi(\varphi, t)) + G(\rho, \eta(\varphi, t)), \qquad (2.49)$$

$$\xi(\varphi, t) = \Omega t - \kappa \varphi, \ \eta(\varphi, t) = \Omega t + \kappa \varphi, \ \Omega = \omega \kappa,$$

где F,G некоторые произвольные функции; $\xi(\varphi,t)$ и $\eta(\varphi,t)$ являются характеристиками, вдоль которых решение W имеет постоянное значение; величина κ соответствует волновому числу; знаки «±» соответствуют направлению волны по часовой стрелке и против часовой стрелки вокруг начала координат в фазовой плоскости (\overline{x},p) .

Замечание

Так как угол $\varphi = \arctan \frac{v}{u} = \arctan \frac{p}{m\omega \overline{x}}$ соответствует полярному углу в фазовой плоскости (\overline{x}, p) , то решение (2.49) в каждый момент времени должно удовлетворять периодическому условию:

$$W(\rho, 0, t) = W(\rho, 2\pi, t),$$

$$F(\rho, \Omega t) + G(\rho, \Omega t) = F(\rho, \Omega t - 2\pi\kappa) + G(\rho, \Omega t + 2\pi\kappa)$$
(2.50)

то есть функции F,G должны быть $2\pi\kappa$ периодичными по второму аргументу. Заметим, что согласно (2.46) величина ρ соответствует энергии гармонического осциллятора:

$$\rho^{2} = u^{2} + v^{2} = \omega^{2} \overline{x}^{2} + \frac{p^{2}}{m^{2}} = \frac{2}{m} \left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2} \overline{x}^{2}}{2} \right) = 2 \frac{\hbar \omega}{m} \varepsilon (\overline{x}, p), \qquad (2.51)$$

$$\varepsilon (\overline{x}, p) = \frac{1}{\hbar \omega} \left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2} \overline{x}^{2}}{2} \right) = \frac{1}{\hbar \omega} \left(\frac{p^{2}}{2m} + U_{\alpha}(x) \right).$$

С другой стороны функция Вигнера для квантового гармонического осциллятора известна в явном виде (1.31):

$$W_{n}(\overline{x},p) = \frac{(-1)^{n}}{\pi\hbar} e^{-2\varepsilon(\overline{x},p)} L_{n}(4\varepsilon(\overline{x},p)), \qquad (2.52)$$

Решение (1.31)/(2.52) уравнения Моэля (2.43) является стационарным и не зависит от времени, а зависит только от энергии $\varepsilon(\overline{x}, p)$, то есть согласно (2.51) от радиуса ρ . Из сравнения (2.49) и (2.52) следует, что нестационарное

решение уравнения Моэля / Власова с потенциалом $U_{\alpha}(x)$ можно записать в факторизованном виде:

$$W^{(n)}(\rho,\varphi,t) = N \frac{\left(-1\right)^{n}}{\pi \hbar} e^{-\frac{m}{\hbar \omega}\rho^{2}} L_{n} \left(\frac{2m}{\hbar \omega}\rho^{2}\right) \left[C + f\left(\Omega t + \kappa \varphi\right) + g\left(\Omega t - \kappa \varphi\right)\right], \quad (2.53)$$

где f,g — некоторые $2\pi\kappa$ периодические функции, а C — некоторая постоянная величина. Константа N является нормировочным множителем.

Лемма 1. Нормировочный множитель N в выражении (2.53) имеет вид:

$$N = \frac{1}{C + \langle f \rangle + \langle g \rangle},\tag{2.54}$$

где $\langle f \rangle$ и $\langle g \rangle$ являются средними значениями функций f,g на отрезке $[0,2\pi].$

Доказательство леммы 1

Вычислим интеграл от функции (2.53) по всей фазовой плоскости:

$$dxdp = \frac{m}{\omega}dudv = \frac{m}{\omega}\rho d\rho d\varphi,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty + \infty} W_n(x, p) dxdp = (-1)^n \frac{2m}{\hbar \omega} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{m}{\hbar \omega}\rho^2} L_n\left(\frac{2m}{\hbar \omega}\rho^2\right) \rho d\rho = 1,$$

$$\frac{1}{N} = \frac{(-1)^n m}{\pi \hbar \omega} \int_0^{2\pi} \left[C + f\left(\Omega t + \kappa \varphi\right) + g\left(\Omega t - \kappa \varphi\right)\right] d\varphi \int_0^{+\infty} e^{-\frac{m}{\hbar \omega}\rho^2} L_n\left(\frac{2m}{\hbar \omega}\rho^2\right) \rho d\rho,$$

$$\frac{1}{N} = C + \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left[f(\Omega t + \kappa \varphi) + g(\Omega t - \kappa \varphi) \right] d\varphi = C + \langle f \rangle + \langle g \rangle,$$

что и требовалось доказать.

Замечание

Заметим, что нормировочный коэффициент N (2.54) не будет зависеть от времени t. Величина Ωt в (2.53) соответствует набегу фазы и дает поворот вокруг начала координат (\bar{x},p) распределений f,g, которые являются $2\pi \kappa$ периодическими.

Функции f,g в выражении (2.53) определяются начальными условиями $W_0^{(n)}(\rho,\varphi)$, например:

$$W^{(n)}(\rho,\varphi,0) = W_0^{(n)}(\rho,\varphi) = N \frac{\left(-1\right)^n}{\pi\hbar} e^{-\frac{m}{\hbar\omega}\rho^2} L_n \left(\frac{2m}{\hbar\omega}\rho^2\right) \left[C + f\left(\kappa\varphi\right) + g\left(-\kappa\varphi\right)\right]. \tag{2.55}$$

Замечание

Простейшим примером решения вида (2.53) является случай f+g=0, C=1, соответствующий стационарному решению (2.43). В общем случае решение (2.53) является негладким в начале координат фазовой плоскости (\overline{x},p) при $\rho=0$, то есть при нулевой энергии. Таким образом, состояние с нулевой энергией является неустойчивым и при малейших флуктуациях происходит резкое изменение плотности квази-вероятностей $W^{(n)}$.

При интегрировании функции Вигнера $W_n(\bar{x}, p)$ по импульсу и по координате должны получаться положительные функции (1.26):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W_n(\bar{x}, p) dp = \left| \Psi_n(\bar{x}) \right|^2 = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \bar{x} \right), \qquad (2.56)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W_n(\bar{x}, p) dx = \left| \tilde{\Psi}_n(p) \right|^2,$$

где $\Psi_n(\overline{x})$ – координатное представление волновой функции, а $\tilde{\Psi}_n(p)$ – импульсное представление волновой функции квантового гармонического осциллятора. Функция $|\Psi_n(\overline{x})|^2$ соответствует плотности вероятностей распределений координат, а функция $|\tilde{\Psi}_n(p)|^2$ соответствует плотности вероятностей распределения импульсов для квантового гармонического осциллятора.

Проинтегрируем выражение (2.53) по координате и по импульсу, получим:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W^{(n)}(\bar{x}, p, t) d\bar{x} = CN \left| \tilde{\Psi}_n(p) \right|^2 + N \left\langle \Phi \right\rangle_{x, n} (p, t), \tag{2.57}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W^{(n)}(\bar{x}, p, t) dp = CN \left| \Psi_n(\bar{x}) \right|^2 + N \left\langle \Phi \right\rangle_{p, n} (\bar{x}, t),$$

где

$$\langle \Phi \rangle_{x} (p,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[f \left(\Omega t + \kappa \varphi \right) + g \left(\Omega t - \kappa \varphi \right) \right] W_{n}(\overline{x}, p) d\overline{x}, \qquad (2.58)$$

$$\langle \Phi \rangle_{p} (\overline{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[f \left(\Omega t + \kappa \varphi \right) + g \left(\Omega t - \kappa \varphi \right) \right] W_{n}(\overline{x}, p) dp.$$

Функции $\langle \Phi \rangle_{x,n}$ и $\langle \Phi \rangle_{p,n}$ являются усредненными функциями для функции $\Phi(\overline{x},p,t)=f(\eta)+g(\xi)$ по координате и по импульсу

соответственно. Усреднение (2.58) функции Φ производится с Вигнеровской плотностью квази-вероятностей $W_n(\overline{x},p)$ (2.52). Функции f,g являются произвольными периодическими функциями, следовательно, функции $\langle \Phi \rangle_{x,n}, \langle \Phi \rangle_{p,n}$ могут принимать различные значения. Совместимость выражений (2.56) и (2.57) определяется следующей теоремой.

Теорема 2. Пусть функция $\Phi(\overline{x}, p, t)$ является нечётной по переменным \overline{x} и p, тогда функция $W^{(n)}(\overline{x}, p, t)$ (2.53) удовлетворяет условиям:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W^{(n)}(\overline{x}, p, t) d\overline{x} = \left| \tilde{\Psi}_n(p) \right|^2, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} W^{(n)}(\overline{x}, p, t) dp = \left| \Psi_n(\overline{x}) \right|^2, \tag{2.59}$$

Доказательство теоремы 2

В силу чётности функции $W_n(\overline{x},p)$ и нечётности функции $\Phi(\overline{x},p,t)$ по переменным \overline{x} и p средние значения $\langle \Phi \rangle$ (2.58) будут равны нулю, то есть

$$\left\langle \Phi \right\rangle_{p,n} \left(\overline{x}_s, t \right) = \left\langle \Phi \right\rangle_{x,n} \left(p_s, t \right) = 0.$$
(2.60)

Вычислим значение нормировочного множителя N, которое в соответствии с выражением (2.54) зависит от средних значений функции $\langle f \rangle$ и $\langle g \rangle$. Интегрирование по импульсу p от $-\infty$ до $+\infty$ соответствует интегрированию по углу $\varphi \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right]$. Угол φ представим в виде:

$$\varphi = \begin{cases} \arctan \frac{p}{\overline{x}}, \ \overline{x} \ge 0, \\ \pi + \arctan \frac{p}{\overline{x}}, \ \overline{x} < 0. \end{cases}$$
 (2.61)

Учитывая (2.60) и (2.61), получаем:

$$d\varphi = \frac{\overline{x}dp}{\overline{x}^2 + p^2}, dp = \frac{\rho}{\cos\varphi}d\varphi = \overline{x}\frac{d\varphi}{\cos^2\varphi},$$

$$0 = \overline{x}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \Phi(\overline{x}, \overline{x} \operatorname{tg}\varphi, t) \frac{W_n(\overline{x}, \overline{x} \operatorname{tg}\varphi)}{\cos^2\varphi}d\varphi,$$
(2.62)

где величина \overline{x} является фиксированной при интегрировании по углу φ . На отрезке $\varphi \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right]$ функция $\frac{W_n \left(\overline{x}, \overline{x} \operatorname{tg} \varphi \right)}{\cos^2 \varphi}$ является чётной функцией относительно точки $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$ (p = 0), поэтому равенство нулю интеграла (A.8) вызвано нечётностью функции $\Phi \left(\overline{x}, \overline{x} \operatorname{tg} \varphi, t \right)$, то есть

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \Phi(\overline{x}, \overline{x} \operatorname{tg} \varphi, t) d\varphi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \left[f(\Omega t - \kappa \varphi) + g(\Omega t + \kappa \varphi) \right] d\varphi = 0.$$
 (2.63)

Сделаем замену переменных $\chi = \varphi + \pi$ в интеграле (2.63), получим

$$\int_{\pi/2}^{3\pi/2} \left[f\left(\Omega t_1 - \kappa \chi\right) + g\left(\Omega t_2 + \kappa \chi\right) \right] d\chi = 0,$$

$$\Omega t_1 = \Omega t + \kappa \pi, \ \Omega t_2 = \Omega t - \kappa \pi,$$
(2.64)

Разница фаз между углами Ωt_1 и Ωt_2 составляет $2\pi\kappa$, то есть $\Omega t_1 = \Omega t_2 + 2\pi\kappa$. Функции f и g в силу (1.7) являются $2\pi\kappa$ периодичными, следовательно, из выражения (2.64) получаем

$$\int_{\pi/2}^{3\pi/2} \left[f\left(\Omega t - \kappa \varphi\right) + g\left(\Omega t + \kappa \varphi\right) \right] d\varphi = 0.$$
 (2.65)

Складывая выражения (2.64) и (2.65), получаем

$$\frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left[f\left(\Omega t - \kappa \varphi\right) + g\left(\Omega t + \kappa \varphi\right) \right] d\varphi = \langle f \rangle + \langle g \rangle = 0,$$

$$N = 1/C.$$

Теорема доказана.

Выполнение условий (2.59) означает, что построенная функция $W^{(n)}(\bar{x},p,t)$ (2.53) может быть рассмотрена как функция плотности квазивероятностей для гармонического осциллятора в фазовом пространстве. Определение 1. Пусть функция $\Phi(\bar{x},p,t)$ является нечётной по переменным \bar{x} и p, тогда соответствующую ей функцию $W^{(n)}(\bar{x},p,t)$ (2.53) будем называть расширенной функцией Вигнера для гармонического осциллятора в фазовом пространстве.

Теорема 3. Энергетические уровни $\left<\left<\varepsilon\right>\right>_n$, соответствующие расширенной функции Вигнера $W^{(n)}$ имеют вид:

$$\left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_{n} = \hbar \omega \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon(\overline{x}, p) W^{(n)}(\overline{x}, p) d\overline{x} dp = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \tag{2.66}$$

Доказательство теоремы 3

Найдем уровни энергий $\left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_n$ для распределений $W^{(n)}$ (2.53):

$$d\rho^{2} = 2\rho d\rho = 2\frac{\hbar\omega}{m}d\varepsilon, \ \rho d\rho = \frac{\hbar\omega}{m}d\varepsilon, \ d\overline{x}dp = \frac{m}{\omega}\frac{\hbar\omega}{m}d\varepsilon d\varphi = \hbar d\varepsilon d\varphi,$$

$$\left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_{n} = \hbar\omega \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \varepsilon(\overline{x}, p)W^{(n)}(\overline{x}, p)d\overline{x}dp =$$

$$= N\hbar^{2}\omega \int_{0}^{2\pi} \left[C + f\left(\Omega t + \kappa\varphi\right) + g\left(\Omega t - \kappa\varphi\right)\right]d\varphi \frac{\left(-1\right)^{n}}{\pi\hbar} \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon}L_{n}(4\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon =$$

$$= N\hbar^{2}\omega \frac{2n+1}{4\pi\hbar} \int_{0}^{2\pi} \left[C + f\left(\Omega t + \kappa\varphi\right) + g\left(\Omega t - \kappa\varphi\right)\right]d\varphi,$$

$$\left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_{n} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{N}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left[C + f\left(\Omega t + \kappa\varphi\right) + g\left(\Omega t - \kappa\varphi\right)\right]d\varphi, \tag{2.67}$$

где учтено $\int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} L_n(4\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = (-1)^n \frac{2n+1}{4}$. Учитывая условие нормировки (2.54) (лемма 1), выражение (2.67) принимает вид:

$$\left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

что и требовалось доказать.

