ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 26 за 2019 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

В.В. Веденяпин, Н. И. Караваева,
О.А. Костюк, Б.Н. Четверушкин

Уравнение Шредингера как следствие новых уравнений типа Власова

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Уравнение Шредингера как следствие новых уравнений типа Власова / В.В. Веденяпин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 26. 11 с. **https://doi.org/10.20948/prepr-2019-26**
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-26

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

В.В.Веденяпин, Н.И.Караваева, О.А.Костюк,
Б.Н.Четверушкин

Уравнение Шредингера как следствие новых уравнений типа Власова

Москва — 2019

Веденяпин В.В., Караваева Н.И., Костюк О.А., Четверушкин Б.Н.

Уравнение Шредингера как следствие новых уравнений типа Власова

Уравнение Шредингера приводится к уравнению Гамильтона–Якоби, как известно, в рамках механики Бома. В работе были предложены новые уравнения типа Власова, из которых получаются уравнения типа Гамильтона-Якоби. Также исследуются их стационарные решения.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, уравнения типа Власова, стационарные решения

Victor Valentinovich Vedenyapin, Nataliia Igorevna Karavaeva, Oksana Aleksandrovna Kostiuk, Boris Nikolaevich Chetverushkin

Schrödinger equation as a consequence of new Vlasov type equations

It is well known that the Schrödinger equation can be reduced to the Hamilton–Jacobi equation in Bohmian mechanics. New Vlasov-type equations were proposed, from which Hamilton-Jacobi type equations are derived. Also their stationary solutions are investigated.

Key words: Schrödinger equation, equations of the Vlasov and Lamb types, stationary solutions

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства образования и науки РФ по программе повышения конкурентоспособности РУДН 5–100 среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2016–2020 гг. и при поддержке программы Президента РАН № 01 “Фундаментальная математика и её приложения” (грант PRAS-18-01).

Оглавление

1. Уравнение Шредингера, уравнение типа Лэмба и уравнения типа Власова

Рассмотрим классическое уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(x)\psi. \qquad (1)$$

Как известно, подстановка ([1], [2])

$$\psi(x,t) = \sqrt{\rho}\exp\left(i\frac{S(x,t)}{\hbar}\right) \qquad (2)$$

для скалярных функций $\rho(x,t) \geq 0$, $S(x,t)$ приводит к следующей системе:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{m}\mathrm{div}(\rho\nabla S) = 0, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = 0. \qquad (4)$$

Здесь Δ – оператор Лапласа.

Бом предложил интерпретировать уравнение (4) как уравнение Гамильтона–Якоби для обычной классической частицы, которая находится в суперпозиции двух полей с потенциалами $U(x)$ [1,2] и $P = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}$.

В работах И.С.Аржаных [18] и В. В. Козлова [2, 17] было показано, что уравнение Гамильтона–Якоби может быть получено из уравнений типа Лэмба. В данном случае может быть написано аналогичное уравнение типа Лэмба (5), из которого подстановкой $Q = \nabla S$ получится (3), (4):

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{Q_i}{m}\frac{\partial Q}{\partial x_i} = -\nabla U + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}, \qquad (5)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{m}\mathrm{div}(\rho Q) = 0. \qquad (6)$$

Уравнение (5) было получено в связи с уравнением (4) и уравнением Шредингера ещё Маделунгом [25], что предвосхитило связь уравнений типа Лэмба и уравнений типа Гамильтона–Якоби по Аржаных и Козлову. Вся эта тематика развивалась Давидом Бомом [22–24] и даже получила название механики Бома [1, 16].

