

ЭФФЕКТИВНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ ФУНКЦИИ ВИГНЕРА КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Е. Е. Перепёлкин^{1, 2, 3, 4, *}, *Б. И. Садовников*²,
Н. Г. Иноземцева^{3, 4}, *Е. В. Бурлаков*^{2, 4}, *Р. В. Полякова*^{1, **}

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

³ Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

⁴ Московский технический университет связи и информатики, Москва

При рассмотрении квантовых систем в фазовом пространстве используется функция Вигнера как функция квазиплотности вероятностей. Нахождение функции Вигнера связано с вычислением преобразования Фурье от некоторой композиции волновых функций соответствующей квантовой системы. Как правило, знание функции Вигнера не является конечной целью, а требуется произвести вычисления средних значений различных квантовых характеристик системы. Явное решение уравнения Шрёдингера удается получить только для узкого класса потенциалов, поэтому в большинстве случаев приходится использовать численные методы для нахождения волновых функций. В результате нахождение функции Вигнера связано с численным интегрированием сеточных волновых функций. При рассмотрении одномерной системы требуется вычисление N^2 интегралов Фурье от сеточной волновой функции. Чтобы обеспечить необходимую точность для волновых функций, соответствующих высшим состояниям квантовой системы, требуется большее число узлов сетки. Целью данной работы было построение численно-аналитического метода нахождения функции Вигнера, позволяющего существенно сократить количество вычислительных операций. В работе рассмотрены квантовые системы с полиномиальными потенциалами, для которых функция Вигнера представляется в виде ряда по некоторым известным функциям.

When considering quantum systems in the phase space, the Wigner function is used as a function of the quasi-probability density. Finding the Wigner function is related to

*E-mail: pevgeny@mail.ru

**E-mail: polykovarv@mail.ru

the calculation of the Fourier transform of a certain composition of wave functions of the corresponding quantum system. As a rule, the knowledge of the Wigner function is not the ultimate goal, and computations of the average values of different quantum characteristics of a system are required. An explicit solution of the Schrödinger equation can be obtained only for a narrow class of potentials; therefore, numerical methods to find wave functions are used in most cases. Consequently, finding the Wigner function is associated with the numerical integration of grid wave functions. When considering a one-dimensional system, it is obligatory to calculate N^2 Fourier integrals of the grid wave function. To provide the required accuracy for the wave functions corresponding to the higher states of a quantum system, a larger number of grid nodes is needed. The goal of the given work was to construct a numerical-analytical method for finding the Wigner function, which would significantly reduce the number of computational operations. Quantum systems with polynomial potentials, for which the Wigner function is represented as a series in some known functions, were considered.

PACS: 05.20.Dd; 03.65.Wj; 05.30.-d

ВВЕДЕНИЕ

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 $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ 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 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ и $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ связаны фурье-преобразованием и соответствуют координатному и импульсному представлениям.

В 1930–1932 гг. Г. Вейлем и Е. Вигнером феноменологическим способом в виде интеграла Фурье от композиции волновых функций была построена функция W квазиплотности вероятностей квантовой системы в фазовом пространстве [1, 2]. Функция W получила название функции Вигнера, а термин квазиплотность вызван наличием отрицательных значений у функции W .

Функция Вигнера может быть представлена через матрицу плотности $\hat{\rho}$:

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

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

$$\int_{(\infty)} W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3p = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad \int_{(\infty)} W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r = |\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2. \quad (\text{B.2})$$

Эволюция функции Вигнера $W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ описывается уравнением Моэля [3], которое непосредственно получается из уравнения фон Неймана для матрицы плотности $\hat{\rho}$ и в предположении, что потенциал U является аналитической функцией

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{m}(\mathbf{p}, \nabla_r)W - (\nabla_r U, \nabla_p W) = \\ = \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l (\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} U(\overleftarrow{\nabla}_r, \overrightarrow{\nabla}_p)^{2l+1} W. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Уравнение Моэля (B.3) — обобщение уравнения Лиувилля для классической функции плотности вероятностей $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. 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: $(\partial^{2l+1}W/\partial p_\lambda^{2l+1})(\partial^{2l+1}U/\partial x_\lambda^{2l+1})$. В классическом пределе при $\hbar \rightarrow 0$ и при условии ограниченности производных $(\partial^{2l+1}W/\partial p_\lambda^{2l+1})(\partial^{2l+1}U/\partial x_\lambda^{2l+1})$ уравнение Моэля (B.3) переходит в уравнение Лиувилля. Наличие ненулевой правой части в уравнении Моэля приводит к непостоянству (существованию диссипаций у квантовой системы) функции Вигнера вдоль фазовой траектории.

За последние десятилетия существенно развит математический аппарат квантовой механики в фазовом пространстве [4–18]. Функция Вигнера получила широкое применение в квантовой томографии [19–22], квантовой связи и криптографии [23, 24], квантовой информатике [25–27], в задачах обработки сигнала [28–30].

Знание функции Вигнера необходимо для вычисления средних значений характеристик квантовых систем. Для нахождения функции Вигнера (B.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 функций 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 сеточной функции, аппроксимирующей соответствующую волновую функцию Ψ_s . Для одномерной сеточной волновой функции с числом узлов N соответствующая сеточная функция Вигнера (В.1) будет иметь порядка N^2 узлов. Значения сеточной функции Вигнера в каждом из N^2 узлов вычисляются путем численного интегрирования (В.1) сеточных волновых функций. Найденная таким образом сеточная функция Вигнера требует повторного интегрирования по всему фазовому пространству для усреднения различных квантовых характеристик системы. С учетом сказанного описанная численная процедура требует большого количества вычислительных операций и контроля точности конечного результата.

Широкий класс [31–38] 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 (В.3). Простейший полиномиальный потенциал U_N — это потенциал гармонического осциллятора $U_2(x) = (m\omega^2 x^2)/2$. Для гармонического осциллятора уравнение Моэля (В.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. 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 $\{\psi_k\}$, т. е. $\Psi = \sum_{k=0}^{+\infty} c_k \psi_k$. Коэффициенты разложения c_k непосредственно находятся из уравнения Шрёдингера путем решения задачи на собственные значения для линейной алгебраической системы [39]. Такой подход требует существенно меньшего количества операций, чем, например, метод Б. В. Нумерова [40]. Подставляя разложение функции Ψ по функциям $\{\psi_k\}$ в представление функции Вигнера (В.1), можно произвести интегрирование в явном виде [41]. Найденные таким образом аналитические выражения для интегралов существенно ускорят описанную выше процедуру численного усреднения квантовых характеристик.

Предлагаемый обзор состоит из двух разделов. Разд. 1 содержит описание общих первых принципов, позволяющих связать рассмотрение классических и квантовых систем в фазовом пространстве. Первым принципом является закон сохранения вероятностей в обобщенном фазовом пространстве [42–46, 50], на основании которого А. А. Власовым была получена бесконечная самозацепляющаяся цепочка уравнений для функций плотности распределений высших кинематических величин $f_1(\mathbf{r}, t)$, $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, $f_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t)$, ... [47, 48]. В разд. 1 рассматриваются только первые два уравнения из цепочки Власова для функций распределения $f_1(\mathbf{r}, t)$ и $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Частный случай [46–48] второго уравнения Власова для функции $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ известен как уравнение Власова для самосогласованного поля и имеет широкое применение в физике плазмы, астрофизике, ускорительной физике в задачах термоядерного синтеза. В п. 1.1 рассмотрено первое уравнение Власова для функции $f_1(\mathbf{r}, t)$, которое получается из второго уравнения путем интегрирования его по пространству скоростей. Формально первое уравнение Власова для функции $f_1(\mathbf{r}, t)$ схоже с уравнением непрерывности, но имеет существенные отличия, позволяющие построить из него уравнение Шрёдингера для волновой функции $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ [45, 49, 50]. В п. 1.2 рассматривается второе уравнение Власова, которое является обобщением уравнения Моэля (В.3) для функции Вигнера. В частном случае при аппроксимации Власова–Моэля для средней кинематической величины $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle$ [39] второе уравнение Власова переходит в уравнение Моэля. В п. 1.2 описан вывод уравнения Моэля (В.3) из уравнения фон Неймана. Приводится построение функции квазиплотности вероятности $f_2(x, v)$ для квантового гармонического осциллятора непосредственно из второго уравнения Власова без введения функции Вигнера. Построенная функция $f_{2,n}(x, v)$ совпадает с известной функцией Вигнера $W_n(x, p)$, где n соответствует номеру состояния гармонического осциллятора. В п. 1.3 по функции Вигнера $W_n(x, p)$ для гармонического осциллятора получены точные выражения для средних кинематических величин $\langle \langle x^2 \rangle \rangle_n$, $\langle \langle v^2 \rangle \rangle_n$, $\langle x^2 \rangle_n(v)$, $\langle v^2 \rangle_n(x)$. Из полученных выражений видно, что дискретный энергетический спектр гармонического осциллятора $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ является средним значением энергии $\langle \langle \varepsilon \rangle \rangle_n$, 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» $\langle \langle p^2 \rangle \rangle_n/2m$ и «потенциальной» $m\omega^2 \langle \langle x^2 \rangle \rangle_n/2$ энергии. Таким образом, с позиций квантовой механики в фазовом пространстве существует бесконечное множество фазовых траекторий $\varepsilon = \text{const}$, являющихся характеристиками уравнения Моэля, а их усреднение по соответствующей функции Вигнера $W_n(x, p)$ дает известные дискретные спектры энергии.

Интересным является тот факт, что «кинетическая» энергия $T_n \sim \langle v^2 \rangle_n(x)$ как функция координаты имеет полюса в точках x_ℓ ($\ell = 1, \dots, n$),

совпадающих с нулями волновых функций ψ_n . Полюса x_ℓ расположены в области отрицательных значений функции Вигнера. Как показано в п. 1.3, благодаря отрицательным значениям функции Вигнера потенциальная яма осциллятора разбивается на несколько ям энергетическими стенками. Количество таких ям определяется номером состояния n , а положение энергетических стенок — областями отрицательных значений функции Вигнера. В каждой такой «новой» энергетической яме, по сути, существует свой осциллятор.

В п. 1.4 рассмотрен вопрос о положительности функции плотности вероятностей f_2 в фазовом пространстве. Описаны варианты построения аналога уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве для волновых функций $\Psi_2(r, p, t)$. Приведены точные решения «второго» уравнения Шрёдингера для гармонического осциллятора.

Разд. 2 посвящен представлению функции Вигнера для квантовой системы с полиномиальным потенциалом в виде разложения

$$W(x, p) = \sum_{n,k=0}^{+\infty} \rho_{k,n} w_{n,k}(x, p) = \text{Tr} [\rho \mathcal{W}(x, p)], \quad (\text{B.4})$$

где функции $w_{n,k}$ получены в явном виде через собственные функции гармонического осциллятора $\{\psi_k\}$. В п. 2.1 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, т.е. $w_{n,n}(x, p) = W_n(x, p)$. Элементы $w_{n,k}$ ($\varpi_{n,k} = n - k \neq 0$) являются комплекснозначными функциями, имеющими фазу $\varpi_{n,k}\phi$, 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 показывают степень ангармоничности квантовой системы относительно гармонического осциллятора. В п. 2.2 приведен вывод выражения для полной энергии $\langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle$ квантовой системы с полиномиальным потенциалом. Величина $\langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle$ представима в виде суперпозиции энергий $\langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n$ — состояний гармонического осциллятора (основная диагональ матрицы \mathcal{W} , $\varpi_{n,n} = 0$) и энергий смешанных состояний (верхние и нижние диагонали матрицы \mathcal{W} , $\varpi_{n,n} \neq 0$). В п. 2.3 приведено описание численного метода нахождения функции Вигнера для квантовой системы с полиномиальным потенциалом U_N . Для волновой функции Ψ_s , соответствующей состоянию с номером s , ищутся коэффициенты разложения $C^{(s)} = \{c_0^{(s)}, c_1^{(s)}, \dots, c_M^{(s)}\}$ по базису собственных функций гармонического осциллятора $\{\psi_k\}$. Количество слагаемых M в разложении определяет точность аппроксимации. Коэффициенты $C^{(s)}$ являются собственными векторами матрицы $J_{n,k} = \langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n I_{n,k}^{(0)} +$

$\sum_{l \neq 2}^N a_l I_{n,k}^{(l)}$, в которой величины $I_{n,k}^{(l)}$ известны заранее и не зависят от коэффициентов a_l потенциала U_N . Собственные значения $\mathcal{E}^{(s)}$ матрицы $J_{n,k}$ являются собственными энергиями квантовой системы с полиномиальным потенциалом U_N . Зная коэффициенты $C^{(s)}$, остается только подставить их в разложение (В.4). В качестве примера в п. 2.3 рассмотрен потенциал пятой степени U_5 , для которого получены функции Вигнера и проведен анализ их свойств.

Заключение содержит краткое обсуждение итогов обзора.

1. КЛАССИЧЕСКИЕ И КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

1.1. Первое уравнение Власова. Рассмотрим два первых уравнения из бесконечной самозацепляющейся цепочки уравнений А. А. Власова [47, 48] для функций распределений плотности вероятностей $f_1(\mathbf{r}, t)$ и $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$:

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

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

где

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{r}, t) &= \int_{(\infty)} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v, & N(t) &= \int_{(\infty)} f_1(\mathbf{r}, t) d^3 r, \\ f_1(\mathbf{r}, t) \langle \mathbf{v} \rangle(\mathbf{r}, t) &= \int_{(\infty)} \mathbf{v} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v, & (1.3) \\ f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) &= \int_{(\infty)} \dot{\mathbf{v}} f_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t) d^3 \dot{v}. \end{aligned}$$

Векторные поля $\langle \mathbf{v} \rangle(\mathbf{r}, t)$ и $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ соответствуют скорости и ускорению потоков вероятностей. Функция $N(t)$ определяет число частиц в системе, которое может быть нецелым [47, 48]. При постоянном числе частиц ($N = \text{const}$) величина N используется как нормировочный множитель при вычислении полной вероятности. Функция распределения $f_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t)$ удовлетворяет третьему уравнению Власова. Отметим, что переменные $\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, \ddot{\mathbf{v}}, \dots$ являются независимыми кинематическими величинами.

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

$$\begin{aligned} N(t)\langle\langle \mathbf{v} \rangle\rangle(t) &= \int_{(\infty)} \langle \mathbf{v} \rangle(\mathbf{r}, t) f_1(\mathbf{r}, t) d^3 r, \\ f_1(\mathbf{r}, t)\langle\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle\rangle(\mathbf{r}, t) &= \int_{(\infty)} \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v, \\ N(t)\langle\langle\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle\rangle\rangle(t) &= \int_{(\infty)} \langle\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle\rangle(\mathbf{r}, t) f_1(\mathbf{r}, t) d^3 r. \end{aligned} \quad (1.4)$$

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

Первое уравнение Власова (1.1) получается из второго уравнения (1.2) при интегрировании его по пространству скоростей с использованием соотношений (1.2) и условия достаточно быстрого стремления к нулю функций распределения на бесконечности [47, 48]. Аналогичная процедура перехода от одного уравнения к другому применима для всех уравнений из цепочки Власова.

В работах [45, 49] показано, что из первого уравнения Власова (1.1) можно построить уравнение Шрёдингера с учетом электромагнитного поля. Положительная функция плотности вероятностей $f_1(\mathbf{r}, t)$ представляется в виде:

$$f_1(\mathbf{r}, t) = |\Psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 \geq 0, \quad (1.5)$$

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

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

где α_1, γ_1 — некоторые постоянные величины. Подставлением представлений (1.5) и (1.6) в уравнение (1.1) получается уравнение [45, 49]

$$\begin{aligned} \frac{i}{\beta_1} \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} &= -\alpha_1 \beta_1 \left(\hat{p}_1 - \frac{\gamma_1}{2\alpha_1 \beta_1} \mathbf{A}_1 \right)^2 \Psi_1 + \tilde{U}_1 \Psi_1, \\ \tilde{U}_1 \stackrel{\text{det}}{=} \frac{1}{2\alpha_1 \beta_1} \frac{|\gamma_1 \mathbf{A}_1|^2}{2} + U_1, \quad \hat{p}_1 \stackrel{\text{det}}{=} -\frac{i}{\beta_1} \nabla_r, \quad \hat{p}_1^2 &= -\frac{1}{\beta_1^2} \Delta_r. \end{aligned} \quad (1.7)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} \rangle &= -\alpha_1 \nabla_r \Phi_1 + \gamma_1 \mathbf{A}_1 = i^2 \alpha_1 \nabla_r \Phi_1 + \gamma_1 \mathbf{A}_1 = \\ &= i \alpha_1 \nabla_r (0 + i \Phi_1) + \gamma_1 \mathbf{A}_1 = i \alpha_1 \nabla_r \left(\ln \left| \frac{\Psi_1}{|\Psi_1|} \right| + i \Phi_1 \right) + \gamma_1 \mathbf{A}_1, \end{aligned} \quad (1.9)$$

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

Уравнение Гамильтона–Якоби принимает вид

$$-\hbar \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} = \frac{m}{2} |\langle \mathbf{v} \rangle|^2 + e\chi_1 = H_1, \quad (1.10)$$

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

где величина Q_1 — квантовый потенциал из теории «волны-пилота» де Бройля–Бома [51–54]. Квантовый потенциал Q_1 позволяет определить тензор квантового давления $P_{\mu\lambda}^{(q)}$:

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

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

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

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

где $\langle \mathbf{v}_p \rangle = -\alpha_1 \nabla_r \Phi_1$ — безвихревая компонента векторного поля потока вероятностей (1.6).

