

Монси В. Джон (Индия)

Вероятность и комплексные квантовые траектории

Перевод М.Х.Шульмана (shulman@dol.ru)

arXiv:0809.5101v1 [quant-ph] 30 Sep 2008

Probability and complex quantum trajectories

Moncy V. John

*Department of Physics, St. Thomas College, Kozhencherry, Kerala 689641,
India.*

Key words: quantum Hamilton-Jacobi equation, trajectory representation, probability axiom, complex methods

PACS: 03.65.Ca

Аннотация

Показано, что в представлении квантовой механики с помощью комплексных траекторий плотность вероятности $\Psi^*\Psi$ Борна может быть получена из мнимой части поля скоростей частиц на действительной оси. Расширяя эту аксиому вероятности на комплексную плоскость, мы сначала пытаемся найти плотность вероятности, решая подходящее уравнение сохранения. Характеристические кривые этого уравнения сохранения оказываются теми же, что и комплексные пути частиц в новом представлении. Граничное условие в этом случае состоит в том, что расширенная плотность вероятности должна быть согласована с правилом квантовой вероятности вдоль действительной оси. Для простых, не зависящих от времени одномерных задач, которые здесь рассматриваются, мы устанавливаем, что сохраняющаяся плотность вероятности может быть выведена из поля скоростей частицы, исключая области, где траектории были предварительно оценены как несуществующие. Представлен также альтернативный метод нахождения этой плотности вероятности в терминах интегралов по траекториям, который проще реализовать на компьютере и который полезен для получения одночастичных решений. Самое важное, мы показываем, что требуемое уравнение сохранения может быть выведено из такого определения плотности вероятности с помощью комплексного расширения уравнения Шредингера.

1 Введение

В предшествующей работе [1] было использовано квантовое уравнение Гамильтона-Якоби [2-5] для демонстрации существования траекторий частицы в комплексном пространстве для различных квантовых состояний. Это представление комплексной квантовой траектории было получено за счет модификации подхода де

Бройля – Бома к квантовой механике [6], который предусматривает движение частицы, управляемое волновой функцией. Одним из преимуществ результирующей теории, которая дает новую интерпретацию квантовой механики, является отсутствие проблемы стационарности частиц в связанных состояниях, возникающей в подходе де Бройля - Бома. Другой основанный на траекториях подход к квантовой механике, который также претендует на устранение этой проблемы, развивают Floyd, Faraggi, Matone (FFM) и другие [7-9].

Новое представление, связанное с комплексными траекториями, возникает благодаря первоначальной подстановке выражения $\Psi = e^{i\hat{S}/\hbar}$ в уравнение Шредингера с целью получения квантового уравнения Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} + \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial x} \right)^2 + V \right] = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \hat{S}}{\partial x^2}, \quad (1)$$

и последующему постулированию уравнения движения

$$m\dot{x} \equiv \frac{\partial \hat{S}}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (2)$$

для частицы. Траектории $x(t)$ частицы в комплексной x -плоскости получают интегрированием этого уравнения по времени [1]. Установлено, что вышеуказанное определение $\Psi = e^{i\hat{S}/\hbar}$ позволяет использовать всю информацию, заключенную в Ψ для траектории. (Подход, который использует определение $\Psi = Re^{iS/\hbar}$, не обладает этим преимуществом¹.) В [1] были найдены собственные комплексные траектории для задач о свободной частице, гармоническом осцилляторе и потенциальном барьере, а также комплексные траектории решения для волнового пакета. Это представление было распространено Yang на трехмерные задачи, такие, как атом водорода [10] и использовано для исследования одномерных задач рассеяния и задач связанного состояния Chou и Wyatt [11,12]. Позднее подход с комплексной траекторией для решения квантового уравнения Гамильтона-Якоби развил Tannor с сотрудниками [13]. Данное уравнение независимо вывели также Sanz и Miret-Artes [14], которые тоже нашли полезным представление комплексных траекторий для лучшего понимания нелокальности в квантовой механике [15,16].

Хорошо известно, что квантовое уравнение Гамильтона-Якоби в виде уравнения (1) использовалось многими физиками, такими, как Вентцель, Паули и Дирак, еще на заре квантовой механики [2]. В рекомендуемой работе 1982 года Leacock и Padgett [4] использовали квантовое уравнение Гамильтона-Якоби для получения собственных значений во многих задачах со связанным состоянием, не решая непосредственно соответствующее уравнение Шредингера. Однако в их работе не было траекторий, и только в [1] уравнение движения (2) было явно решено, были впервые рассчитаны и построены комплексные траектории частиц в различных квантовых состояниях. Данная статья также подчеркивает интерпретационное значение представления с

¹ В подходе де Бройля-Бома действие S считается действительной величиной, тогда как параметр $\hat{S}$ подразумевается комплексным. – Примеч. пер.

комплексными квантовыми траекториями по сравнению с механикой Бомы. Даже если эта формулировка требовала бы, чтобы волновая функция находилась из независимого расчета, в общем случае надо отказаться от того, что предусматривалось в работе [1] интерпретацией квантовой механики с комплексными траекториями [16,17].