В свою очередь, как показано в работах [3–5], такие системы гидродинамического типа получаются из уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\left(v,\frac{\partial f}{\partial x}\right)-\left(\nabla U+\nabla P,\frac{\partial f}{\partial v}\right)=0, \tag{7}$$

$$P=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}. \tag{8}$$

(Здесь $f(t,v,x)$ – функция распределения частицы по скоростям $v\in R^3$ и пространству $x\in R^3$) с помощью гидродинамической подстановки

$$f(t,v,x)=\rho(x,t)\delta(v-Q(x,t)).$$

Методически этот прием совпадает со способом получения уравнений идеальной магнитной газовой динамики из кинетического уравнения с помощью процедуры, аналогичной процедуре Чепмена–Энскога [6]. С этой целью вводится аналог локально-максвелловской функции.

$$f_M(t,v,x)=\frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}}\exp\left(-\frac{(v-u-iB/\sqrt{4\pi\rho})^2}{2RT}\right),$$

где $T(x,t)$ – температура, R – газовая постоянная, v и $u(x,t)$ соответственно скорость молекулы и макроскопическая скорость, $B(x,t)$ – напряженность магнитного поля, i – мнимая единица, $v_\alpha(x,t)=B(x,t)/\sqrt{4\pi\rho(x,t)}$ – альфвеновская скорость. При температуре, стремящейся к нулю, это максвелловское распределение переходит в вышеуказанную гидродинамическую подстановку.

Подобный подход позволяет строить вычислительные алгоритмы, адаптируемые к архитектуре систем с экстрамассивным параллелизмом [7]. Его использовали для моделирования 3D астрофизических явлений на пространственной сетке, состоящей из более 10^9 узлов [8].

Все переходы от системы (7–8) к системе (5–6) и далее к (3–4) точные, поэтому удобно проследить более общую подстановку [3–5,9,10] в (7)

$$f(t,v,x)=\sum\rho_i(x,t)\delta(v-Q_i(x,t))$$

или даже

$$f(t,v,x)=\int\rho(x,s,t)\delta(v-Q(x,s,t))ds,$$

где для каждой пары функций $(\rho_i(x,t), Q_i(x,t))$ или $(\rho(x,s,t), Q(x,s,t))$ получаются описанные (5–6) уравнения. Соответственно, систему (7–8) можно интерпретировать как систему уравнений типа уравнения Власова, где U – внешнее поле, а самосогласованный потенциал задается неклассическим образом (8). Следовательно, уместно сравнить систему (7–8) с классическим уравнением Власова [9, 19–21].

2. Уравнение Власова–Пуассона и его стационарные решения

Уравнение Власова–Пуассона может быть записано в виде [9,11–12]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_i}{\partial t} + \left(v, \dfrac{\partial f_i}{\partial x}\right) - \dfrac{e_i}{m_i}\left(\nabla\varphi, \dfrac{\partial f_i}{\partial v}\right) = 0, \\ \Delta\varphi = -\sum 4\pi e_i \int f_i(t,v,x)\,dv. \end{cases} \tag{9}$$

Рассмотрим подстановку [5,9,11–12] (энергетическая подстановка, которая сводит систему (9) к нелинейному эллиптическому уравнению)

$$f_i(v,x) = g_i\left(\frac{m_i v^2}{2} + e_i\varphi\right).$$

Тогда первое уравнение системы (9) удовлетворяется, и мы получаем эллиптическое уравнение

$$\Delta\varphi = \psi(\varphi),$$

где $\psi(u) = -\sum 4\pi e_i \int g_i\left(\dfrac{m_i v^2}{2} + e_i\varphi\right) dv$.

Если $v \in R^d$, то $\psi'(u) \geq 0$ при $d \geq 2$ или если $g_i' \leq 0$ [5,11–12]. Тогда граничная задача корректна, и мы имеем также отсутствие периодических решений.

Пусть, однако, мы имеем одномерную задачу, когда потенциал $\varphi(x)$ и функция распределения зависят только от одной пространственной переменной x_1: $\varphi(x) \geq \Phi(x_1)$, $f(x,v) = F(x_1,v)$. В этом случае мы можем перейти к одномерной и по v системе для функции

$$G(x_1,v_1) = \int F(x_1,v_1,v_2,v_3)\,dv_2 dv_3.$$

В этом случае существуют нетривиальные периодические решения по x_1, которые называются волнами Бернштейна–Грина–Крускула (БГК):

$$G_i(x_1, v_1) = g_i\left(\frac{mv_i^2}{2} + \varphi(x_1)\right).$$

При этом функции $g_i(E)$ не могут быть монотонно убывающими, например, максвелловскими распределениями, а должны быть, например, вида $\delta(E - E_0)$. Все это налагает значительные ограничения на поведение функций распределения, которые дают волны БГК и которые сейчас хотят получить экспериментально. Трудности здесь заключаются и в том, что среда не может быть квазинейтральной.