Уравнения движения имеют вид

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{v} \rangle = -\gamma_1 (\mathbf{E}_1 + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B}_1), \quad \mathbf{E}_1 = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}_1 - \nabla_r \chi_1. \quad (1.13)$$

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 $\bar{\Psi}_1$. Полученные уравнения умножаются на функции Ψ_1 и $\bar{\Psi}_1$ соответственно и складываются. При таком переходе «теряется» информация о потенциале U_1 . Здесь приведен нетривиальный переход [49] 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 $\langle \mathbf{v} \rangle(\mathbf{r}, t)$, входящее в уравнение (1.1), определяется функцией плотности вероятностей $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ в соответствии с выражением (1.3). Функция $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ удовлетворяет второму уравнению Власова (1.2), в котором стоит неизвестное векторное поле ускорений $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, а функция $f_1(\mathbf{r}, t)$ связана с $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ через соотношение (1.3). Если зафиксировать векторное поле $\langle \mathbf{v} \rangle(\mathbf{r}, t)$ в уравнении (1.1), то можно подобрать множество функций распределений $f(\mathbf{r}, t)$, удовлетворяющих уравнению (1.1). Но не любая функция $f(\mathbf{r}, t)$ из такого множества будет «усреднением» функции $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ (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.

1.2. Второе уравнение Власова. Перейдем к рассмотрению второго уравнения Власова (1.2). Перепишем уравнение (1.2) в виде [45, 46]

$$\frac{\partial}{\partial t} f_2 + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f_2 + \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle \cdot \nabla_v f_2 = -f_2 \operatorname{div}_v \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle, \quad (1.14)$$

или

$$\frac{d_2 S_2}{dt} \stackrel{\text{det}}{=} \frac{\partial}{\partial t} S_2 + \mathbf{v} \cdot \nabla_r S_2 + \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle \cdot \nabla_v S_2 = -Q_2,$$

$$S_2 \stackrel{\text{det}}{=} \ln f_2, \quad Q_2 \stackrel{\text{det}}{=} \operatorname{div}_v \langle \dot{\mathbf{v}} \rangle.$$

Функция Q_2 имеет физический смысл источников диссипаций вероятностей. Если источники отсутствуют ($Q_2 = 0$), то уравнение (1.14) переходит в известное уравнение Лиувилля и вдоль фазовой траектории плотность вероятностей остается постоянной ($(d_2 f_2)/dt = 0$). Наличие источников ($Q_2 \neq 0$) у векторного поля ускорений $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ 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 [45, 50]

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

можно получить уравнение эволюции

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

Как видно из уравнения (1.16), при постоянном числе частиц ($N = \text{const}$) изменение H_2 -функции Больцмана напрямую определяется наличием усредненных источников диссипаций $\langle\langle Q_2 \rangle\rangle$.

Зная функцию распределения $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, можно переписать уравнения движения (1.13) в гидродинамическом представлении [45, 47, 48]:

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

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

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

где $P_{\mu\lambda}$ — тензор давления (ср. с (1.12)). Величина $\langle\langle \dot{v}_\mu \rangle\rangle$ 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 $\langle\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle\rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. По аналогии со вторым законом Ньютона А. А. Власовым была предложена простейшая аппроксимация

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

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} f_2 + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f_2 + \frac{1}{m} \mathbf{F} \cdot \nabla_v f_2 = 0. \quad (1.21)$$

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 $f_1(\mathbf{r}, t)$ связана с квантовой механикой, так как может быть выражена через волновую функцию $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ (1.5), удовлетворяющую уравнению Шрёдингера (1.7). С другой стороны, функция $f_1(\mathbf{r}, t)$ может быть найдена по функции $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ (1.3), которая удовлетворяет уравнению Власова (1.2), (1.14). Функция $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ 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 $U_1(x) = (m\omega^2 x^2)/2$. Решение стационарного уравнения (1.7) имеет вид

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad n \in \mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}, \quad (1.22)$$

$$\tilde{\psi}_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{m\omega}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}\right) H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right),$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) dx, \\ \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}_n(p) \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) dp. \end{aligned}$$

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

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

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 $\mathbf{F} = -\nabla_r U_1$, получим

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

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

$$\begin{aligned}\varepsilon(x, p) &= \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) = \text{const}, \\ f_{2,n}(x, v) &= F_n(\varepsilon(x, mv)),\end{aligned}\tag{1.25}$$

где F_n — некоторая функция, вид которой необходимо определить из условия (1.24), т. е.

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

В правой части выражения (1.26) стоит произведение экспоненциальной функции на многочлен. Простейшей функцией, интегрирование которой дает 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

$$\begin{aligned}F_n(\varepsilon) &= C e^{-A\varepsilon} P_n(\varepsilon) = \\ &= C \exp\left(-A\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \exp\left(-\frac{A}{\hbar\omega} \frac{p^2}{2m}\right) P_n\left(\frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\right),\end{aligned}\tag{1.27}$$

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n a_k^{(n)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^2} \left(\frac{\bar{p}^2}{2} + \frac{\bar{x}^2}{2} \right)^k d\bar{p} &= \sum_{s,l=0}^n b_s^{(n)} b_l^{(n)} \bar{x}^{s+l}, \\ \sum_{k=0}^n \frac{a_k^{(n)}}{2^k} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^2} (\bar{p}^2 + \bar{x}^2)^k d\bar{p} &= \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{a_k^{(n)}}{2^k} \sum_{j=0}^k C_k^j \bar{x}^{2(k-j)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^2} \bar{p}^{2j} d\bar{p} = \sum_{s,l=0}^n b_s^{(n)} b_l^{(n)} \bar{x}^{s+l}, \end{aligned} \tag{1.29}$$

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{p}^2} \bar{p}^{2j} d\bar{p} &= \frac{|2j-1|!}{2^j} \sqrt{\pi}, \\ \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^n \frac{a_k^{(n)}}{2^k} \sum_{j=0}^k C_k^j \frac{|2j-1|!}{2^j} \bar{x}^{2(k-j)} &= \sum_{s,l=0}^n b_s^{(n)} b_l^{(n)} \bar{x}^{s+l}. \end{aligned} \tag{1.30}$$

Приравнивая коэффициенты справа и слева в выражении (1.30) при одинаковых степенях \bar{x} , получим значения искоемых коэффициентов $a_k^{(n)}$, которые соответствуют коэффициентам полиномов Лагерра $L_n(4\varepsilon)$. В результате искомая функция $F_n(\varepsilon)$ (1.27) принимает вид

$$F_n(\varepsilon) = \frac{(-1)^n m}{\pi \hbar} e^{-2\varepsilon} L_n(4\varepsilon), \tag{1.31}$$

или

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

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

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

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

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

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 $i\hbar(\partial\hat{\rho}/\partial t) = [\hat{H}, \hat{\rho}]$. Для этого функция Вигнера $W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ определяется через матрицу плотности:

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

где обозначения $|\cdot\rangle, \langle\cdot|$ соответствуют векторам состояния в терминах дираковского формализма. Используя выражение для гамильтониана $\hat{H} = (\hat{p}^2/2m) + U_1(\hat{\mathbf{r}})$ и уравнение фон Неймана, сделаем следующие преобразования [55]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho}(t) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle &= \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| [\hat{H}, \hat{\rho}] \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle, \\ \frac{\partial}{\partial t} W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3\hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| [\hat{H}, \hat{\rho}] \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3s = \\ &= -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3\hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \times \\ &\times \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \frac{1}{2m} (\hat{p}^2\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{p}^2) + U_1(\hat{\mathbf{r}})\hat{\rho} - \hat{\rho}U_1(\hat{\mathbf{r}}) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3s, \quad (1.34) \end{aligned}$$

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

где

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

$$U = -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3\hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| U_1(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\rho} - \hat{\rho} U_1(\hat{\mathbf{r}}) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3s. \quad (1.36)$$

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

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| U_1(\hat{\mathbf{r}}) \hat{\rho} - \hat{\rho} U_1(\hat{\mathbf{r}}) \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle = \\ = \left[U_1\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2}\right) - U_1\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) \right] \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Разложим выражение U_1 в ряд Тейлора

$$\begin{aligned} U_1\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2}\right) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mathbf{s}}{2} \cdot \nabla_r\right)^n U_1(\mathbf{r}), \\ U_1\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{\mathbf{s}}{2} \cdot \nabla_r\right)^n U_1(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

получим

$$\begin{aligned} U_1\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2}\right) - U_1\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n!} \left(\frac{\mathbf{s}}{2} \cdot \nabla_r\right)^n U_1(\mathbf{r}) = \\ &= 2 \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{\mathbf{s}}{2} \cdot \nabla_r\right)^{2l+1} U_1(\mathbf{r}) = \\ &= i\hbar \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(i\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} \left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right)^{2l+1} U_1(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.38)$$

Справедливо следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right)^{2l+1} U_1(\mathbf{r}) = \\ = (\nabla_p \cdot \nabla_r)^{2l+1} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) U_1(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Выражения (1.39) можно проверить непосредственным дифференцированием. Действительно,

$$\begin{aligned}
 (\nabla_p \cdot \nabla_r)^{2l+1} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) U_1(\mathbf{r}) &= \\
 &= \underbrace{(\nabla_p \cdot \nabla_r) \dots (\nabla_p \cdot \nabla_r)}_{2l+1} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) U_1(\mathbf{r}) = \\
 &= \underbrace{(\nabla_p \cdot \nabla_r) \dots \left(\nabla_p \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \cdot \nabla_r\right)}_{2l+1} U_1(\mathbf{r}) = \\
 &= \underbrace{(\nabla_p \cdot \nabla_r) \dots (\nabla_p \cdot \nabla_r)}_{2l} \exp\left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right) U_1(\mathbf{r}) = \\
 &= \dots = \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \underbrace{\left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right) \dots \left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right)}_{2l+1} U_1(\mathbf{r}) = \\
 &= \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right)^{2l+1} U_1(\mathbf{r}).
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U} &= -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3\hbar} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \times \\
 &\quad \times \left[U_1\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2}\right) - U_1\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2}\right) \right] \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3s = \\
 &= \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(i\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left(-i\frac{\mathbf{s}}{\hbar} \cdot \nabla_r\right)^{2l+1} \times \\
 &\quad \times U_1(\mathbf{r}) \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3s = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(i\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} (\nabla_p \cdot \nabla_r)^{2l+1} U_1(\mathbf{r}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \times \\
 &\quad \times \int_{(\infty)} \exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3s = \\
 &= \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(-1)^l (\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} (\nabla_p \cdot \nabla_r)^{2l+1} U_1(\mathbf{r}) W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (1.40)
 \end{aligned}$$

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

в виде

$$U = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(-1)^l (\hbar/2)^{2l}}{(2l+1)!} U_1(\mathbf{r}) \left(\overleftarrow{\nabla}_r \cdot \overrightarrow{\nabla}_p \right)^{2l+1} W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (1.41)$$

Преобразуем выражение (1.35). Введем обозначения $x'_\mu = x_\mu - s_\mu/2$, $x''_\mu = x_\mu + s_\mu/2$, откуда $x_\mu = (x'_\mu + x''_\mu)/2$, $s_\mu = x''_\mu - x'_\mu$. Производные по компонентам будут иметь вид

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

Выражение (1.35) примет вид

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{p}^2 \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{p}^2 \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle &= -2\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial s_\alpha} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle = \\ &= -2\hbar^2 (\nabla_r, \nabla_s) \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &= -\frac{i}{(2\pi\hbar)^3 \hbar} \frac{1}{2m} \int_{(\infty)} \exp\left(-i \frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{p}^2 \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{p}^2 \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3 s, \\ \mathcal{T} &= \frac{i}{(2\pi\hbar)^3 \hbar} \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \int_{(\infty)} \exp\left(-i \frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) \frac{\partial}{\partial s_\mu} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle d^3 s = \\ &= \frac{i}{(2\pi\hbar)^3 \hbar} \frac{\hbar^2}{m} \left(i \frac{p_\mu}{\hbar} \right) \frac{\partial}{\partial x_\mu} \int_{(\infty)} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle \exp\left(-i \frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) d^3 s = \\ &= -\frac{p_\mu}{m} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{(\infty)} \left\langle \mathbf{r} + \frac{\mathbf{s}}{2} \left| \hat{\rho} \right| \mathbf{r} - \frac{\mathbf{s}}{2} \right\rangle \exp\left(-i \frac{\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}\right) d^3 s = \\ &= -\frac{p_\mu}{m} \frac{\partial}{\partial x_\mu} W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \\ \mathcal{T} &= -\frac{1}{m} (\mathbf{p} \cdot \nabla_r) W(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (1.42)$$

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

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

или

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

В классическом пределе при $\hbar \rightarrow 0$ 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. При сравнении уравнения Моэля (1.43) и второго уравнения Власова (1.14) видно, что уравнение Моэля является частным случаем уравнения Власова с аппроксимацией векторного поля ускорений $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$:

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

которая называется аппроксимацией Власова–Моэля [39]. Действительно, подставляя аппроксимацию (1.44) в уравнение Власова (1.14), получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_2}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f_2 - \frac{1}{m} \nabla_r U_1 \cdot \nabla_v f_2 = \\ & = - \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1} (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \left[f_2 \frac{\partial}{\partial v_\mu} \left(\frac{1}{f_2} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} \right) + \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} \right]. \end{aligned} \quad (1.45)$$

С учетом того, 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) $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle = (-1/m) \nabla_r U_1$. Последующие слагаемые ряда (1.44) имеют множители \hbar^{2n} и при классическом переходе ($\hbar \rightarrow 0$) 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 $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ от переменных скорости \mathbf{v} , что влечет за собой наличие источников диссипаций Q_2 (1.14), (1.16):

$$Q_2 = \frac{\partial}{\partial v_\mu} \langle \dot{v}_\mu \rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1} (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \frac{\partial}{\partial v_\mu} \left(\frac{1}{f_2} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} \right). \quad (1.46)$$

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

$$\begin{aligned} f_1 \langle Q_2 \rangle &= \int_{(\infty)} f_2 Q_2 d^3 v = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1} (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \int_{(\infty)} \frac{\partial^{2n+1} f_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} d^3 v + \\ &+ \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \int_{(\infty)} \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v. \end{aligned} \quad (1.47)$$

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

$$\begin{aligned} \int_{(\infty)} \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v &= \int_{(\infty)} \frac{\partial S_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v = \\ &= \frac{\partial S_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n-1} f_2}{\partial v_\mu^{2n-1}} \Big|_{\infty} - \int_{(\infty)} \frac{\partial^2 S_2}{\partial v_\mu^2} \frac{\partial^{2n-1} f_2}{\partial v_\mu^{2n-1}} d^3 v = - \int_{(\infty)} \frac{\partial^2 S_2}{\partial v_\mu^2} \frac{\partial^{2n-1} f_2}{\partial v_\mu^{2n-1}} d^3 v, \end{aligned} \quad (1.48)$$

где учтено, что частные производные $\partial^{2n} f_2 / \partial v_\mu^{2n}$ стремятся к нулю на бесконечности достаточно быстро [47, 48]. Повторяя процедуру (1.48) k раз ($k = 2n$), получим

$$\begin{aligned} \int_{(\infty)} \frac{1}{f_2} \frac{\partial f_2}{\partial v_\mu} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3 v &= (-1)^k \int_{(\infty)} \frac{\partial^{k+1} S_2}{\partial v_\mu^{k+1}} \frac{\partial^{2n-k} f_2}{\partial v_\mu^{2n-k}} d^3 v = \\ &= (-1)^{2n} \int_{(\infty)} f_2 \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} d^3 v = f_1 \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} \right\rangle, \end{aligned} \quad (1.49)$$

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

Используя выражение (1.49), вычислим среднее значение $\langle\langle Q_2 \rangle\rangle$:

$$\begin{aligned}
 N(t)\langle\langle Q_2 \rangle\rangle(t) &= \int_{(\infty)} f_1 \langle Q_2 \rangle d^3r = \\
 &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \int_{(\infty)} f_1 \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} \right\rangle d^3r, \quad (1.50) \\
 \langle\langle Q_2 \rangle\rangle(t) &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \left\langle \frac{\partial^{2n+1} S_2}{\partial v_\mu^{2n+1}} \right\rangle \right\rangle.
 \end{aligned}$$

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 ($\hbar \rightarrow 0$). 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 $\langle\langle \dot{v}_\mu \rangle\rangle$. Используя аппроксимацию Власова–Моэля (1.44), можно вычислить значение $\langle\langle \dot{v}_\mu \rangle\rangle$:

$$\begin{aligned}
 f_1 \langle\langle \dot{v}_\mu \rangle\rangle &= \int_{(\infty)} \langle \dot{v}_\mu \rangle f_2 d^3v = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x_\mu} f_1 + \frac{(\hbar/2)^2}{3!m^3} \frac{\partial^3 U_1}{\partial x_\mu^3} \times \\
 &\times \int_{(\infty)} \frac{\partial^2 f_2}{\partial v_\mu^2} d^3v - \frac{(\hbar/2)^4}{5!m^5} \frac{\partial^5 U_1}{\partial x_\mu^5} \int_{(\infty)} \frac{\partial^4 f_2}{\partial v_\mu^4} d^3v + \dots + \\
 &+ \frac{(-1)^{n+1} (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \int_{(\infty)} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} d^3v + \dots = -\frac{1}{m} \frac{\partial U_1}{\partial x_\mu} f_1,
 \end{aligned}$$

таким образом,

$$\langle\langle \dot{v}_\mu \rangle\rangle = -\frac{1}{m} \frac{\partial U_1}{\partial x_\mu}. \quad (1.51)$$

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) $\langle \dot{v}_\mu \rangle = (-1/m)(\partial U_1/\partial x_\mu)$.

