УДК 519.21+530.145.61

Ил.И. Гихман, д-р. физ.-мат. наук (Ин–т прикл. математики и механики АН Украины, Донецк)

ВЕРОЯТНОСТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КВАНТОВЫХ ЭВОЛЮЦИЙ

Показана возможность выбора комплексного фазового пространства для вероятностного представления решения уравнения Шредингера.

Доведена можливість вибору комплексного фазового простору для імовірнісного зображення розв'язку рівняння Шредінгера.

Статистическому описанию волновой функции посвящено большое количество работ. Среди различных направлений в исследованиях такого рода отметим использование методов теории случайных процессов для решения ряда задач квантовой механики [1]. Другим направлением, тесно примыкающим к этому, является развитие результатов, полученных при построении меры с помощью интеграла Фейнмана [2]. Основная задача этих исследований — выяснение вероятностного смысла волновой функции, и, следовательно, вероятностного характера нерелятивистской квантовой механики, так как значение волновой функции дает полное описание свойств квантовых систем.

Известные трудности при построении меры с помощью интеграла Фейнмана подчеркнуты в [3], где указывается на невозможность построения меры с помощью интеграла по траекториям в действительном координатном пространстве по гауссовой мере с мнимой дисперсией [3] (задача 64).

Как уже отмечалось, основным объектом квантовой механики является комплекснозначная волновая функция $\psi(t, x)$, квадрат модуля которой представляет собой вероятность нахождения квантовой частицы в точке x координатного пространства. Из результатов волновой механики следует, что искомая волновая функция должна удовлетворятьуравнению Шредингера

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(t,x)\psi, \tag{1}$$

внешнее сходство которого с "классическим" уравнением Колмогорова для диффузионных процессов позволяет также надеяться на возможность построения теории, аналогичной классической теории диффузии. Хорошо известна (см., например, [1]) модель перехода к мнимому времени в обратном уравнении Колмогорова, при которой функция, являющаяся решением уравнения Колмогорова, переходит в решение уравнения (1).

Здесь предлагается установить соответствие между решением уравнения (1) и диффузией в комплексном кординатном пространстве. Более точно, доказывается возможность вероятностного представления решения уравнения (1) в некотором комплексном многообразии. Таким образом, квантовая эволюция представляет собой диффузию в этом многообразии. Для построения меры соответствующей диффузии на Γ_z будет использована теорема Колмогорова [4] о построении вероятностного пространства по конечномерным распределениям. В этой теореме мера на вероятностном пространстве соответствует рассматриваемому случайному процессу.

Пусть $R^+=[0,+\infty)$; R^n — n-мерное евклидово пространство; Z^n – комплексное пространство переменной $z = x + iy$, где $x, y \in R^n$. На полном вероятностном пространстве $\{\Omega, F, P\}$ определим случайный процесс $\xi(s)$ с обращенным временем $s \in [0, t]$

$$\xi(s)=\xi(s;t,z)=z\pm\left(ihm^{-1}\right)^{1/2}[w(s)-w(t)], \tag{2}$$

где $z \in Z^n$; $t < \infty$; $w(t)$ – стандартный винеровский процесс со значениями в R^n; h и m – некоторые постоянные. Выбор обращенного времени в (2) обусловлен необходимостью исследования волновой функции ψ в обычном изменении времени. Из вида функции $\xi(s;\ t,\ z)$ непосредственно следует, что с вероятностью 1

$$\frac{\partial}{\partial z}\xi(s;t,z)=I;\ \frac{\partial^k}{\partial z^k}\xi(s;t,z)=0,\quad k=2,3,\ldots,$$

где I – единичный n–мерный вектор. Отсюда, в частности, следует

$$\left.\frac{\partial}{\partial z}\xi(s;t,z)\right|_{z=x+i0}=\frac{\partial}{\partial x}\xi(s;t,x)=I\ .$$

Допустим, что непрерывные векторные неслучайные функции $\Psi_0(z)$, $V(t,\ z)$, определенные при $t \in R^+$, $z \in Z^n$, аналогичны по переменной $z=(z_1,\ z_2,\ \ldots,\ z_n)$. Это означает, что они являются аналитическими по каждой переменной $z_k = x_k + iy_k$, где $x_k, y_k \in (-\infty,+\infty)$. Определим функционал

$$\Psi(t,z) = M\Psi_0(\xi(0;t,z))\exp i/h\int_0^t V(s,\xi(s;t,z))\,ds. \tag{3}$$

Применяя технику дифференцирования по начальным данным решений обыкновенных стохастических дифференциальных уравнений Ито [5], получаем