3. Получение стационарных решений

Теперь исследуем, насколько глубока внешняя похожесть уравнения Власова–Пуассона (9) и системы (7–8). В теории уравнения Власова есть три классические подстановки: энергетическая, гидродинамическая и микроскопическая [5,9–12, 20–21]. Гидродинамическая подстановка как раз была использована (обратным ходом) из уравнений де Бройля–Маделунга–Бома (3–4) при получении из (5–6) системы (7–8). Микроскопическая подстановка [5,9] в виде суммы дельта функций в уравнения типа Власова даёт уравнения движения многих тел или даже континуума тел, что показывает фундаментальность уравнений типа Власова. Именно эта подстановка не проходит в уравнении (8). Но энергетическая подстановка, которая была описана в предыдущем пункте, проходит. Используем эту методику для получения стационарных решений системы (7–8). Полагая в (7–8) функцию распределения в виде функции только от энергии, как и в предыдущем пункте, удовлетворяем уравнению (7), а (8), вместе с определением плотности как интеграла функции распределения по скоростям, даёт уравнение на $\rho : \rho = \xi(U, \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}})$, где U – заданное внешнее поле, а

$$\xi(U, \frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}) = \int g\left(\frac{mv^2}{2} + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right)dv. \qquad (10)$$

Перепишем это уравнение, положив $\frac{mv^2}{2} = u$, d – размерность пространства скоростей

$$\rho = C_d \int_0^\infty g\left(u + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right) u^{\frac{d-2}{2}} du. \qquad (11)$$

Для уравнения Шредингера очень важны именно стационарные решения уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi = \lambda\psi. \qquad (12)$$

4. Новые уравнения

Перепишем (10) точнее.

$$\rho = \xi\left(U - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right), \qquad (13)$$

где $\xi(E) = \int g\left(\frac{mv^2}{2} + E\right)dv$.

Обращая это уравнение, получим уравнение Шредингера с нелинейной добавкой, $\rho = |\psi|^2$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = \psi\xi^{-1}(|\psi|^2). \qquad (14)$$

Пусть в (13) $g(\varepsilon) = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)$ – максвелловское распределение. Тогда $\xi(E) = C\exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$, где $C \neq C(E),\ C = C(kT)$.

Обратим полученную функцию $\rho = \xi(E)$ и подставим в (14):

$$E = -\frac{\ln(\rho / C)}{kT},$$

$$-\frac{h^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = -\psi\frac{\ln(|\psi|^2 / C)}{kT}. \qquad (15)$$

Проанализируем вопрос, когда правая часть уравнения (14) представляет собой константу

$$\psi\xi^{-1}(|\psi|^2) = const.$$

Это даст решение $\rho = \xi(E) = \frac{const^2}{E^2}$.

Рассмотрим подстановку $g(E) = \delta(E - E_0)$ в (11) при d=1,2,3:

$$d=1:\ \ \rho = C_1\left(E_0 - U(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right)^{-1/2}\cdot\Theta\left(E_0 - U(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right), \tag{16}$$

$$d=2:\ \ \rho = C_2\cdot\Theta\left(E_0 - U(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right), \tag{17}$$

$$d=3:\ \ \rho = C_3\left(E_0 - U(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right)^{1/2}\cdot\Theta\left(E_0 - U(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}\right), \tag{18}$$

где $\Theta(E_0 - E) = \begin{cases} 0, & E_0 < E \\ 1, & E_0 \ge E \end{cases}$ – функция Хевисайда, $E = U(x) - \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}}$. Тогда выражения (16–18) примут вид

$$d=1:\ \ \rho = C_1\left(E_0 - E\right)^{-1/2}\cdot\Theta\left(E_0 - E\right), \tag{19}$$

$$d=2:\ \ \rho = C_2\cdot\Theta\left(E_0 - E\right), \tag{20}$$

$$d=3:\ \ \rho = C_3\left(E_0 - E\right)^{1/2}\cdot\Theta\left(E_0 - E\right). \tag{21}$$

Выражения для ρ качественно различны в зависимости от размерности пространства скоростей.