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

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) :

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \tilde{x}, & p &= \tilde{p}\sqrt{2m\hbar\omega}, & \tilde{x}^2 + \tilde{p}^2 &= \varepsilon(x, p), \\ \varphi &= \operatorname{arctg}\left(\frac{\tilde{p}}{\tilde{x}}\right) = \operatorname{arctg}\left(\frac{p}{m\omega x}\right), \\ dx dp &= 2\hbar d\tilde{x} d\tilde{p} = 2\hbar\sqrt{\varepsilon} d\sqrt{\varepsilon} d\varphi = \hbar d\varepsilon d\varphi. \end{aligned} \quad (1.52)$$

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

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega \langle \varepsilon \rangle_n = \frac{\hbar\omega}{m} \int_{(\infty)} dx \int_{(\infty)} f_{2,n}\left(x, \frac{p}{m}\right) \varepsilon(x, p) dp = \\ &= \frac{\hbar^2\omega}{m} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} F_n(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = 2(-1)^n \hbar\omega \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} L_n(4\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = \\ &= 2(-1)^n \hbar\omega (-1)^n \frac{2n+1}{4}, \end{aligned} \quad (1.53)$$

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

Выражение (1.53) совпадает с известными значениями энергетического спектра квантового гармонического осциллятора. Аналогичным образом вычислим среднеквадратичные отклонения энергии для каждого состояния:

$$\sigma_{E_n}^2 = \hbar^2\omega^2 \left[M\varepsilon^2 - (M\varepsilon)^2 \right] = \hbar^2\omega^2 \left[M\varepsilon^2 - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \right]. \quad (1.54)$$

Вычислим слагаемое $M\varepsilon^2$:

$$\begin{aligned} M\varepsilon^2 &= \frac{\hbar}{m} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} F_n(\varepsilon) \varepsilon^2 d\varepsilon = 2(-1)^n \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} L_n(4\varepsilon) \varepsilon^2 d\varepsilon = \\ &= 2(-1)^n \sum_{k=0}^n C_n^k \frac{4^k (-1)^k}{k!} I_{k+2}, \end{aligned}$$

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

$$I_n \stackrel{\text{det}}{=} \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^n d\varepsilon = \frac{n}{2} I_{n-1} = \frac{n!}{2^n} I_0, \quad I_0 = \frac{1}{2}, \quad I_n = \frac{n!}{2^{n+1}}, \quad (1.55)$$

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

Сумму, стоящую в выражении (1.55), можно посчитать в явном виде, используя операцию дифференцирования и формулу бинома Ньютона:

$$\begin{aligned} M \varepsilon^2 &= \frac{(-1)^n}{4} \frac{d^2}{dx^2} \sum_{k=0}^n C_n^k (-2)^k x^{k+2} \Big|_{x=1} = \\ &= \frac{(-1)^n}{4} \frac{d^2}{dx^2} x^2 \sum_{k=0}^n C_n^k (-2x)^k 1^{n-k} \Big|_{x=1} = \frac{(-1)^n}{4} \frac{d^2}{dx^2} x^2 (1-2x)^n \Big|_{x=1}, \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$M \varepsilon^2 = \frac{(-1)^n}{2} [(1-2x)^n - 4nx(1-2x)^{n-1} + 2x^2n(n-1)(1-2x)^{n-2}] \Big|_{x=1},$$

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

Подставляя (1.56) в выражение (1.54), получим

$$\sigma_{E_n} = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (1.57)$$

Для каждого состояния величина среднеквадратичного отклонения энергии (1.57) одинакова. При этом расстояния между средними значениями энергии E_n согласно выражениям (1.53) и (1.57) 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 счетным и совпадает с собственными значениями гамильтониана. Использование фазового пространства позволяет наглядным образом интерпретировать связь между классической и квантовой механикой.

Вычислим средние значения «кинетической» $T = (mv^2)/2$ и «потенциальной» $U_1 = (m\omega^2 x^2)/2$ энергии квантового гармонического осциллятора. Усреднение можно произвести по координате x , скорости v или по всему фазовому пространству (по обоим переменным x, v). Найдем значения

$\langle x^2 \rangle$, $\langle v^2 \rangle$, $\langle \langle x^2 \rangle \rangle$, $\langle \langle v^2 \rangle \rangle$ 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 $\langle x \rangle = \langle \langle x \rangle \rangle = 0$ и $\langle v \rangle = \langle \langle v \rangle \rangle = 0$.

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

$$\sigma_x \sigma_v = |\alpha| = \frac{\hbar}{2m}, \quad \omega = \frac{\sigma_v}{\sigma_x}. \quad (1.58)$$

С использованием величин σ_x и σ_v выражение для энергии (1.25) и представления функций распределений (1.23) и (1.31) примут вид

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

$$f_{1,n}(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) H_n^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x}\right), \quad (1.59)$$

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

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 (1.18) сделана замена обозначений $P_{\mu\lambda}$ на P :

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

$$0 = \int_{-\infty}^{+\infty} (v^2 F'_n(\tilde{\varepsilon}) + \sigma_x^2 \omega^2 F_n(\tilde{\varepsilon})) dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(v^2 \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} + \sigma_x^2 \omega^2 \right) F_n(\tilde{\varepsilon}) dv =$$

$$= f_{1,n} \left\langle v^2 \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} + \sigma_x^2 \omega^2 \right\rangle, \quad (1.60)$$

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

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

$$\frac{1}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 f_{2,n}(x, v) dv = -\alpha^2 \frac{\partial^2 S_{1,n}}{\partial x^2}, \quad \langle v^2 \rangle = -\alpha^2 \frac{\partial^2 S_{1,n}}{\partial x^2}. \quad (1.61)$$

Подставим функции распределения (1.59) в выражения (1.60) и (1.61). Начнем с выражения (1.60):

$$S_{2,n} = \ln F_n(\tilde{\varepsilon}) = \ln B_n - \tilde{\varepsilon} + \ln L_n(2\tilde{\varepsilon}), \quad \frac{\partial S_{2,n}}{\partial \tilde{\varepsilon}} = -1 + 2 \frac{L'_n(2\tilde{\varepsilon})}{L_n(2\tilde{\varepsilon})}, \quad (1.62)$$

где $B_n = (-1)^n / (2\pi\sigma_v\sigma_x)$. Усредним выражение (1.62) по формуле (1.60), получим

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 \omega^2 &= \langle v^2 \rangle - 2 \left\langle v^2 \frac{L'_n}{L_n} \right\rangle = \\ &= \frac{B_n}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} L_n(2\tilde{\varepsilon}) dv - 2 \frac{B_n}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} L'_n(2\tilde{\varepsilon}) dv = \\ &= \frac{B_n}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} (L_n(2\tilde{\varepsilon}) - 2 [L'_{n-1}(2\tilde{\varepsilon}) - L_{n-1}(2\tilde{\varepsilon})]) dv = \\ & \hspace{20em} (1.63) \\ &= \frac{B_n}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} (L_n - 2 [L'_0 - L_0 - \dots - L_{n-3} - L_{n-2} - L_{n-1}]) dv = \\ &= \frac{B_n}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} \left(L_n + 2 \sum_{k=0}^{n-1} L_k \right) dv, \\ \sigma_x^2 \omega^2 &= \frac{B_n}{f_{1,n}} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} (L_n(2\tilde{\varepsilon}) + 2L_{n-1}^{(1)}(2\tilde{\varepsilon})) dv, \end{aligned}$$

где учтено, что $L'_n = L'_{n-1} - L_{n-1}$, $L_s^{(\mu+1)} = \sum_{k=0}^s L_k^{(\mu)}$. С учетом выражения $L_n^{(\mu)}(x) = L_n^{(\mu+1)}(x) - L_{n-1}^{(\mu+1)}(x)$ при $\mu = 0$ $L_n(x) = L_n^{(1)}(x) - L_{n-1}^{(1)}(x)$, выражение (1.63) примет вид

$$\frac{\sigma_v^2}{B_n} f_{1,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 e^{-\tilde{\varepsilon}} (L_n^{(1)}(2\tilde{\varepsilon}) + L_{n-1}^{(1)}(2\tilde{\varepsilon})) dv. \quad (1.64)$$

Для обобщенных полиномов Лагерра справедливо соотношение

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

откуда

$$\begin{aligned} L_n^{(1)}(2\varepsilon) &= \sum_{k=0}^n L_k\left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) L_{n-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right), \\ L_{n-1}^{(1)}(2\varepsilon) &= \sum_{k=0}^{n-1} L_k\left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) L_{n-1-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right). \end{aligned} \quad (1.65)$$

Подставляя (1.65) в (1.64), получим

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_v^2}{B_n} f_{1,n} &= \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) \sum_{k=0}^n L_{n-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) L_k\left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) dv + \\ &+ \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) L_k\left(\frac{v^2}{\sigma_v^2}\right) dv, \\ (-1)^n \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1}n!} H_n^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x}\right) &= \sum_{k=0}^n L_{n-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) J_k + \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) J_k, \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} (-1)^n \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1}n!} H_n^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x}\right) &= \sum_{k=1}^n L_{n-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) J_k + \\ &+ \sum_{s=1}^n L_{n-s}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) J_{s-1} + L_n\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) J_0, \quad (1.66) \\ (-1)^n \frac{\sqrt{\pi}}{2^{n+1}n!} H_n^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x}\right) &= \sum_{k=1}^n L_{n-k}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) (J_k + J_{k-1}) + L_n\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2}\right) J_0, \end{aligned}$$

где

$$J_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau, \quad \tau = \frac{v}{\sqrt{2}\sigma_v}. \quad (1.67)$$

Выражение (1.66) позволяет представить квадрат полиномов Эрмита H_n^2 через полиномы Лагерра L_k . Вычислим интеграл (1.67):

$$\begin{aligned}
 J_k &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau = \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau^2 = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau L_k(2\tau^2) d e^{-\tau^2} = \\
 &= -\frac{1}{2} \left(\tau L_k(2\tau^2) e^{-\tau^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} (L_k(2\tau^2) + 4\tau^2 L'_k(2\tau^2)) d\tau \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} [L'_{k-1}(2\tau^2) - L_{k-1}(2\tau^2)] d\tau = \\
 & \hspace{20em} (1.68)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-1}(2\tau^2) d\tau - \\
 & - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_{k-1}(2\tau^2) d\tau, \\
 J_k &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} L_k(2\tau^2) d\tau - 2J_{k-1} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-1}(2\tau^2) d\tau.
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 &\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) L_n\left(2\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) dv = \\
 &= \sqrt{2}\sigma_v \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\tau^2} L_n(2\tau^2) d\tau = (-1)^n \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_v}{2^n n!} H_n^2(0), \quad (1.69)
 \end{aligned}$$

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

С учетом (1.69) выражение (1.68) принимает вид

$$J_k = (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1}k!} H_k^2(0) - 2J_{k-1} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-1}(2\tau^2) d\tau. \quad (1.70)$$

Из выражения (1.70) следует, что

$$J_{k-1} = (-1)^{k-1} \frac{\sqrt{\pi}}{2^k(k-1)!} H_{k-1}^2(0) - 2J_{k-2} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-2}(2\tau^2) d\tau. \quad (1.71)$$

Подставим (1.71) в выражение (1.68), получим

$$J_k = (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1}k!} H_k^2(0) + (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1}(k-1)!} H_{k-1}^2(0) + 4J_{k-2} - 4 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-2}(2\tau^2) d\tau + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} [L'_{k-2}(2\tau^2) - L_{k-2}(2\tau^2)] d\tau, \quad (1.72)$$

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

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

$$J_{k-2} = (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1}(k-2)!} H_{k-2}^2(0) - 2J_{k-3} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-3}(2\tau^2) d\tau, \quad (1.73)$$

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

$$\begin{aligned}
J_{k-3} &= -(-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-2}(k-3)!} H_{k-3}^2(0) - 2J_{k-4} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-4}(2\tau^2) d\tau, \\
J_k &= (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1}k!} H_k^2(0) + (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-1}(k-1)!} H_{k-1}^2(0) + \\
&+ (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-2}(k-2)!} H_{k-2}^2(0) + (-1)^k \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k-3}(k-3)!} H_{k-3}^2(0) + 2J_{k-4} - \\
&- 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{k-4}(2\tau^2) d\tau.
\end{aligned} \tag{1.74}$$

Выражение для J_0 имеет вид

$$\begin{aligned}
J_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L_0(2\tau^2) d\tau = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}\sigma_v^3} \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) dv = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \tag{1.75}
\end{aligned}$$

Рассмотрим четные ($k = 2m$) и нечетные ($k = 2m + 1$) значения для выражения J_k . Продолжая итерационную процедуру, выражение (1.74) для J_{2m} запишем в виде

$$\begin{aligned}
J_{2m} &= \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+1}(2m)!} H_{2m}^2(0) + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-1}(2m-1)!} H_{2m-1}^2(0) + \\
&+ \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-2}(2m-2)!} H_{2m-2}^2(0) + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-3}(2m-3)!} H_{2m-3}^2(0) + \dots + \\
&+ \frac{\sqrt{\pi}}{2^{11!}} H_1^2(0) + 2J_0 - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_0(2\tau^2) d\tau, \tag{1.76}
\end{aligned}$$

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

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

Для J_{2m+1} аналогично получаем

$$\begin{aligned}
 J_{2m+1} &= -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2}(2m+1)!} H_{2m+1}^2(0) - \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m}(2m)!} H_{2m}^2(0) - \\
 &- \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-1}(2m-1)!} H_{2m-1}^2(0) - 2I_{2m-2} + 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_{2m-2}(2\tau^2) d\tau = \\
 &= -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2}(2m+1)!} H_{2m+1}^2(0) - \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m}(2m)!} H_{2m}^2(0) - \\
 &- \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m-1}(2m-1)!} H_{2m-1}^2(0) - \dots - \frac{\sqrt{\pi}}{2^1(1)!} H_1^2(0) - 2J_0 + \\
 &+ 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 e^{-\tau^2} L'_0(2\tau^2) d\tau,
 \end{aligned}$$

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

или

$$\begin{aligned}
 J_{2m+1} &= -\frac{\sqrt{\pi}}{2^{2m+2}(2m+1)!} H_{2m+1}^2(0) - \\
 &- \sqrt{\pi} \sum_{q=1}^{2m+1} \frac{H_{2m+1-q}^2(0)}{2^{2m+1-q}(2m+1-q)!}. \quad (1.77)
 \end{aligned}$$

Сравнивая (1.76) и (1.77), получим общее выражение для J_k :

$$J_k = (-1)^k \sqrt{\pi} \left\{ \frac{1}{2^{k+1}k!} H_k^2(0) + \sum_{s=1}^k \frac{H_{k-s}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} \right\}. \quad (1.78)$$

Для преобразования выражения (1.66) вычислим сумму $J_k + J_{k-1}$, используя (1.78):

$$\begin{aligned}
 J_k + J_{k-1} &= (-1)^k \sqrt{\pi} \left\{ \frac{1}{2^{k+1}k!} H_k^2(0) + \sum_{s=1}^k \frac{H_{k-s}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} \right\} - \\
 &- (-1)^k \sqrt{\pi} \left\{ \frac{1}{2^k(k-1)!} H_{k-1}^2(0) + \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-1-s}^2(0)}{2^{k-1-s}(k-1-s)!} \right\} = \\
 &= (-1)^k \sqrt{\pi} \left\{ \frac{H_k^2(0)}{2^{k+1}k!} - \frac{2kH_{k-1}^2(0)}{2^{k+1}k!} + \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-s}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} + H_0^2(0) - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-1-s}^2(0)}{2^{k-1-s}(k-1-s)!} \Big\} = (-1)^k \sqrt{\pi} \left\{ \frac{H_k^2(0) - 2kH_{k-1}^2(0)}{2^{k+1}k!} + \right. \\
& \left. + H_0^2(0) + \sum_{s=1}^{k-1} \frac{H_{k-s}^2(0) - 2(k-s)H_{k-s-1}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} \right\}, \tag{1.79}
\end{aligned}$$

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

Подставляя (1.79) в (1.66), получим

$$\begin{aligned}
\frac{(-1)^n}{2^{n+1}n!} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) = & \frac{1}{2} L_n \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) + \sum_{k=1}^n (-1)^k L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) \times \\
& \times \left\{ \frac{H_k^2(0) - 2kH_{k-1}^2(0)}{2^{k+1}k!} + \sum_{s=1}^k \frac{H_{k-s}^2(0) - 2(k-s)H_{k-s-1}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} \right\}. \tag{1.80}
\end{aligned}$$

Выражение (1.80) можно переписать в компактной форме, если воспользоваться функцией Хевисайда

$$\eta(s) = \begin{cases} 0, & s = 0, \\ 1, & s > 0. \end{cases} \quad \frac{1 + \eta(s)}{2} = \begin{cases} \frac{1}{2}, & s = 0, \\ 1, & s > 0. \end{cases} \tag{1.81}$$

С использованием (1.81) выражение (1.80) примет вид

$$\begin{aligned}
\frac{(-1)^n}{2^{n+1}n!} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) = & \sum_{k=0}^n (-1)^k L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) \times \\
& \times \sum_{s=0}^k \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{H_{k-s}^2(0) - 2(k-s)H_{k-s-1}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!}, \tag{1.82}
\end{aligned}$$

или

$$\frac{(-1)^n}{2^{n+1}n!} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) = \sum_{k=0}^n \bar{C}_k L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right), \tag{1.83}$$

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}_k удобно пользоваться свойствами нулей полиномов Эрмита

$$H_{2k}^2(0) = \frac{(2k)!(2k)!}{k!k!}, \quad H_{2k+1}^2(0) = 0. \quad (1.84)$$

Формула (1.83) задает разложение полиномов $H_n^2(x/\sqrt{2}\sigma_x)$ по полиномам Лагерра $L_s(x^2/\sigma_x^2)$. Выражение (1.83) получилось как следствие из выражения (1.60).