Замечание

Выражение (2.66) совпадает с энергетическим спектром гармонического осциллятора. Таким образом, наличие нестационарной части $f(\eta) + g(\xi)$ в выражении (2.53) не влияет на энергетический спектр гармонического осциллятора.

Пример расширенной функции Вигнера

Рассмотрим модельные решения уравнения Моэля (2.44) в виде расширенной функции Вигнера (2.53) для квантового гармонического

осциллятора. Функция $\Phi(\bar{x}, p, t) = f(\eta) + g(\xi)$ должна быть нечётной по переменным \bar{x} , p и являться $2\pi\kappa$ периодичной. В качестве примера рассмотрим представление функции Φ в виде суперпозиции двух встречных волн, дающих стоячую волну:

$$\Phi(\overline{x}, p, t) = g(\Omega t + \kappa \varphi) + f(\Omega t - \kappa \varphi) = A \sin(\Omega t + \kappa \varphi) - A \sin(\Omega t - \kappa \varphi),$$

$$\Phi(\overline{x}, p, t) = \overline{\Phi}(\varphi, t) = 2A \cos(\Omega t) \sin(\kappa \varphi),$$
 (2.68)

где A — постоянная величина. Функция (2.68) удовлетворяет условию периодичности $\overline{\Phi}(\varphi+2\pi\kappa,t)=\overline{\Phi}(\varphi,t)$ и является нечётной по переменной p, так как замена p на -p соответствует замене φ на $-\varphi$. Нечётность функции (2.68) по переменной \overline{x} возможна при $\kappa=2\ell,\,\ell\in\mathbb{N}$. Условие на волновое число κ дает ограничение на соотношение (2.49) частот Ω и ω , то есть

$$\Omega_{\ell} = 2\omega\ell \,. \tag{2.69}$$

Частота ω соответствует частоте гармонического осциллятора и определяет угловую скорость, с которой бегут волны в фазовой плоскости вдоль окружностей вокруг начала координат. Из выражения (2.69) следует, что частота Ω стоячей волны (2.68) должна быть кратна частоте ω .

В результате для функции (2.68) выполнены условия теоремы 2, и можно записать расширенную функцию Вигнера $W^{(n)}(\bar{x}, p, t)$ для гармонического осциллятора в виде (2.53):

$$W_{\ell}^{(n)}(\rho,\varphi,t) = \frac{\left(-1\right)^{n}}{\pi\hbar} e^{-\frac{m}{\hbar\omega}\rho^{2}} L_{n}\left(\frac{2m}{\hbar\omega}\rho^{2}\right) \left[1 + 2\frac{A}{C}\cos(2\omega\ell t)\sin(2\ell\varphi)\right], \quad (2.70)$$

здесь учтено, что N=1/C. При A=0 выражение (2.70) перейдет в обычную стационарную функцию Вигнера для гармонического осциллятора W_n (2.52). Из выражения (2.70) следует, что для каждого состояния n гармонического осциллятора существует дополнительный дискретный набор функций, определяемый индексом ℓ . Узлы и пучности стоячей волны будут располагаться на следующих углах в фазовой плоскости:

$$\varphi_{n,\ell}^{(node)} = \frac{\pi n}{2\ell}, \ \varphi_{n,\ell}^{(anti-node)} = \frac{\pi (2n+1)}{4\ell}. \tag{2.71}$$

Из анализа выражения (2.70) следует, что функция Вигнера W_n являться некоторой «средней/равновесной» функцией, относительно которой происходят осцилляции функции $W_\ell^{(n)}$ с частотой Ω и периодом $T=2\pi/\Omega$.

На рис. 3-8 показаны графики функции (2.70) при $\ell=3$ и A=2, C=5. Графики на рис. 3-5 соответствуют основному состоянию n=0, а на рис. 6-8 состоянию с номером n=5. На рис. 3 и 6 показаны распределения, соответствующие моменту времени t=0 или t=T. Распределения на рис. 4 и 7 соответствуют времени t=T/4, когда функция (2.70) переходит в обычную функцию Вигнера W_n гармонического осциллятора (2.52). На рис. 5 и 8 распределения относятся к моменту времени t=T/2.

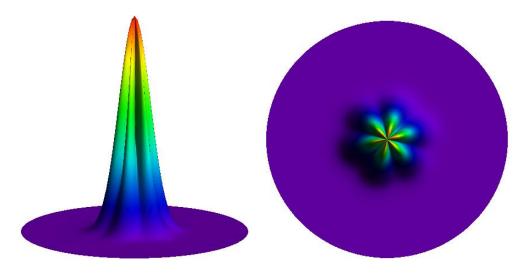


Рис. 3 График $W_3^{(0)}(\rho,\varphi,0) = W_3^{(0)}(\rho,\varphi,T)$

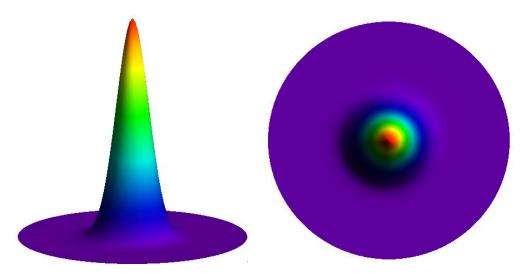


Рис. 4 График $W_3^{(0)}\left(
ho, \phi, T/4
ight) = W_3^{(0)}\left(
ho, \phi, 3T/4
ight)$ или W_0

В моменты времени t=0 (рис. 3,6) и t=T/2 (рис. 5,8) функция $W_\ell^{(n)}$ максимально отклоняется от функции W_n на углах пучностей $\varphi_{n,\ell}^{(anti-node)}$ (2.71). В моменты времени t=T/4 и t=3T/4 функция $W_\ell^{(n)}$ полностью совпадает с функцией W_n . На линии узловых точек $\varphi_{n,\ell}^{(node)}$ во все моменты времени значение функций W_n и $W_\ell^{(n)}$ совпадают.

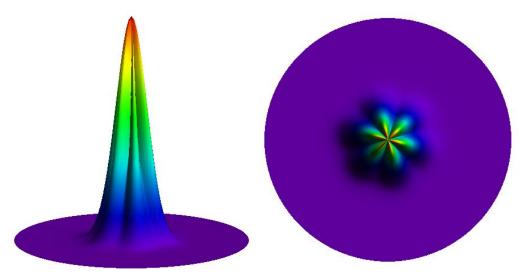


Рис. 5 График $W_{\scriptscriptstyle 3}^{(0)}ig(
ho, \phi, T/2ig)$

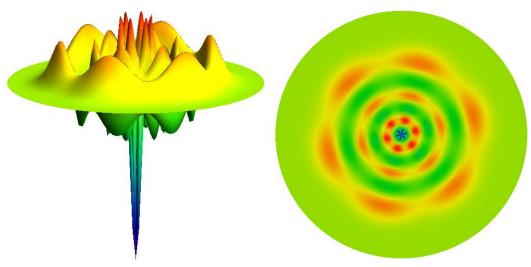


Рис. 6 График $W_3^{(5)}(\rho,\varphi,0) = W_3^{(5)}(\rho,\varphi,T)$

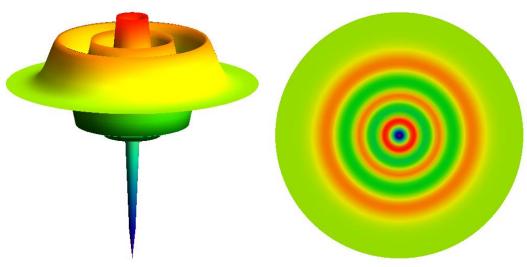


Рис. 7 График $W_3^{(5)}(\rho, \varphi, T/4) = W_3^{(5)}(\rho, \varphi, 3T/4)$

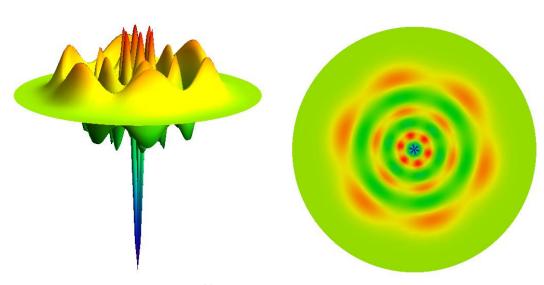


Рис. 8 График $W_{_{3}}^{(5)}ig(
ho, arphi, T/2ig)$ 95

Замечание

Заметим, что основное состояние (n=0), изображенное на рис. 3-5 не имеет областей отрицательных значений функции $W_\ell^{(0)}$, так как коэффициент $2\frac{A}{C}$ в выражении (2.70) равен $\frac{4}{5} < 1$. Может показаться, что положительность функции $W_\ell^{(0)}$ нарушает теорему Хадсона [42]. То есть существует положительная функция $W_\ell^{(0)}$, отличная от гауссова распределения. В действительности противоречия нет, так как теорема Хадсона была доказана для аналитических функций, а функция $W_\ell^{(0)}$ не является гладкой в начале координат.

Замечание

Изначально функция Вигнера была построена феноменологическим путем в виде Фурье преобразования (1.32). Подставляя выражения для волновых функций Ψ_n гармонического осциллятора в интеграл (1.32) можно получить функции W_n (2.52). Волновые функции Ψ_n являются стационарными, следовательно, функции W_n также стационарны (2.52).

Используя уравнение фон Неймана для матрицы плотности $\hat{\rho}$ и выражение (1.32) получается эволюционное уравнение Моэля (см. §1.2). Естественно, что функция W_n является решением уравнения Моэля, но не любое решение уравнения Моэля будет давать функцию, обладающую свойствами (2.59). В данном параграфе для выполнения свойства (2.59) были наложены дополнительные условия на функцию Φ (см. теорему 2).

Решение уравнения Моэля в общем виде затруднено наличием бесконечного ряда в правой части (1.43), но это только часть проблемы. Другая часть проблемы – это выбор начально-краевых условий, которые, по крайней мере, должны быть связаны с условиями (2.59). С точки зрения

классической механики можно было рассмотреть выражение для функции $\bar{\Phi}$ в виде бегущей волны:

$$\overline{\Phi}(\varphi,t) = A\cos(\Omega t + \kappa \varphi), \qquad (2.72)$$

но для него не выполнены «квантовые» условия (2.59). При этом, решая уравнение Шрёдингера для гармонического осциллятора, серьезной проблемы в выборе начально-краевых условий не возникает.

Интересным видится тот факт, что с позиции классической механики уравнение колебаний (2.44) не накладывает никаких условий на зависимость расширенной функции Вигнера от радиуса ρ , то есть от энергии ε . Важным для классической механики является зависимость расширенной функции Вигнера от времени t и угла φ (2.44). С позиций квантовой механики функция Вигнера (2.52) содержит зависимость только от энергии ε , то есть от радиуса ρ , и не зависит от угла φ .

Таким образом, для одной и той же физической системы (осциллятор) накладываются полностью «ортогональные» условия. Квантовая механика задает радиальную (энергетическую) зависимость, а «классическая» механика накладывает условия только на временную и угловую зависимость.

ГЛАВА 3 ФУНКЦИЯ ВИГНЕРА КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Рассматривается построение точных выражений для функции Вигнера квантовых систем с полиномиальным потенциалом. Получен эффективный численно-аналитический алгоритм нахождения функции Вигнера и вычисления средних квантовых характеристик.

§3.1 Представление функции Вигнера

Решения ψ_n (1.22) для квантового гармонического осциллятора представляют собой ортонормированный базис в пространстве L_2 [82]. Следовательно, некоторое решение $\Psi \in L_2$ уравнения Шрёдингера может быть разложено по базису $\{\psi_n\}$:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(t) \psi_n(x), \qquad \tilde{\Psi}(p,t) = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(t) \tilde{\psi}_n(p), \qquad (3.1)$$

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \sum_{n,k=0}^{+\infty} c_n \overline{c}_k \psi_n \overline{\psi}_k, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi\right|^2 dx = \sum_{n=0}^{+\infty} \left|c_n\right|^2 = 1,$$

$$\left|\tilde{\Psi}(p,t)\right|^2 = \sum_{n,k=0}^{+\infty} c_n \overline{c}_k \tilde{\psi}_n \overline{\tilde{\psi}}_k, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\tilde{\Psi}\right|^2 dp = \sum_{n=0}^{+\infty} \left|c_n\right|^2 = 1.$$

где $c_{\scriptscriptstyle n}$ – коэффициенты разложения.

Как следует из (3.1), волновая функция $\Psi \in L_2$ произвольной квантовой системы может быть представлена как суперпозиция волновых функций осциллятора (1.22). Зная волновую функцию (3.1), можно построить функцию Вигнера (1.32). Учитывая (3.1) и (1.32), определим новые функции $w_{n,k}(x,p)$:

$$\mathcal{W} = \left\{ w_{n,k} \left(x, p \right) \right\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_n \left(x - \frac{s}{2} \right) \psi_k \left(x + \frac{s}{2} \right) \exp\left(-i \frac{ps}{\hbar} \right) ds =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\tilde{\psi}}_n \left(p - \frac{\xi}{2} \right) \widetilde{\psi}_k \left(p + \frac{\xi}{2} \right) \exp\left(i \frac{x\xi}{\hbar} \right) d\xi,$$
(3.2)

где $n,k \in \mathbb{N}_0$. Выражение (3.2) представляет собой оператор Вейля в базисе собственных функций гармонического осциллятора. Заметим, что матрица \mathcal{W} является эрмитовой матрицей $\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}$, то есть $w_{n,k}(x,p) = \overline{w}_{k,n}(x,p)$. Диагональные элементы $w_{n,n}$ матрицы \mathcal{W} (3.2) совпадают с функциями Вигнера (1.31) для собственных состояний $\psi_n(x)$ гармонического осциллятора.