Вместо вычисления комплексных траекторий $x(t)$, комплексные пути $x_i(x_r)$ в вышеприведенной схеме могут непосредственно быть найдены путем интегрирования уравнения

$$\frac{dx_i}{dx_r} = \frac{\dot{x}_i}{\dot{x}_r}, \quad (3)$$

где должно использоваться уравнение (2). В работе [1] было отмечено, что даже в случае некоторого собственного состояния частица может находиться на любой из бесконечного числа возможных квантовых траекторий, в зависимости от ее начального положения на комплексной плоскости. Следовательно, ожидаемые значения динамических переменных оцениваются для всего ансамбля частиц по всем возможным траекториям. Было постулировано, что среднее значение динамической переменной O может быть получено с использованием меры $\Psi^*\Psi$ в виде

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} O \Psi^* \Psi dx, \quad (4)$$

где интеграл берется вдоль действительной оси [1]. Было также отмечено, что в такой форме нет необходимости делать общепринятую замену на операторы. Сделанный выше постулат эквивалентен аксиоме вероятности Борна для таких наблюдаемых, как положение, импульс, энергия и т.п., и можно показать, что эти величины $\langle O \rangle$ совпадают с соответствующими средними в квантовой механике

Это создает новую схему, эквивалентную стандартной схеме квантовой механики, когда вычисляются средние значения динамических переменных. Один из вызовов, стоящих перед этим представлением с помощью комплексных квантовых траекторий, как онтологической теории движения частицы, это объяснение аксиомы квантовой вероятности. В подходе де Бройля – Бома имелись некоторые попытки получить распределение вероятности $\Psi^*\Psi$ из более фундаментальных допущений [6]. В настоящей статье мы сначала попробуем в рамках представления с комплексными траекториями найти это распределение вдоль действительной оси из скорости частиц.

Было установлено, что всегда существует прямое соотношение между распределением $\Psi^*\Psi$ и мнимой компонентой скорости частиц на действительной оси. Поскольку это распределение определено и используется только вдоль действительной оси, уравнение сохранения для вероятности в стандартной квантовой механике здесь тоже выполняется без каких-либо модификаций.

В то же время, поскольку мы имеем комплексные пути, должно быть естественным рассматривать вероятность для частицы находиться на каком-то частном пути. Кроме того, мы можем рассматривать вероятность найти частицу в различных точках одного и того же пути, который тоже может быть различным. Таким

образом, желательно расширить аксиому вероятности на $x_r x_i$ - плоскость. Но в этом случае необходимо знать, выполняется ли сохранение вероятности везде на этой плоскости. Недавняя статья Poirier [18] посвящена этому вопросу и устанавливает некоторые отрицательные результаты при определенном выборе для такого распределения. Poirier пытается определить расширенную вероятность, работая с Ψ , решением зависящего от времени уравнения Шредингера. Плотность вероятности в точке x на комплексной плоскости определяется как $\rho(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)$, где $\Psi^*(x) \equiv \Psi^*(x^*)$. Комплексный поток принимается в виде $j(x,t) = v(x,t)\rho(x,t) = -(i\hbar/m)\Psi^*(x^*)\Psi'$, где $v(x,t) \equiv \dot{x}$ дается уравнением (2), а штрих обозначает пространственное дифференцирование. С помощью зависящего от времени уравнения Шредингера автор показывает, что в общем случае

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \neq j'(x,t).$$

Это, разумеется, означает несохранение вероятности вдоль траекторий. Но следует иметь в виду, что этот отрицательный результат основан на предположениях, сделанных в [18] относительно плотности и потока вероятности.

С другой стороны, в настоящей статье мы сначала показываем, что плотность борновской вероятности, определенная вдоль $x = x_r$, оказывается экспонентой от интеграла вдоль действительной оси от x_i , т.е. от мнимой части комплексной скорости частицы. Далее, расширяя эту аксиому вероятности на всю $x_r x_i$ -плоскость, мы пытаемся решить соответствующее уравнение для сохраняющейся плотности вероятности.

Мы также потребуем, чтобы эта величина соответствовала правилу вероятности Борна вдоль действительной оси, которая в этом случае является граничным условием. Важный результат при этом заключается в том, что характеристические кривые уравнения сохранения, вдоль которых распространяется информация о решении, совпадают с путями частицы в представлении с комплексными траекториями. Мы устанавливаем, что существуют сохраняющиеся плотности вероятности, которые соответствуют граничному условию в большинстве рассмотренных примеров. Представлен также альтернативный метод оценки в терминах интеграла по траектории, сходный с нахождением распределения вероятности $\Psi^*\Psi$ вдоль действительной оси. Этот второй метод представляет интерес при решении квантового уравнения Гамильтона-Якоби в случае движения индивидуальных частиц. Самое важное, мы показываем, что требуемое уравнение сохранения может быть выведено из такого определения плотности вероятности с помощью комплексного расширения уравнения Шредингера.

2 Вероятность, выраженная через поле скорости

Напомним, что в такой схеме действительная часть скорости частицы на действительной оси, обозначенная как $\dot{x}_r(x_r, 0)$, всегда соответствует скорости частицы в подходе де Бройля - Бома [1]. Чтобы найти функцию квантовой вероятности, выраженную через скорости и являющуюся нашей первоочередной

целью, мы заметим также, что мнимая компонента $\dot{x}_i$ скорости частицы на комплексной траектории может быть представлена в виде

$$\dot{x}_i = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x_r} + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x_r} \right)^* \Psi \right]}{\Psi^* \Psi}. \quad (5)$$

Это позволяет написать плотность вероятности для частицы в некоторой точке $x = x_r$ в виде

$$\Psi^* \Psi(x_r, 0) \equiv P(x_r) = \mathcal{N} \exp \left(-\frac{2m}{\hbar} \int^{\dot{x}_r} \dot{x}_i dx_r \right), \quad (6)$$

где интеграл берется вдоль действительной оси. Такая возможность для извлечения распределения квантовой вероятности из поля скоростей оказывается уникальным свойством формулировки с комплексными траекториями. Например, в подходе де Бройля – Бома поля скоростей для всех связанных собственных состояний равны нулю везде, и невозможно установить соотношение между скоростью и вероятностью. С другой стороны, представление траекторий, развиваемое Floyd, Faraggi и Matone, вообще не ставит перед собой задачи найти какую-либо связь с вероятностью.