Рассмотрим выражение (1.61). Вычислим выражение $\partial^2 S_1/\partial x^2$, стоящее в (1.61):

$$\begin{aligned} S_{1,n} &= \ln f_{1,n} = \ln \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} - \frac{x^2}{2\sigma_x^2} + 2 \ln H_n \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right), \\ \frac{\partial S_1}{\partial x} &= -\frac{x}{\sigma_x^2} + \frac{\sqrt{2}H'_n}{\sigma_x H_n}, \quad \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} = -\frac{1}{\sigma_x^2} \left(1 - \frac{H''_n H_n - H'_n H'_n}{H_n^2} \right), \\ \frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} &= -\frac{1}{\sigma_x^2} \left(1 - \frac{H''_n}{H_n} + \left(\frac{H'_n}{H_n} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (1.85)$$

Найдем $\langle v^2 \rangle$:

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

$$\begin{aligned}
(-1)^n \frac{\sqrt{2\pi}\sigma_v}{2^n n!} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) \langle v^2 \rangle &= \\
&= \sum_{k=0}^n L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \exp \left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2} \right) L_k \left(\frac{v^2}{\sigma_v^2} \right) dv - \\
&\quad - \sum_{k=0}^{n-1} L_{n-1-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \exp \left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2} \right) L_k \left(\frac{v^2}{\sigma_v^2} \right) dv, \quad (1.86)
\end{aligned}$$

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

так как $\int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \exp(-v^2/2\sigma_v^2) L_k(v^2/\sigma_v^2) dv = 2\sqrt{2}\sigma_v^3 J_k$. Подставляя (1.78) в (1.86), получим

$$\begin{aligned}
&\frac{(-1)^n}{2^{n+1} n! \sigma_v^2} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) \langle v^2 \rangle = \\
&= \sum_{k=0}^n L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) (-1)^k \sum_{s=0}^k \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{H_{k-s}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} + \\
&+ \sum_{q=1}^n L_{n-q} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) (-1)^q \sum_{s=0}^{q-1} \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{2(q-s) H_{q-s-1}^2(0)}{2^{q-s}(q-s)!} = \\
&= \sum_{k=0}^n L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) (-1)^k \sum_{s=0}^k \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{H_{k-s}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!} + \quad (1.87) \\
&+ \sum_{q=0}^n L_{n-q} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) (-1)^q \sum_{s=0}^q \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{2(q-s) H_{q-s-1}^2(0)}{2^{q-s}(q-s)!} = \\
&= \sum_{k=0}^n L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right) (-1)^k \sum_{s=0}^k \frac{1 + \eta(s)}{2} \frac{H_{k-s}^2(0) + 2(q-s) H_{q-s-1}^2(0)}{2^{k-s}(k-s)!},
\end{aligned}$$

$$\frac{(-1)^n}{2^{n+1} n! \sigma_v^2} H_n^2 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) \langle v^2 \rangle = \sum_{k=0}^n C_k L_{n-k} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} \right),$$

где

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

Из выражений (1.87) и (1.83) следует, что

$$\langle v^2 \rangle_{v,n}(x) = \sigma_v^2 \frac{\sum_{k=0}^n C_k L_{n-k}(x^2/\sigma_x^2)}{\sum_{k=0}^n \bar{C}_k L_{n-k}(x^2/\sigma_x^2)}, \quad (1.88)$$

где индекс « v » указывает на усреднение по пространству скоростей, а индекс « n » соответствует номеру состояния квантового гармонического осциллятора.

В силу симметрии функции $f_{2,n}$ по переменным x и v по аналогии с выражением (1.88) можно записать выражение для $\langle x^2 \rangle_{x,n}$ при усреднении по пространству координат x :

$$\langle x^2 \rangle_{x,n}(v) = \sigma_x^2 \frac{\sum_{k=0}^n C_k L_{n-k}(v^2/\sigma_v^2)}{\sum_{k=0}^n \bar{C}_k L_{n-k}(v^2/\sigma_v^2)}. \quad (1.89)$$

Проведем анализ полученных распределений (1.88) и (1.89). Особенностью выражений (1.88) и (1.89) является наличие полюсов по координате и скорости соответственно. На рис. 1 приведено распределение энергии осциллятора $\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{v,n}(x) = (\langle v^2 \rangle_{v,n}(x))/(2\sigma_v^2) + x^2/(2\sigma_x^2)$ 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 $\langle v^2 \rangle_{v,0} = \sigma_v^2$ (см. выражение (1.88)).

Обратим внимание, что полюса кинетической (1.88) и потенциальной (1.89) энергии в соответствии с выражением (1.88) расположены в нулях

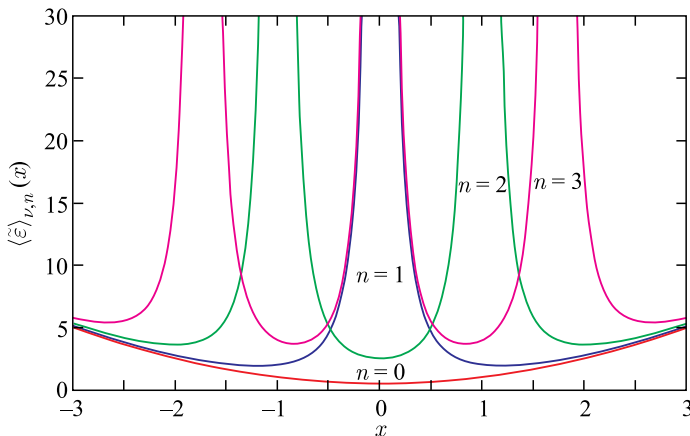


Рис. 1. Распределение плотности энергии $\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{v,n}(x)$

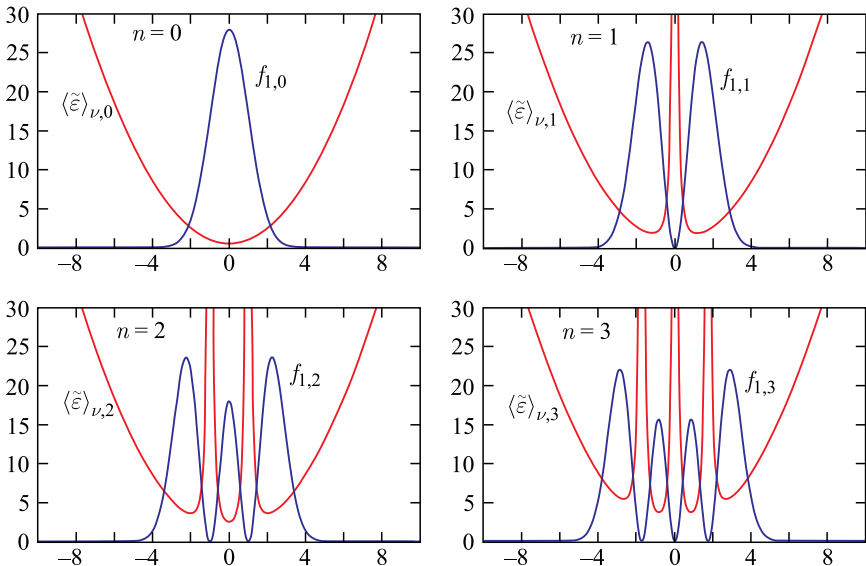


Рис. 2. Распределение плотности энергии $\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{\nu,n}(x)$ и плотности вероятности $f_{1,n}(x)$

полиномов Эрмита и находятся в области отрицательных значений плотности вероятности функции Вигнера (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 $\langle \tilde{\varepsilon} \rangle_{\nu,n}(x)$.

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 $n = 2, 3, \dots$ (см. рис. 2).

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

Именно в области отрицательных значений имеются полюса у кинетической (1.88) и потенциальной энергии (1.89), которые приводят к энергетическим барьерам (см. рис. 1, 2) и фактически «создают» еще один осциллятор.

Используя выражения (1.85) и (1.61), вычислим среднеквадратичные отклонения $\langle\langle x^2 \rangle\rangle_n$ и $\langle\langle v^2 \rangle\rangle_n$:

$$\begin{aligned} \langle\langle v^2 \rangle\rangle_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,n}(x) \langle v^2 \rangle_{v,n}(x) dx = \\ &= \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} - \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,n}(x) \frac{H_n''}{H_n} dx + \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,n}(x) \left(\frac{H_n'}{H_n} \right)^2 dx, \\ \langle\langle v^2 \rangle\rangle_n &= \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} - \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} \frac{1}{2^n n!} \frac{\sqrt{2}\sigma_x}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_n(y) H_n''(y) dy + \\ &+ \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} \frac{1}{2^n n!} \frac{\sqrt{2}\sigma_x}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_n'(y) H_n'(y) dy. \end{aligned}$$

Исходя из формулы дифференцирования полиномов Эрмита $H_n'(y) = 2nH_{n-1}(y)$ и условия ортогональности, получаем

$$\begin{aligned} \langle\langle v^2 \rangle\rangle_n &= \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} + \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} \frac{1}{2^n n!} \frac{4n^2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! = \frac{\alpha^2}{\sigma_x^2} (2n+1), \\ \langle\langle v^2 \rangle\rangle_n &= \sigma_v^2 (2n+1), \end{aligned} \quad (1.90)$$

где учтено соотношение (1.58). В силу симметрии выражений (1.88) и (1.89) можно записать для $\langle\langle x^2 \rangle\rangle_n$ аналогичное выражение

$$\langle\langle x^2 \rangle\rangle_n = \sigma_x^2 (2n+1). \quad (1.91)$$

Из выражений (1.90) и (1.91) видно, что для основного состояния ($n=0$) среднеквадратичные отклонения $\sqrt{\langle\langle v^2 \rangle\rangle_0} = \sigma_v$ и $\sqrt{\langle\langle x^2 \rangle\rangle_0} = \sigma_x$, т. е. совпадают с величинами σ_v и σ_x , введенными формально выше в (1.58). Следовательно, обозначения (1.58) имеют наглядную интерпретацию. При увеличении номера состояния n величины (1.90) и (1.91) растут. Зная $\langle\langle x^2 \rangle\rangle_n$ (1.91) и $\langle\langle v^2 \rangle\rangle_n$ (1.90), можно вычислить полную среднюю энергию гармонического осциллятора в состоянии n , про которую было сказано в начале пункта:

$$\begin{aligned} E &= T + U_1 = \frac{mv^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \\ E_n &= \langle\langle E \rangle\rangle_n = \frac{m}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x, v) v^2 dx dv + \\ &+ \frac{m\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x, v) x^2 dx dv = \frac{m}{2} \langle\langle v^2 \rangle\rangle_n + \frac{m\omega^2}{2} \langle\langle x^2 \rangle\rangle_n, \end{aligned} \quad (1.92)$$

$$E_n = \frac{m}{2}\sigma_v^2(2n+1) + \frac{m\omega^2}{2}\sigma_x^2(2n+1) = m\left(n + \frac{1}{2}\right)(\sigma_v^2 + \omega^2\sigma_x^2),$$

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

где учтены соотношения (1.58). Полученное выражение (1.92) полностью совпадает с выражением (1.53). 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.

1.4. Уравнение Шрёдингера в фазовом пространстве. Рассмотрим вопрос отрицательности функции плотности вероятностей в фазовом пространстве. Для гармонического осциллятора ($\partial^s U_1 / \partial x_\mu^s = 0$ при $s \geq 3$) уравнение Власова и уравнение Моэля совпадают с уравнением Лиувилля, в котором отсутствуют источники диссипаций ($Q_2 = 0$). Решение уравнения (1.24) ищется методом характеристик. Вдоль характеристик (1.25) решение является постоянным: $f_{2,n} = \text{const}$. На рис. 3 приведен график характеристик (1.25) в системе координат (\bar{x}, \bar{v}) (1.28). Если функция $f_{1,n}(x)$ имеет нули, т. е. $\exists x_k, k = 1, \dots, n: f_{1,n}(x_k) = 0$, то из (1.3) следует, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{2,n}(x_k, v) dv = 0. \quad (1.93)$$

Пусть функция плотности вероятностей удовлетворяет условию $f_{2,n}(x, v) \geq 0$, тогда из (1.93) следует, что $f_{2,n}(x_k, v) = 0$ почти всюду на

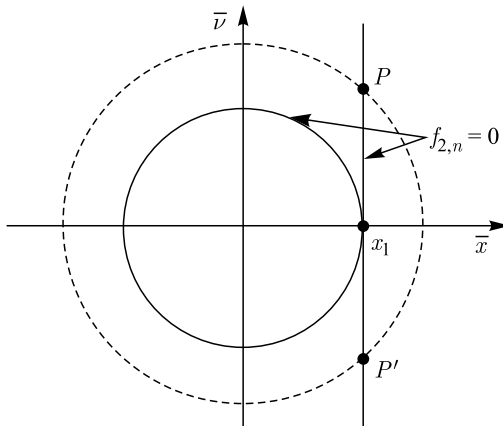


Рис. 3. Значения функции $f_{2,n}$

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. 3).

На рис. 3 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 радиусом 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 (1.31) не имеет нулей — это $f_{1,0}$. Поэтому из всех функций в (1.31) только $f_{2,0}$ является положительной во всей области.

Для квантовой системы с произвольным гладким потенциалом Р. Хадсоном была доказана теорема о положительности функции Вигнера только для гауссовой формы волновой функции $\exp(-ax^2 + bx + c)$ [56].

Заметим, что площадь фазовой области, в которой функция Вигнера принимает отрицательные значения, порядка постоянной Планка, что непосредственно связано с границей «применимости» принципа неопределенности Гейзенберга.

Желание работать с положительными функциями распределения плотности вероятностей привело к построению различных модификаций функции Вигнера в виде P - и Q -функций [57–61]. С другой стороны, положительную функцию плотности вероятности в фазовом пространстве $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ можно получить при наличии волновой функции $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ для уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве, так как $f = |\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)|^2 \geq 0$. Существует ряд работ по построению уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве [62, 63, 45]. В работах [62, 63] для волновой функции $\Psi(x, p, t)$ предлагается уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V \left(q + i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \Psi, \quad (1.94)$$

которое для гармонического осциллятора дает решение

$$\Psi_n(x, p) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar^{n+1}\pi n! \omega^n}} \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} x - i \frac{p}{\sqrt{2m}} \right)^n \times \exp \left[-\frac{1}{2\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) + i \frac{px}{2\hbar} \right]. \quad (1.95)$$

Плотность вероятности, соответствующая функции (1.95), имеет вид

$$|\Psi_n(x, p)|^2 = \frac{1}{2\hbar\pi n!} \varepsilon(x, p)^n e^{-\varepsilon(x, p)}. \quad (1.96)$$

Как и следовало ожидать (см. рис. 3), интегрирование выражения (1.96) по пространству импульсов не дает решений (1.22), кроме случая $n = 0$, при котором функция (1.96) почти совпадает с функцией Вигнера (1.31) $F_0(\varepsilon)$.