$$\frac{\partial\Psi(t,z)}{\partial z}=M\left[\frac{\partial\Psi_0(\xi(0;t,z))}{\partial z}\,\frac{\partial\xi(0;t,z)}{\partial z}+\right.$$

$$\left.+\ \Psi_0(\xi(0;t,z))\,\frac{i}{h}\int_0^t\frac{\partial V(s,\xi(s;t,z))}{\partial z}\,\frac{\partial\xi(s;t,z)}{\partial z}\,ds\right]\times$$

$$\times\ \exp i/h\int_0^t V(s,\xi(s;t,z))ds\ =M\left[\frac{\partial\Psi_0(\xi(0;t,z))}{\partial z}\,I+\right.$$

$$\left.+\Psi_0(\xi(0;t,z))\,\frac{i}{h}\int_0^t\frac{\partial V(s,\xi(s;t,z))}{\partial z}\,I\,ds\right]\ \exp i/h\int_0^t V(s,\xi(s;t,z))ds\ .$$

В силу аналитичности функций $\Psi_0(\cdot)$, $V(\cdot\,,\cdot)$ убеждаемся, что $\left.\dfrac{\partial\Psi(t,z)}{\partial z}\right|_{z=x+i0} = \dfrac{\partial\Psi(t,x)}{\partial x}$. Аналогичные рассуждения показывают, что

$$\left.\frac{\partial^k\Psi(t,z)}{\partial z^k}\right|_{z=x+i0}=\frac{\partial^k\Psi(t,x)}{\partial x^k},\ k=2,\ 3,\ \ldots$$

Теорема 1. *Предположим, что векторная и скалярная функции* $\Psi_0(z)$, $V(t,z)$, *определенные при* $(t,z) \in R^t \times Z^n$, *неслучайны, аналитичны по переменной* $z = (x_1+iy_1,\ \ldots,\ x_n+iy_n)$ *и непрерывны по* t. *Тогда функция* $\Psi(t,z)$, *заданная равенством* (3), *аналитична и является классическим решением задачи Коши*

$$\frac{\partial\Psi(t,z)}{\partial t}=\frac{ih}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi(t,z)}{\partial z^2}-\frac{i}{h}V(t,z)\Psi(t,z),\quad \Psi(0,\ z)=\Psi_0(z). \tag{4}$$

Доказательство. Аналитичность функции $\Psi(t,\ z)$ вытекает из непосредственно проверяемого равенства $\partial\Psi(t,z)/\partial\bar{z}_k = 0$, $\bar{z}_k = x_k - iy_k$, $k = 1,\ 2,\ \ldots,\ n$.

Дальнейшее доказательство следует выводу обратного уравнения Колмогорова [5] для диффузионных процессов и поэтому подробно не приводится. Применяя известные свойства условных математических ожиданий, получаем

$$\Psi(t+\Delta t, z) - \Psi(t, z) = M\{[\Psi(t, \xi(t; t+\Delta t, z)) - \Psi(t, z)] \exp i/h\, V(t, z)\Delta t +$$

$$+ \Psi(t, z)[\exp i/h\, V(t, z)\Delta t - 1]\} + o(\Delta t) = M\frac{\partial\Psi}{\partial z}[\xi(t; t+\Delta t, z) - z] +$$

$$+\frac{1}{2}M[\xi(t; t+\Delta t, z) - z]^* \frac{\partial^2\Psi(t,z)}{\partial z^2}[\xi(t; t+\Delta t, z) - z] + \frac{i}{h}V(t, z)\Psi(t, z)\Delta t + o(\Delta t).$$

Разделив крайние члены этого равенства на Δt и перейдя к пределу при $\Delta t \to \to 0$, получим доказательство теоремы. Учитывая непрерывную зависимость от параметров функции $\Psi(t, z)$, заданной с помощью соотношения (3), легко находим $\lim\limits_{t\downarrow 0}\Psi(t,z)=\Psi_0(z)$.

Замечание. Полагая в равенстве (4) $z = x + i0$, а также $\psi(t, x) = \Psi(t, x+i0)$, убеждаемся, что

$$\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t} = \frac{ih}{2m}\frac{\partial^2\psi(t,x)}{\partial x^2} - \frac{i}{h}V(t,x)\psi(t,x). \qquad (1')$$

Уравнение (1′) совпадает с уравнением Шредингера (1), описывающим эволюции квантовой частицы, взаимодействие которой с внешней средой описывается потенциалом $V(t, x)$. Физический смысл замечания состоит в возможности произвольно выбирать начало отсчета для мнимой части пространства Z^n.