В дальнейшем ограничимся одномерными и не зависящими от времени задачами. Переменная x всегда предполагается комплексной. Как было сформулировано ранее, в этом новом представлении, основанном на существовании траекторий в комплексной плоскости, даже частица в собственном состоянии может находиться на любой из бесконечного числа возможных траекторий, в зависимости от своего начального положения на комплексной плоскости. Очевидно, хотелось бы также найти вероятность нахождения частицы в области $dx_r dx_i$ вокруг точки (x_r, x_i) на комплексной плоскости. Обозначим эту величину через $\rho(x_r, x_i) dx_r dx_i$.

Явное выражение для $\rho(x_r, x_i)$ может быть получено следующим образом. Расширение плотности вероятности на всю $x_r x_i$ -плоскость требует выполнения уравнения сохранения в виде (для не зависящих от времени случаев)

$$\frac{\partial(\rho \dot{x}_r)}{\partial x_r} + \frac{\partial(\rho \dot{x}_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (7)$$

Чтобы решить это уравнение в частных производных, мы можем написать $\rho(x_r, x_i) = h(x_r, x_i) f(p)$, где $h(x_r, x_i)$ – некоторое решение уравнения (7), p – некоторая комбинация x_r и x_i , чье значение остается постоянным вдоль их характеристических кривых [19].

Подставляя это выражение для ρ в (7), мы видим, что эти характеристические кривые получают интегрированием уравнения

$$\frac{dx_r}{\dot{x}_r} = \frac{dx_i}{\dot{x}_i} \quad \text{или} \quad \frac{dx_i}{dx_r} = \frac{\dot{x}_i}{\dot{x}_r}, \quad (8)$$

которое подобно уравнению (3). Это демонстрирует важное свойство: характеристические кривые для вышеприведенного уравнения сохранения идентичны комплексным путям частиц в описываемом представлении с квантовыми траекториями.

Мы теперь можем найти точный вид $f(p)$, потребовав, чтобы $\rho(x_r, 0)$ соответствовала вероятности $P(x_r)$, которая в данном случае является граничным условием. Пусть постоянная интегрирования в вышеприведенном уравнении (8) будет (действительной) координатой какой-либо одной точки пересечения траектории на действительной оси, обозначенной через x_{r0} . Поскольку характеристические кривые идентичны комплексным путям, можно принять x_{r0} в качестве постоянной величины p вдоль характеристической кривой, и пусть она будет выражена через x_r и x_i . Предполагаемый вид расширенного распределения вероятности ρ может быть записан в виде

$$\rho(x_r, x_i) = h(x_r, x_i) f(x_{r0}). \quad (9)$$

Теперь мы можем выбрать $f(x_{r0})$ для задания граничного условия. В точке $x = x_{r0}$, где кривая C пересекает действительную ось, мы потребуем (в качестве граничного условия), чтобы

$$\rho(x_{r0}, 0) = h(x_{r0}, 0) f(x_{r0}) = P(x_{r0}) \quad (10)$$

и отсюда найдем $f(x_{r0})$. Выражая x_{r0} через x_r и x_i в $f(x_{r0})$ из уравнения (9), получаем $\rho(x_r, x_i)$.

Здесь необходимо оговориться. Как мы увидим ниже, могут встретиться примеры, когда граничное условие избыточно определяет задачу, и мы оказываемся не в состоянии найти решение. Замечено, что это имеет место в некоторых областях комплексного пространства, где, предположительно, траектории не могут существовать.

Можно также заметить, что дифференциал в уравнении (3), даваемый выражением

$$\dot{x}_i dx_r - \dot{x}_r dx_i = 0 \quad (11)$$

не совсем точен

$$\frac{\partial \dot{x}_r}{\partial x_r} \neq -\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i}, \quad (12)$$

если только обе частные производные не равны нулю. Это связано с выполнением в комплексной плоскости для аналитической функции $\dot{x}$ условий Коши – Римана (за исключением сингулярных точек). Однако этот неточный дифференциал всегда может быть сделан точным путем умножения на интегрирующий множитель $\mu(x_r, x_i)$, удовлетворяющий соотношению

$$\frac{\partial(\mu \dot{x}_r)}{\partial x_r} = -\frac{\partial(\mu \dot{x}_i)}{\partial x_i}. \quad (13)$$

Таким образом, мы видим, что этот интегрирующий множитель μ может использоваться в качестве $h(x_r, x_i)$ в уравнении (9).