В работе [45] по аналогии с работой [49] строится цепочка уравнений квантовой механики для волновых функций высших кинематических величин $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$, $\Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, $\Psi_3(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t)$, $\Psi_4(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, \ddot{\mathbf{v}}, t)$, ... Цепочка уравнений квантовой механики высших кинематических величин строится по бесконечной цепочке уравнений Власова. В частном случае для второго уравнения Власова (1.14) получается аналог уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве для волновой функции $\Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ вида

$$\frac{i}{\beta_2} \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -\alpha_2 \beta_2 \left(\hat{p}_2 - \frac{\gamma_2}{2\alpha_2 \beta_2} \mathbf{A}_2 \right)^2 \Psi_2 + \frac{\beta_1}{\beta_2} (\mathbf{v}, \hat{p}_1) \Psi_2 + V_2 \Psi_2, \quad (1.97)$$

$$V_2 = \frac{1}{2\alpha_2 \beta_2} \frac{|\gamma_2 \mathbf{A}_2|^2}{2} + U_2,$$

где $\hat{p}_2 \stackrel{\text{det}}{=} (-i/\beta_2) \nabla_v$, $\alpha_2 = -\hbar_2/(2m)$, $\beta_2 = 1/\hbar_2$, γ_2 — некоторые постоянные величины. Величина \hbar_2 связана с аналогом принципа неопределенности Гейзенберга в проекции (v, \dot{v}) обобщенного фазового пространства [43, 44, 45, 50] $\sigma_v \sigma_{\dot{v}} \geq |\alpha_2| = \hbar_2/(2m)$. Векторное поле ускорений $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle$ по теореме Гельмгольца представляется в виде суперпозиции вихревого $\gamma_2 \mathbf{A}_2$ и безвихревого $\langle \dot{\mathbf{v}}_p \rangle = -\alpha_2 \nabla_v \Phi_2$ полей. Скалярный потенциал Φ_2 определяется фазой φ_2 ($\Phi_2 = 2\varphi_2 + 2\pi k$) волновой функции $\Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ и удовлетворяет аналогу уравнения Гамильтона–Якоби:

$$-\hbar_2 \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} = \frac{m}{2} |\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle|^2 + e\chi_2 = H_2,$$

$$e\chi_2 \stackrel{\text{det}}{=} V_2 + Q_2 + \hbar_2 (\mathbf{v}, \nabla_r \varphi_2), \quad (1.98)$$

$$Q_2 \stackrel{\text{det}}{=} \frac{\alpha_2}{\beta_2} \frac{\Delta_v |\Psi_2|}{|\Psi_2|} = \frac{\alpha_2}{2\beta_2} \left(\Delta_v S_2 + \frac{1}{2} |\nabla_v S_2|^2 \right),$$

где функция Q_2 соответствует квантовому потенциалу в фазовом пространстве (\mathbf{r}, \mathbf{v}) . Функция Лагранжа $L_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \dot{\mathbf{v}}, t)$

$$-\frac{1}{\beta_2} \frac{d_2 \varphi_2}{dt} \stackrel{\text{det}}{=} -\frac{1}{\beta_2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v}, \nabla_r) + (\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle, \nabla_r) \right) \varphi_2 =$$

$$= \frac{1}{2\alpha_2 \beta_2} \frac{1}{2} |\langle \dot{\mathbf{v}}_p \rangle|^2 + U_2 + Q_2 = -L_2 \quad (1.99)$$

связана с гамильтонианом H_2 преобразованием Лежандра

$$L_2 + H_2 = \hbar_2 (\mathbf{v}, \nabla_r \varphi_2) + m(\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle, \langle \dot{\mathbf{v}}_p \rangle). \quad (1.100)$$

Аппроксимация Власова–Моэля (1.44) не содержит вихревого поля $\gamma_2 \mathbf{A}_2$, поэтому по теореме Гельмгольца справедливо представление

$$\begin{aligned} \langle \dot{v}_\mu \rangle &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1} (\hbar/2)^{2n}}{m^{2n+1} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U_1}{\partial x_\mu^{2n+1}} \frac{1}{f_2} \frac{\partial^{2n} f_2}{\partial v_\mu^{2n}} = -\alpha_2 \frac{\partial}{\partial v_\mu} \Phi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \\ \langle \dot{v}_\mu \rangle &= -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x_\mu} + \frac{(\hbar/2)^2}{m^3 3!} \frac{\partial^3 U_1}{\partial x_\mu^3} \frac{1}{f_2} \frac{\partial^2 f_2}{\partial v_\mu^2} + \dots = \\ &= -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v_\mu} \left[\frac{\partial U_1}{\partial x_\mu} v_\alpha - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \frac{\partial^3 U_1}{\partial x_\mu^3} \left(S_2 + \frac{\partial S_2}{\partial v_\mu} \right) + \dots \right], \quad (1.101) \end{aligned}$$

$$\Phi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = -\frac{2}{\hbar_2} \left[v_\alpha \frac{\partial U_1}{\partial x_\mu} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \frac{\partial^3 U_1}{\partial x_\mu^3} \left(S_2 + \frac{\partial S_2}{\partial v_\mu} \right) + \dots \right] + \text{const},$$

где постоянная величина const не зависит от скорости и в соответствии с уравнением Гамильтона–Якоби (1.98) может быть принята $(-E_2/\hbar_2)t$ [45].

Для полиномиального потенциала $U_{1,4}(x) = \sum_{k=0}^4 a_k x^k$ выполнено условие $\partial^l U_{1,4}/\partial x_\alpha^l = 0$ при $l \geq 5$, следовательно, выражение (1.101) содержит только два первых слагаемых:

$$\begin{aligned} -\hbar_2 \varphi_2(x, v, t) &= v \sum_{k=1}^4 a_k k x^{k-1} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \left(S_2 + \frac{\partial S_2}{\partial v} \right) \times \\ &\quad \times \sum_{k=3}^4 a_k k(k-1)(k-2) x^{k-3} + E_2 t. \quad (1.102) \end{aligned}$$

В случае гармонического осциллятора ($U_1(x) = (m\omega^2 x^2)/2$) из выражений (1.98), (1.101), (1.102) получаем

$$\begin{aligned} -\hbar_2 \varphi_2(x, v, t) &= m\omega^2 x v + E_2 t, \quad \langle \dot{v} \rangle = -\omega^2 x, \\ E_2 &= \frac{m}{2} \omega^4 x^2 + e\chi_2, \end{aligned} \quad (1.103)$$

$$\begin{aligned} e\chi_2 &= U_2 + Q_2 - m\omega^2 v^2 = E_2 - \frac{m}{2} \omega^4 x^2, \\ U_2 &= E_2 + m\omega^2 \left(v^2 - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \right) + \frac{\hbar_2^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{f_2}} \frac{\partial^2 \sqrt{f_2}}{\partial v^2}. \end{aligned} \quad (1.104)$$

Используя метод характеристик (1.25), (1.27), возьмем простейший вид функции $f_2(\varepsilon) \sim e^{-2\varepsilon}$, тогда выражение для потенциала (1.104) примет вид

$$\frac{\partial^2 \sqrt{f_2}}{\partial v^2} = \text{const} \frac{m}{\hbar\omega} \left[\frac{m}{\hbar\omega} v^2 - 1 \right] \exp \left[-\frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \right], \quad (1.105)$$

$$U_2 = E_2 - \frac{\hbar_2^2}{2\hbar\omega} + m\omega^2 \left(1 + \frac{\hbar_2^2}{2\hbar^2\omega^4} \right) v^2 - \frac{1}{2} m\omega^4 x^2.$$

Так как для гармонического осциллятора [45] $\omega \stackrel{\text{det}}{=} \omega_1 = \sigma_v/\sigma_r = \sigma_{\dot{v}}/\sigma_v \stackrel{\text{det}}{=} \omega_2$, $\sigma_r\sigma_v = |\alpha_1| = \hbar/(2m)$, $\sigma_v\sigma_{\dot{v}} = |\alpha_2| = \hbar_2/(2m)$ и потенциал U_2 определен с точностью для константы, положим $E_2 = (\hbar_2\omega_2)/2$, тогда

$$U_2(x, v) = -\frac{\omega^2}{2\alpha_2\beta_2} \left[\left(1 + \frac{\alpha_2^2}{2\omega^2\sigma_v^4} \right) v^2 - \frac{1}{2}\omega^2 x^2 \right]. \quad (1.106)$$

С учетом (1.106) уравнение (1.97) для гармонического осциллятора примет вид

$$\frac{i}{\beta_2} \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \frac{\alpha_2}{\beta_2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \Psi_2 - \frac{i}{\beta_2} v \frac{\partial}{\partial x} \Psi_2 + U_2 \Psi_2, \quad (1.107)$$

где

$$\Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \text{const} \exp \left[-\frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) - i \left(\frac{m\omega^2}{\hbar_2} xv + \frac{E_2}{\hbar_2} t \right) \right]. \quad (1.108)$$

Волновая функция (1.108) соответствует функции Вигнера основного состояния гармонического осциллятора (1.31)

$$|\Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)|^2 = f_{2,0}(x, v) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left[-\frac{m}{\hbar\omega} (v^2 + \omega^2 x^2) \right]. \quad (1.109)$$

Как отмечалось ранее, других решений $\Psi_2(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, отличных от решения (1.108), уравнение (1.107) иметь не может (см. рис. 2).

Заметим, что рассмотренные аналоги уравнения Шрёдингера в фазовом пространстве (1.94) и (1.97) имеют отличия и, как следствие, их решения не совпадают. Построение уравнения (1.94) делалось феноменологическим методом и даже для основного состояния гармонического осциллятора не дает известного решения (1.23). Уравнение (1.97) строилось из первых принципов на основе второго уравнения Власова (1.14) и привело к точному решению (1.23) для основного состояния гармонического осциллятора. Других решений уравнение (1.97) иметь не может, так как на уравнение Власова (1.14) было наложено условие положительности функции распределения (см. рис. 3). Уравнение (1.94), напротив, имеет множество решений (1.60), которые не совпадают с известными решениями (1.23).

Так как функции (1.95) и (1.109) зависят только от переменной ε , то исходя из метода характеристик ($\varepsilon = \text{const}$) они удовлетворяют уравнению Моэля (1.33) для гармонического осциллятора. Но функции (1.44) не приводят к решению уравнения Шрёдингера (1.14). Проблема в том, что не любое решение уравнения Моэля–Власова будет давать квантовые решения. При построении уравнения Шрёдингера (1.7) из первого уравнения Власова (1.1) использовалось условие связи (1.9) фазы волновой функции и скалярного потенциала в разложении векторного поля потока вероятностей $\langle \mathbf{v} \rangle$. Аналогичное условие связи между фазой φ_2 и полем $\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle$ используется при построении уравнения (1.97) из второго уравнения Власова (1.2) [45]. При построении уравнения (1.97) таких условий не накладывалось. Фазы функций (1.95) отличаются от фазы (1.103), следовательно, уравнения (1.43) и (1.46) имеют разные фазовые траектории при решении уравнения Гамильтона–Якоби (1.98).

2. ФУНКЦИЯ ВИГНЕРА КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ С ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

2.1. Представление функции Вигнера. Решения ψ_n (1.22) для квантового гармонического осциллятора представляют собой ортонормированный базис в пространстве L_2 [64]. Следовательно, некоторое решение $\Psi \in L_2$ уравнения Шрёдингера может быть разложено по базису $\{\psi_n\}$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(t) \psi_n(x), \\ \tilde{\Psi}(p, t) &= \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(t) \tilde{\psi}_n(p), \end{aligned} \tag{2.1}$$

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

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

где c_n — коэффициенты разложения.

Как следует из (2.1), волновая функция $\Psi \in L_2$ произвольной квантовой системы может быть представлена как суперпозиция волновых функций осциллятора (1.22). Зная волновую функцию (2.1), можно построить функцию

Вигнера (1.32). Учитывая (2.1) и (1.32), определим новые функции $w_{n,k}(x, p)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{W} \stackrel{\text{def}}{=} \{w_{n,k}(x, p)\} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_n \left(x - \frac{s}{2}\right) \psi_k \left(x + \frac{s}{2}\right) \exp\left(-i\frac{ps}{\hbar}\right) ds = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_n \left(p - \frac{\xi}{2}\right) \tilde{\psi}_k \left(p + \frac{\xi}{2}\right) \exp\left(i\frac{x\xi}{\hbar}\right) d\xi, \quad (2.2) \end{aligned}$$

где $n, k \in \mathbb{N}_0$. Выражение (2.2) представляет собой оператор Вейля в базе собственных функций гармонического осциллятора. Заметим, что матрица \mathcal{W} является эрмитовой матрицей $\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}$, т. е. $w_{n,k}(x, p) = \bar{w}_{k,n}(x, p)$. Диагональные элементы $w_{n,n}$ матрицы \mathcal{W} (2.2) 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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x, p) dp &= \bar{\psi}_n(x) \psi_k(x), \\ \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x, p) dx &= \bar{\psi}_n(p) \tilde{\psi}_k(p). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Доказательство свойства 1. Действительно, в силу определения (2.2) получим

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x, p) dp &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-i\frac{ps}{\hbar}\right) dp \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_n \left(x - \frac{s}{2}\right) \psi_k \left(x + \frac{s}{2}\right) ds = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(s) \bar{\psi}_n \left(x - \frac{s}{2}\right) \psi_k \left(x + \frac{s}{2}\right) ds = \bar{\psi}_n(x) \psi_k(x), \\ \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,k}(x, p) dx &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i\frac{x\xi}{\hbar}\right) dx \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_n \left(p - \frac{\xi}{2}\right) \tilde{\psi}_k \left(p + \frac{\xi}{2}\right) d\xi = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\xi) \bar{\psi}_n \left(p - \frac{\xi}{2}\right) \tilde{\psi}_k \left(p + \frac{\xi}{2}\right) d\xi = \bar{\Psi}_n(p) \tilde{\psi}_k(p), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Используя выражение (2.2), можно записать функцию Вигнера (1.32) произвольной квантовой системы, описываемой волновой функцией Ψ :

$$W(x, p) = \sum_{n,k=0}^{+\infty} \rho_{k,n} w_{n,k}(x, p) = \text{Tr} [\rho \mathcal{W}(x, p)], \quad (2.4)$$

где $\rho_{k,n} = c_k \bar{c}_n$ — матрица плотности. Матрица плотности ρ эрмитова ($\rho = \rho^\dagger$). Согласно (2.1) для матрицы ρ выполнено условие $\text{Tr} [\rho] = 1$. Из выражения (2.4) следует, что, зная матрицу \mathcal{W} , можно получить функцию Вигнера произвольной квантовой системы. В матричной форме выражение (2.4) может быть представлено в виде свертки

$$W = \bar{C}^T \mathcal{W} C, \quad \bar{C}^T = \{\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots\}, \quad C = \{c_1, c_2, \dots\}^T. \quad (2.5)$$

Зная волновую функцию Ψ , согласно (2.1) используя формулу $c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_n(x) \Psi(x) dx$, можно найти вектор C и применить формулы (2.5), (2.4) для получения выражения для функции Вигнера W .

Выражение (2.4) в квантовой механике интерпретируется как среднее значение оператора $\hat{\mathcal{W}}$. Следовательно, согласно (2.4) 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), необходимо найти вид функций $w_{n,k}(x, p)$ для $n \neq k$.

Рассмотрим полином $P_{n,k}(z_1, z_2)$ двух переменных $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ вида [41]

$$P_{n,k}(z_1, z_2) \stackrel{\text{det}}{=} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} n! k!}} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{1}{2^s s!} \frac{\partial^{2s}}{\partial z_1^s \partial z_2^s} [(2z_1)^n (2z_2)^k], \quad (2.6)$$

или

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

Из выражения (2.6) следует, что полином $P_{n,k}(z_1, z_2)$ удовлетворяет условию

$$\bar{P}_{n+l,n}(-z, \bar{z}) = (-1)^l P_{n,n+l}(-z, \bar{z}). \quad (2.7)$$

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

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_2(x, y) P_{n_1, k_1}(x, y) P_{n_2, k_2}(x, y) dx dy \quad (2.8)$$

при $n_1 + n_2$ четном и $k_1 + k_2$ нечетном или при $n_1 + n_2$ нечетном и $k_1 + k_2$ четном будет равен нулю, т. е. $I = 0$.

При $n_1 + n_2$ и $k_1 + k_2$ нечетных или при $n_1 + n_2$ и $k_1 + k_2$ четных интеграл I будет строго положительным, т. е. $I > 0$.

Доказательство теоремы 1. Докажем первое утверждение теоремы 1. Пусть для определенности величина $n = n_1 + n_2$ является четной, а величина $k = k_1 + k_2$ — нечетной. Подставим выражение (2.6) в интеграл (2.8), получим

$$I = \frac{2^{n+k} n_1! n_2! k_1! k_2!}{\sqrt{2^{n+k} n_1! n_2! k_1! k_2!}} \times \\ \times \sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1)} \sum_{l=0}^{\min(n_2, k_2)} \frac{1}{(n_1 - s)!(n_2 - l)!} \frac{1}{(k_1 - s)!(k_2 - l)!} \frac{1}{2^{s+l} s! l!} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n-(l+s)} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} y^{k-(l+s)} dy. \quad (2.9)$$

Обозначим $\lambda = l + s$ и рассмотрим двойной интеграл, стоящий в выражении (2.9):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n-\lambda} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} y^{k-\lambda} dy. \quad (2.10)$$

Величина λ может быть четной или нечетной и меняться от 0 до $\min(n_1, k_1) + \min(n_2, k_2)$. Рассмотрим оба случая значений λ : четное и нечетное значения. Если значение λ четное, то величина $n - \lambda$ четная, а величина $k - \lambda$ будет нечетной. Следовательно, второй интеграл в выражении (2.10) по переменной y будет равен нулю. Если значение λ нечетное, то величина $n - \lambda$ нечетная, а величина $k - \lambda$ будет четной. Следовательно, первый интеграл в выражении (2.10) по переменной x будет равен нулю. Таким образом, при любом значении λ интеграл (2.10) будет равен нулю. Аналогичные рассуждения справедливы при нечетном значении n и четном значении k . В результате первое утверждение теоремы 1 доказано.

Докажем второе утверждение теоремы 1. Пусть n, k являются четными, тогда при нечетных значениях λ оба интеграла в выражении (2.10) будут обращаться в нуль. То есть в суммах (2.9) будут отсутствовать слагаемые, у которых $\lambda = l + s$ является нечетным. При четных значениях λ величины $n - \lambda, k - \lambda$ будут четными. Следовательно, интегралы (2.10) будут отличными от нуля и строго положительными. В результате, в сумме (2.9) отличными от нуля будут только слагаемые с четными значениями λ .

Если n, k являются нечетными, то по аналогии с предыдущим случаем отличными от нуля будут слагаемые, для которых значения λ являются не-

четными. Таким образом, в обоих случаях при четных и нечетных значениях n, k интеграл (2.8) будет строго положительным, что и требовалось доказать.

Теорема 2. Пусть числа $n = n_1 + n_2, k = k_1 + k_2$ из теоремы 1 одновременно являются четными или нечетными, тогда интеграл (2.8) принимает значения

$$I_{n,k} = \pi \sqrt{n_1!n_2!k_1!k_2!} \times \underbrace{\sum_{s=0}^{\min(n_1,k_1)} \sum_{l=0}^{\min(n_2,k_2)}_{s+l,n,k-\text{even/odd}}}_{\substack{\min(n_1,k_1) \min(n_2,k_2)}} \frac{|k - (l + s) - 1|!!}{s!(n_1 - s)!(k_1 - s)!} \frac{|n - (l + s) - 1|!!}{l!(n_2 - l)!(k_2 - l)!}. \quad (2.11)$$

При этом суммирование в выражении (2.11) производится по всем четным значениям $s + l$ при четных значениях n, k и по всем нечетным значениям $s + l$ при нечетных значениях n, k .