Функции (19,21) можно обратить при условии неотрицательности аргумента $\Theta(E_0 - E)$. Выражая $E = \xi^{-1}(\rho)$ из (19) и подставляя в (14), получим уравнение Шредингера следующего вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = \psi\left(E_0 - \frac{C_1^2}{|\psi|^4}\right). \tag{22}$$

Аналогично для (21)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = \psi\left(E_0 - \frac{|\psi|^4}{C_3^2}\right). \tag{23}$$

Эти уравнения похожи на уравнения Шредингера при переобозначении $\sqrt{\rho} = \psi$. Заметим, что эта величина действительна, хотя и незнакоопределена для уравнения Шредингера.

Было бы интересно сравнить, что получается из известных решений уравнения Шредингера (12) для уравнений (7,8,10,11): это могло бы стать источником новых решений нелинейных уравнений. Наоборот, интересно было бы получить ограниченные решения уравнения Шредингера (12) из уравнения (11). Можно ли получить такие решения в квантовомеханичеких экспериментах? Значат ли они что-нибудь в квантовой механике?

5. Заключение

Наша интерпретация механики Бома и уравнения Шредингера как самосогласованного поля продолжает линию Маделунга–Бома [1] и позволяет избежать многих вопросов в интерпретации квантовой механики, и поэтому уравнения (7–8) и (5–6) могут оказаться фундаментальными. Например, на фазовой плоскости получается яркая визуализация принципа неопределенности. Если в начальный момент времени мы возьмём квадратик (в одномерном случае) с площадью, равной постоянной Планка (когда неравенство Гейзенберга принципа неопределённости превращается в равенство), то эволюция в силу кинетического уравнения (7–8) превратит этот квадратик в кривую, растянутую вдоль линии уровня энергии, а равенство Гейзенберга превратится в неравенство. Следует признать аналогию с уравнением Власова неполной: хотя энергетическая подстановка проходит, неясно, дадут ли новые решения что-нибудь новое для квантовой механики. Кроме того, не проходит важнейшая в уравнении Власова микроскопическая подстановка: при такой подстановке в уравнение Власова аргументы удовлетворяют уравнениям движения многих тел, а для уравнения Лиувилля – исходному уравнению, из которого уравнение Лиувилля получено. Интересно исследовать вопрос о возрастании энтропии и связанный с этим вопрос о совпадении временных средних и экстремалей Больцмана [12–15] как для уравнения Власова, так и для новой системы (7–8). Этот круг вопросов весьма интересен, может быть, не только с математической точки зрения. Краткий вариант статьи был опубликован в [26].