Свойство 1.

Для элементов $w_{n,k}(x,p)$ матрицы ${\mathcal W}$ справедливы соотношения:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x,p) dp = \overline{\psi}_n(x) \psi_k(x), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x,p) dx = \overline{\widetilde{\psi}}_n(p) \widetilde{\psi}_k(p). \tag{3.3}$$

Доказательство свойства 1

Действительно в силу определения (3.2) получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x,p)dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{ps}{\hbar}} dp \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_n \left(x - \frac{s}{2}\right) \psi_k \left(x + \frac{s}{2}\right) ds =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(s) \overline{\psi}_n \left(x - \frac{s}{2}\right) \psi_k \left(x + \frac{s}{2}\right) ds = \overline{\psi}_n(x) \psi_k(x),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x,p) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{x\xi}{\hbar}} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\tilde{\psi}}_n \left(p - \frac{\xi}{2} \right) \widetilde{\psi}_k \left(p + \frac{\xi}{2} \right) d\xi =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\xi) \overline{\tilde{\psi}}_n \left(p - \frac{\xi}{2} \right) \widetilde{\psi}_k \left(p + \frac{\xi}{2} \right) d\xi = \overline{\tilde{\Psi}}_n (p) \widetilde{\psi}_k (p),$$

что и требовалось доказать.

Используя выражение (3.2), можно записать функцию Вигнера (1.32) произвольной квантовой системы, описываемой волновой функцией Ψ :

$$W(x,p) = \sum_{n,k=0}^{+\infty} \rho_{k,n} w_{n,k}(x,p) = \text{Tr}[\rho W(x,p)], \qquad (3.4)$$

где $\rho_{k,n} = c_k \overline{c}_n$ матрица плотности. Матрица плотности ρ эрмитова ($\rho = \rho^{\dagger}$). Согласно (3.1), для матрицы ρ выполнено условие $\mathrm{Tr}[\rho] = 1$. Из выражения (3.4) следует, что зная матрицу \mathcal{W} , можно получить функцию Вигнера произвольной квантовой системы. В матричной форме, выражение (3.4) может быть представлено в виде свертки:

$$W = \overline{C}^{T} W C, \qquad (3.5)$$

$$\overline{C}^{T} = \{\overline{c}_{1}, \overline{c}_{2}, ...\}, C = \{c_{1}, c_{2}, ...\}^{T}.$$

Зная волновую функцию Ψ , согласно (3.1) используя формулу $c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_n(x) \Psi(x) dx$, можно найти вектор C и использовать формулы (3.5), (3.4) для получения выражения для функции Вигнера W.

Выражение (3.4) в квантовой механике интерпретируется как среднее значение оператора $\hat{\mathcal{W}}$. Следовательно, согласно (3.4), функция Вигнера представляет собой среднее значение оператора $\hat{\mathcal{W}}$.

Матрица $\mathcal W$ будет универсальной для любой квантовой системы, описываемой волновой функцией $\Psi\in L_2$. Таким образом, проблема построения функции Вигнера сводится к задаче отыскания матрицы $\mathcal W$. Так как диагональные элементы $w_{n,n}$ матрицы $\mathcal W$ известны (1.32), то необходимо найти вид функций $w_{n,k}(x,p)$ для $n\neq k$.

Рассмотрим полином $\mathcal{P}_{n,k}(z_1, z_2)$ двух переменных $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ вида [62]:

$$\mathcal{P}_{n,k}(z_1, z_2) \stackrel{\text{det}}{=} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} n! k!}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{1}{2^s s!} \frac{\partial^{2s}}{\partial z_1^s \partial z_2^s} \Big[(2z_1)^n (2z_2)^k \Big]. \tag{3.6}$$

или

$$\mathcal{P}_{n,k}(z_1,z_2) = \sqrt{2^{n+k} n! k!} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{z_1^{n-s} z_2^{k-s}}{2^s s! (k-s)! (n-s)!}$$

Из выражения (3.6) следует, что полином $\mathcal{P}_{n,k}(z_1,z_2)$ удовлетворяет условию:

$$\overline{\mathcal{P}}_{n+l,n}(-z,\overline{z}) = (-1)^{l} \mathcal{P}_{n,n+l}(-z,\overline{z}). \tag{3.7}$$

Теорема 1.

Пусть $n_1, k_1, n_2, k_2 \in \mathbb{N}_0$, $x, y \in \mathbb{R}$ и $\rho_2(x, y) = e^{-x^2 - y^2}$, тогда интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_2(x, y) \mathcal{P}_{n_1, k_1}(x, y) \mathcal{P}_{n_2, k_2}(x, y) dx dy, \qquad (3.8)$$

 $npu\ n_1+n_2\ -\$ чётном $u\ k_1+k_2\ -\$ нечётном или $npu\ n_1+n_2\ -\$ нечётном $u\ k_1+k_2\ -\$ чётном, будет равен нулю, то есть I=0 .

 $\Pi pu \ n_1 + n_2 \ u \ k_1 + k_2 \ -$ нечётных или $npu \ n_1 + n_2 \ u \ k_1 + k_2 \ -$ чётных, интеграл I будет строго положительным, то есть I > 0.

Доказательство теоремы 1. Докажем первое утверждение теоремы 1. Пусть для определенности величина $n = n_1 + n_2$ является чётной, а величина $k = k_1 + k_2$ — нечётной. Подставим выражение (3.6) в интеграл (3.8), получим

$$I = \frac{2^{n+k} n_1! n_2! k_1! k_2!}{\sqrt{2^{n+k} n_1! n_2! k_1! k_2!}} \sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1) \min(n_2, k_2)} \frac{1}{(n_1 - s)! (n_2 - l)!} \frac{1}{(k_1 - s)! (k_2 - l)!} \frac{1}{2^{s+l} s! l!} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n-(l+s)} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} y^{k-(l+s)} dy,$$
(3.9)

Обозначим $\lambda = l + s$ и рассмотрим двойной интеграл, стоящий в выражении (3.9)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n-\lambda} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} y^{k-\lambda} dy$$
 (3.10)

Величина λ может быть чётной или нечётной и меняется от 0 до $\min(n_1,k_1)+\min(n_2,k_2)$. Рассмотрим оба случая значений λ : чётное и нечётное значение. Если λ является чётным, тогда величина $n-\lambda$ является чётной, а величина $k-\lambda$ будет нечётной. Следовательно, второй интеграл в выражении (3.10) по переменной y будет равен нулю. Если λ является нечётным, тогда величина $n-\lambda$ является нечётной, а величина $k-\lambda$ будет чётной. Следовательно, первый интеграл в выражении (3.10) по переменной x будет равен нулю. Таким образом, при любом значении λ интеграл (3.10) будет равен нулю. Аналогичные рассуждения справедливы при нечётном

значении n и чётном значении k. В результате первое утверждение теоремы 1 доказано.

Докажем второе утверждение теоремы 1. Пусть n,k являются чётными, тогда при нечётных значениях λ оба интеграла в выражении (3.10) будут обращаться в ноль. То есть в суммах (3.9) будут отсутствовать слагаемые, у которых $\lambda = l + s$ является нечётным. При чётных значениях λ величины $n - \lambda, k - \lambda$ будут чётными. Следовательно, интегралы (3.10) будут отличными от нуля и строго положительными. В результате, в сумме (3.9) отличными от нуля будут только слагаемые с чётными значениями λ .

Если n,k являются нечётными, тогда по аналогии с предыдущим случаем, отличными от нуля будут слагаемые, для которых значения λ являются нечётными. Таким образом, в обоих случаях при чётных и нечётных значениях n,k интеграл (3.8) будет строго положительным, что и требовалось доказать.

Теорема 2

Пусть числа $n=n_1+n_2$, $k=k_1+k_2$ из теоремы l одновременно являются чётными или нечётными, тогда величина интеграл (3.8) принимает значения

$$I_{n,k} = \pi \sqrt{n_1! n_2! k_1! k_2!} \underbrace{\sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1) \min(n_2, k_2)}}_{s+l, n, k-even/odd} \frac{\left|k - (l+s) - 1\right|!!}{s! (n_1 - s)! (k_1 - s)!} \frac{\left|n - (l+s) - 1\right|!!}{l! (n_2 - l)! (k_2 - l)!}, \quad (3.11)$$

При этом суммирование в выражении (3.11) производится по всем чётным значениям s+l при чётных значениях n,k и по всем нечётным значениям s+l при нечётных значениях n,k.

Доказательство теоремы 2

Интегралы (3.10) могут быть вычислены в явном виде. Обозначим $n-\lambda=2\nu,\,\nu\in\mathbb{N}_0$ и $k-\lambda=2\mu,\,\mu\in\mathbb{N}_0$, так как только для чётных значений $n-\lambda$ и $k-\lambda$ интеграл (3.10) будет отличен от нуля.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^{2}} x^{2n} dx = \sqrt{\pi} \frac{|2n-1|!!}{2^{n}}, n \in \mathbb{N}_{0},$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^{2}} x^{2\nu} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^{2}} y^{2\mu} dy = \frac{2^{l+s} \pi}{\sqrt{2^{n+k}}} |n-(l+s)-1|!! |k-(l+s)-1|!!$$
(3.12)

Используя выражение (3.12) для интеграла (3.9) получаем представление (3.11), что и требовалось доказать.

Определение. Пусть $n,k\in\mathbb{N}_0$ определим модифицированный символ Кронекера $\tilde{\delta}_{n,k}$ следующим образом

Следствие 1. Согласно Теоремам 2 и 3, для полиномов $\mathcal{P}_{n,k}(x,y)$ справедливо следующее представление:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_2(x, y) \mathcal{P}_{n_1, k_1}(x, y) \mathcal{P}_{n_2, k_2}(x, y) dx dy = \mathcal{N}_{n_1 + n_2, k_1 + k_2}^{(2)} \tilde{\delta}_{n_1 + n_2, k_1 + k_2}, \tag{3.14}$$

$$\mathcal{N}_{n_1+n_2,k_1+k_2}^{(2)} = \pi \sqrt{n_1! n_2! k_1! k_2!} \underbrace{\sum_{s=0}^{\min(n_1,k_1)\min(n_2,k_2)}}_{s+l,n,k-even/odd} \underbrace{\frac{\left|k-(l+s)-1\right|!!}{s!(n_1-s)!(k_1-s)!}}_{\frac{\left|k-(l+s)-1\right|!!}{l!(n_2-l)!(k_2-l)!}.$$

Теорема 3.

Пусть $n,k \in \mathbb{N}_0$ и ζ_1,ζ_2 –постоянные величины, тогда для полиномов Эрмита справедливо выражение

$$\frac{1}{\sqrt{2^{n+k}\pi n!k!}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^2} H_n(\varsigma + \varsigma_1) H_k(\varsigma + \varsigma_2) d\varsigma = \mathcal{P}_{n,k}(\varsigma_1,\varsigma_2). \tag{3.15}$$

Доказательство теоремы 3

Воспользуемся формулой для полиномов Эрмита

$$H_n(\varsigma + \xi) = \sum_{k=0}^n C_n^k H_k(\varsigma) (2\xi)^{n-k}. \tag{3.16}$$

Подставляя (3.16) в левую часть выражения (3.15) получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^{2}} H_{n}(\varsigma + \varsigma_{1}) H_{k}(\varsigma + \varsigma_{2}) d\varsigma = \sum_{s=0}^{n} \sum_{l=0}^{k} C_{k}^{l} C_{n}^{s} (2\varsigma_{1})^{n-s} (2\varsigma_{2})^{k-l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^{2}} H_{s}(\varsigma) H_{l}(\varsigma) d\varsigma =$$

$$= \sqrt{\pi} \sum_{s=0}^{n} \sum_{l=0}^{k} C_{k}^{l} C_{n}^{s} (2\varsigma_{1})^{n-s} (2\varsigma_{2})^{k-l} 2^{s} s! \delta_{sl} = 2^{n} \sqrt{\pi} n! \sum_{s=0}^{\min(n,k)} C_{k}^{s} \frac{1}{(n-s)!} \varsigma_{1}^{n-s} (2\varsigma_{2})^{k-s} =$$

$$= 2^{n} 2^{k} n! k! \sqrt{\pi} \varsigma_{1}^{n} \varsigma_{2}^{k} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{1}{s!(k-s)!(n-s)!} \frac{1}{(2\varsigma_{1}\varsigma_{2})^{s}},$$

полученное выражение согласно выражению (3.7) доказывает теорему.

Следствие 2.

 $\it Из\ meopemы\ 3\ c$ ледует, что при $\it n=k\$ формула (3.15) переходит в выражение

$$\frac{1}{2^{n} n! \sqrt{\pi}} \int e^{-\varsigma^{2}} H_{n}(\varsigma + \varsigma_{1}) H_{n}(\varsigma + \varsigma_{2}) d\varsigma = \mathcal{P}_{n,n}(\varsigma_{1}, \varsigma_{2}) = L_{n}(-2\varsigma_{1}\varsigma_{2}), \quad (3.17)$$

где L_{n} – полиномы Лагерра.

Доказательство следствия 2.

Действительно, с одной стороны для полиномов Лагерра справедливо представление [83, 84]

$$L_{n}(x) = \sum_{k=0}^{n} C_{n}^{n-k} \frac{(-x)^{k}}{k!} = \sum_{k=0}^{n} \frac{n!(-x)^{k}}{(n-k)!k!k!} = \sum_{s=0}^{n} \frac{n!(-x)^{n-s}}{s!(n-s)!(n-s)!} = \sum_{s=0}^{n} \frac{C_{n}^{s}}{(n-s)!}(-x)^{n-s}.$$
(3.18)

С другой стороны из формулы (3.16) при n = k получаем

$$\frac{1}{2^{n} n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^{2}} H_{n}(\varsigma + \varsigma_{1}) H_{n}(\varsigma + \varsigma_{2}) d\varsigma = 2^{n} n! \varsigma_{1}^{n} \varsigma_{2}^{n} \sum_{s=0}^{n} \frac{1}{s!(n-s)!(n-s)!} \frac{1}{(2\varsigma_{1}\varsigma_{2})^{s}} = \sum_{s=0}^{n} \frac{C_{n}^{s}}{(n-s)!} (2\varsigma_{1}\varsigma_{2})^{n-s} = L_{n}(-2\varsigma_{1}\varsigma_{2}).$$
(3.19)

Сравнивая выражения (3.18) и (3.19) получаем справедливость выражения (3.17).