Доказательство теоремы 2. Интегралы (2.10) 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 четных значений $n - \lambda$ и $k - \lambda$ интеграл (2.10) будет отличен от нуля:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{2n} dx = \sqrt{\pi} \frac{|2n - 1|!!}{2^n}, \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (2.12)$$

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

Используя выражение (2.12), для интеграла (2.9) получаем представление (2.11), что и требовалось доказать.

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

$$\tilde{\delta}_{n,k} = \begin{cases} 1, & n, k \text{ — четные,} \\ 1, & n, k \text{ — нечетные,} \\ 0, & n \text{ — четный, } k \text{ — нечетный,} \\ 0, & n \text{ — нечетный, } k \text{ — четный.} \end{cases} \quad (2.13)$$

Следствие 1. Согласно теоремам 2 и 3 для полиномов $P_{n,k}(x, y)$ справедливо следующее представление:

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

$$\mathcal{N}_{n_1+n_2, k_1+k_2}^{(2)} = \pi \sqrt{n_1! n_2! k_1! k_2!} \times \underbrace{\sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1)} \sum_{l=0}^{\min(n_2, k_2)} \frac{|k - (l + s) - 1|! |n - (l + s) - 1|!}{s!(n_1 - s)!(k_1 - s)! l!(n_2 - l)!(k_2 - l)!}}_{s+l, n, k \text{--even/odd}}. \quad (2.14)$$

Теорема 3. Пусть $n, k \in \mathbb{N}_0$ и ς_1, ς_2 — постоянные величины, тогда для полиномов Эрмита справедливо выражение

$$\frac{1}{\sqrt{2^{n+k} \pi n! k!}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^2} H_n(\varsigma + \varsigma_1) H_k(\varsigma + \varsigma_2) d\varsigma = P_{n,k}(\varsigma_1, \varsigma_2). \quad (2.15)$$

Доказательство теоремы 3. Воспользуемся формулой для полиномов Эрмита

$$H_n(\varsigma + \xi) = \sum_{k=0}^n C_n^k H_k(\varsigma) (2\xi)^{n-k}. \quad (2.16)$$

Подставляя (2.16) в левую часть выражения (2.15), получим

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^2} H_n(\varsigma + \varsigma_1) H_k(\varsigma + \varsigma_2) d\varsigma = \\ & = \sum_{s=0}^n \sum_{l=0}^k C_n^s C_k^l (2\varsigma_1)^{n-s} (2\varsigma_2)^{k-l} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^2} H_s(\varsigma) H_l(\varsigma) d\varsigma = \\ & = \sqrt{\pi} \sum_{s=0}^n \sum_{l=0}^k C_n^s C_k^l (2\varsigma_1)^{n-s} (2\varsigma_2)^{k-l} 2^s s! \delta_{sl} = \\ & = 2^n \sqrt{\pi} n! \sum_{s=0}^{\min(n, k)} C_k^s \frac{1}{(n-s)!} \varsigma_1^{n-s} (2\varsigma_2)^{k-s} = \\ & = 2^n 2^k n! k! \sqrt{\pi} \varsigma_1^n \varsigma_2^k \sum_{s=0}^{\min(n, k)} \frac{1}{s!(k-s)!(n-s)!} \frac{1}{(2\varsigma_1 \varsigma_2)^s}. \end{aligned}$$

Данное выражение согласно выражению (2.7) доказывает теорему.

Следствие 2. Из теоремы 3 следует, что при $n = k$ формула (2.15) переходит в выражение

$$\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int e^{-\varsigma^2} H_n(\varsigma + \varsigma_1) H_n(\varsigma + \varsigma_2) d\varsigma = P_{n,n}(\varsigma_1, \varsigma_2) = L_n(-2\varsigma_1 \varsigma_2), \quad (2.17)$$

где L_n — полиномы Лагерра.

Доказательство следствия 2. Действительно, с одной стороны, для полиномов Лагерра справедливо представление [65, 66]

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n C_n^{n-k} \frac{(-x)^k}{k!} = \sum_{k=0}^n \frac{n!(-x)^k}{(n-k)!k!} =$$

$$= \sum_{s=0}^n \frac{n!(-x)^{n-s}}{s!(n-s)!(n-s)!} = \sum_{s=0}^n \frac{C_n^s}{(n-s)!} (-x)^{n-s}. \quad (2.18)$$

С другой стороны, из формулы (2.16) при $n = k$ получаем

$$\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varsigma^2} H_n(\varsigma + \varsigma_1) H_n(\varsigma + \varsigma_2) d\varsigma =$$

$$= 2^n n! \varsigma_1^n \varsigma_2^n \sum_{s=0}^n \frac{1}{s!(n-s)!(n-s)!} \frac{1}{(2\varsigma_1 \varsigma_2)^s} =$$

$$= \sum_{s=0}^n \frac{C_n^s}{(n-s)!} (2\varsigma_1 \varsigma_2)^{n-s} = L_n(-2\varsigma_1 \varsigma_2). \quad (2.19)$$

Сравнивая выражения (2.18) и (2.19), получаем справедливость выражения (2.17).

Теорема 4. Элементы матрицы \mathcal{W} имеют вид

$$w_{n,k}(x, p) = \frac{(-1)^k}{\pi \hbar} \exp\left(-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2 \kappa^2}\right) P_{n,k}\left(-\kappa x - i \frac{p}{\hbar \kappa}, \kappa x - i \frac{p}{\hbar \kappa}\right), \quad (2.20)$$

где $\kappa = \sqrt{(m\omega)/\hbar}$.

Доказательство теоремы 4. Используя формулу (2.15), получим выражение для функции $w_{n,k}(x, p)$. Из определения (2.2) следует, что

$$w_{n,k}(x, p) = \frac{1}{2\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} n! k!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} \times$$

$$\times \int \exp\left\{-\frac{m\omega \left[\left(x + \frac{s}{2}\right)^2 + \left(x - \frac{s}{2}\right)^2\right]}{2\hbar} - i \frac{ps}{\hbar}\right\} \times$$

$$\times H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x - \frac{s}{2}\right)\right) H_k\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x + \frac{s}{2}\right)\right) ds =$$

$$= \frac{1}{2\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{2^{n+k} \pi n! k!}} e^{-\kappa^2 x^2} \int \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} - i \frac{p\xi}{\kappa \hbar}\right) \times$$

$$\times H_n\left(\kappa x - \frac{\xi}{2}\right) H_k\left(\kappa x + \frac{\xi}{2}\right) d\xi, \quad (2.21)$$

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

$$-\left(\frac{1}{2}\xi + i\frac{p}{\hbar\kappa}\right)^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2} = -\zeta^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2}. \quad (2.22)$$

Подставляя (2.22) в выражение (2.21) и используя свойство полиномов Эрмита $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$ (т. е. $H_n(-(\zeta - \kappa x - i(p/\hbar\kappa))) = (-1)^n H_n(\zeta - \kappa x - i(p/\hbar\kappa))$), получим

$$w_{n,k}(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar\sqrt{2^{n+k}\pi n!k!}} \exp\left(-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2}\right) \times \\ \times \int e^{-\zeta^2} H_n\left(\zeta - \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) H_k\left(\zeta + \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) d\zeta. \quad (2.23)$$

Обозначим $\zeta_1 = \kappa x - i(p/\hbar\kappa)$, $\zeta_2 = -\kappa x - i(p/\hbar\kappa)$ и воспользуемся формулой (2.15), для выражения (2.23) получим

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

что и требовалось доказать.

Следствие 3. Из теоремы 4 и свойства 1 следует, что для полиномов $P_{n,k}$ справедливы соотношения

$$\frac{(-1)^n}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2}\right) \times \\ \times P_{n,k}\left(-\kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}, \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) dp = \bar{\psi}_n(x)\psi_k(x), \\ \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2}\right) \times \\ \times P_{n,k}\left(-\kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}, \kappa x - i\frac{p}{\hbar\kappa}\right) dx = \bar{\psi}_n(p)\tilde{\psi}_k(p).$$

Заметим, что выражение (2.20) при $n = k$ согласно следствию 3 переходит в функции Вигнера.

Из эрмитовости матрицы \mathcal{W} и выражения (2.5) следует, что

$$\bar{W}^T = (C^T \bar{W} \bar{C})^T = (\bar{W} \bar{C})^T C = \bar{C}^T (\bar{W})^T C = \bar{C}^T \mathcal{W}^\dagger C = \bar{C}^T \mathcal{W} C = W,$$

и полученные элементы $w_{n,k}(x, p)$ (2.20) удовлетворяют $w_{n,k}(x, p) = \bar{w}_{k,n}(x, p)$. Действительно, обозначим $z = \kappa x + i(p/\hbar\kappa)$, тогда выражение (2.20) примет вид

$$w_{n,k}(x, p) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} \exp\left(-\kappa^2 x^2 - \frac{p^2}{\hbar^2\kappa^2}\right) P_{n,k}(-z, \bar{z}),$$

$$P_{n,k}(-z, \bar{z}) = \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-z)^{n-s} \bar{z}^{k-s}}{2^s s!(k-s)!(n-s)!} =$$

$$= (-1)^n z^n \bar{z}^k \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s!(k-s)!(n-s)! |z|^{2s}}, \quad (2.24)$$

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

Проверим условие эрмитовости $w_{n,k}(x, p) = \bar{w}_{k,n}(x, p)$, из представления (2.24) получаем

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

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

Отметим, что полученные выражения $w_{n,k}(x, p)$ в общем случае являются комплексными (2.24), только при $n = k$ диагональные элементы $w_{n,n}(x, p)$ являются действительными. При $n \neq k$ недиагональные элементы представимы в виде

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

$$\times \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s!(k-s)!(n-s)! |z|^{2s}} \begin{cases} \bar{z}^{k-\min(n,k)}, & k > n, \\ z^{n-\min(n,k)}, & k < n, \end{cases} \quad (2.25)$$

или

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

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

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), т. е.

$$|z|^2 = \frac{2}{\hbar\omega} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) = 2\varepsilon(x, p). \quad (2.26)$$

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

$$\phi = \arg z = \arctg \left(\frac{p}{m\omega x} \right). \quad (2.27)$$

Выражение (2.27) указывает на важное физическое значение недиагональных элементов матрицы \mathcal{W} в фазовом пространстве. Для квантового гармонического осциллятора $n = k$ и недиагональные элементы отсутствуют, что приводит к постоянству функции плотности вероятностей на фазовых траекториях (2.26), так как влияние фазы ϕ (2.27) в выражении (2.25) отсутствует:

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} w_{1,1} & 0 \dots & 0 \\ 0 & w_{2,2} \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots \end{pmatrix}, \quad \varepsilon = \frac{|z|^2}{2} = \text{const}. \quad (2.28)$$

Для произвольной квантовой системы в общем случае $n \neq k$, поэтому значение фазы ϕ (2.27) вносит вклад в функцию плотности вероятности $w_{n,k}(x, p)$ (2.25) вдоль фазовой траектории $\varepsilon = \text{const}$, где функция $\varepsilon(x, p)$ отлична от выражения (1.25), (2.26). Поэтому плотность вероятности (функция Вигнера) W будет переменной вдоль фазовой траектории $\varepsilon = \text{const}$.

Как видно из выражения (2.25), при движении по замкнутой фазовой траектории изменение плотности вероятности вдоль фазовой траектории $\varepsilon = \text{const}$ будет иметь периодический характер. Величина $\varpi_{n,k} = n - k \in \mathbb{Z}$ принимает целые значения. Из выражения (2.29) следует, что функции $w_{n,k}(x, p)$ будут периодичными с периодом

$$T_{n,k} = \frac{2\pi}{|\varpi_{n,k}|} = \frac{2\pi}{|n - k|}. \quad (2.29)$$

Из (2.29) следует, что чем дальше от диагонали матрицы \mathcal{W} , тем период меньше, т. е. выше частота осцилляции $|\varpi_{n,k}|$ комплексной функции плотности вероятности $w_{n,k}(x, p)$. Чем ближе к диагонали матрицы \mathcal{W} , тем больше период (2.29) осцилляций плотности вероятностей $w_{n,k}(x, p)$ (меньше частота $|\varpi_{n,k}|$). На диагонали матрицы \mathcal{W} частота осцилляций равна нулю $|\varpi_{n,n}| = 0$ и плотность вероятности становится действительной величиной и постоянной вдоль фазовой траектории $\varepsilon = \text{const}$ (2.26).

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

$$|w_{n,k}(x, p)| = \frac{1}{\pi\hbar} |z|^{n+k} e^{-|z|^2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! |z|^{2s}}, \quad (2.30)$$

т. е. на фазовых траекториях $\varepsilon \sim |z| = \text{const}$ согласно (2.30),

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

С точки зрения теории функций комплексного переменного элементы $w_{n,k}(x, p)$ матрицы \mathcal{W} являются многолиственными комплексными функциями на римановой поверхности. Диагональные элементы $w_{n,n}(x, p)$ имеют постоянные действительные значения на фазовых траекториях $\varepsilon = \text{const}$ (2.26) при фазовых углах $0 \leq \phi \leq 2\pi$.

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

$$\Upsilon_{n,k}(x) \stackrel{\text{det}}{=} x^{n+k} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)! x^{2s}}. \tag{2.31}$$

Свойство 2. Полиномы $\Upsilon_{n,k}(x)$ удовлетворяют условию

$$P_{n,k}(-z, \bar{z}) = (-1)^n \Upsilon_{n,k}(|z|) e^{i(n-k)\varphi}, \tag{2.32}$$

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

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

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{n_1+n_2, k_1+k_2}^{(1)} &= \sqrt{\frac{\pi}{2^{n_1+n_2+k_1+k_2}}} \sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1)} \times \\ &\times \sum_{l=0}^{\min(n_2, k_2)} \frac{(-1)^{s+l} |n_1 + n_2 + k_1 + k_2 - 2(l+s) - 1|!}{s! l! (k_1 - s)! (n_1 - s)! (k_2 - l)! (n_2 - l)!}; \end{aligned} \tag{2.33}$$

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

Доказательство свойства 2. Выражение (2.32) получается из сравнения выражений (2.31) и (2.25). Вычислим интеграл (2.33):

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_1(x) \Upsilon_{n_1, k_1}(x) \Upsilon_{n_2, k_2}(x) dx = \\ &= \sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1)} \sum_{l=0}^{\min(n_2, k_2)} \frac{(-1)^{s+l}}{2^{s+l} s! (k_1 - s)! (n_1 - s)! l! (k_2 - l)! (n_2 - l)!} \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n_1+n_2+k_1+k_2-2(s+l)} dx. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Вычислим интеграл, стоящий в выражении (2.34), используя (2.12) и теорему 2. Обозначим $n = n_1 + n_2$, $k = k_1 + k_2$, $\lambda = l + s$. Значение 2λ является четным. Если значения n и k четные, то выражение $n + k - 2\lambda$ тоже четное. Если n и k нечетные, то выражение $n + k$ является четным и выражение $n + k - 2\lambda$ тоже четное. В результате при n и k четных и при n и k нечетных интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n+k-2\lambda} dx$ будет отличен от нуля:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n+k-2\lambda} dx = 2^\lambda \sqrt{\frac{\pi}{2^{n+k}}} |n + k - 2\lambda - 1|!! \tag{2.35}$$

Если значение n или k нечетное, то выражение $n + k - 2\lambda$ нечетное и интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{n+k-2\lambda} dx$ равен нулю. Подставляя (2.35) в (2.34), получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_1(x) \Upsilon_{n_1, k_1}(x) \Upsilon_{n_2, k_2}(x) dx = \sqrt{\frac{\pi}{2^{n+k}}} \sum_{s=0}^{\min(n_1, k_1)} \sum_{l=0}^{\min(n_2, k_2)} \frac{(-1)^{s+l} |n + k - 2(l + s) - 1|!!}{s!!(k_1 - s)!(n_1 - s)!(k_2 - l)!(n_2 - l)!},$$

что и требовалось доказать.

На рис. 4 приведены графики функций $e^{-x^2} \Upsilon_{n,k}(x)$. Видно, что полиномы $\Upsilon_{n,k}(x)$ имеют нули и являются знакопеременными. Относительно начала координат полиномы $\Upsilon_{n,k}(x)$ являются четными и нечетными.

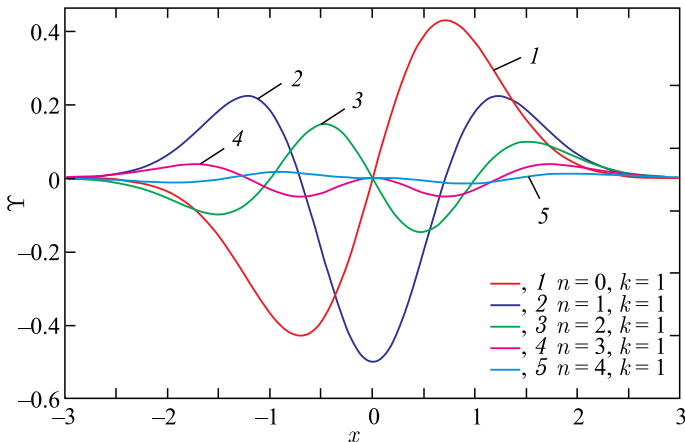


Рис. 4. Графики функций $e^{-x^2} \Upsilon_{n,k}(x)$

Запишем выражения для элементов $w_{n,k}(x, p)$ согласно (2.25)–(2.27), тогда (2.31) примет вид

$$w_{n,k}(x, p) = \frac{1}{\pi \hbar} e^{-|z|^2} \Upsilon_{n,k}(|z|) e^{i(n-k)\varphi}, \quad (2.36)$$

или

$$w_{n,k}(x, p) = \frac{1}{\pi \hbar} e^{-2\varepsilon(x,p)} \Upsilon_{n,k} \left(\sqrt{2\varepsilon(x,p)} \right) \exp \left[i(n-k) \operatorname{arctg} \left(\frac{p}{m\omega x} \right) \right].$$

Из выражений (2.36) следует, что при изменении фазового угла $0 \leq \phi \leq 2\pi$ 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 $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Значения 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 [45, 67] 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 $w_{n,k}(x, p)$ (2.29). При движении по замкнутой фазовой траектории $\varepsilon = \text{const}$ осцилляции представляют собой вращение «векторов» $w_{n,k}(x, p)$ по римановой поверхности.

