

УДК 530.1

## ДИНАМИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ МАРГИНАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОИЗВОЛЬНОЙ $n$ -МЕРНОЙ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ И МАРГИНАЛЬНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Я. А. Коренной, В. И. Манько

*Выведено динамическое интегродифференциальное уравнение для маргинального распределения произвольной  $n$ -мерной квантовой системы, проведено численное исследование поведения функции распределения повернутых в фазовом пространстве квадратурных компонент (маргинального распределения) для состояний атома водорода с малыми квантовыми числами  $n, l$  и  $m$ .*

Еще на заре создания квантовой механики принимались неоднократные попытки описания состояний частицы в терминах функции распределения координаты и импульса. Однако сама постановка задачи в таком виде противоречит принципу неопределенности Гейзенберга, из которого следует, что невозможно ввести функцию распределения одновременно для координаты и сопряженного ей импульса.

В недавних работах [1, 2] было предложено рассматривать квантово-динамические процессы как классические стохастические процессы, описываемые распределением вероятности – так называемым *маргинальным распределением* и показано, что это распределение полностью описывает квантовое состояние.

В данной работе мы обобщим уже известные результаты на случай квантовых систем произвольной размерности, выведем уравнение квантовой динамики в терминах маргинального распределения и изучим поведение маргинальных распределений на известном примере трехмерной квантовой системы – атоме водорода.

Следуя [3], введем  $n$ -мерный оператор квадратурной компоненты

$$\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mu}\hat{\mathbf{q}} + \hat{\nu}\hat{\mathbf{p}},$$

где  $\hat{\mu}$  и  $\hat{\nu}$  –  $n \times n$  диагональные матрицы с элементами  $\hat{\mu}_{ij} = \delta_{ij}\mu_i$ ,  $\hat{\nu}_{ij} = \delta_{ij}\nu_i$ . Величины  $\mu_i, \nu_i$  описывают преобразования поворота и сжатия в классическом фазовом пространстве. Если известна матрица плотности системы  $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$ , то можно найти характеристическую функцию  $F(\mathbf{k}, t)$ , являющуюся средним значением экспоненты  $\exp(i\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}})$ .

Маргинальное распределение  $n$ -мерной квантовой системы получается  $n$ -мерным преобразованием Фурье этой характеристической функции

$$w(\mathbf{x}, \hat{\mu}, \hat{\nu}, t) = (2\pi)^{-2n} \int F(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d^n \mathbf{k}.$$

Маргинальное распределение связано с вignerовской функцией  $W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  [4] следующим соотношением:

$$w(\mathbf{x}, \hat{\mu}, \hat{\nu}, t) = \int \exp(-i\mathbf{k}(\mathbf{X} - \hat{\mu}\mathbf{q} - \hat{\nu}\mathbf{p})) W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \frac{d^n \mathbf{k} d^n \mathbf{q} d^n \mathbf{p}}{(2\pi)^{2n}},$$

где

$$W(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \int \rho(\mathbf{q} + \mathbf{u}/2, \mathbf{q} - \mathbf{u}/2, t) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{u}} d^n \mathbf{u}.$$

Используя приведенные формулы, из уравнения Шредингера [5] для матрицы плотности  $n$ -мерной квантовой системы

$$i \frac{\partial \rho(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)}{\partial t} = (\hat{H}_{\mathbf{q}} - \hat{H}_{\mathbf{q}'}) \rho(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t)$$

после достаточно громоздких вычислений можно получить динамическое уравнение для маргинального распределения

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \mu \frac{\partial}{\partial \nu} w + 2ImU \left( i \frac{\nu_1}{2} \frac{\partial}{\partial x_1} - \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \right]^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu_1}, \dots, i \frac{\nu_n}{2} \frac{\partial}{\partial x_n} - \left[ \frac{\partial}{\partial x_n} \right]^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu_n} \right) w, \quad (1)$$

где для сокращения записи аргументы у функции  $w(\mathbf{x}, \hat{\mu}, \hat{\nu}, t)$  опущены,  $U(\mathbf{q})$  – оператор потенциальной энергии,  $\left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \right]^{-1}$  – оператор, обратный оператору  $\frac{\partial}{\partial x_i}$ .