Теорема 4.

Элементы матрицы \mathcal{W} имеют вид

$$W_{n,k}(x,p) = \frac{\left(-1\right)^k}{\pi\hbar} e^{-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2 \kappa^2}} \mathcal{P}_{n,k}\left(-\kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}, \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right),\tag{3.20}$$

Доказательство теоремы 4

Используя формулу (3.15) получим выражение для функции $w_{n,k}(x,p)$. Из определения (3.2) следует, что

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} n! k!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \times \left(\frac{m\omega\left[\left(x+\frac{s}{2}\right)^{2} + \left(x-\frac{s}{2}\right)^{2}\right]}{2\hbar} + \frac{i\frac{ps}{\hbar}}{\hbar} H_{n}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x-\frac{s}{2}\right)\right) H_{k}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x+\frac{s}{2}\right)\right) ds = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} \pi n! k!}} e^{-\kappa^{2}x^{2}} \int e^{-\frac{\xi^{2}}{4} - i\frac{p\xi}{\kappa\hbar}} H_{n}\left(\kappa x - \frac{\xi}{2}\right) H_{k}\left(\kappa x + \frac{\xi}{2}\right) d\xi,$$
(3.21)

где $\kappa = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $\xi = s\kappa$. Воспользуемся представлением

$$-\left(\frac{1}{2}\xi + i\frac{p}{\hbar\kappa}\right)^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2} = -\zeta^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2}.$$
 (3.22)

Подставляя (3.22) в выражение (3.21) и используя свойство полиномов

Эрмита
$$H_n \left(-x \right) = \left(-1 \right)^n H_n \left(x \right)$$
 (то есть $H_n \left(-\left(\varsigma - \kappa x - i \frac{p}{\hbar \kappa} \right) \right) =$ $= \left(-1 \right)^n H_n \left(\varsigma - \kappa x - i \frac{p}{\hbar \kappa} \right)$) получим:

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{\left(-1\right)^n}{\pi\hbar\sqrt{2^{n+k}\pi n!k!}} e^{-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2 \kappa^2}} \int e^{-\varsigma^2} H_n\left(\varsigma - \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) H_k\left(\varsigma + \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) d\varsigma. \tag{3.23}$$

Обозначим $\varsigma_1 = \kappa x - i \frac{p}{\hbar \kappa}$, $\varsigma_2 = -\kappa x - i \frac{p}{\hbar \kappa}$ и воспользуемся формулой (3.15) для выражения (3.23) получим

$$W_{n,k}(x,p) = \frac{\left(-1\right)^n}{\pi\hbar} e^{-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2 \kappa^2}} \mathcal{P}_{n,k}\left(-\kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}, \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right),$$

что и требовалось доказать.

Следствие 3.

Uз теоремы 4 и свойства 1 следует, что для полиномов $\mathcal{P}_{n,k}$ справедливы соотношения:

$$\frac{\left(-1\right)^{n}}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\kappa^{2}x^{2}-\frac{p^{2}}{\hbar^{2}\kappa^{2}}}\mathcal{P}_{n,k}\left(-\kappa x-i\frac{p}{\hbar\kappa},\kappa x-i\frac{p}{\hbar\kappa}\right)dp=\overline{\psi}_{n}(x)\psi_{k}(x),$$

$$\frac{\left(-1\right)^{n}}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\kappa^{2}x^{2}-\frac{p^{2}}{\hbar^{2}\kappa^{2}}}\mathcal{P}_{n,k}\left(-\kappa x-i\frac{p}{\hbar\kappa},\kappa x-i\frac{p}{\hbar\kappa}\right)dx=\overline{\tilde{\psi}}_{n}\left(p\right)\tilde{\psi}_{k}\left(p\right).$$

Заметим, что выражение (3.20) при n=k согласно следствию 3 переходит в функции Вигнера.

Из эрмитовости матрицы W и выражения (3.5) следует, что

$$\overline{W}^T = \left(C^T \overline{W} \overline{C}\right)^T = \left(\overline{W} \overline{C}\right)^T C = \overline{C}^T \left(\overline{W}\right)^T C = \overline{C}^T W^{\dagger} C = \overline{C}^T W C = W,$$

и полученные элементы $w_{n,k}\left(x,p\right)$ (3.20) удовлетворяют $w_{n,k}\left(x,p\right)=\overline{w}_{k,n}\left(x,p\right)$. Действительно, обозначим $z=\kappa x+i\frac{p}{\hbar\kappa}$, тогда выражение (3.20) примет вид

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} e^{-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2 \kappa^2}} \mathcal{P}_{n,k}(-z,\overline{z}),$$

$$\mathcal{P}_{n,k}(-z,\overline{z}) = \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-z)^{n-s} \overline{z}^{k-s}}{2^s s! (k-s)! (n-s)!} = (-1)^n z^n \overline{z}^k \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! |z|^{2s}},$$

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{z^n \overline{z}^k}{\pi\hbar} e^{-|z|^2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! |z|^{2s}}.$$
(3.24)

Проверим условие эрмитовости $w_{n,k}(x,p) = \overline{w}_{k,n}(x,p)$, из представления (3.24) получаем

$$w_{k,n}(x,p) = \frac{z^{k}\overline{z}^{n}}{\pi\hbar} e^{-|z|^{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^{s}}{2^{s} s!(k-s)!(n-s)!|z|^{2s}},$$

$$\overline{w}_{k,n}(x,p) = \frac{\overline{z}^{k} z^{n}}{\pi\hbar} e^{-|z|^{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^{s}}{2^{s} s!(k-s)!(n-s)!|z|^{2s}} = w_{n,k}(x,p).$$

Отметим, что полученные выражения $w_{n,k}(x,p)$ в общем случае являются комплексными (3.24). Только при n=k диагональные элементы $w_{n,n}(x,p)$ являются действительными. При $n \neq k$ недиагональные элементы представимы в виде

$$W_{n,k}(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar} |z|^{2\min(n,k)} e^{-|z|^2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! |z|^{2s}} \begin{cases} \overline{z}^{k-\min(n,k)}, k > n, \\ z^{n-\min(n,k)}, k < n, \end{cases}$$
(3.25)

или

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{1}{\pi \hbar} |z|^{\min(n,k)} e^{-|z|^2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! |z|^{2s}} \begin{cases} |z|^k e^{-i[k-\min(n,k)]\varphi}, k > n, \\ |z|^n e^{i[n-\min(n,k)]\varphi}, k < n, \end{cases}$$

или

$$w_{n,k}(x,p) = \frac{1}{\pi \hbar} |z|^{n+k} e^{-|z|^2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s!(k-s)!(n-s)!|z|^{2s}} e^{i(n-k)\varphi}$$

где учтено, что $\min(n,k) + \max(n,k) = n+k$. Величина $|z|^2$ соответствует энергии (1.25), то есть

$$\left|z\right|^{2} = \frac{2}{\hbar\omega} \left(\frac{p^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}x^{2}}{2}\right) = 2\varepsilon(x, p). \tag{3.26}$$

Фаза φ соответствует полярному углу на плоскости фазового пространства (x,p), так как

$$\varphi = \arg z = \arctan\left(\frac{p}{m\omega x}\right).$$
 (3.27)

Выражение (3.27) указывает на важное физическое значение недиагональных элементов матрицы W в фазовом пространстве. Для квантового гармонического осциллятора n=k и недиагональные элементы отсутствуют, что приводит к постоянству функции плотности вероятностей на фазовых траекториях (3.26), так как влияние фазы φ (3.27) в выражении (3.25) отсутствует

$$W = \begin{pmatrix} w_{1,1} & 0 \dots & 0 \\ 0 & w_{2,2} \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots \end{pmatrix}, \quad \varepsilon = \frac{|z|^2}{2} = const.$$
 (3.28)

Для произвольной квантовой системы в общем случае $n \neq k$, поэтому значение фазы φ (3.27) вносит вклад в функцию плотности вероятности

 $w_{n,k}(x,p)$ (3.25) вдоль фазовой траектории $\varepsilon = const$, где функция $\varepsilon(x,p)$ отлична от выражения (1.25), (2.26). Поэтому плотность вероятности (функция Вигнера) W будет переменной вдоль фазовой траектории $\varepsilon = const$.

Как видно из выражения (3.25) при движении по замкнутой фазовой траектории изменение плотности вероятности вдоль фазовой траектории $\varepsilon = const$ будет иметь периодический характер. Величина $\varpi_{n,k} = n - k \in \mathbb{Z}$ принимает целые значения. Из выражения (3.29) следует, что функции $w_{n,k} \left(x,p \right)$ будут периодичными с периодом

$$T_{n,k} = \frac{2\pi}{|\varpi_{n,k}|} = \frac{2\pi}{|n-k|}.$$
 (3.29)

Из (3.29) следует, что чем дальше от диагонали матрицы \mathcal{W} , тем период меньше, то есть выше частота осцилляции $|\sigma_{n,k}|$ комплексной функции плотности вероятности $w_{n,k}(x,p)$. Чем ближе к диагонали матрицы \mathcal{W} , тем больше период (3.29) осцилляций плотности вероятностей $w_{n,k}(x,p)$ (меньше частота $|\sigma_{n,k}|$). На диагонали матрицы \mathcal{W} частота осцилляций равна нулю $|\sigma_{n,n}|=0$ и плотность вероятности становится действительной величиной и постоянной вдоль фазовой траектории $\varepsilon = const$ (3.26).

При рассмотрении модуля $\left|w_{n,k}\left(x,p\right)\right|$ функций плотностей вероятностей, осцилляции исчезают, так как $\left|e^{i\varpi_{n,k}\varphi}\right|=1$

$$\left| w_{n,k}(x,p) \right| = \frac{1}{\pi \hbar} |z|^{n+k} e^{-|z|^2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! |z|^{2s}},$$
(3.30)

то есть на фазовых траекториях $\varepsilon \sim |z| = const$ согласно (3.30)

$$|w_{n,k}(x,p)| = const.$$

С точки зрения теории функций комплексного переменного элементы $w_{n,k}(x,p)$ матрицы \mathcal{W} являются многолистными комплексными функциями на римановой поверхности. Диагональные элементы $w_{n,n}(x,p)$ имеют постоянные действительные значения на фазовых траекториях $\varepsilon = const$ (3.26) при фазовых углах $0 \le \varphi \le 2\pi$.

Определение

Пусть $n,k\in\mathbb{N}_0$ и $x\in\mathbb{R}$. Определим полиномы $\Upsilon_{n,k}\left(x\right)$ степени n+k как

$$\Upsilon_{n,k}(x) \stackrel{\text{det}}{=} x^{n+k} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! x^{2s}}.$$
 (3.31)

Свойство 2

Полиномы $\Upsilon_{n,k}(x)$ удовлетворяют условию

$$\mathcal{P}_{n,k}\left(-z,\overline{z}\right) = \left(-1\right)^{n} \Upsilon_{n,k}\left(\left|z\right|\right) e^{i(n-k)\varphi},\tag{3.32}$$

где $\varphi = \arg z$ и для них выполнено условие ортогональности

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_1(x) \Upsilon_{n_1,k_1}(x) \Upsilon_{n_2,k_2}(x) dx = \mathcal{N}_{n_1+n_2,k_1+k_2}^{(1)} \tilde{\delta}_{n_1+n_2,k_1+k_2}, \tag{3.33}$$

$$\mathcal{N}_{n_1+n_2,k_1+k_2}^{(1)} = \sqrt{\frac{\pi}{2^{n_1+n_2+k_1+k_2}}} \sum_{s=0}^{\min(n_1,k_1)\min(n_2,k_2)} \frac{\left(-1\right)^{s+l} \left|n_1+n_2+k_1+k_2-2\left(l+s\right)-1\right|!!}{s!l!(k_1-s)!(n_1-s)!(k_2-l)!(n_2-l)!},$$

где весовая функция $\rho_1(x) = e^{-x^2}$.

Доказательство свойства 2

Выражение (3.32) получается из сравнения выражений (3.31) и (3.25). Вычислим интеграл (3.33).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{1}(x) \Upsilon_{n_{1},k_{1}}(x) \Upsilon_{n_{2},k_{2}}(x) dx =$$

$$= \sum_{s=0}^{\min(n_{1},k_{1})\min(n_{2},k_{2})} \frac{(-1)^{s+l}}{2^{s+l} s!(k_{1}-s)!(n_{1}-s)!} \frac{1}{l!(k_{2}-l)!(n_{2}-l)!} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^{2}} x^{n_{1}+n_{2}+k_{1}+k_{2}-2(s+l)} dx.$$
(3.34)

Вычислим интеграл, стоящий в выражении (3.34), используя (3.12) и теорему 2. Обозначим $n=n_1+n_2$, $k=k_1+k_2$, $\lambda=l+s$. Значение 2λ является чётным. Если значения n и k являются чётными, тогда выражение $n+k-2\lambda$ тоже чётное. Если n и k являются нечётными, тогда выражение n+k является чётным и выражение $n+k-2\lambda$ тоже чётным. В результате при n и k — чётных и при n и k нечётных интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n+k-2\lambda} dx$ будет отличен от нуля

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n+k-2\lambda} dx = 2^{\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{2^{n+k}}} |n+k-2\lambda-1|!!$$
 (3.35)

Если значение n или k является нечётным, тогда выражение $n+k-2\lambda$ будет нечётным и интеграл $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}x^{n+k-2\lambda}dx$ будет равен нулю. Подставляя (3.35) в (3.34), получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{1}(x) \Upsilon_{n_{1},k_{1}}(x) \Upsilon_{n_{2},k_{2}}(x) dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2^{n+k}}} \sum_{s=0}^{\min(n_{1},k_{1})\min(n_{2},k_{2})} \frac{(-1)^{s+l} |n+k-2(l+s)-1|!!}{s!l!(k_{1}-s)!(n_{1}-s)!(k_{2}-l)!(n_{2}-l)!},$$

что и требовалось доказать.