При нахождении $h(x_r, x_i)$ или даже $\rho(x_r, x_i)$ в случае некоторых специальных потенциалов может оказаться также полезным следующее наблюдение. Обозначим $d\Psi/dx \equiv \chi(x)$. Тогда использование не зависящего от времени уравнение Шредингера позволяет представить уравнение движения (2) в виде

$$\dot{x} = \frac{2i(E - V)}{\hbar} \frac{\chi}{\chi'}, \quad (14)$$

где $\chi' \equiv d\chi/dx$. При $V = V_0$ (действительная константа), интегрируя, получим

$$\chi(x) = A \exp \left[\frac{2i(E - V_0)}{\hbar} x \right], \quad (15)$$

откуда находим для траектории частицы в комплексной x -плоскости $\chi^*(x)\chi(x) = |A|^2$. Более того, нетрудно видеть, что

$$(\chi')^* \chi' = \frac{4(E - V_0)^2}{\hbar^2} \frac{\chi^* \chi}{\dot{x}^* \dot{x}}. \quad (16)$$

Но для постоянных потенциалов в комплексной x -плоскости имеем $(\chi')^* \chi' \propto \Psi^* \Psi$. Можно видеть, что вышеприведенное выражение (16) обеспечивает уравнение сохранения и согласуется с граничным условием. Иными словами, расширенная, сохраняющаяся вероятность $\rho(x_r, x_i)$ в этом случае может быть записана как

$$\rho(x_r, x_i) = \Psi^* \Psi = \frac{\hbar^2 |A|^2}{m^2 \dot{x}^* \dot{x}},$$

и, следовательно, ρ изменяется обратно пропорционально $|\dot{x}|^2$, как если бы частица двигалась вдоль частной траектории с фиксированным A . Этот результат не противоречит результату приближения WKB, согласно которому $\Psi^* \Psi \propto 1/v_{\text{classical}}$ при постоянных потенциалах [20], поскольку $|\dot{x}|$ вдоль траектории в нашем случае не тот же самый, что $v_{\text{classical}}$.

В случае потенциала для гармонического осциллятора мы ниже увидим, что выражение вида $|A|^2/(\dot{x}^* \dot{x})$ даст решение $h(x_r, x_i)$ уравнения сохранения, но для частного решения, которое согласуется с граничным условием, необходимо также найти $f(x_{r0})$.

3 Примеры

Теперь применим эту процедуру, прежде всего, к гармоническому осциллятору. В случае $n = 0$ мы имеем $\dot{x}_i = (\hbar\alpha^2/m)x_r$, а плотность квантовой вероятности восстанавливается с использованием уравнения (6) в виде

$$P(x_r) \equiv \mathcal{N} \exp\left(-\frac{2m}{\hbar} \int_{x_i}^{x_r} \dot{x}_i dx_r\right) = \mathcal{N}_0 e^{-\alpha^2 x_r^2}. \quad (17)$$

Чтобы найти $\rho(x_r, x_i)$, вначале заметим, что в этом случае решением уравнения сохранения (7) может быть значение $h = h_0$, т.е. равное константе. Тогда, используя уравнение (10), мы находим $f(x_{r0})$ пропорциональной $\exp(-\alpha^2 x_{r0}^2)$. Чтобы подставить x_{r0} вместо x_r и x_i , уравнение (3) должно быть проинтегрировано с целью представления путей в виде $x_r^2 + x_i^2 = \text{constant}$ [1]. Приравнявая эту константу к x_{r0}^2 , мы окончательно находим

$$\rho(x_r, x_i) \propto e^{-\alpha^2(x_r^2 + x_i^2)}. \quad (18)$$

Эта сохраняющаяся вероятность изображена на рис. 1.

Аналогично, для собственного состояния при $n = 1$ воспользуемся уравнением (6) и получим $P(x_r) = \mathcal{N}_1 x_r^2 \exp(-\alpha^2 x_r^2)$. Следующий шаг состоит в нахождении $h(x_r, x_i) = (x_r^2 + x_i^2)$ в качестве решения уравнения сохранения (7). (В этом случае можно угадать это выражение с помощью выражения $\dot{x}^* \dot{x}$, поскольку оно возникает в его знаменателе.) $f(x_{r0})$ может быть теперь найден в виде

$$f(x_{r0}) \propto e^{-\alpha^2 x_{r0}^2}. \quad (19)$$

Эти комплексные пути в данном случае задаются условием $(\alpha^2 x_r^2 - \alpha^2 x_i^2 - 1)^2 + 4\alpha^4 x_r^2 x_i^2 = |A|^2$, т.е. константой. (Заметим, что это также появляется в выражении для $\dot{x}^* \dot{x}$. Очевидно, мы получаем $\dot{x}^* \dot{x} = |A|^2 / (x_r^2 + x_i^2)$). Приравнявая эту константу к $(\alpha^2 x_{r0}^2 - 1)^2$, находим $f(x_{r0})$, а также расширенную плотность вероятности ρ , выраженные через x_r и x_i . Но при вычислении квадратных корней следует быть аккуратным. Необходимо отметить, что для области, содержащей подсемейства гармонического осциллятора (с $A < 1$ в рассматриваемом случае $n = 1$) [1], граничное условие для задачи оказывается переопределенным, в результате чего решения не существует. Однако внешней по отношению к указанной области мы можем написать

$$f(x_{r0}) \propto \exp(-\sqrt{(\alpha^2 x_r^2 - \alpha^2 x_i^2 - 1)^2 + 4\alpha^4 x_r^2 x_i^2}), \quad (20)$$

и, следовательно,

$$\rho(x_r, x_i) \propto (x_r^2 + x_i^2) \exp(-\sqrt{(\alpha^2 x_r^2 - \alpha^2 x_i^2 - 1)^2 + 4\alpha^4 x_r^2 x_i^2}) \quad (21)$$

что изображено на рис. 2.