Литература

1. *Durr D., Tuefel S.* Bohmian Mechanics // Springer – Verlag, Berlin, Heidelberg, 2009.
https://link.springer.com/chapter/10.1007/b99978_8
2. *Козлов В.В.* Общая теория вихрей. М.–Ижевск, 2013.
3. *Веденяпин В.В. Фимин Н.Н.* Уравнение Лиувилля, гидродинамическая подстановка и уравнение Гамильтона–Якоби // Доклады РАН, 446:2 (2012), С. 142–144.
4. *Веденяпин В.В., Негматов М.А.* О топологии гидродинамических и вихревых следствий уравнений Власова и метод Гамильтона–Якоби // Доклады РАН, 449:5 (2013), С. 521–526.
5. *Веденяпин В.В., Фимин Н.Н., Негматов М.А.* Уравнения типа Власова и Лиувилля, их микроскопические, энергетические и гидродинамические следствия // *Изв. РАН. Сер. матем.*, **81**:3 (2017), 45–82; *Izv. Math.*, **81**:3 (2017), 505–541
http://mi.mathnet.ru/izv8444
6. *Chetverushkin B.N., D'Ascenzo N., Ishanov S., Saveliev V.* Hyperbolic type explicit kinetic scheme of magneto gas dynamics for high performance computing systems // Russian Journ. Numer. Analys Math. Modeling. 2015. V 30, № 1, pp. 27–36.
7. *Четверушкин Б.Н.* Кинетические модели для решения задач механики сплошной среды на суперкомпьютерах // Математическое моделирование. Т. 27. № 5. 2015. СС. 65–79.
http://mi.mathnet.ru/mm3600
8. *Chetverushkin B.N., Ascenzo D, Saveliev A., Saveliev V.* Novel kinetically consistent algoritm for magneto gas dynamics // Applied Mathematics Letters. 2017. 72. pp. 75–81
9. *Власов А.А.* Нелокальная статистическая механика // М.: Наука, 1978.
10. *Захаров В.Е., Кузнецов Е.А.* Гамильтоновский формализм для нелинейных волн // УФН 167 1137–1167 (1997)
http://mi.mathnet.ru/ufn1388
11. *Веденяпин В.В.* О стационарных решениях уравнения Власова–Пуассона // Доклад АН. СССР, 290:4 (1986). С. 777–780.
12. *Веденяпин В.В.* О классификации стационарных решений уравнения Власова на торе и граничная задача // Доклады АН. СССР, 323:6 (1992), С. 1004–1006.
13. *Веденяпин В.В.* Временные средние и экстремали по Больцману // Докл. РАН, 422:2, (2008), 161–163.
14. *Аджиев С.З., Веденяпин В.В.* Временные средние и экстремали Больцмана для марковских цепей, дискретного уравнения Лиувилля и круговой модели Каца // Журн. вычисл. матем. и матем. физ.,51:11 (2011), 2063–2074.
http://mi.mathnet.ru/zvmmf9576

15. *Веденяпин В.В., Аджиев С.З.* Энтропия по Больцману и Пуанкаре // УМН, 69:6(420) (2014), 45–80; Russian Math. Surveys, 69:6 (2014), 995–1029 http://mi.mathnet.ru/umn9635
16. Вопросы причинности в квантовой механике. Сборник переводов М. ИЛ, 1953.
17. *Козлов В.В.* Гидродинамика Гамильтоновых систем // Вестник МГУ, Сер. Мат. и мех., 6 (1983), С. 10–22.
18. *Аржаных И.С.* Поле импульсов // Издательство Наука Уз СССР, Ташкент, 1965.
19. *Власов А.А.* О вибрационных свойствах электронного газа // ЖЭТФ, 8:3 (1938), С. 291–318.
20. *Веденяпин В.В.* Кинетические уравнения Больцмана и Власова // М: физматлит, 2001.
21. *Маслов В.П.* Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана // М.: Наука, 1970.
22. *Bohm D.* Quantum Theory // Prentice Hall, New York, 1951.
23. *Bohm D.* A suggested interpretation of the quantum theory in terms of “hidden” variables I,II // Physical Review 85, 166–179, 180–193, 1952.
24. *Bohm D., Hiley B.J.* The Undivided Universe. An Ontological Interpretation of Quantum Theory // Routledge, London, 1995.
25. *Madelung E.* Quantum theory in hydrodynamic form // Zeitschrift f˙ur Physik 40, no. 3/4, 322–326, 1926.
26. *Веденяпин В.В., Казакова Т.С., Киселевская–Бабинина В.Я., Четверушкин Б.Н.* Уравнение Шредингера как самосогласованное поле // Докл. РАН, 480:3, (2018), 270–272.
27. *Веденяпин В.В., Негматов М.А*. О выводе и классификации уравнений типа Власова и магнитной гидродинамики. Тождество Лагранжа, форма Годунова и критическая масса // СМФН. 2013. Т.47. с. 5–17.
28. *Vedenyapin V., Sinitsyn A., Dulov E.* Kinetic Boltzmann, Vlasov and related equations // Elsevier, 304 p. (2011).