На рис. 1 приведены графики функций $e^{-x^2} \Upsilon_{n,k}(x)$. На рис. 1 видно, что полиномы $\Upsilon_{n,k}(x)$ имеют нули и являются знакопеременными. Относительно начала координат полиномы $\Upsilon_{n,k}(x)$ являются чётными и нечётными.

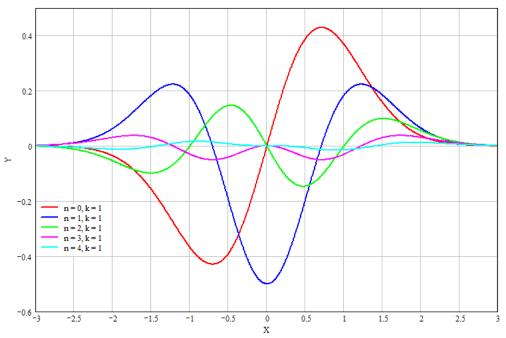


Рис. 1 Графики функций $e^{-x^2} \Upsilon_{n,k}(x)$

Запишем выражения для элементов $w_{n,k}(x,p)$ согласно (3.25)-(3.27) и (3.31) примет вид:

$$W_{n,k}(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-|z|^2} \Upsilon_{n,k}(|z|) e^{i(n-k)\varphi}, \qquad (3.36)$$

ИЛИ

$$W_{n,k}(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-2\varepsilon(x,p)} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon(x,p)}) e^{i(n-k)\arctan\left(\frac{p}{m\omega x}\right)}.$$

Из выражений (3.36) следует, что при изменении фазового угла $0 \le \varphi \le 2\pi$ значения $w_{n,n+1}(x,p)$ расположены на одном листе римановой поверхности. Значения элементов $w_{n,n+2}(x,p)$ покрывают два листа римановой поверхности при изменении фазового угла $0 \le \varphi \le 2\pi$. Значение элементов каждой следующей диагонали (верхней от основной диагонали) матрицы $\mathcal W$ покрывают количество листов римановой поверхности равное номеру диагонали. Аналогичный процесс происходит и с элементами нижних диагоналей, только покрытие идет в обратную сторону.

В работах [17, 79] при рассмотрении комплексного принципа наименьшего действия было показано, что для микросистем фаза волновой функции (действие) соответствует отображениям однолистных римановых поверхностей. Для макросистем диапазон изменения фазы больше 2π и происходит переход на многолистные римановы поверхности.

В данной работе макросистема представляется в виде множества микросистем (осцилляторов — простейших квантовых систем), для которых достаточно одной действительной оси. При рассмотрении сложных квантовых систем (макросистем) необходимо использовать многолистную риманову поверхность, которая связана с наличием недиагональных элементов в матрице \mathcal{W} . Наличие недиагональных элементов приводит к осцилляциям комплексных значений плотности вероятностей $w_{n,k}(x,p)$ (3.29). При движении по замкнутой фазовой траектории $\varepsilon = const$ осцилляции представляют собой вращение «векторов» $w_{n,k}(x,p)$ по римановой поверхности.

Теорема 5

Пусть $ho_{k,n}=c_k\overline{c}_n$ матричные элементы матрицы плотности и $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ матрица поворота

$$\Omega^{(n,k)}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varpi_{n,k}\varphi) & \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \\ -\sin(\varpi_{n,k}\varphi) & \cos(\varpi_{n,k}\varphi) \end{pmatrix}, \ \varpi_{n,k} = n - k,$$
 (3.37)

для коэффициентов c_k (при $\left|c_k\right| \neq 0$) определим фазовый вектор

$$\vec{n}_{k} = \begin{pmatrix} \cos \alpha_{k} \\ \sin \alpha_{k} \end{pmatrix} = \frac{1}{|c_{k}|} \begin{pmatrix} \operatorname{Re} c_{k} \\ \operatorname{Im} c_{k} \end{pmatrix}, \qquad (3.38)$$

$$\alpha_{k} = \arg c_{k},$$

тогда функция Вигнера квантовой системы представима в виде:

$$W(x,p) = \frac{e^{-2\varepsilon(x,p)}}{\pi\hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \Upsilon_{n,k} \left(\sqrt{2\varepsilon(x,p)} \right) \vec{\mathbf{n}}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \vec{\mathbf{n}}_n, \tag{3.39}$$

где фаза $\varphi = \varphi(x,p)$ имеет вид (3.27) и соответствует полярному углу точке (x,p) на фазовой плоскости.

Доказательство теоремы 5

Преобразуем выражение (3.5) для функции Вигнера:

$$W = \overline{C}^{T} W C = \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left[c_{n}^{(R)} w_{n,k}^{(R)} c_{k}^{(R)} - c_{n}^{(R)} w_{n,k}^{(I)} c_{k}^{(I)} + c_{n}^{(I)} w_{n,k}^{(R)} c_{k}^{(I)} + c_{n}^{(I)} w_{n,k}^{(I)} c_{k}^{(R)} \right] + i \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left[c_{n}^{(R)} w_{n,k}^{(R)} c_{k}^{(I)} + c_{n}^{(R)} w_{n,k}^{(I)} c_{k}^{(R)} - c_{n}^{(I)} w_{n,k}^{(R)} c_{k}^{(R)} + c_{n}^{(I)} w_{n,k}^{(I)} c_{k}^{(I)} \right],$$

$$(3.40)$$

где верхний индекс «R» означает действительную компоненту, а индекс «I» мнимую компоненту элемента. Так как универсальная матрица \mathcal{W} является эрмитовой, то справедливы соотношения: $w_{n,k} = \overline{w}_{k,n}$, $w_{n,k}^{(R)} + iw_{n,k}^{(I)} = w_{k,n}^{(R)} - iw_{k,n}^{(I)}$, следовательно

$$w_{n,k}^{(R)} = w_{k,n}^{(R)}, \ w_{n,k}^{(I)} = -w_{k,n}^{(I)},$$

$$W = \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left[w_{n,k}^{(R)} \left(c_n^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} c_k^{(I)} \right) + 2c_n^{(I)} w_{n,k}^{(I)} c_k^{(R)} \right] + i \sum_{n,k=0}^{+\infty} w_{n,k}^{(I)} \left(c_n^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} c_k^{(I)} \right). (3.41)$$

При суммировании мнимой части выражения (3.41) результат будет равен нулю, так как $w_{n,n}^{(I)} = 0$, а слагаемые $w_{n,k}^{(I)} \left(c_n^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} c_k^{(I)} \right)$ при $n \neq k$ будут компенсированы слагаемыми $w_{k,n}^{(I)} \left(c_k^{(R)} c_n^{(R)} + c_k^{(I)} c_n^{(I)} \right) = -w_{n,k}^{(I)} \left(c_k^{(R)} c_n^{(R)} + c_k^{(I)} c_n^{(I)} \right)$. В результате выражение (3.41) будет иметь только действительную часть. В соответствии с (3.36) для функции W получим

$$W = \frac{e^{-|z|^{2}}}{\pi\hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|)|c_{n}||c_{k}| \times$$

$$\times \left[\cos(\varpi_{n,k}\varphi)(\cos\alpha_{n}\cos\alpha_{k} + \sin\alpha_{n}\sin\alpha_{k}) + 2\sin(\varpi_{n,k}\varphi)\sin\alpha_{n}\cos\alpha_{k}\right] =$$

$$= \frac{e^{-|z|^{2}}}{\pi\hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|)|c_{n}||c_{k}|\cos\alpha_{k} \left[\cos(\varpi_{n,k}\varphi)\cos\alpha_{n} + \sin(\varpi_{n,k}\varphi)\sin\alpha_{n}\right] +$$

$$+ \frac{e^{-|z|^{2}}}{\pi\hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|)|c_{n}||c_{k}|\sin\alpha_{n} \left[\cos(\varpi_{n,k}\varphi)\sin\alpha_{k} + \sin(\varpi_{n,k}\varphi)\cos\alpha_{k}\right].$$

$$(3.42)$$

Учтем, что $\varpi_{n,k}=n-k=-\varpi_{k,n}$, а полиномы $\Upsilon_{n,k}$ в силу определения (3.31) являются симметричными по индексам n и k, то есть $\Upsilon_{n,k}=\Upsilon_{k,n}$. В результате выражение (3.42) можно переписать в виде

$$W = \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |\rho_{k,n}| \cos \alpha_k \Big[\cos (\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n + \sin (\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n \Big] + \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |\rho_{k,n}| \sin \alpha_k \Big[\cos (\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n - \sin (\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n \Big],$$

$$(3.43)$$

где учтено, что $\left| \rho_{k,n} \right|^2 = \rho_{k,n} \overline{\rho}_{k,n} = \left| c_n \right|^2 \left| c_k \right|^2$. Используя определение матрицы поворота $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ и фазового вектора $\vec{\mathbf{n}}_k$, получаем

$$\vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \Omega^{(n,k)}(\varphi) \vec{\mathbf{n}}_{n} = (\cos \alpha_{k} - \sin \alpha_{k}) \begin{pmatrix} \cos(\varpi_{n,k}\varphi) & \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \\ -\sin(\varpi_{n,k}\varphi) & \cos(\varpi_{n,k}\varphi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha_{n} \\ \sin \alpha_{n} \end{pmatrix},$$

$$\vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \Omega^{(n,k)}(\varphi) \vec{\mathbf{n}}_{n} = \cos \alpha_{k} \left[\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_{n} + \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_{n} \right] +$$

$$+ \sin \alpha_{k} \left[\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_{n} - \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_{n} \right].$$
(3.44)

Подставляя (3.44) в выражение (3.43) получим выражение (3.39). Теорема 5 доказана.

Замечание

С точки зрения классической механики произвольной квантовой системе будут соответствовать фазовые траектории (характеристики уравнения Лиувилля) $\mathcal{E}(x,p) = \frac{p^2}{2m} + U_1(x) = const$, которые в общем случае отличны от фазовых траекторий гармонического осциллятора $\mathcal{E}(x,p) \sim \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = const$. При движении по фазовым траекториям $\mathcal{E} = const$ матрица поворота $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ будет единичной матрицей и выражение (3.39) перейдет в функцию Вигнера гармонического осциллятора (1.31). В этом случае плотность вероятностей W будет постоянной

величиной на фазовых траекториях $\varepsilon = const$. Из-за отличия потенциала $U_1(x)$ от потенциала гармонического осциллятора уравнение Моэля (1.43) или второе уравнение Власова (1.14) с аппроксимацией Власова-Моэля (1.44) буду иметь ненулевую правую часть (источники диссипаций $Q_2 \neq 0$). Наличие источников диссипации приведёт к непостоянству квази-плотности вероятностей вдоль фазовых траекторий $\mathcal{E}(x,p) = const$. Матрица поворота $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ будет содержать ненулевые частоты $\varpi_{n,k}$, вызванные наличием недиагональных элементов в матрице плотности $\rho_{n,k}$.

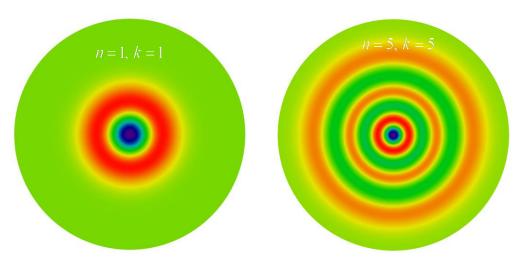


Рис. 2 «Базисные» функции плотности вероятности при $\varpi_{n,n} = 0$.

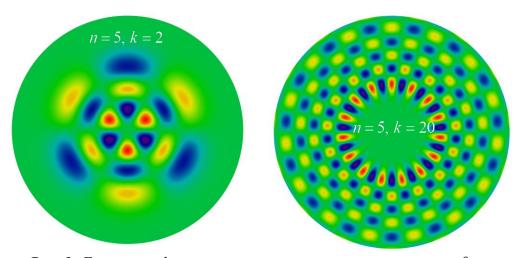


Рис. 3 «Базисные» функции плотности вероятности при $\varpi_{n,k} \neq 0$.

Выражение (3.39) для функции Вигнера можно интерпретировать как разложение по «базисным» функции вида

$$\operatorname{wc}_{n,k}(x,p) = e^{-2\varepsilon} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) \cos(\varpi_{n,k}\varphi),$$

$$\operatorname{ws}_{n,k}(x,p) = e^{-2\varepsilon} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) \sin(\varpi_{n,k}\varphi).$$
(3.45)

На рис. 2, 3 приведены графики функций $\operatorname{wc}_{n,k}(x,p)$ для различных значений n и k. На рис. 2 функции $\operatorname{wc}_{1,1}$ и $\operatorname{wc}_{5,5}$ соответствуют главной диагонали матрицы $\mathcal W$ и имеют частоту $\varpi_{n,n}=0$. На фазовых траекториях $\varepsilon=const$ (концентрические окружности) функции $\operatorname{wc}_{n,n}$ и $\operatorname{ws}_{n,n}$ являются постоянными, что и наблюдается на рис. 3. Диагональные базисные функции (3.45) вносят существенный вклад в сумму (3.39) для систем схожих с гармоническим осциллятором.

На рис. 3 функции $wc_{n,k}$ имеют ненулевые частоты $\varpi_{n,k} \neq 0$ ($\varpi_{5,2} = 3$ и $\varpi_{5,20} = -15$), что приводит к осцилляциям вдоль фазовых траекторий $\varepsilon = const$. Функции $wc_{n,k}$ с частотами $\varpi_{n,k} \neq 0$ соответствуют верхним и нижним диагоналям матрицы \mathcal{W} . Чем дальше диагональ от центральной диагонали, тем выше частота $\varpi_{n,k}$ осцилляций. Недиагональные базисные функции (3.45) вносят существенный вклад для систем сильно отличающихся от гармонического осциллятора.

§ 3.2 Энергетический спектр квантовой системы

В §2.1 с помощью функций Вигнера $f_{2,n}(x,p)$ были найдены средние значения (математические ожидания случайной величины $\varepsilon(x,p)$) энергий E_n гармонического осциллятора (2.2). Используя представление функции

Вигнера (3.39), получим выражение для средних энергий $\langle\langle\mathcal{E}\rangle\rangle$ произвольной квантовой системы.