Теорема 5. Пусть $\rho_{k,n} = c_k \bar{c}_n$ — матричные элементы матрицы плотности и $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ — матрица поворота

$$\Omega^{(n,k)}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varpi_{n,k}\varphi) & \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \\ -\sin(\varpi_{n,k}\varphi) & \cos(\varpi_{n,k}\varphi) \end{pmatrix}, \quad \varpi_{n,k} = n - k; \quad (2.37)$$

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

$$\mathbf{n}_k \stackrel{\text{det}}{=} \begin{pmatrix} \cos \alpha_k \\ \sin \alpha_k \end{pmatrix} = \frac{1}{|c_k|} \begin{pmatrix} \operatorname{Re} c_k \\ \operatorname{Im} c_k \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = \arg c_k, \quad (2.38)$$

тогда функция Вигнера квантовой системы представима в виде

$$W(x, p) = \frac{e^{-2\varepsilon(x,p)}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \Upsilon_{n,k} \left(\sqrt{2\varepsilon(x,p)} \right) \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n, \quad (2.39)$$

где фаза $\phi = \phi(x, p)$ имеет вид (2.27) и соответствует полярному углу точки (x, p) на фазовой плоскости.

Доказательство теоремы 5. Преобразуем выражение (2.5) для функции Вигнера:

$$\begin{aligned} W &= \bar{C}^T \mathcal{W} C = \\ &= \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left[c_n^{(R)} w_{n,k}^{(R)} c_k^{(R)} - c_n^{(R)} w_{n,k}^{(I)} c_k^{(I)} + c_n^{(I)} w_{n,k}^{(R)} c_k^{(I)} + c_n^{(I)} w_{n,k}^{(I)} c_k^{(R)} \right] + \\ &+ i \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left[c_n^{(R)} w_{n,k}^{(R)} c_k^{(I)} + c_n^{(R)} w_{n,k}^{(I)} c_k^{(R)} - c_n^{(I)} w_{n,k}^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} w_{n,k}^{(I)} c_k^{(I)} \right], \quad (2.40) \end{aligned}$$

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

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

$$\begin{aligned} W &= \sum_{n,k=0}^{+\infty} \left[w_{n,k}^{(R)} \left(c_n^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} c_k^{(I)} \right) + 2c_n^{(I)} w_{n,k}^{(I)} c_k^{(R)} \right] + \\ &+ i \sum_{n,k=0}^{+\infty} w_{n,k}^{(I)} \left(c_n^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} c_k^{(I)} \right). \quad (2.41) \end{aligned}$$

При суммировании мнимой части выражения (2.41) результат будет равен нулю, так как $w_{n,n}^{(I)} = 0$, а слагаемые $w_{n,k}^{(I)} (c_n^{(R)} c_k^{(R)} + c_n^{(I)} c_k^{(I)})$ при $n \neq k$ будут компенсированы слагаемыми $w_{k,n}^{(I)} (c_k^{(R)} c_n^{(R)} + c_k^{(I)} c_n^{(I)}) = -w_{n,k}^{(I)} (c_k^{(R)} c_n^{(R)} + c_k^{(I)} c_n^{(I)})$. В результате выражение (2.41) будет иметь только действительную часть. В соответствии с (2.36) для функции W получим

$$\begin{aligned} W &= \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |c_n| |c_k| \times \\ &\times \left[\cos(\varpi_{n,k} \varphi) (\cos \alpha_n \cos \alpha_k + \sin \alpha_n \sin \alpha_k) + \right. \\ &\left. + 2 \sin(\varpi_{n,k} \varphi) \sin \alpha_n \cos \alpha_k \right] = \\ &= \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |c_n| |c_k| \cos \alpha_k \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times [\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n + \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n] + \\
 & + \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |c_n| |c_k| \sin \alpha_n \times \\
 & \times [\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_k + \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_k]. \quad (2.42)
 \end{aligned}$$

Примем во внимание, что $\varpi_{n,k} = n - k = -\varpi_{k,n}$, а полиномы $\Upsilon_{n,k}$ в силу определения (2.31) являются симметричными по индексам n и k , т. е. $\Upsilon_{n,k} = \Upsilon_{k,n}$. В результате выражение (2.42) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
 W = & \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |\rho_{k,n}| \cos \alpha_k \times \\
 & \times [\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n + \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n] + \\
 & + \frac{e^{-|z|^2}}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(|z|) |\rho_{k,n}| \sin \alpha_k \times \\
 & \times [\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n - \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n], \quad (2.43)
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n &= (\cos \alpha_k \quad \sin \alpha_k) \begin{pmatrix} \cos(\varpi_{n,k}\varphi) & \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \\ -\sin(\varpi_{n,k}\varphi) & \cos(\varpi_{n,k}\varphi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha_n \\ \sin \alpha_n \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n &= \cos \alpha_k [\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n + \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n] + \\
 & + \sin \alpha_k [\cos(\varpi_{n,k}\varphi) \sin \alpha_n - \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \cos \alpha_n]. \quad (2.44)
 \end{aligned}$$

Подставляя (2.44) в выражение (2.43), получим выражение (2.39). Теорема 5 доказана.

Замечание. С точки зрения классической механики произвольной квантовой системе будут соответствовать фазовые траектории (характеристики уравнения Лиувилля) $\mathcal{E}(x, p) = (p^2/2m) + U_1(x) = \text{const}$, которые в общем случае отличны от фазовых траекторий гармонического осциллятора $\varepsilon(x, p) \sim p^2/(2m) + (m\omega^2 x^2)/2 = \text{const}$. При движении по фазовым траекториям $\varepsilon = \text{const}$ матрица поворота $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ будет единичной матрицей и выражение (2.39) перейдет в функцию Вигнера гармонического осциллятора (1.31). В этом случае плотность вероятностей W будет постоянной величиной на фазовых траекториях $\varepsilon = \text{const}$. 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) будут иметь ненулевую правую часть (источники диссипаций $Q_2 \neq 0$). Наличие источников диссипаций приведет к непостоянству квазиплотности вероятностей

вдоль фазовых траекторий $\mathcal{E}(x, p) = \text{const}$. Матрица поворота $\Omega^{(n,k)}(\varphi)$ будет содержать ненулевые частоты $\varpi_{n,k}$, вызванные наличием недиагональных элементов в матрице плотности $\rho_{n,k}$.

Выражение (2.39) для функции Вигнера можно интерпретировать как разложение по «базисным» функциям вида

$$\begin{aligned} w_{c_{n,k}}(x, p) &= e^{-2\varepsilon} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) \cos(\varpi_{n,k}\varphi), \\ w_{s_{n,k}}(x, p) &= e^{-2\varepsilon} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) \sin(\varpi_{n,k}\varphi). \end{aligned} \quad (2.45)$$

На рис. 5, 6 приведены графики функций $w_{c_{n,k}}(x, p)$ для различных значений n и k . На рис. 5 функции $w_{c_{1,1}}$ и $w_{c_{5,5}}$ соответствуют главной диагонали матрицы \mathcal{W} и имеют частоту $\varpi_{n,n} = 0$. На фазовых траекториях $\varepsilon = \text{const}$ (концентрические окружности) функции $w_{c_{n,n}}$ и $w_{s_{n,n}}$ являются постоянными, что и наблюдается на рис. 5. Диагональные базисные функции (2.45) вносят существенный вклад в сумму (2.39) для систем, схожих с гармоническим осциллятором.

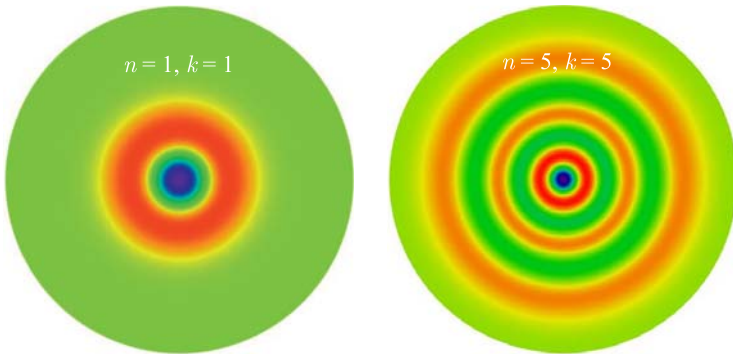


Рис. 5. «Базисные» функции плотности вероятности при $\varpi_{n,n} = 0$

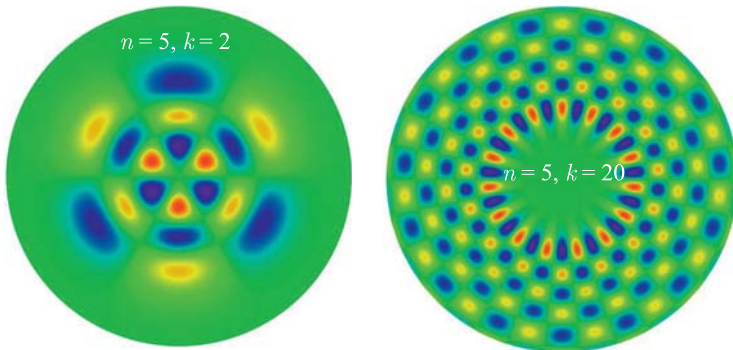


Рис. 6. «Базисные» функции плотности вероятности при $\varpi_{n,k} \neq 0$

На рис. 6 функции $w_{c_{n,k}}$ имеют ненулевые частоты $\varpi_{n,k} \neq 0$ ($\varpi_{5,2} = 3$ и $\varpi_{5,20} = -15$), что приводит к осцилляциям вдоль фазовых траекторий $\varepsilon = \text{const}$. Функции $w_{c_{n,k}}$ 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. Недиagonальные базисные функции (2.45) вносят существенный вклад для систем, сильно отличающихся от гармонического осциллятора.

2.2. Энергетический спектр квантовой системы. В п. 1.2 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 (1.53). Используя представление функции Вигнера (2.39), 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 $\varepsilon(x, p)$ и некоторой добавочной энергии:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(x, p) &= \frac{p^2}{2m} + U_1(x) = \hbar\omega\varepsilon(x, p) + \delta U(x), \\ \delta U(x) &= U_1(x) - \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

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

$$\langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{E}(x, p) W(x, p) dx dp, \quad (2.47)$$

где $W(x, p)$ — функция плотности вероятностей в фазовом пространстве, которой в данном случае соответствует выражение (2.39).

Теорема 6. Пусть энергия $\mathcal{E}(x, p)$ квантовой системы представима в виде (2.46) 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 (2.47) имеет вид

$$\begin{aligned} \langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle &= \sum_{n=0}^{+\infty} |\rho_{n,n}| \langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n + \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \cos(\alpha_k - \alpha_n) \times \\ &\times \sum_{(n-k+l)/2 \in \mathbb{Z}, l \geq |n-k|}^{+\infty} a_l \left(\frac{\hbar}{4m\omega} \right)^{l/2} C_l^{(n-k+l)/2} \times \\ &\times \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s \left(\frac{k+n+l}{2} - s \right)!}{2^s s! (k-s)! (n-s)!}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

где $\rho_{k,n} = c_k \bar{c}_n$ — матричные элементы матрицы плотности; $\alpha_k = \arg c_k$ (2.38); $C_n^k = n!/(k!(n-k)!)$ — число сочетаний; $\langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n = \hbar\omega(n+1/2)$ — собственные энергии гармонического осциллятора.

Доказательство теоремы 6. Перейдем в полярную систему координат в фазовой плоскости (1.52), в результате интеграл (2.47) примет вид

$$\begin{aligned} \langle\langle \varepsilon \rangle\rangle &= \hbar \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} \mathcal{E} W d\varepsilon = \\ &= \hbar^2 \omega \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon + \hbar \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \delta U d\varepsilon = I_1 + I_2. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Рассмотрим каждый интеграл в выражении (2.49) по отдельности:

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \int_0^{2\pi} \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n d\varphi \int_0^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon = \\ &= \frac{2}{\hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \delta_{n,k} \mathbf{n}_k^T \mathbf{n}_n \int_0^{+\infty} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon = \\ &= \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} |\rho_{n,n}| \int_0^{+\infty} \Upsilon_{n,n}(\sqrt{2\varepsilon}) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon, \end{aligned} \quad (2.50)$$

где учтено, что $\int_0^{2\pi} \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n d\varphi = 2\pi \delta_{n,k} \mathbf{n}_k^T \mathbf{n}_n$. Используя выражения (2.32) и (2.17), из (2.50) получим

$$\begin{aligned} &\Upsilon_{n,n}(|z|) = (-1)^n P_{n,n}(-z, \bar{z}) = (-1)^n L_n(2|z|^2), \\ &\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon = \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n |\rho_{n,n}| \int_0^{+\infty} L_n(4\varepsilon) e^{-2\varepsilon} \varepsilon d\varepsilon = \\ &= \frac{2}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n |\rho_{n,n}| (-1)^n \frac{2n+1}{4}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$I_1 = \hbar^2 \omega \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \varepsilon d\varepsilon = \hbar \omega \sum_{n=0}^{+\infty} |\rho_{n,n}| \left(n + \frac{1}{2} \right) = \sum_{n=0}^{+\infty} |\rho_{n,n}| \langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n.$$

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,

$$\delta U(x) = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l x^l = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{l/2} \tilde{x}^l = \sum_{l=0}^{+\infty} a_l \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{l/2} \varepsilon^{l/2} \cos^l \varphi, \quad (2.52)$$

где согласно (1.52) $\tilde{x} = \sqrt{\varepsilon} \cos \varphi$. Подставим выражение (2.52) в интеграл I_2 , получим

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \delta U d\varepsilon &= \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \sum_{l=0}^{+\infty} a_l \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{l/2} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n \cos^l \varphi d\varphi \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{l/2} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Интеграл по угловой переменной φ в выражении (2.53) можно вычислить в явном виде

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Omega^{(n,k)}(\varphi) \cos^l \varphi d\varphi &= \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{cases} \frac{2\pi}{2^l} C_l^{\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}}, & \text{если } \frac{\varpi_{n,k}+l}{2} \in \mathbb{Z}, l \geq |\varpi_{n,k}|, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.54)$$

где учтено

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin(\varpi_{n,k}\varphi) \cos^l \varphi d\varphi &= 0, \\ \int_0^{2\pi} \cos(\varpi_{n,k}\varphi) \cos^l \varphi d\varphi &= \begin{cases} \frac{2\pi}{2^l} C_l^{\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}}, & \text{если } \frac{\varpi_{n,k}+l}{2} \in \mathbb{Z}, l \geq |\varpi_{n,k}|, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \end{aligned}$$

В результате интеграл по переменной φ примет вид

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \mathbf{n}_k^T \Omega^{(n,k)}(\varphi) \mathbf{n}_n \cos^l \varphi d\varphi &= \\ &= \cos(\alpha_k - \alpha_n) \begin{cases} \frac{2\pi}{2^l} C_l^{\frac{\varpi_{n,k}+l}{2}}, & \text{если } \frac{\varpi_{n,k}+l}{2} \in \mathbb{Z}, l \geq |\varpi_{n,k}|, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.55)$$

где учтено, что $\mathbf{n}_k^T \mathbf{n}_n = \cos \alpha_k \cos \alpha_n + \sin \alpha_k \sin \alpha_n = \cos(\alpha_k - \alpha_n)$. Рассмотрим интеграл по переменной ε в выражении (2.53). Учитывая, что

$$\Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) = (2\varepsilon)^{(n+k)/2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s!(k-s)!(n-s)!(2\varepsilon)^s}, \quad (2.56)$$

получаем

$$\begin{aligned} & \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{l/2} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) d\varepsilon = \\ & = 2^{(n+k)/2} \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{(n+k+l)/2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{4^s s!(k-s)!(n-s)! \varepsilon^s} d\varepsilon = \\ & = 2^{(n+k)/2} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{4^s s!(k-s)!(n-s)!} \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{(n+k+l-2s)/2} d\varepsilon. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Обозначим $(\varpi_{n,k} + l)/2 = \lambda \in \mathbb{Z}$, 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,

$$\begin{aligned} & \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{(n+k+l-2s)/2} d\varepsilon = \int_0^{+\infty} e^{-\tau} \tau^{k+\lambda-s} d\tau = \\ & = \frac{1}{2^{k+\lambda-s+1}} \int_0^{+\infty} e^{-\tau} \tau^{k+\lambda-s} d\tau = \frac{1}{2^{k+\lambda-s+1}} \Gamma(k + \lambda - s + 1), \end{aligned} \quad (2.58)$$

где $\tau = 2\varepsilon$ и принято, что $\int_0^{+\infty} e^{-\tau} \tau^{z-1} d\tau = \Gamma(z)$, $z = k + \lambda - s + 1$. С учетом (2.58) интеграл (2.57) имеет вид

$$\begin{aligned} & \int_0^{+\infty} e^{-2\varepsilon} \varepsilon^{l/2} \Upsilon_{n,k}(\sqrt{2\varepsilon}) d\varepsilon = \\ & = 2^{-((l/2)+1)} \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s!(k-s)!(n-s)!} \Gamma\left(\frac{k+n+l}{2} - s + 1\right). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Подставим выражения (2.59) и (2.55) в исходный интеграл (2.53), получим

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \delta U d\varepsilon = \frac{1}{\pi \hbar} \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \mathbf{n}_k^T \mathbf{n}_n \sum_{l=0}^{+\infty} a_l \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{l/2} 2^{-((l/2)+1)} \times$$

$$\times \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s}{2^s s! (k-s)! (n-s)!} \Gamma \left(\frac{k+n+l}{2} - s + 1 \right) \times$$

$$\times \begin{cases} \frac{2\pi}{2^l} C_l^{\frac{n-k+l}{2}}, & \text{если } \frac{n-k+l}{2} \in \mathbb{Z}, \quad |n-k| \leq l, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (2.60)$$

или

$$I_2 = \hbar \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} W \delta U d\varepsilon = \sum_{n,k=0}^{+\infty} |\rho_{k,n}| \cos(\alpha_k - \alpha_n) \times$$

$$\times \sum_{(n-k+l)/2 \in \mathbb{Z}, l \geq |n-k|}^{+\infty} a_l \left(\frac{\hbar}{4m\omega} \right)^{l/2} C_l^{(n-k+l)/2} \times$$

$$\times \sum_{s=0}^{\min(n,k)} \frac{(-1)^s \left(\frac{k+n+l}{2} - s \right)!}{2^s s! (k-s)! (n-s)!}. \quad (2.61)$$

Подстановка интегралов (2.51) и (2.60) в выражение (2.49) дает выражение (2.48). Теорема 6 доказана.