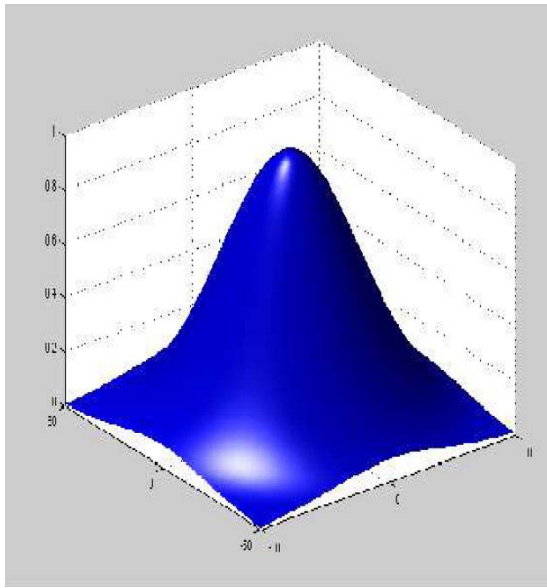


Рисунок 1. Расширенная плотность вероятности $\rho(x_r, x_i)$ для гармонического осциллятора при $n = 1$.

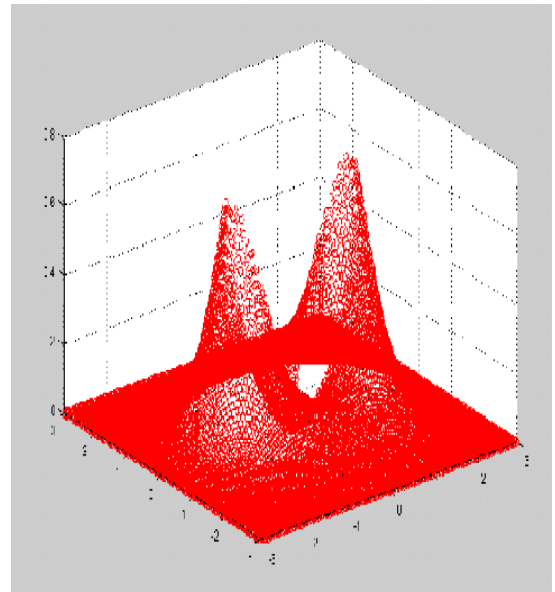


Рисунок 2. Расширенная плотность вероятности $\rho(x_r, x_i)$ для гармонического осциллятора при $n = 2$. Здесь, однако, не существует сохраняющейся вероятности для подсемейств с $|A| < 1$ во внутренней области.

Теперь рассмотрим другой пример – частица в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками между $x = 0$ и $x = a$. Используя выражение для собственной функции энергии $\psi_n = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$, можно найти, что комплексные пути задаются соотношением

$$\cosh\left(\frac{2n\pi x_i}{a}\right) + \cos\left(\frac{2n\pi x_r}{a}\right) = |A|^2. \quad (22)$$

Мы можем выбрать $h(x_r, x_i) = \cosh(2n\pi x_i/a) - \cos(2n\pi x_r/a)$ в качестве решения уравнения сохранения. (Здесь мы снова имеем $\dot{x}^* \dot{x} = |A|^2 / h(x_r, x_i)$.) Интересно, что мы здесь также имеем $f(x_{r0}) = \text{constant}$ и, следовательно,

$$\rho(x_r, x_i) \propto \cosh\left(\frac{2n\pi x_i}{a}\right) - \cos\left(\frac{2n\pi x_r}{a}\right). \quad (23)$$

Случай $n = 1$ для этого распределения изображен на рис. 3.

Сходная ситуация возникает в случае комплексной траектории в задаче о потенциальном барьере, обсуждаемой в [1]. Мы снова находим, что $\dot{x}^* \dot{x} = |A|^2 / h(x_r, x_i)$ и $f(x_{r0}) = \text{constant}$. Для константы отражения $\frac{1}{2}$ мы, таким образом, получаем для потенциального барьера

$$\rho(x_r, x_i) \propto e^{-2kx_i} + \sqrt{2} \cos(2kx_r) + \frac{1}{2} e^{2kx_i}, \quad (24)$$

что показано на рис. 4.

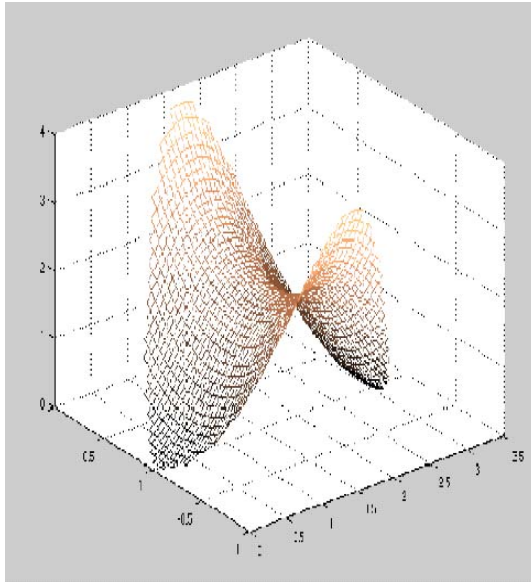


Рисунок 3. Расширенная плотность вероятности $\rho(x_r, x_i)$ для бесконечно высокой прямоугольной потенциальной ямы при $n = 1$.