Запишем выражение для энергии $\mathcal{E}(x,p)$ в виде энергии гармонического осциллятора $\mathcal{E}(x,p)$ и некоторой добавочной энергии:

$$\mathcal{E}(x,p) = \frac{p^2}{2m} + U_1(x) = \hbar\omega\varepsilon(x,p) + \delta U(x),$$

$$\delta U(x) = U_1(x) - \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$
(3.46)

Функция $\delta U(x)$ определяет отклонение потенциальной энергии произвольной системы от потенциальной энергии гармонического осциллятора. Среднюю энергию системы $\langle\langle\mathcal{E}\rangle\rangle$ можно определить по формуле

$$\langle \langle \mathcal{E} \rangle \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{E}(x, p) W(x, p) dx dp,$$
 (3.47)

где W(x,p) функция плотности вероятностей в фазовом пространстве, которой в данном случае соответствует выражение (3.39).

Теорема 6

Пусть энергия $\mathcal{E}(x,p)$ квантовой системы представима в виде (3.46) и функция $\delta U(x)$ допускает разложение в степенной ряд с коэффициентами $a_l, l \in \mathbb{N}_0$, тогда полная энергия $\langle \langle \mathcal{E} \rangle \rangle$ системы (3.47) имеет вид:

$$\left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \left| \rho_{n,n} \right| \left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle_n + \tag{3.48}$$

$$+ \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \cos(\alpha_k - \alpha_n) \sum_{\frac{n-k+l}{2} \in \mathbb{Z}, \ l \ge |n-k|}^{+\infty} a_l \left(\frac{\hbar}{4m\omega} \right)^{l/2} C_l^{\frac{n-k+l}{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s \left(\frac{k+n+l}{2} - s \right)!}{2^s s! (k-s)! (n-s)!},$$

где $ho_{k,n}=c_k\overline{c}_n$ матричные элементы матрицы плотности; $lpha_k=\arg c_k$ (3.38); $C_n^k=\frac{n!}{k!(n-k)!}$ — число сочетаний; $\left<\left<\varepsilon\right>\right>_n=\hbar\omega\Big(n+\frac{1}{2}\Big)$ собственные энергии гармонического осциллятора.

Доказательство теоремы 6

Перейдем в полярную систему координат в фазовой плоскости (2.1), в результате интеграл (3.47) примет вид

$$\left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle = \hbar \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} \mathcal{E}W d\varepsilon = \hbar^{2} \omega \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon + \hbar \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \delta U d\varepsilon = I_{1} + I_{2}$$
 (3.49)

Рассмотрим каждый интеграл в выражении (3.49) по отдельности

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon = \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \int_{0}^{2\pi} \vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \Omega^{(n,k)}(\varphi) \vec{\mathbf{n}}_{n} d\varphi \int_{0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k} \left(\sqrt{2\varepsilon} \right) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon = \\
= \frac{2}{\hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \delta_{n,k} \vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \vec{\mathbf{n}}_{n} \int_{0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k} \left(\sqrt{2\varepsilon} \right) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon = \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} \left| \rho_{n,n} \right| \int_{0}^{+\infty} \Upsilon_{n,n} \left(\sqrt{2\varepsilon} \right) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon, \tag{3.50}$$

где учтено, что $\int\limits_0^{2\pi}\vec{\mathbf{n}}_k^T\Omega^{(n,k)}(\varphi)\vec{\mathbf{n}}_n\,d\varphi=2\pi\delta_{n,k}\,\vec{\mathbf{n}}_k^T\,\vec{\mathbf{n}}_n.$ Используя выражения (3.32) и (3.17) из (3.50) получим

$$\Upsilon_{n,n}(|z|) = (-1)^n \mathcal{P}_{n,n}(-z,\overline{z}) = (-1)^n L_n(2|z|^2)$$

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon = \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^{n} \left| \rho_{n,n} \right| \int_{0}^{+\infty} L_{n} (4\varepsilon) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon = \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^{n} \left| \rho_{n,n} \right| (-1)^{n} \frac{2n+1}{4},$$

$$I_{1} = \hbar^{2} \omega \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon = \hbar \omega \sum_{n=0}^{+\infty} \left| \rho_{n,n} \right| \left(n + \frac{1}{2} \right) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left| \rho_{n,n} \right| \left\langle \langle \varepsilon \rangle \rangle_{n}.$$
(3.51)

Интеграл I_1 содержит вклад диагональных элементов матрицы $\mathcal{W}.$ Вычислим второй интеграл $I_2.$ По условию теоремы потенциал $\delta U(x)$ разлагается в степенной ряд, следовательно

$$\delta U(x) = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l x^l = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l \left(\frac{2\hbar}{m\omega}\right)^{l/2} \tilde{x}^l = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l \left(\frac{2\hbar}{m\omega}\right)^{l/2} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \cos^l \varphi, \qquad (2.52)$$

где согласно (2.1) $\tilde{x} = \sqrt{\varepsilon} \cos \varphi$. Подставим выражение (3.52) в интеграл I_2 , получим

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \delta U d\varepsilon =$$

$$= \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right|_{l=0}^{+\infty} a_{l} \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{l/2} \int_{0}^{2\pi} \vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \Omega^{(n,k)} (\varphi) \vec{\mathbf{n}}_{n} \cos^{l} \varphi d\varphi \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \Upsilon_{n,k} (\sqrt{2\varepsilon}) d\varepsilon.$$
(3.53)

Интеграл по угловой переменной φ в выражении (3.53) можно вычислить в явном виде

$$\int_{0}^{2\pi} \Omega^{(n,k)}(\varphi) \cos^{l} \varphi d\varphi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{cases} \frac{2\pi}{2^{l}} C_{l}^{\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}}, & \text{if } \frac{\varpi_{n,k}+l}{2} \in \mathbb{Z}, l \geq |\varpi_{n,k}|, \\ 0, & \text{uhave.} \end{cases}$$
(3.54)

где учтено

$$\int_{0}^{2\pi} \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \cos^{l} \varphi d\varphi = 0,$$

$$\int\limits_{0}^{2\pi}\cos\left(\varpi_{n,k}\varphi\right)\!\cos^{l}\varphi d\varphi = \begin{cases} \frac{2\pi}{2^{l}}C_{l}^{\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}}, \ \text{if} \ \frac{\varpi_{n,k}+l}{2}\!\in\!\mathbb{Z}, \ l\!\geq\!\left|\varpi_{n,k}\right|, \\ 0, \ \text{иначе}. \end{cases}$$

В результате интеграл по переменной φ примет вид

$$\int_{0}^{2\pi} \vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \Omega^{(n,k)}(\varphi) \vec{\mathbf{n}}_{n} \cos^{l} \varphi d\varphi = \cos(\alpha_{k} - \alpha_{n}) \begin{cases} \frac{2\pi}{2^{l}} C_{l}^{\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}}, & \text{if } \frac{\varpi_{n,k}+l}{2} \in \mathbb{Z}, l \geq \left|\varpi_{n,k}\right|, \\ 0, & \text{иначе}, \end{cases}$$

$$(3.55)$$

где учтено, что $\vec{\mathbf{n}}_k^T \vec{\mathbf{n}}_n = \cos \alpha_k \cos \alpha_n + \sin \alpha_k \sin \alpha_n = \cos (\alpha_k - \alpha_n)$. Рассмотрим интеграл по переменной ε в выражении (2.53). Учитывая, что

$$\Upsilon_{n,k}\left(\sqrt{2\varepsilon}\right) = \left(2\varepsilon\right)^{\frac{n+k}{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{\left(-1\right)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! (2\varepsilon)^s}.$$
 (3.56)

получаем

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \Upsilon_{n,k} \left(\sqrt{2\varepsilon} \right) d\varepsilon = 2^{\frac{n+k}{2}} \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{\frac{n+k+l}{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{\left(-1\right)^{s}}{4^{s} s! (k-s)! (n-s)! \varepsilon^{s}} d\varepsilon = 2^{\frac{n+k}{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{\left(-1\right)^{s}}{4^{s} s! (k-s)! (n-s)!} \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{\frac{n+k+l-2s}{2}} d\varepsilon. \tag{3.57}$$

Обозначим
$$\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}=\lambda\in\mathbb{Z}$$
 , тогда $l=2\lambda-\varpi_{n,k}$ и

$$\frac{n+k+l-2s}{2} = \frac{n+k+2\lambda-\varpi_{n,k}-2s}{2} = k+\lambda-s.$$

Следовательно,

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{\frac{n+k+l-2s}{2}} d\varepsilon = \int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{k+\lambda-s} d\varepsilon = \frac{1}{2^{k+\lambda-s+1}} \int_{0}^{+\infty} e^{-\tau} \tau^{k+\lambda-s} d\tau = \frac{1}{2^{k+\lambda-s+1}} \Gamma(k+\lambda-s+1),$$
(3.58)

где $\tau=2\varepsilon$ и учтено, что $\int\limits_0^{+\infty}e^{-\tau}\tau^{z-1}d\tau=\Gamma(z),\,z=k+\lambda-s+1.$ Учитывая (3.58) интеграл (3.57) имеет вид

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{\frac{l}{2}} \Upsilon_{n,k}\left(\sqrt{2\varepsilon}\right) d\varepsilon = 2^{-\left(\frac{l}{2}+1\right)} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{\left(-1\right)^{s}}{2^{s} s! (k-s)! (n-s)!} \Gamma\left(\frac{k+n+l}{2}-s+1\right). (3.59)$$

Подставим выражения (3.59) и (3.55) в исходный интеграл (3.53), получим

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{+\infty} W \delta U d\varepsilon =$$

$$= \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \vec{\mathbf{n}}_{k}^{T} \vec{\mathbf{n}}_{n} \sum_{l=0}^{+\infty} a_{l} \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{l/2} 2^{-\left(\frac{l}{2}+1\right)} \times$$

$$\times \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{\left(-1\right)^{s}}{2^{s} s! (k-s)! (n-s)!} \Gamma\left(\frac{k+n+l}{2}-s+1\right) \begin{cases} \frac{2\pi}{2^{l}} C_{l}^{\frac{n-k+l}{2}}, & \text{if } \frac{n-k+l}{2} \in \mathbb{Z}, |n-k| \leq l \\ 0, & \text{unave.} \end{cases}$$
(3.60)

или

$$I_2 = \hbar \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \delta U d\varepsilon =$$
 (3.61)

$$= \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left| \rho_{k,n} \right| \cos \left(\alpha_k - \alpha_n \right) \sum_{\frac{n-k+l}{2} \in \mathbb{Z}, \ l \ge |n-k|}^{+\infty} a_l \left(\frac{\hbar}{4m\omega} \right)^{l/2} C_l^{\frac{n-k+l}{2}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{\left(-1\right)^s \left(\frac{k+n+l}{2} - s \right)!}{2^s s! (k-s)! (n-s)!}.$$

Подстановка интегралов (3.51) и (3.60) в выражение (3.49) дает выражение (3.48). Теорема 6 доказана.

Замечание

Выражение (3.48) для средней энергии $\langle\langle\mathcal{E}\rangle\rangle$ квантовой системы состоит из двух основных слагаемых. Первое слагаемой соответствует энергии связанной с диагональными элементами матрицы \mathcal{W} . Поэтому «проекции» состояний произвольной квантовой системы на состояния собственных осциллятора суперпозицию из энергий дают гармонического осциллятора (3.48). Второе слагаемое в выражении (3.48) содержит энергию, связанную с недиагональными элементами матрицы ${\cal W}$. Эта энергия есть суперпозиция энергий «смешанных» состояний, связанных отличием произвольной квантовой системы гармонического otосциллятора.

Рассмотрим пример квантовой системы с потенциалом

$$U_1(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \mu x^4. \tag{3.62}$$

Первое слагаемое в потенциальной энергии соответствует потенциалу гармонического осциллятора. Второе слагаемое μx^4 вносит ангармоничность. Из теоремы 6 следует, что все коэффициенты a_i будут

равны нулю, кроме коэффициента $a_4 = \mu$. Следовательно, при вычислении суммы по l (3.48) накладывается условие на n и k

$$\frac{\varpi_{n,k}}{2} + 2 \in \mathbb{Z} \implies \varpi_{n,k} = 2j, \ j \in \mathbb{Z},$$

$$\left|\varpi_{n,k}\right| \le l = 4 \implies j = 0, \pm 1, \pm 2, \ \varpi_{n,k} = -4, -2, 0, 2, 4.$$
(3.63)

Из (3.63) следует, что из матрицы \mathcal{W} будут взяты только пять диагоналей: основная диагональ $\varpi_{n,n}=0$; вторая $\varpi_{n,n+2}=-2$ и четвертая $\varpi_{n,n+4}=-4$ сверху; вторая $\varpi_{n+2,n}=2$ и четвертая $\varpi_{n+4,n}=4$ снизу. Остальные элементы матрицы \mathcal{W} не будут использоваться при вычислении энергии $\langle\langle\mathcal{E}\rangle\rangle$ для квантовой системы с потенциалом (3.62).

§ 3.3 Эффективный численный алгоритм нахождения функции Вигнера

При практическом использовании выражений (3.39), (3.48) для произвольной квантовой системы требуется знание коэффициентом матрицы плотности. Если потенциал рассматриваемой квантовой системы допускает представление или аппроксимацию в виде полинома $U_{1,N}(x) = \sum_{l=1}^{N} a_l x^l$, тогда задача построения функции Вигнера может быть существенно упрощена. Рассмотрим следующую теорему.

Теорема 7.