Отметим, что в качестве исходного для данной интерпретации можно взять уравнение (1′). Его сходство с обратным уравнением Колмогорова позволяет утверждать, что квадрат коэффициента диффузии квантового процесса должен быть равен ihm^{-1}, что возможно только тогда, когда его фазовое пространство есть Z^n. Следовательно, хотя в момент времени t процесс $\xi(\cdot)$ мог находиться в действительном многообразии, в последующий момент он уже переходит в комплексную область.

Представим процесс $\xi(s; t, z_0)$ в виде

$$\xi(s;t,z_0) = x_0 \pm \left(\frac{h}{2m}\right)^{1/2}[w(s) - w(t)] + i\left\{y_0 \pm \left(\frac{h}{2m}\right)^{1/2}[w(s) - w(t)]\right\}. \qquad (5)$$

Формула (5) показывает, что при выбранном $z_0 = x_0 + iy_0$ марковский процесс $\xi(s)$ имеет своим фазовым пространством многообразие $\Gamma_{z_0} = \mathop{\times}\limits_{l=1}^{n}\Gamma_{z_0^{(l)}}$, $\Gamma_{z_0^{(l)}} = =\{z^{(l)} = x^{(l)} + iy^{(l)},\ x^{(l)} - x_0^{(l)} = y^{(l)} - y_0^{(l)}\}$, состоящее из совокупности прямых в каждой комплексной плоскости переменной $z^{(l)}$, имеющих угол наклона к координатным осям $\pi/4$ и проходящих через точку $(x_0^{(l)}, y_0^{(l)})$, $l = 1, 2, \ldots, n$.

Обозначим $\eta(0; t, z)$ выражение под знаком математического ожидания в правой части (3). Используя вид $\eta(0; t, z)$, построим конечномерные распределения для случайного процесса, служащего его аппроксимацией. Пусть $0 = t_0 < < t_1 < \ldots < t_N = t$ — некоторое разбиение отрезка $[0, t]$ и $\lambda = \max\limits_i(t_{i+1} - t_i)$. Тогда

$$\eta\,(0;t,z) = \xi(0;t_{N-1}, z_{N-1})\exp i/h\int_0^{t_{N-1}} V(s, \xi(s; t_{N-1}, z_{N-1}))ds\Bigg|_{z_{N-1}=\xi(t_{N-1};\,t_N, z)} \times$$

$$\times \exp i/h \int_{t_{N-1}}^{t} V(s,\xi(s;t,z))ds = \eta(0;t_{N-1},\xi(t_{N-1};t,z))\exp i/h \int_{t_{N-1}}^{t} V(s,\xi(s;t,z))ds = \ldots$$

$$\ldots = \xi(0;t_1,z_1)\prod_{k=1}^{N} \exp i/h \int_{t_{k-1}}^{t_k} V(s,\xi(s;t_k,z_k))ds\Big|_{z_k=\xi(t_k;t_{k+1},z_{k+1})}.$$

Определим аппроксимации $\eta_\lambda(\,\cdot\,;t,z)$ процесса $\eta(\,\cdot\,;t,z)$, полагая

$$\eta_\lambda(0;t,z) = \xi(0;t_1,z_1)\prod_{k=1}^{N} \exp {}^{i}\!/_{h}\, V(t_k,z_k)ds\Big|_{z_k=\xi(t_k;t_{k+1},z_{k+1})},$$

где $\Delta t_{k+1} = t_{k+1} - t_k$. Для произвольного борелевского множества B, лежащего в Γ_z, имеем

$$P\{\eta_\lambda(0;t,z)\in B\} = M\,\chi_B(\xi(0;t_1,z_1))\prod_{k=1}^{N} \exp i/h\, V(t_k,z_k)\Delta t_k\Big|_{z_k=\xi(t_k;t_{k+1},z_{k+1})} =$$
$$= \exp i/h\, V(t,z)\Delta t_N \int_{\Gamma_z} \exp i/h\, V(t_{N-1},z_{N-1})\Delta t_{N-1}\, p(t,z;t_{N-1},z_{N-1})dz_{N-1}\ldots$$
$$\int_{\Gamma_2} \exp i/h\, V(t_1,z_1)\Delta t_1\; p(t_2,z_2;t_1,z_1)dz_1 \int_B p(t_1,z_1;t_0,z_0)dz_0,$$

где плотность гауссовского вектора $z_k \pm \left(ihm^{-1}\right)^{1/2}[w(t_{k-1}) - w(t_k)]$ представима в виде

$$p(t_k,z_k;t_{k-1},z_{k-1})dz_{k-1} = p(t_k,x_k;t_{k-1},x_{k-1})dx_{k-1} =$$
$$= \left(\frac{m}{2\pi ih\Delta t_k}\right)^{n/2} \exp\frac{im}{2h}\frac{\left|x_{k-1}-x_k\right|^2}{\Delta t_k}dx_{k-1}.$$