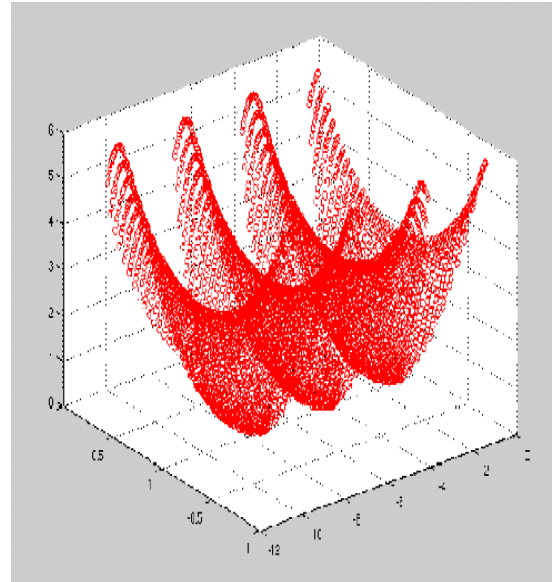


Рисунок 4. Расширенная плотность вероятности $\rho(x_r, x_i)$ для задачи о потенциальном барьере в области, где $V = 0$.

4 Метод нахождения ρ путем интегрирования по траектории

Может показаться, что два вышеописанных подхода к вероятности (первый из которых дает вероятность Борна $\Psi^* \Psi$ вдоль действительной оси с помощью уравнения (6), а второй – сохраняющуюся плотность вероятности на всей $x_r x_i$ -плоскости путем решения уравнения сохранения) не имеют ничего общего. Но в этом разделе мы покажем, что имеется еще более элегантный способ нахождения $\rho(x_r, x_i)$ путем объединения этих подходов. Этот метод может быть также полезным при нахождении вариации вероятности вдоль любой траектории.

Прежде всего, мы постулируем, что если задана расширенная плотность вероятности ρ_0 в некоторой точке (x_{r0}, x_{i0}) , то $\rho(x_r, x_i)$ в другой точке, принадлежащей траектории, которая проходит через (x_{r0}, x_{i0}) , равна

$$\rho(x_r, x_i) = \rho_0 \exp \left[\frac{-4}{\hbar} \int_{t_0}^t \text{Im} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \right) dt' \right]. \quad (25)$$

Здесь интеграл берется вдоль траектории $[x_r(t'), x_i(t')]$. Используя расширенную версию уравнения Шредингера, можно вывести уравнение непрерывности, что дает

$$\text{Im}(E) = \text{Im} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) + \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} \right) = 0, \quad (26)$$

поскольку энергия и время предполагаются действительными [1]. Это позволяет написать вышеуказанное определение (25) в виде

$$\rho(x_r, x_i) = \rho_0 \exp \left(-2 \int_{t_0}^t \frac{\partial \dot{x}_r}{\partial x_r} dt' \right), \quad (27)$$

что, в свою очередь, дает

$$\frac{d\rho}{dt} = -2 \frac{\partial \dot{x}_r}{\partial x_r} \rho = - \left(\frac{\partial \dot{x}_r}{\partial x_r} + \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} \right) \rho. \quad (28)$$

Последний шаг следует из аналитичности $\dot{x}$. Это приводит к уравнению непрерывности для частицы, как если бы она двигалась вдоль траектории: т.е.,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \dot{x}_r)}{\partial x_r} + \frac{\partial(\rho \dot{x}_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (29)$$

Выше, при оценке ρ с помощью (25), было необходимо знать ρ_0 в точке (x_{r0}, x_{i0}) , и если мы выбирали в качестве (x_{r0}, x_{i0}) точку пересечения траектории на реальной оси, то ρ_0 могла принимать значение $P(x_{r0})$ и ее можно было найти с помощью (6). Здесь следует помнить, что что интеграл для $P(x_{r0})$ оценивается только по действительной оси.

Подытоживая этот альтернативный метод, отметим, что сохраняющаяся, расширенная плотность вероятности равна

$$\rho(x_r, x_i) \propto \exp \left(-\frac{2m}{\hbar} \int_{x_{r0}}^{x_r} \dot{x}_i dx_r \right) \exp \left[\frac{-4}{\hbar} \int_{t_0}^t \text{Im} \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \right) dt' \right], \quad (30)$$

где первый интегральный множитель, вычисляется вдоль действительной оси, а второй – по всей траектории частицы. Этот метод легче использовать при численных расчетах на компьютере.

Мы теперь можем продемонстрировать этот метод интегральной траектории, применив его к состоянию гармонического осциллятора с $n = 1$. В этом случае, принимая численные значения как α , так и ω равными единице (тогда остается лишь $\hbar/m$), легко увидеть, что [1]

$$x_r = \pm \sqrt{(1 + A \cos 2t) \pm \sqrt{1 + A^2 + 2A \cos 2t}} / \sqrt{2} \quad (31)$$

и

$$x_i = \frac{A \sin 2t}{2x_r}. \quad (32)$$

Здесь можно написать, что $P(x_{r0}) = (1 + A) \exp(-(1 + A))$. Находя с помощью вышеприведенных соотношений x_r и x_i , получаем численную оценку

$$\rho(x_r, x_i) = P(x_{r0}) \exp \left(-4 \int_0^t \frac{x_r x_i}{(x_r^2 + x_i^2)^2} dt \right). \quad (33)$$

для различных A и t . Это дает то же расширенное распределение, что и описываемое уравнением (21) и показанное на рис. 2 при $A > 1$. Более точно, в этом случае, поскольку уравнения (9) и (30) должны соответствовать одно другому, графики поверхности $h(x_r, x_i) = (x_r^2 + x_i^2)$ и выражение

$$(1 + A) \exp \left(-4 \int_0^t \frac{x_r x_i}{(x_r^2 + x_i^2)^2} dt \right),$$

при различных значениях A , t но изображенные для x_r и x_i , оцененных с помощью уравнений (31) и (32), должны быть одинаковыми. Установлено, что так оно и есть, и это показывает, что оба эти метода оценки вероятности дают одинаковые результаты.