Пусть стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{xx} + (U_1 - \mathcal{E})\Psi = 0, \ a \ nomenциал представим в виде <math>U_{1,N}(x) = \sum_{l=1}^N a_l x^l,$ где $N \in \mathbb{N}$. Если волновая функция Ψ допускает разложение (3.1), тогда

векторы коэффициентов $C^{(s)}$ (3.5) являются собственными векторами, а спектр энергий \mathcal{E}_s собственными значениями симметричной матрицы $J_{n,k}$:

$$JC^{(s)} = \mathcal{E}_{s}C^{(s)}, \ s \in \mathbb{N}_{0}, \qquad J_{n,k} = \left\langle \left\langle \varepsilon \right\rangle \right\rangle_{n}I_{n,k}^{(0)} + \sum_{l \neq 2}^{N}a_{l}I_{n,k}^{(l)}, \tag{3.64}$$

$$I_{n,k}^{(l)} = \frac{l-1}{2\gamma}I_{n,k}^{(l-2)} + \sqrt{\frac{n}{2\gamma}}I_{n-1,k}^{(l-1)} + \sqrt{\frac{k}{2\gamma}}I_{n,k-1}^{(l-1)}, \ I_{n,k}^{(0)} = \delta_{n,k}, \ I_{n,k}^{(1)} = \sqrt{\frac{n}{2\gamma}}I_{n-1,k}^{(0)} + \sqrt{\frac{k}{2\gamma}}I_{n,k-1}^{(0)},$$

где $m\omega^2=2a_2$; $\gamma=\frac{m\omega}{\hbar}$; $\left<\left<\varepsilon\right>\right>_n=\hbar\omega\Big(n+\frac{1}{2}\Big)$ — спектр энергий гармонического осциллятора.

Доказательство теоремы 7

Подставляя представление (3.1) в уравнение Шрёдингера, получим

$$0 = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_n''(x) + (U - \mathcal{E}) \psi_n \right] = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n \psi_n \left[\left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle_n - \mathcal{E} + \sum_{l \neq 2}^N a_l x^l \right].$$

Умножая скалярно полученное выражение на $\overline{\psi}_k(x)$, получим задачу на собственные значения:

$$\begin{split} \sum_{n=0}^{+\infty} \boldsymbol{J}_{k,n} \boldsymbol{c}_n &= \mathcal{E} \boldsymbol{c}_k \,, \\ \boldsymbol{J}_{k,n} &= \boldsymbol{A}_{k,n} + \left\langle \left\langle \mathcal{E} \right\rangle \right\rangle_n \, \delta_{n,k} \,, \, \boldsymbol{A}_{k,n} = \sum_{l \neq 2}^N \boldsymbol{I}_{k,n}^{(l)} \boldsymbol{a}_l \,, \, \, \boldsymbol{I}_{k,n}^{(l)} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \overline{\boldsymbol{\psi}}_k \boldsymbol{x}^l \boldsymbol{\psi}_n d\boldsymbol{x}. \end{split}$$

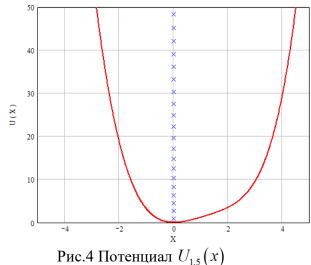
Вычислим интегралы $I_{k,n}^{(l)}$ по рекуррентной формуле

$$\begin{split} &I_{k,n}^{(l)} = N_k N_n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} H_n \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) H_k \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) x^l dx = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} N_k N_n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} \Big[H_n' \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) H_k \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) + H_n \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) H_k' \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) \Big] x^{l-1} dx + \\ &+ \frac{(l-1)}{2\gamma} N_k N_n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} H_n \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) H_k \Big(\sqrt{\gamma} x \Big) x^{l-2} dx = \\ &= \frac{n}{\sqrt{\gamma}} \frac{N_n}{N_{n-1}} I_{k,n}^{(l-1)} + \frac{k}{\sqrt{\gamma}} \frac{N_k}{N_{k-1}} I_{k-1,n}^{(l-1)} + \frac{(l-1)}{2\gamma} I_{k,n}^{(l-2)} = \sqrt{\frac{n}{2\gamma}} I_{k,n}^{(l-1)} + \sqrt{\frac{k}{2\gamma}} I_{k-1,n}^{(l-1)} + \frac{(l-1)}{2\gamma} I_{k,n}^{(l-2)}, \end{split}$$

где
$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$
. Теорема 7 доказана.

Заметим, что элементы $I_{n,k}^{(1)}$ совпадают с матричными элементами оператора координаты $\langle n|\hat{x}|k\rangle$, определяющего вероятность перехода из состояния n в состояние k. Элементы $I_{n,k}^{(l)}$ при l>1 соответствуют элементам $\langle n | \hat{x}^l | k \rangle$ оператора \hat{x}^l .

Решая задачу на собственные значения (3.64), можно получить выражение для волновой функции Ψ_s (*s*-состояние) с любой наперед



заданной точностью $\Psi_s(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(s)} \psi_n(x)$. В качестве примера рассмотрим ангармонический квантовый осциллятор с потенциалом

 $U_{1,N}(x) = \sum_{i=1}^{N} a_i x^i$. Не ограничивая

общности, возьмем N = 5. На рис. 4

приведен график потенциала $U_{\scriptscriptstyle 1,5}$ при $a_{\scriptscriptstyle l} = \{0.01, 0.2, -1, 0, 2\}$. Коэффициент $a_{\scriptscriptstyle 1}$

соответствует линейной части потенциала и не дает вклад в диссипативную правую часть уравнения Моэля (1.44), так как третья производная от него равна нулю. Наличие в потенциале слагаемого a_1x приводит к сдвигу распределения Вигнера вдоль оси координат. Потенциал вида $U_{1,2}(x) = a_1 x + a_2 x^2$ дает волновую функцию основного состояния гауссовой формы $\Psi_0(x) \sim \exp \left[-(x-x_0)^2/2\sigma^2\right]$ и в соответствии с теоремой Хадсона гауссову положительную функцию Вигнера $W_0(x)$. Случай $a_1 \neq 0$ является случай $a_1 = 0$. Остальные поэтому рассматривается тривиальным, коэффициенты a_i отличны от нуля.

Используя метод (3.64) найдем коэффициенты разложения $C_k^{(s)}$ и спектр энергий \mathcal{E}_s . На рис. 4 вдоль вертикальной оси точками обозначены уровни энергий \mathcal{E}_s . Заметим, что энергии $\mathcal{E}_s = \left<\left<\mathcal{E}\right>\right>_s$ при усреднении (3.48) по соответствующей функции Вигнера W_s .

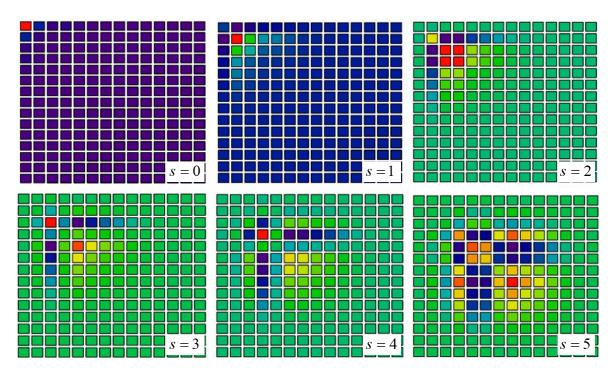
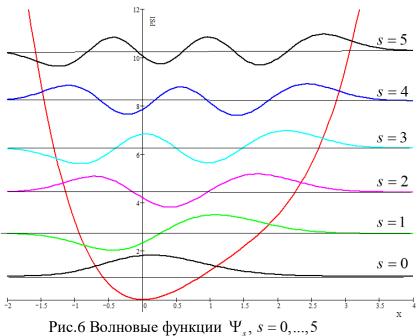


Рис.5 Коэффициенты матрицы плотности $\rho^{(s)}$, s = 0,...,5

На рис. 5 изображены матрицы плотности $\rho_{k,n}^{(s)} = C_k^{(s)} \overline{C}_k^{(s)}$ для состояний s = 0...5. На рис. 5 видно, что при увеличении номера состояния s большее количество недиагональных элементов матрицы плотности $\rho^{(s)}$ начинает вносить существенный вклад в функцию Вигнера.

В §3.1-3.2 было отмечено, что недиагональные элементы могут приводить к появлению диссипаций и изменению функции Вигнера W_s вдоль фазовой траектории $\mathcal{E}_s = const$. Для основного состояния s=0 существенный вклад в функцию Вигнера W_0 вносит элемент матрицы плотности $\rho_{0,0}^{(0)}$. Остальные элементы $\rho_{n,k}^{(0)}$ на порядки меньше, чем $\rho_{0,0}^{(0)}$. Несмотря на этот факт, в соответствии с теоремой Хадсона, функция Вигнера W_0 будет иметь небольшие области отрицательных значений.

На рис.6 приведены графики волновых функций Ψ_s , найденных по формулам (3.1), (3.64). Заметим, что время вычислений волновых функций Ψ_s методом (3.64) на порядки меньше времени вычисления, например, по методу Б.В. Нумерова [61]. Поведение волновых функций Ψ_s на рис.6 схоже с поведением волновых функций для гармонического осциллятора, но имеет асимметрию вдоль оси координат, которая вызвана ангармоничными слагаемыми в потенциале $U_{1.5}$. Заметим, что волновая функция основного состояния $\Psi_0(x)$ не совпадает с гауссовым распределением. Для сравнения на рис. 7 приведены графики функции $\Psi_0(x)$ и гауссовой функции $g(x) = Const \cdot \exp\left[-(x-x_0)^2/2\sigma^2\right]$. Как видно на рис. 7 функция $\Psi_0(x)$ в отличие от функции g(x) не является симметричной относительно вертикальной оси. Следовательно, никаким выбором параметров x_0, σ функция $\Psi_0(x)$ не может быть приведена к распределению Гаусса.



формуле (3.39) зная матрицу плотности $\rho^{(s)}$ можно построить распределения для функции Вигнера W_s . На рис. 8-10 приведены распределения для функций Вигнера W_0, W_1, W_5 . На рис. 8 функция W_0 соответствует основному состоянию с волновой

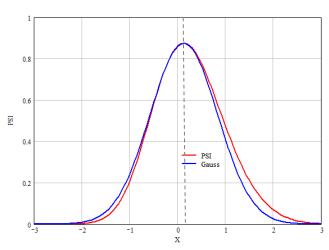


Рис.7 Сравнение $\Psi_{\scriptscriptstyle 0}$ с функцией Гаусса

функцией рис.8 Ψ_0 . Внешне на функция W_0 выглядит строго положительной, но это не так. В основании распределения функция $\mathit{W}_{\scriptscriptstyle{0}}$ имеет небольшие области отрицательных значений на уровне -10^{-5} . Величина -10^{-5} на уровне 1 (порядок максимума функции $W_{\!\scriptscriptstyle 0}$) выглядит незаметной. В результате негауссова волновая функция (см. рис.7) Ψ_0 дает функцию Вигнера W_0 , имеющую отрицательные значения. Наличие отрицательных значений у остальных функций W_s при s=1,2,... непосредственно видно на рис. 9, 10.

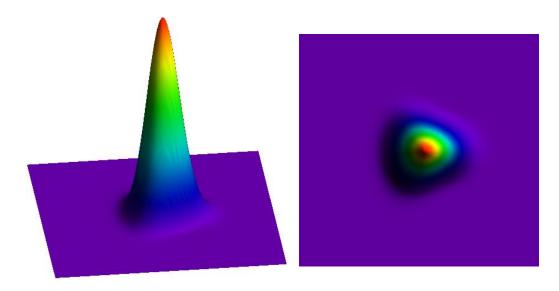


Рис. 8 Функция Вигнера
 $W_{\scriptscriptstyle 0}$

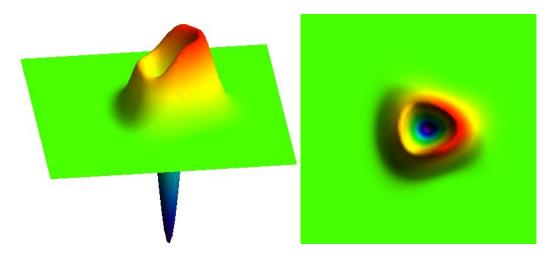


Рис. 9 Функция Вигнера
 $W_{\!\scriptscriptstyle 1}$

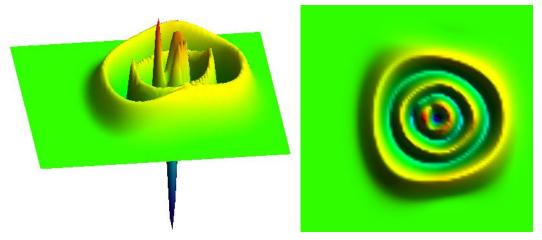


Рис. 10 Функция Вигнера
 $W_{\scriptscriptstyle 5}$

На рис. 8-10 видно, что функции W_s являются несимметричными по координате, но симметричными по импульсу. Как и волновые функции Ψ_s , функции W_s имеют деформацию формы распределения, вызванную наличием ангармонических членов в потенциальной энергии $U_{1,5}(x)$.

Из-за наличия диссипаций $Q_2 \neq 0$ у всех функций W_s наблюдается изменение плотности квази-вероятностей W_s вдоль фазовых траекторий $\mathcal{E}_s = const$. На рис. 11 показаны графики фазовых траекторий $\mathcal{E}_s = const$ и графики линий уровня $W_s = const$, которые отличаются друг от друга. Для гармонического осциллятора $(Q_2 = 0)$ соответствующие функции Вигнера имеют линии уровня, совпадающие с фазовыми траекториями.