Полученное нами уравнение является динамическим интегродифференциальным уравнением для маргинального распределения, полностью описывающего состояние

$n$ -мерной квантовой системы. В формулировке квантовой механики в терминах маргинальных распределений оно является аналогом уравнения Шредингера в формулировке квантовой механики в терминах волновой функции (матрицы плотности).

Рассмотрим поведение маргинальных распределений нескольких нижних состояний атома водорода. Для этой цели ограничимся только преобразованиями поворота в фазовом пространстве, тогда  $\hat{\mu}$  и  $\hat{\nu} - 3 \times 3$  диагональные матрицы с элементами

$$\hat{\mu}_{ij} = \delta_{ij} \cos(\phi_i), \quad \hat{\nu}_{ii} = -\delta_{ij} \sin(\phi_i),$$

где  $\phi_i$  - углы поворота.

Основное состояние атома водорода [5] описывается волновой функцией:

$$\psi_{100} = R_{10}(q_r) Y_{00}(\theta_q, \varphi_q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-q_r}.$$

Это состояние сферически симметричное, поэтому для иллюстрации поведения маргинального распределения достаточно рассмотреть вращения только в плоскости  $(q_x, p_x)$  фазового пространства. Положим углы поворота  $\phi_y = \phi_z = 0$ , тогда интегральное представление маргинального распределения этого состояния имеет вид:

$$w_{100}(x, r_{yz}, \phi_x) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dq_x du_x}{|v_x| \pi^2} \cos\left(-i \frac{u_x}{v_x} (x - \mu_x q_x)\right) \times \\ \times \exp[-((q_x + u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2} - ((q_x - u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2}], \quad (2)$$

где  $r_{yz} = \sqrt{y^2 + z^2}$ . На рис. 1 представлено распределение  $w_{100}(x, r_{yz}, \phi_x)$  как функция  $x$  для  $\phi_x = \pi/4$  и различных значений  $r_{yz}$ .

Так как  $w_{100}(x)$  - четная функция, то мы приводим ее только для положительных  $x$ . Виден достаточно сильный спад распределения. На рис. 1b представлена та же функция, но для  $r_{yz} = 0$  и различных значений  $\phi_x$ .

Волновая функция для  $n = 2, l = 0$ , и  $m = 0$  дается выражением

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-r/2} (1 - r/2).$$

Если выбрать углы поворота как  $\phi_y = \phi_z = 0$ , можно написать маргинальное распределение в интегральной форме (как и в предыдущем случае состояние сферическое и распределение зависит только от  $x, r_{yz}$ , и  $\phi_x$ )

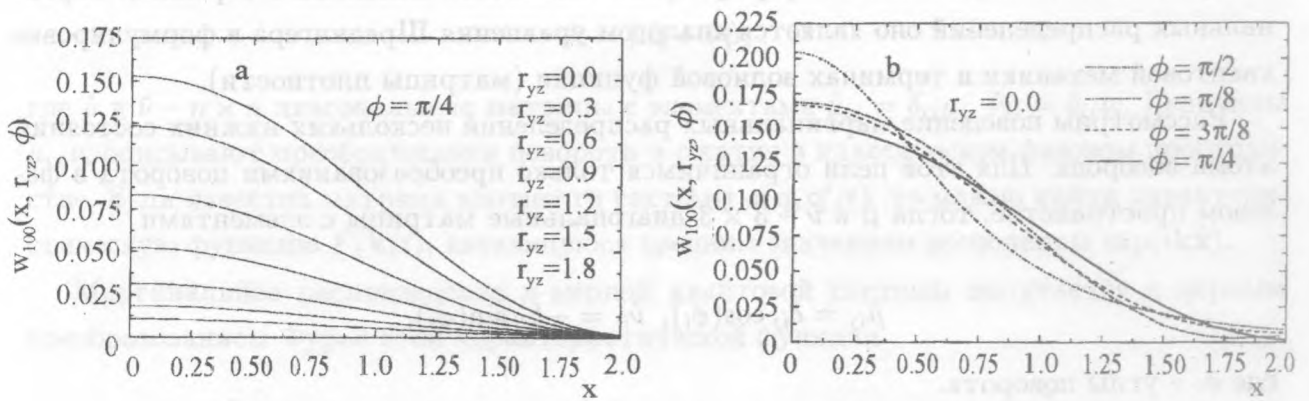


Рис. 1. Распределение  $w_{100}(x, r_{yz}, \phi_x)$  как функция  $x$  а) для  $\phi_x = \pi/4$  и различных значений  $r_{yz}$ ; б) для  $r_{yz} = 0$  и различных значений  $\phi_x$ .