5 Обсуждение

Представление с комплексными квантовыми траекториями представляет ценность, в основном, с точки зрения альтернативной интерпретации стандартной квантовой механики. Стандартная квантовая теория впечатляюще успешна при объяснении всех наблюдений, осуществленных до настоящего времени, и нет оснований для модификации аксиомы квантовой вероятности. Новое представление с комплексными траекториями не отличается от стандартной квантовой механики с точки зрения предсказания результатов эксперимента. Это обеспечивается принятием аксиомы вероятности Борна как таковой в новой теории вдоль действительной оси. Квантовая плотность вероятности, хотя и не признается полностью понятой, чудесным образом хорошо работает. В настоящей статье мы

выводим это распределение вдоль действительной оси, исходя из поля скоростей частиц в представлении с комплексными траекториями.

Ее сохранение на действительной оси гарантируется в стандартной квантовой механике благодаря уравнению Шредингера, и нет необходимости в каком-либо отдельном доказательстве для представления с комплексными траекториями. Что мы пытаемся сделать дальше, так это расширить ее на комплексную плоскость, где она должна подчиняться законам сохранения, как любая другая вероятностная функция. Мы очень надеемся обнаружить такую плотность вероятности на комплексной плоскости, что даст нам ключ к этому распределению.

Здесь мы вначале установили стратегию решения уравнения сохранения на $x_r x_i$ -плоскости, с полем скоростей, даваемым уравнением (2), которое применимо к одномерным, не зависящим от времени состояниям частицы. В ходе этой попытки достигнуто значительное улучшение в нашем понимании природы квантовой вероятности. Мы уже отмечали, что характеристические кривые уравнения сохранения, вдоль которых распространяется информация о решении, оказываются теми же, что и пути частицы в представлении с комплексными траекториями. Наиболее замечательные результаты, полученные нами, состоят в том, что может существовать расширенная, сохраняющаяся вероятность $\rho(x_r, x_i)$, которая согласуется с правилом квантовой вероятности вдоль действительной оси, и что она может быть выведена из поля скоростей частиц. В некоторых случаях существуют части плоскости, где такая вероятность отсутствует. Но в тех случаях, где она может существовать, мы находим, что $\rho(x_r, x_i)$ может быть представлена в виде произведения двух множителей; первый – $[f(x_{r0})]$, постоянный вдоль данного комплексного пути, и второй – $[h(x_r, x_i)]$, зависящий от скорости частицы, как если бы она двигалась вдоль этого пути. В частности, мы отмечаем, что правило вероятности Борна $\Psi^* \Psi \equiv P(x_r)$ само по себе, которое действительно на действительной оси, может быть записано в виде произведения, как сформулировано выше. С другой стороны, при альтернативном методе оценки расширенной вероятности $\rho(x_r, x_i)$ оказывается умноженным на $P(x_{r0})$ экспоненциальным множителем, который содержит зависящий от времени интеграл вдоль траектории, мнимой части суммы комплексной кинетической и потенциальной энергий частицы. В результате сравнения двух методов получения расширенной плотности вероятности было установлено, что они дают идентичные результаты. Последний метод интеграла по траектории легче для применения на компьютере и, в частности, может быть полезен при решении квантовых уравнений Гамильтона-Якоби для одиночных частиц.

Решения, которые мы получили для комплексной плоскости, не совпадают с теми, которые вытекают из правила $\Psi^* \Psi$, за исключением тех случаев, когда потенциал постоянен, обсуждавшихся в разделе (4). Следует отметить, что ρ определена только в этой области $x_r x_i$ -плоскости, где проходят характеристические кривые, пересекающие действительную ось. Во всех других точках ρ предполагается нулевой. Расширенная вероятность может быть нормирована в этом базисе. Описываемое представление также предлагает ту точку зрения, что частица наблюдаема только когда она находится на действительной оси. $P(x_r)$ является вероятностью для таких “появлений” и должна использоваться при вычислениях

измеримых величин. На этом пути все стандартные результаты квантовой механики остаются неизменными.

Что более важно, мы видели, что определение (25) расширенной плотности вероятности ведет к уравнению непрерывности (29), если использовать комплексное расширение уравнения Шредингера. Это определение ρ может, таким образом, иметь общую справедливость. Но здесь ρ является действительной функцией x_r и x_i , не подчиняющейся уравнениям Коши-Римана, и, следовательно, не аналитична на комплексной x -плоскости.

Может быть отмечено, что при нашей попытке добиться лучшего понимания природы правила квантовой вероятности, в ходе которого мы предприняли некоторый поиск, эта неаналитичность не составляла проблемы. Работа [18] энергично защищает аналитическое выражение для ρ ввиду его ожидаемых преимуществ в синтетических применениях зависящего от времени уравнения Шредингера. Но как показано, определение из работы [18] не приводит к уравнению сохранения, и оценивается нами как отрицательный результат. Является ли наше определение расширенной вероятности, приводимое в данной статье и подчиняющееся уравнению непрерывности, полезным в синтетических приложениях – этот вопрос открытый и подлежащий исследованию.