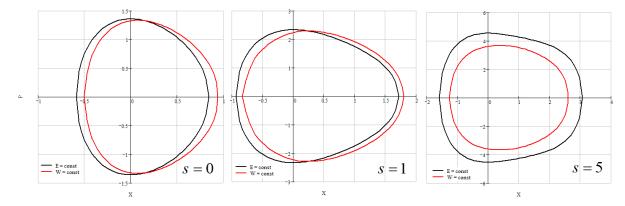


Рис.11 Фазовые траектории $W_s = const$ и $\mathcal{E}_s = const$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты, полученные в диссертации:

- 1. Построена аппроксимация Власова-Моэля для среднего потока вероятностей $\langle \dot{\vec{v}} \rangle$, связывающая второе уравнение Власова и уравнение Моэля для функции Вигнера.
- 2. Получены явные выражения для матричных элементов оператора Вейля в базисе собственных функций гармонического осциллятора.
- 3. Предложен эффективный численно-аналитический метод нахождения функции Вигнера квантовой системы с полиномиальным потенциалом.
- 4. Предложена интерпретация положительной и отрицательной квазиплотности вероятностей как отклонение от положения равновесия некоторой колеблющейся 2D мембраны в фазовой плоскости.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Wigner E.P. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium //Phys. Rev. 1932. T. 40 C. 749-759.
- 2. Weyl H. The Theory of Groups and Quantum Mechanics. New York: Dover, 1931.
- 3. Bartlett M.S. Negative Probability //Proc. Cambridge Philos. Soc. 1945. T. 41. C. 71-73.
- 4. Feynman R.P. Negative Probabilities in Quantum Mechanics. London: Routledge, 1987.
- 5. Scully M. O., Walther H., Schleich W. P. Feynman's approach to negative probability in quantum mechanics //Phys. Rev. A. 1994. T. 49. C. 1562-1566.
- 6. Siyouri, F., El Baz, M. & Hassouni, Y. The negativity of Wigner function as a measure of quantum correlations //Quantum Information Processing. 2016. T. 15. C. 4237-4252.
- 7. Baker Jr. A.G. Formulation of quantum mechanics based on the quasi-probability distribution induced on phase space //Phys. Rev. 1958. T. 109. C. 2198-2206.
- 8. Kenfack A., Zyczkowski K. Negativity of the Wigner function as an indicator of non-classicality //J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. 2004. T.6. C. 396.
- 9. Taghiabadi R., Akhtarshenas S.J., Sarbishaei M. Revealing quantum correlation by negativity of the Wigner function //Quantum Inf. Processing. 2016. C. 1–22.
- 10. Шляйх В.П. Квантовая оптика в фазовом пространстве. Физматлит, 2005.
- 11.Blume-Kohout R. //Phys. Rev. Lett. 2010. T. 105. №. 200504.
- 12.Rehacek J, Mogilevtsev D., Hradil Z. //Phys. Rev. Lett. 2010. T. 105. №. 010402.

- 13. Cooper M., Karpinski M. and Smith B. J. //Nat. Commun. 2014. T. 5. №. 4332EP.
- 14.Møller K. B., Jørgensen T. G., Torres-Vega G. (1997). On coherent-state representations of quantum mechanics: Wave mechanics in phase space //Journal of Chemical Physics. 1997. T. 106. №. 17. C. 7228-7240.
- 15.Go. Torres-Vega, J. H. Frederick A quantum mechanical representation in phase space //J. Chem. Phys. 1993. T. 98. №. 4. C. 3103-3120.
- 16.Go. Torres-Vega, J. H. Frederick Quantum mechanics in phase space: New approaches to the correspondence principle //J. Chem. Phys. 1990. T. 93. № 12. C. 8862-8874.
- 17.Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G. The quantum mechanics of high-order kinematic values //Annals of Physics. 2019. T. 401. C. 59-90.
- 18. Вопросы причинности в квантовой механике. Сборник переводов. Под редакцией Я.П. Терлецкого и А.А., Гусева. М.: ИЛ, 1955.
- 19.Moyal E. Quantum mechanics as a statistical theory //Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1949. T. 45. C. 99-124.
- 20.Balazs N.L., Jennings B. K. Wigner's functions and other distribution functions in Mock phase spaces //Phys. Rep. 1984. T. 104. C. 347-391.
- 21. Hillery M., O'Connell R.F., Scully M.O., Wigner E.P. Distribution functions in physics: fundamentals //Phys. Rep. 1984. T. 106. C. 121-167.
- 22.Englert B.G. On the operator bases underlying Wigner's, Kirkwood's and Glauber's phase space functions //J. Phys. A. 1989. T. 22. C. 625-640.
- 23. Bialynicki-Birula I., Cieplak M., Kaminski J. Theory of Quanta. Oxford University Press, 1992.
- 24.Ozorio de Almeida A.M. The Weyl representation in classical and quantum mechanics //Phys. Rep. 1998. T. 295. C. 265-342.

- 25. Scheibe E. Die Reduktion physikalischer Theorien. Band II. Heidelberg: Springer, 1999.
- 26. Husimi K. Some Formal Properties of the Density Matrix //Proc. Phys. Math. Soc. Japan. 1940. T. 22. C. 264-314.
- 27. Kano Y. A new phase-space distribution function in the statistical theory of the electromagnetic field //J. Math. Phys. 1965. T. 6. C. 1913-1915.
- 28.Glauber R.J. Photon correlations //Phys. Rev. Lett. 1963. T. 10. C. 84-86.
- 29. Sudarshan E.C.G. Equivalence of semiclassical and quantum mechanical descriptions of statistical light beams //Phys. Rev. Lett. 1963. T. 10. C. 277-279.
- 30.Cahill K.E., Glauber R.J. Density Operators and Quasiprobability Distributions //Phys. Rev. A. 1969. T. 177. C. 1882-1902.
- 31.Groenewold H.J. On the principles of elementary quantum mechanics //Physica. 1946. T. 12. C. 405-460.
- 32. Agarwal G.S., Wolf E. Calculus for Functions of Noncommuting Operators and General Phase-Space Methods in Quantum Mechanics. II. Quantum Mechanics in Phase Space //Phys. Rev. D. 1970. T. 2. C. 2187-2205.
- 33. Simpao, Valentino A. Real wave function from Generalised Hamiltonian Schrodinger Equation in quantum phase space via HOA (Heaviside Operational Ansatz): exact analytical results //Journal of Mathematical Chemistry. − 2014. − T. 52. − №. 4. − C. 1137-1155.
- 34.D. B. Fairliet, C. A. Manoguei The formulation of quantum mechanics in terms of phase space functions-the third equation //J. Phys. A: Math. Gen. 1991. T. 24.
- 35. Smithey D.T., Beck M., Raymer M.G., Faridani A. Measurement of the Wigner distribution and the density matrix of a light mode using optical homodyne tomography: application to squeezed states and the vacuum //Phys. Rev. Lett. 1993. T. 70. C. 1244-1247.

- 36.Radon J. fiber die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte langs gewisser Mannigfaltigkeiten //Ber. Verh. Sachs. Akad. Wiss. Leipzig, Math.-Nat. Kl. 1917. T.69. C. 262-277.
- 37.D'Ariano G. M., Paris M. G. A., Sacchi M. F. Quantum Tomography, edited by P. W. Hawkes, Advances in Imaging and Electron Physics. Elsevier, 2003. T. 128. C. 205-308.
- 38. Vogel, K.; Risken, H. Determination of quasiprobability distributions in terms of probability distributions for the rotated quadrature phase //Phys. Rev. A. − 1989. − T.40. − №.5. − C. 2847-2849.
- 39.Casado, A.; Guerra, S.; Plácido, J. From Stochastic Optics to the Wigner Formalism: The Role of the Vacuum Field in Optical Quantum Communication Experiments //Atoms. 2019. T. 7. C. 76.
- 40.Casado, A.; Guerra, S.; Plácido, J. Wigner representation for experiments on quantum cryptography using two-photon polarization entanglement produced in parametric down-conversion //J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. 2008. T. 41. №. 045501.
- 41.Rundle R. P., Tilma T., Samson J. H., Dwyer V. M., Bishop R. F., Everitt M. J. General approach to quantum mechanics as a statistical theory //Phys. Rev. A. 2019. T. 99. №. 012115.
- 42. Arkhipov I., Barasiński A., Svozilík J. Negativity volume of the generalized Wigner function as an entanglement witness for hybrid bipartite states //Sci Rep. − 2018. − T.8. − №. 16955.
- 43. Andersen U., Neergaard-Nielsen J., van Loock P. et al. Hybrid discrete- and continuous-variable quantum information //Nature Physics. 2015. T. 11. C. 713–719.
- 44. Cohen L. Time-Frequency Analysis Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1995.
- 45.Zayed, A. A. New Perspective on the Two-Dimensional Fractional Fourier Transform and Its Relationship with the Wigner Distribution //J. Fourier Analysis and Applications. 2019. T. 25. C. 460-487.

- 46.Claasen, T.A.C.M., Mecklenbräuker, W.F.G. The Wigner distribution—a tool for time-frequency signal analysis. II: discrete-time signals, part 2. //Philips J. Res. 1980. T. 35. C. 276-300.
- 47. Schleich W. P. Quantum optics in phase space Wiley-VCH, 2001.
- 48.Zachos C, Curtright T. Phase-Space Quantization of Field Theory //Prog. Theor. Phys. Suppl. 1999. T. 135. C. 244-258.
- 49.Kakofengitis D., Steuernagel O. Wigner's quantum phase-space current in weakly-anharmonic weakly-excited two-state systems //Eur. Phys. J. Plus. 2017. –T. 132. №. 381.
- 50. Curtright T., Fairlie D., Zachos C. Features of time-independent Wigner functions //Phys. Rev. D. 1998. T. 58. №. 025002-1-14.
- 51.Brandon D., Saad N., Dong Shi-Hai On some polynomial potentials in d-dimensions // Journal of Mathematical Physics. 2013. T. 54. C. 082106.
- 52.G'omez F. J., Sesma J. Quantum anharmonic oscillators: a new approach //J. Phys. A: Math. Gen. 2005. T. 38. C. 3193-3202.
- 53.Pan F., Klauder J. R., Draayer J. P. Quasi-exactly solvable cases of an N-dimensional symmetric decatic anharmonic oscillator //Phys. Letts. A. 1999. T. 131. C. 262.
- 54.Bansal M., Srivastava S., Vishwamittar Energy eigenvalues of double-well oscillator with mixed quartic and sextic anharmonicities //Phys. Rev. A. 1991. T. 44. C. 8012.
- 55. Chaudhuri R. N., Mondal M. Improved Hill determinant method: General approach to the solution of quantum anharmonic oscillators //Phys. Rev. A. −1991. T. 43. №. 3241.
- 56.Hall R. L., Saad N., Bounds on Schrodinger eigenvalues for polynomial potentials in N-dimensions //J. Math. Phys. 1997. T. 38. №. 4909.
- 57. Vishwarmittar M. Energy eigenvalues for anharmonic and double-well oscillators with even power polynomial potential //Physica A. 1995. T. 216. C. 452-458.

- 58.Liverts E. Z., Mandelzweig V. B. Approximate analytic solutions of the Schrodinger equation for the generalized anharmonic oscillator //Phys. Scr. 2008. T. 77. №. 025003.
- 59.Isar A. Wigner Distribution for the Harmonic Oscillator within the Theory of Open Quantum Systems //Scheid W., Sandulescu A. (eds) Frontier Topics in Nuclear Physics. NATO ASI Series (Series B: Physics), Boston: Springer. 1994. T. 334.
- 60.Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V., Wigner function of a quantum system with polynomial potential //Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. − 2020. − №. 053105.
- 61. Numerov B.V. Note on the numerical integration of //Astronomische Nachrichten. 1927. T. 230. C. 359-364.
- 62.Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V., Explicit form for the kernel operator matrix elements in eigenfunction basis of harmonic oscillator //Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment − 2020. − №. 023109.
- 63. Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G., Perepelkin E. E. Generalized phase space and conservative systems //Doklady Mathematics − 2013. − T. 88. − №. 1. − C. 457-459.
- 64.Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G., Perepelkin E. E. Generalized phase space and conservative systems //Doklady Mathematics. − 2013. − T.88. − №1. − C. 1-3.
- 65. Sadovnikov, B. I., Perepelkin, E. E., Inozemtseva, N. G. (2014). Coordinate uncertainty principle in a generalized phase space //Doklady Mathematics. − 2014. − T. 90. − №2. − C. 628-630.
- 66.Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G. The new modified Vlasov equation for the systems with dissipative processes //Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. − 2017. − №. 053207.
- 67.Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G. Paradigm of infinite dimensional phase space //Understanding the Schrödinger Equation: Some

- [Non]Linear Perspectives United States: Nova Science Publishers. 2020.– C. 330.
- 68. Власов А.А. Теория многих частиц. Москва: URSS, 2011.
- 69.Власов А.А. Статистические функции распределения. Москва: Наука, 1966.
- 70. Vlasov A.A. Many-Particle Theory and Its Application to Plasma. New York: Gordon and Breach, 1961.
- 71. Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G. The properties of the first equation of the Vlasov chain of equations //J. Stat. Mech. − 2015. − №. P05019.
- 72. Hudson R.L. When is the Wigner quasi-probability density non-negative? //Reports on mathematical physics. -1974. T. 6. No. 2.
- 73.Bohm D. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of "hidden" variables I and II //Phys. Rev. 1952. T. 85. C. 166-193.
- 74.Bohm D., Hiley B.J., Kaloyerou P.N. An ontological basis for the quantum theory. //Phys. Rep. 1987. T.144. C. 321-375.
- 75.Bohm D., Hiley B.J. The Undivided Universe: An Ontological Interpretation of Quantum Theory. London: Routledge, 1993.
- 76.de Broglie L. Une interpretation causale et non lineaire de la mecanique ondulatoire: la theorie de ladouble solution. Paris: Gauthiers-Villiars, 1956.
- 77.Bopp F. La m'ecanique quantique est-elle une m'ecanique statistique classique particuli`ere? //Ann. Inst. H. Poincar'e − 1956. − T. 15. − №. 81.
- 78.Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G., Burlakov E.V. Extended Wigner Function for the Harmonic Oscillator in the Phase Space // Results in Physics. 2020. №. 103546. C. 103546-1–1035461-8.
- 79.Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I, Inozemtseva N.G. Riemann surface and quantization //Annals of Physics. 2017. T. 376. C. 194-217.
- 80.Перепёлкин Е.Е., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г., Бурлаков Е.В. Уравнение Шрёдингера в фазовом пространстве на основе

- аппроксимации Власова-Моэля //Ученые записки физического факультета Московского университета. 2020. №. 4. С. 2040101-1— 2040101-12.
- 81.Перепёлкин Е.Е., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г., Бурлаков Е.В., Полякова Р.В. Эффективный численный алгоритм построения функции Вигнера квантовой системы с полиномиальным потенциалом в фазовом пространстве //Physics of Particles and Nuclei. − 2021. − Т. 52. − №. 3. − [Статья принята к публикации]
- 82. Wiener N. Hermitian Polynomials and Fourier Analysis //J. Mathematics and Physics. 1929. T. 8. C. 70-73.
- 83. Koepf W. Identities for families of orthogonal polynomials and special functions //Integral Transforms and Special Functions. 1997. T. 5.
- 84.Al-Salam W. A. Operational representations for Laguerre and other polynomials //Duke Math. -1964. -T.31. $-N_{\odot}$. 1. -C. 127-142.