Эта формула является следствием того, что случайность входит в действительную и мнимую части процесса $\xi(\,\cdot\,)$ одинаковым образом (5). Следовательно,

$$P\{\eta_\lambda(0;t,z)\in B\} = \exp i/h\, V(t,x+iy)\Delta t_N \int_{R^n} \exp i/h\, V(t_{N-1},x_{N-1} +$$
$$+ i(x_{N-1} - x + y))\Delta t_{N-1}\, p(t,x;t_{N-1},x_{N-1})dx_{N-1}\cdots$$
$$\ldots \int_{R^n} \exp i/h\, V(t_1,x_1 + i(x_1 - x + y))\Delta t_1\; p(t_2,x_2;t_1,x_1)dx_1 \int_{R^n} p(t_1,x_1;t_0,x_0)dx_0. \quad (6)$$

Последний интеграл берется по проекции множества $B \in \Gamma_z$ на действительное многообразие. Формула (6) дает представление для одномерных распределений. Для построения конечномерных распределений $P\{\eta_\lambda(s_k) \in B_k,\ k = 1, 2,\ldots, l\}$ можно легко применить формулу (6). Для этого моменты времени s_k необходимо ввести в совокупность точек разбиения и затем, при интегрировании по формуле (6), интегралы в момент времени s_k распространить только на проекции множеств B_k, $k = 1, 2, \ldots, l$, на действительную часть Z^n. Так как процессы $\eta_\lambda(s;t,z)$ сходятся при $\lambda\to 0$ по вероятности к $\eta(s;t,z)$, то сходятся и их соответствующие конечномерные распределения. Конечномерные распределения процесса $\eta_\lambda(\cdot)$ удовлетворяют условиям согласованности, поэтому этим же условиям удовлетворяют соответствующие распределения процесса $\eta_\lambda(\cdot)$. По теореме Колмогорова о построении вероятностного пространства мера на алгебре цилиндрических множеств может быть продолжена до счетно-аддитивной меры, определенной на минимальной σ-алгебре, содержащей алгебру цилиндрических множеств над пространством Γ_z.

Установим связь между формулой (6) и принципом квантования по Фейнману. Пусть z_* и z^* – произвольные точки, лежащие в одном и том же фазовом пространстве Γ_z марковского процесса $\xi(s;t,z)$. Из (6) находим

$$M\chi_{\{z_*\}}(\eta(t_*;t^*,z^*))=\lim_{\lambda\downarrow 0} M\chi_{\{z_*\}}(\eta_\lambda(t_*;t^*,z^*))=$$

$$=\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{1}{A_0}\int\cdots\int \exp i/h\sum_{k=1}^{n}\left\{V(t_k,z(t_k))+\frac{m}{2}\frac{\left|x(t_{k-1})-x(t_k)\right|^2}{\Delta t_k}\right\}\Delta t_k\frac{dz_{N-1}}{A_{N-1}}\cdots\frac{dz_1}{A_1}=$$

$$=\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{1}{A_0}\int\cdots\int \exp i/h\sum_{k=1}^{n}\left\{V(t_k,x(t_k)+i[x(t_k)-x^*+y^*])+\right.$$

$$\left.+\frac{m}{2}\frac{\left|x(t_{k-1})-x(t_k)\right|^2}{\Delta t_k}\right\}\Delta t_k\frac{dx_{N-1}}{A_{N-1}}\cdots\frac{dx_1}{A_1}=$$

$$=\lim_{\lambda\downarrow 0}\frac{1}{A_0}\int\cdots\int \exp i/h\int_{t_*}^{t^*}V(s,x(s)+i(x(s)-x^*+y^*))\,ds\frac{dx_{N-1}}{A_{N-1}}\cdots\frac{dx_1}{A_1},$$

где $A_k=\left(m/2\pi ih\Delta t_k\right)^{n/2}$, $k=1,2,\ldots,N-1$. С точностью до мнимого слагаемого $i(x(s)-x^*+y^*)$, стоящего в правой части равенства в потенциале $V(\cdot)$, полученное выражение совпадает с ядром амплитуды вероятности [6]. При этом разность y^*-x^* можно считать равной 0. Для этого следует переместить начало координат пространства Z^n в точку (x^*, y^*). Роль же величины $ix(s)$, стоящей внутри потенциала, нуждается в дополнительном анализе.