В заключение подытожим положительные и отрицательные особенности такого возможного определения квантовой плотности вероятности в комплексном пространстве по сравнению с распределением, описанном в [18]. Во-первых, мы видим, что наше определение помогает нетривиальным образом получить плотность вероятности Борна $\Psi^*\Psi$ вдоль действительной оси, исходя из поля скоростей и формализма комплексных траекторий. С другой стороны, распределение в [18] является просто аналитическим продолжением $\Psi^*\Psi$ и, следовательно, согласие обеспечивается тривиально. Во-вторых, наше определение плотности вероятности для частицы находится в окрестности некоторой точки ее траектории, как если бы она двигалась вдоль нее, подчиняется уравнению сохранения. Напротив, в [18] было показано, что определенная там плотность вероятности в общем случае не сохраняется. Далее, при решении уравнения сохранения мы отметили, что ρ может быть представлено в виде произведения двух сомножителей, один из которых оказывается постоянным вдоль траектории. Это свойство было выведено в процессе попытки решить уравнения сохранения и является следствием того факта, что траектории и характеристические кривые уравнения сохранения идентичны в представлении с комплексными траекториями. Этот факт не имеет параллели с плотностью вероятности, предложенной в [18].

Отрицательным аспектом предлагаемого формализма является то, что плотность вероятности не является аналитической функцией на комплексной плотности, что заставляет усомниться в ее пригодности для синтетических решений. Это еще одно отличие предлагаемого распределения от аналитического, исследуемого в [18]. Еще раз отметим, что для нашей попытки понять природу правила квантовой вероятности в рамках представления с комплексными траекториями указанная неаналитичность не составляет никакой проблемы. Но комплексная вероятность, которая появляется в [18] вне действительной оси, может оказаться нежелательным фактом и создать определенные проблемы, даже если она и удовлетворяла бы уравнению сохранения. Таким образом, заключение о большей желательности свойства аналитичности или действительности для плотности вероятности при синтетических приложениях может быть сделан только

по мере дальнейшего прогресса в использовании предлагаемого формализма для таких приложений.

Благодарности

Нам приятно поблагодарить эксперта по новым идеям профессора K. Babu Joseph, Arun и Joe за обсуждение и Santhom Computing Facility за радушие.

Ссылки

- [1] M.V. John, *Found. Phys. Lett.* 15 (2002) 329.
- [2] G. Wentzel, *Z. Phys.* 38 (1926) 518; W. Pauli, in: H. Geiger, K. Scheel (Ed.), *Handbuch der Physik*, 2nd ed., Vol. 24, part 1, Springer-Verlag, Berlin, 1933, pp. 83-272; P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, London, 1958.
- [3] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1980.
- [4] R.A. Leacock, M.J. Padgett, *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 3; R.A. Leacock, M.J. Padgett, *Phys. Rev. D* 28, (1983) 2491.
- [5] R.S. Bhalla, A.K. Kapoor, P.K. Panigrahi, *Am. J. Phys.* 65 (1997) 1187; R.S. Bhalla, A.K. Kapoor, P.K. Panigrahi, *Mod. Phys. Lett. A* 12 (1997) 295.
- [6] D. Bohm, B.J. Hiley, *The Undivided Universe*, Routledge, London and New York, 1993; P. Holland, *The Quantum Theory of Motion*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 1993.
- [7] E.R. Floyd, *Phys. Rev. D* 26 (1982) 1339; E.R. Floyd, *Phys. Rev. D* 25 (1982) 1547; E.R. Floyd, *Phys. Rev. D* 29 (1984) 1842; E.R. Floyd, *Phys. Rev. D* 34 (1986) 3246; E.R. Floyd, *Found. Phys. Lett.* 9 (1996) 489; E.R. Floyd, *Found. Phys. Lett.* 13 (2000) 235; E.R. Floyd, *Int. J. Mod. Phys. A* 14 (1999) 1111.
- [8] A. Faraggi, M. Matone, *Phys. Lett. B* 450 (1999) 34; A. Faraggi, M. Matone, *Phys. Lett. B* 437 (1998) 369; A. Faraggi, M. Matone, *Phys. Lett. B* 445 (1999) 77; A. Faraggi, M. Matone, *Int. J. Mod. Phys. A* 15 (2000) 1869.
- [9] R. Carroll, *Quantum Theory, Deformation, and Integrability*, North Holland, 2000.
- [10] C.-D. Yang, *Ann. Phys. (N.Y.)* 319 (2005) 339; C.-D. Yang, *Int. J. Quantum Chem.* 106 (2006) 1620; C.-D. Yang, *Ann. Phys. (N.Y.)* 319 (2005) 444; C.-D. Yang, *Chaos, Solitons Fractals* 30 (2006) 342.
- [11] C.-C. Chou and R.E. Wyatt, *Phys. Rev. E* 74 (2006) 066702; C.-C. Chou and R.E. Wyatt, *J. Chem. Phys.* 125 (2007) 174103.
- [12] R.E. Wyatt, *Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics*, Springer, New York, 2005.
- [13] Y. Goldfarb, I. Degani, D.J. Tannor, *J. Chem. Phys.* 125 (2006) 231103.
- [14] A.S. Sanz, F. Borondo, S. Miret-Artes, *J. Phys.: Condens. Matter* 14 (2002) 6109.
- [15] A.S. Sanz, S. Miret-Artes, *Chem. Phys. Lett.* 445 (2007) 350.
- [16] A.S. Sanz, S. Miret-Artes, *J. Chem. Phys.* 127 (2007) 197101.
- [17] Y. Goldfarb, I. Degani, D.J. Tannor, *J. Chem. Phys.* 127 (2007) 197102.
- [18] B. Poirier, *Phys. Rev. A* 77 (2008) 022114.
- [19] K.F. Riley, M.P. Hobson, S.J. Bence, *Mathematical Methods for Physics and Engineering*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997 p.526.
- [20] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley Longman, Singapore, 1994 p. 104