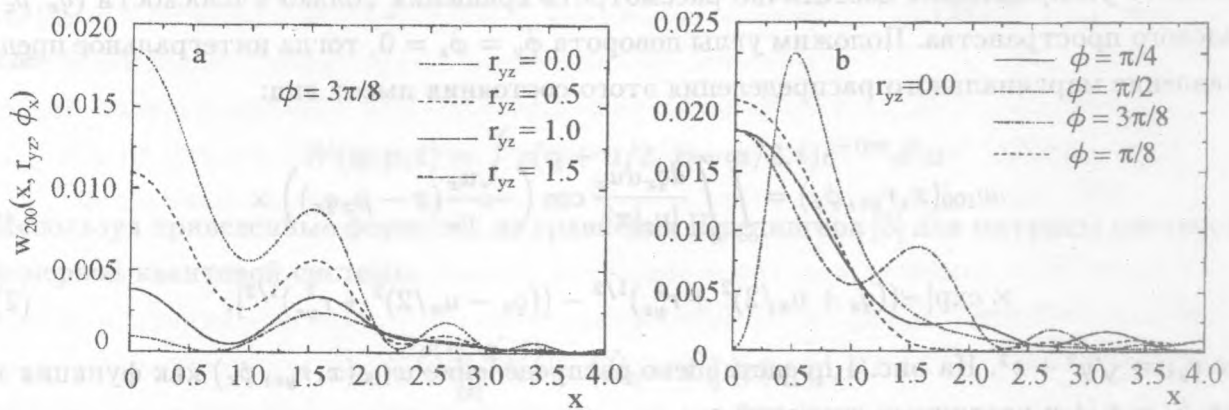


Рис. 2. Распределение  $w_{200}(x, r_{yz}, \phi_x)$  как функция  $x$  для а)  $\phi_x = \pi/4$  и различных значений  $r_{yz}$ ; б) для различных значений  $\phi_x$  и  $r_{yz} = 0$ .

$$\begin{aligned}
 w_{200}(x, r_{yz}, \phi_x) = & \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dq_x du_x}{|v_x| 8\pi^2} \cos\left(-i \frac{u_x}{v_x} (x - \mu_x q_x)\right) \times \\
 & \times [1 - ((q_x + u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2}/2][1 - ((q_x - u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2}/2] \times \\
 & \times \exp\left(-\frac{1}{2}((q_x + u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2} - \frac{1}{2}((q_x - u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2}\right). \quad (3)
 \end{aligned}$$

Результаты численных расчетов функции  $w_{200}(x, r_{yz}, \phi_x)$  приведены на рис. 2. Графики функции имеют характер затухающих осцилляций.