Следует отметить, что измеряемыми величинами являются вероятности квантовых событий, значения которых выражаются через квадрат модулей волновой функции. Ранее полагалось, что волновая функция, определяющая начальное распределение, и потенциал являются аналитическими. Это предположение связано с необходимостью согласования полученных результатов с уравнением Шредингера. Более точно, необходимо равенство производных

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi\right|_{z=x+i0}=\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}.$$

Если же предполагать, что квантовое описание имеет своим фазовым пространством Γ_z, то условие аналитичности можно ослабить, а именно достаточно требовать гладкость функций $\Psi_0(z)$ и $V(t,z)$ на этом многообразии. Кроме того, возникает вопрос об области определения потенциала, так как он, на первый взгляд, имеет естественной областью определения действительное пространство. Отметим, что если в дальнейшем рассмотреть взаимодействие квантовой частицы с "внешней" средой, которая представляет собой также квантовую систему, то квантовый потенциал взаимодействия естественно будет определен в комплексной области. Эти вопросы мы в данной работе обсуждать не будем.

Замечание. Легко может быть проверено, что, помимо предложенной мультипликативной формы записи волновой функции (3), ее можно представить в аддитивной форме как решение линейного уравнения

$$\Psi(t,z) = M\{\Psi_0(\xi(0;t,z)) + i/h \int_0^t V(s,\xi(s;t,z))\Psi(s,\xi(s;t,z))ds\}.$$

Более содержательным по сравнению с предыдущим представляется анализ уравнения Шредингера для заряженной частицы в электромагнитном поле

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{ih}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{eA}{mc}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \left[\frac{e\,\mathrm{div}A}{2mc} + e\varphi - \frac{ie^2A^2}{2hmc}\right]\psi. \qquad (7)$$

Здесь A и φ – векторный и скалярный потенциалы поля, l и m – заряд и масса частицы, c – скорость света. Определим комплексный случайный процесс $\zeta(s;t,z)$ как решение стохастического уравнения с обращенным временем

$$\zeta(s;t,z) = z + \frac{e}{mc}\int_s^t A(\zeta(r;t,z))dr \pm \left(ihm^{-1}\right)^{1/2}[w(s) - w(t)],$$

где $A(z)$ – продолжение потенциала $A(x)$ в комплексное пространство Z^n. Рассмотрим функционал

$$\Psi(t,z) = M\Psi_0(\zeta(0;t,z))\exp i/h\int_0^t V(\zeta(s;t,z))ds,$$

где $V(z) = \dfrac{ie^2A^2(z)}{2hmc^2} - e\varphi(z) + \dfrac{e}{2mc}\mathrm{div}A(z)$.

Теорема 2. *Пусть функции* $\Psi_0(z)$, $V(z)$ *аналитичны в пространстве* Z^n. *Тогда функция* $\psi(t, x) = \Psi(t, x = i0)$ *удовлетворяет уравнению* (7) *с начальной функцией* $\Psi_0(x + i0)$.

Отличие теоремы 2 от предыдущей состоит в том, что процесс $\zeta(s;\, t,\, z)$ имеет отличный от 0 снос $A(\cdot)$. С помощью стандартных методов стохастических дифференциальных уравнений [5] проверяется, что $\partial\Psi(t,z)/\partial z = 0$, а это является доказательством аналитичности функции $\Psi(t,\cdot)$. Нетрудно видеть, что

$$\frac{\partial\zeta(s;t,z)}{\partial\bar{z}} = \frac{e}{mc}\int_s^t A'(\zeta(r;t,z))\frac{\partial\zeta(r;t,z)}{\partial\bar{z}}\,dr.$$

Отсюда следует, что с вероятностью 1 $\dfrac{\partial\zeta(s;t,z)}{\partial\bar{z}} = 0$, поэтому функция $\zeta(s;t,\, z)$ аналитическая с вероятностью 1. После этого проверка того, что $\partial\Psi/\partial\bar{z} = 0$, не представляет каких-либо затруднений.

1. *Rendiconti. Ser* II. – 1991.– **25.**–176p.
2. *Смолянов О. Г., Шевгулидзе Е. Т.* Континуальные интегралы. – М.: Изд-во Моск. ун–та, 1990. – 147с.
3. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики: В 4-х т. – М.: Мир, 1978.– Т.2.– 393с.
4. *Гихман И. И., Скороход А. В.* Теория случайных процессов: В 3-х т. – М.: Наука,1971.– Т.1.– 664с.
5. *Гихман И. И., Скороход А. В.* Введение в теорию случайных процессов. – М.: Наука, 1977. – 567с.
6. *Фейнман П., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. – М.: Мир, 1968. – 382с.

Получено 01.04.92