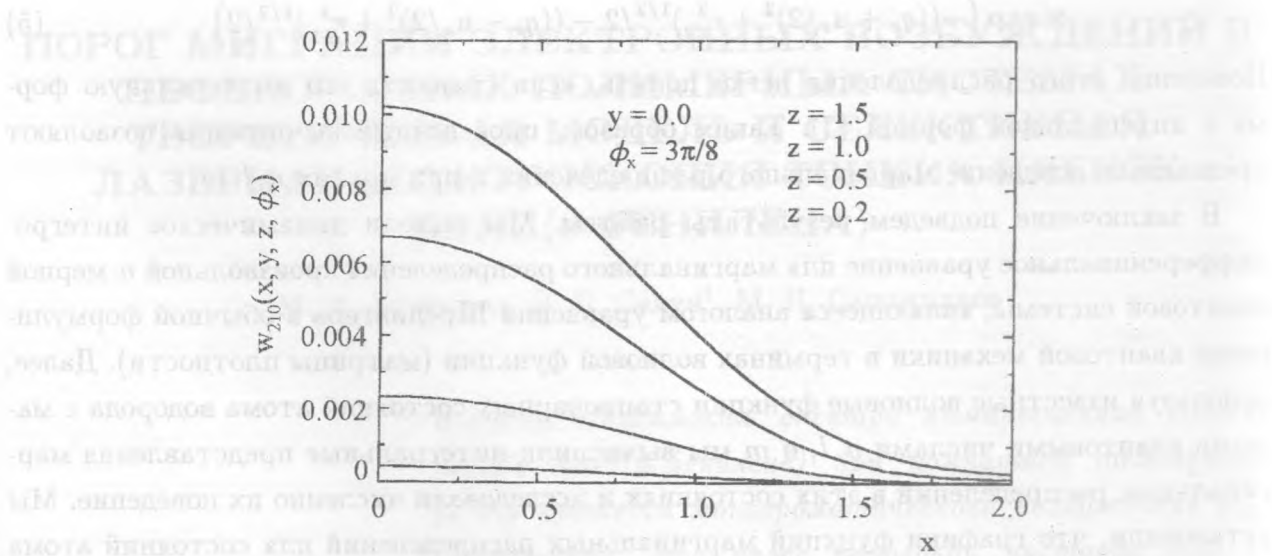


Рис. 3.  $w_{210}(x, y, z, \phi_x)$  как функция  $x$  для  $y = 0, \phi_x = 3\pi/8$ , и различных значений  $z$ .

Первое несферическое состояние атома имеет вид:

$$\psi_{210} = \frac{i}{4\sqrt{2}\pi} e^{-r/2} r \cos \theta = \frac{i}{4\sqrt{2}\pi} e^{-r/2} q_z.$$

Поведение кривых для этого случая легко понять с помощью рис. 1, если сравнить интегральное представление распределения

$$w_{210}(x, y, z, \phi_x) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dq_x du_x}{32|v_x|\pi^2} \cos\left(-i\frac{u_x}{v_x}(x - \mu_x q_x)\right) z^2 \times \\ \times \exp\left(-((q_x + u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2}/2 - ((q_x - u_x/2)^2 + r_{yz}^2)^{1/2}/2\right), \quad (4)$$

с интегральным представлением (2). На рис. 3 представлено распределение  $w_{210}(x, y, z, \phi_x)$  как функция  $x$  для  $y = 0, \phi_x = 3\pi/8$ , и различных значений  $z$ . Кривые похожи на те, что приведены на рис. 1.

Если положить  $\phi_x = \phi_y = 0$ , то интегральная форма распределения может быть представлена в виде

$$w_{210}(x, y, z, \phi_z) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dq_z du_z}{32|v_z|\pi^2} \cos\left(-i\frac{u_z}{v_z}(z - \mu_z q_z)\right) (z^2 - u_z^2/4) \times \\ \times \exp\left(-((q_z + u_z/2)^2 + r_{xy}^2)^{1/2}/2 - ((q_z - u_z/2)^2 + r_{xy}^2)^{1/2}/2\right). \quad (5)$$

Поведение этого распределения легко понять, если сравнить его интегральную форму с интегральной формой (3). Таким образом, проведенные вычисления позволяют предсказать поведение маргинального распределения и при других  $n, l, m$ .

В заключение подведем результаты работы. Мы вывели динамическое интегродифференциальное уравнение для маргинального распределения произвольной  $n$ -мерной квантовой системы, являющееся аналогом уравнения Шредингера в обычной формулировке квантовой механики в терминах волновой функции (матрицы плотности). Далее, используя известные волновые функции стационарных состояний атома водорода с малыми квантовыми числами  $n, l$ , и  $m$  мы вычислили интегральные представления маргинальных распределений в этих состояниях и исследовали численно их поведение. Мы установили, что графики функций маргинальных распределений для состояний атома водорода имеют вид затухающих осцилляций.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mancini S., Man'ko V. I., and Tombesi P. *Europhys. Lett.*, **37**, 79 (1997).
- [2] Man'ko V. I. Optical Symplectic Tomography and Classical Probability Instead of Wave Function in Quantum Mechanics, in: GROUP21. Physical Applications and Mathematical Aspects of Geometry, Groups, and Algebras. Eds.: H.-D. Doebner, W. Scherer, and C. Schultz (World Scientific, Singapore, 1997), **2**, p. 764.
- [3] Mancini S., Man'ko V. I., and Tombesi P. *Quantum Semiclass. Opt.*, **7**, 615 (1995).
- [4] Wigner E. *Phys. Rev.*, **40**, 749 (1932).
- [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика*, М., Наука, 1989.

Поступила в редакцию 15 июля 1998 г.