Замечание. Выражение (2.48) для средней энергии $\langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle$ квантовой системы состоит из двух основных слагаемых. Первое слагаемое соответствует энергии, связанной с диагональными элементами матрицы \mathcal{W} . Поэтому «проекции» состояний произвольной квантовой системы на состояния осциллятора дают суперпозицию из собственных энергий $\langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n$ гармонического осциллятора (2.48). Второе слагаемое в выражении (2.48) содержит энергию, связанную с недиагональными элементами матрицы \mathcal{W} . Эта энергия есть суперпозиция энергий «смешанных» состояний, связанных с отличием произвольной квантовой системы от гармонического осциллятора.

Рассмотрим пример квантовой системы с потенциалом

$$U_1(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \mu x^4. \quad (2.62)$$

Первое слагаемое в потенциальной энергии соответствует потенциалу гармонического осциллятора. Второе слагаемое μx^4 вносит ангармоничность. Из теоремы 6 следует, что все коэффициенты a_l будут равны нулю, кроме

коэффициента $a_4 = \mu$. Следовательно, при вычислении суммы по l (2.48) накладывается условие на n и k :

$$\frac{\varpi_{n,k}}{2} + 2 \in \mathbb{Z} \Rightarrow \varpi_{n,k} = 2j, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad (2.63)$$

$$|\varpi_{n,k}| \leq l = 4 \Rightarrow j = 0, \pm 1, \pm 2, \quad \varpi_{n,k} = -4, -2, 0, 2, 4.$$

Из (2.63) 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 (2.62).

2.3. Численный алгоритм нахождения функции Вигнера. При практическом использовании выражений (2.39), (2.48) для произвольной квантовой системы требуется знание коэффициентов матрицы плотности. Если потенциал рассматриваемой квантовой системы допускает представление или аппроксимацию в виде полинома $U_{1,N}(x) = \sum_{l=1}^N a_l x^l$, то задача построения функции Вигнера может быть существенно упрощена. Рассмотрим следующую теорему.

Теорема 7. Пусть стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид $-(\hbar^2/2m)\Psi_{xx} + (U_1 - \mathcal{E})\Psi = 0$, а потенциал представим в виде $U_{1,N}(x) = \sum_{l=1}^N a_l x^l$, где $N \in \mathbb{N}$. Если волновая функция Ψ допускает разложение (2.1), то векторы коэффициентов $C^{(s)}$ (2.5) являются собственными векторами, а спектр энергий \mathcal{E}_s — собственными значениями симметричной матрицы $J_{n,k}$:

$$J C^{(s)} = \mathcal{E}_s C^{(s)}, \quad s \in \mathbb{N}_0, \quad J_{n,k} = \langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle_n I_{n,k}^{(0)} + \sum_{l \neq 2}^N a_l I_{n,k}^{(l)},$$

$$I_{n,k}^{(l)} = \frac{l-1}{2\gamma} I_{n,k}^{(l-2)} + \sqrt{\frac{n}{2\gamma}} I_{n-1,k}^{(l-1)} + \sqrt{\frac{k}{2\gamma}} I_{n,k-1}^{(l-1)}, \quad (2.64)$$

$$I_{n,k}^{(0)} = \delta_{n,k}, \quad I_{n,k}^{(1)} = \sqrt{\frac{n}{2\gamma}} I_{n-1,k}^{(0)} + \sqrt{\frac{k}{2\gamma}} I_{n,k-1}^{(0)},$$

где $m\omega^2 = 2a_2$; $\gamma = (m\omega)/\hbar$; $\langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ — спектр энергий гармонического осциллятора.

Доказательство теоремы 7. Подставляя представление (2.1) в уравнение Шрёдингера, получим

$$0 = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_n''(x) + (U - \mathcal{E})\psi_n \right] = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n \psi_n \left[\langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n - \mathcal{E} + \sum_{l \neq 2}^N a_l x^l \right].$$

Умножая скалярно полученное выражение на $\bar{\psi}_k(x)$, получим задачу на собственные значения:

$$\sum_{n=0}^{+\infty} J_{k,n} c_n = \mathcal{E} c_k, \quad J_{k,n} = A_{k,n} + \langle\langle \varepsilon \rangle\rangle_n \delta_{n,k},$$

$$A_{k,n} = \sum_{l \neq 2}^N I_{k,n}^{(l)} a_l, \quad I_{k,n}^{(l)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_k x^l \psi_n dx.$$

Вычислим интегралы $I_{k,n}^{(l)}$ по рекуррентной формуле

$$\begin{aligned} I_{k,n}^{(l)} &= N_k N_n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} H_n(\sqrt{\gamma}x) H_k(\sqrt{\gamma}x) x^l dx = \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} N_k N_n \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} [H_n'(\sqrt{\gamma}x) H_k(\sqrt{\gamma}x) + H_n(\sqrt{\gamma}x) H_k'(\sqrt{\gamma}x)] x^{l-1} dx + \\ &+ \frac{(l-1)}{2\gamma} N_k N_n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} H_n(\sqrt{\gamma}x) H_k(\sqrt{\gamma}x) x^{l-2} dx = \\ &= \frac{n}{\sqrt{\gamma}} \frac{N_n}{N_{n-1}} I_{k,n}^{(l-1)} + \frac{k}{\sqrt{\gamma}} \frac{N_k}{N_{k-1}} I_{k-1,n}^{(l-1)} + \frac{(l-1)}{2\gamma} I_{k,n}^{(l-2)} = \\ &= \sqrt{\frac{n}{2\gamma}} I_{k,n}^{(l-1)} + \sqrt{\frac{k}{2\gamma}} I_{k-1,n}^{(l-1)} + \frac{(l-1)}{2\gamma} I_{k,n}^{(l-2)}, \end{aligned}$$

где $N_n = (1/\sqrt{2^n n!}) ((m\omega)/(\pi\hbar))^{1/4}$. 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 (2.64), можно получить выражение для волновой функции Ψ_s (s -состояние) с любой наперед заданной точностью

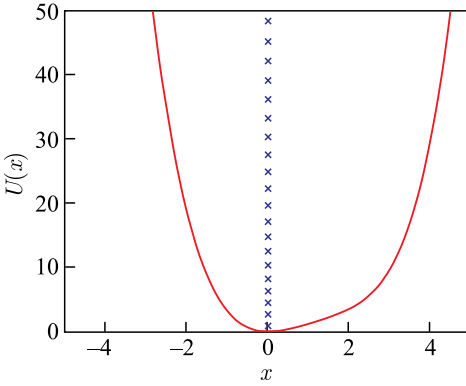


Рис. 7. Потенциал $U_{1,5}(x)$

$\Psi_s(x) = \sum_{n=0}^M c_n^{(s)} \psi_n(x)$. В качестве примера рассмотрим ангармонический квантовый осциллятор с потенциалом $U_{1,N}(x) = \sum_{l=1}^N a_l x^l$.

Не ограничивая общности, возьмем $N = 5$. На рис. 7 приведен график потенциала $U_{1,5}$ при $a_l = \{0,01, 0,2, -1, 0, 2\}$. Коэффициент a_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 $a_1 x$ 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 $\Psi_0(x) \sim \exp[-(x - x_0)^2/2\sigma^2]$ и в соответствии с теоремой Хадсона гауссову положительную функцию Вигнера $W_0(x)$. Случай $a_1 \neq 0$ является тривиальным, поэтому рассматривается случай $a_1 = 0$. Остальные коэффициенты a_l отличны от нуля.

Используя метод (2.64), найдем коэффициенты разложения $C_k^{(s)}$ и спектр энергий \mathcal{E}_s . На рис. 7 вдоль вертикальной оси точками обозначены уровни энергий \mathcal{E}_s . Заметим, что энергии $\mathcal{E}_s = \langle\langle \mathcal{E} \rangle\rangle_s$ при усреднении (2.48) по соответствующей функции Вигнера W_s .

На рис. 8 изображены матрицы плотности $\rho_{k,n}^{(s)} = C_k^{(s)} \bar{C}_k^{(s)}$ для состояний $s = 0, \dots, 5$. Видно, что при увеличении номера состояния s большее количество недиагональных элементов матрицы плотности $\rho^{(s)}$ начинает вносить существенный вклад в функцию Вигнера.

В п. 2.1, 2.2 было отмечено, что недиагональные элементы могут приводить к появлению диссипаций и изменению функции Вигнера W_s вдоль фазовой траектории $\mathcal{E}_s = \text{const}$. 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. 9 приведены графики волновых функций Ψ_s , найденных по формулам (2.1), (2.64). Заметим, что время вычислений волновых функций Ψ_s методом (2.64) на порядки меньше времени вычисления, например, по методу Б. В. Нумерова [40]. Поведение волновых функций Ψ_s на рис. 9 схоже

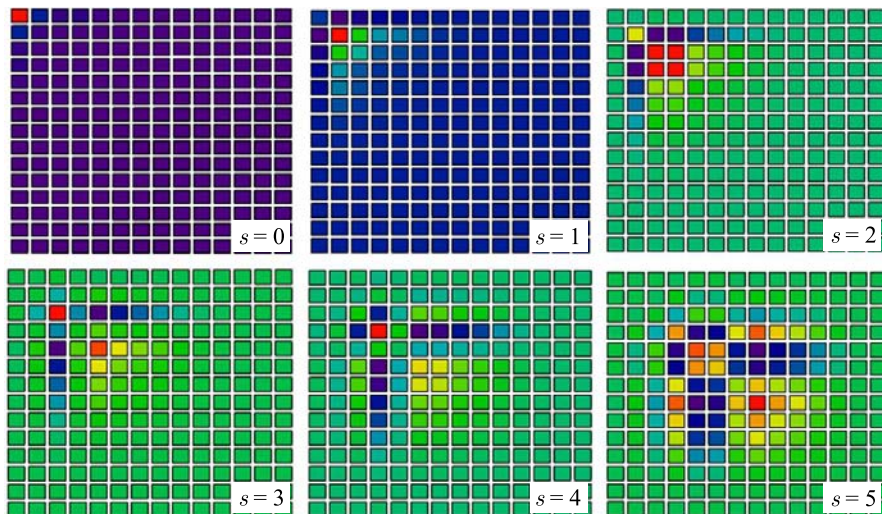


Рис. 8. Коэффициенты матрицы плотности $\rho^{(s)}$, $s = 0, \dots, 5$

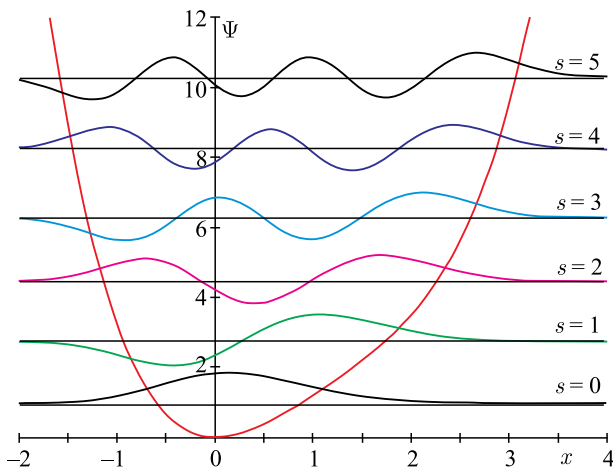
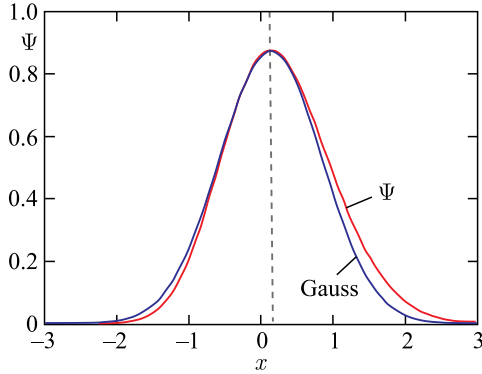


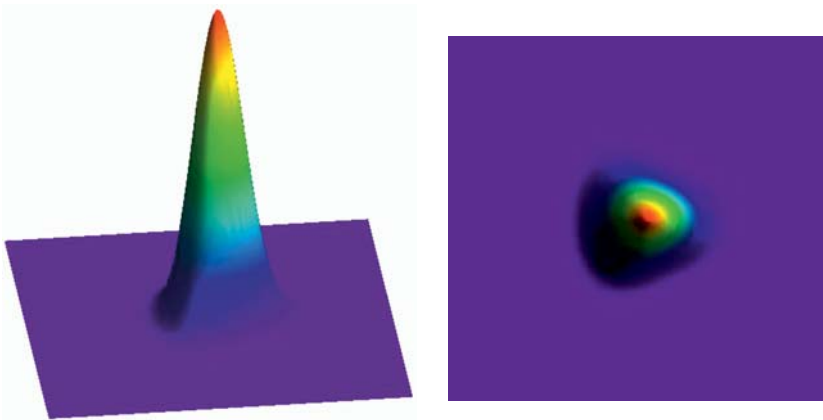
Рис. 9. Волновые функции Ψ_s , $s = 0, \dots, 5$

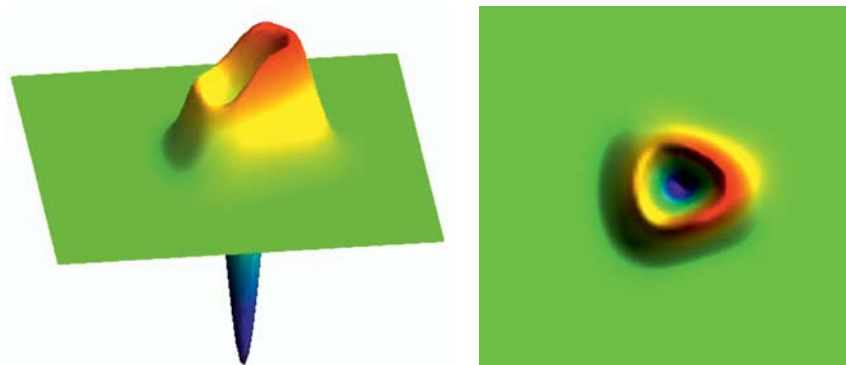
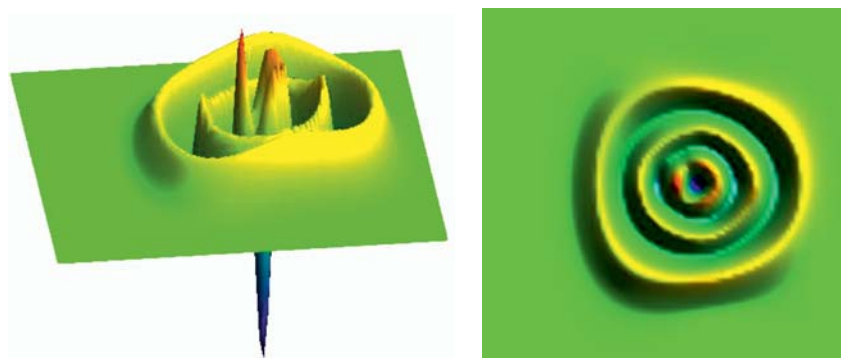
с поведением волновых функций для гармонического осциллятора, но имеет асимметрию вдоль оси координат, которая вызвана ангармоничными слагаемыми в потенциале $U_{1,5}$. Заметим, что волновая функция основного состояния $\Psi_0(x)$ не совпадает с гауссовым распределением. Для сравнения на рис. 10 приведены графики функции $\Psi_0(x)$ и гауссовой функции $g(x) =$

Рис. 10. Сравнение Ψ_0 с функцией Гаусса

$\text{const} \exp[-(x - x_0)^2/2\sigma^2]$. Как видно, 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.

По формуле (2.39), зная матрицу плотности $\rho^{(s)}$, можно построить распределения для функции Вигнера W_s . На рис. 11–13 приведены распределения для функций Вигнера W_0, W_1, W_5 . На рис. 11 функция W_0 соответствует основному состоянию с волновой функцией Ψ_0 . Внешне функция W_0 выглядит строго положительной, но это не так. В основании распределения функция W_0 имеет небольшие области отрицательных значений на уровне -10^{-5} . Величина -10^{-5} на уровне 1 (порядок максимума функции W_0) выглядит

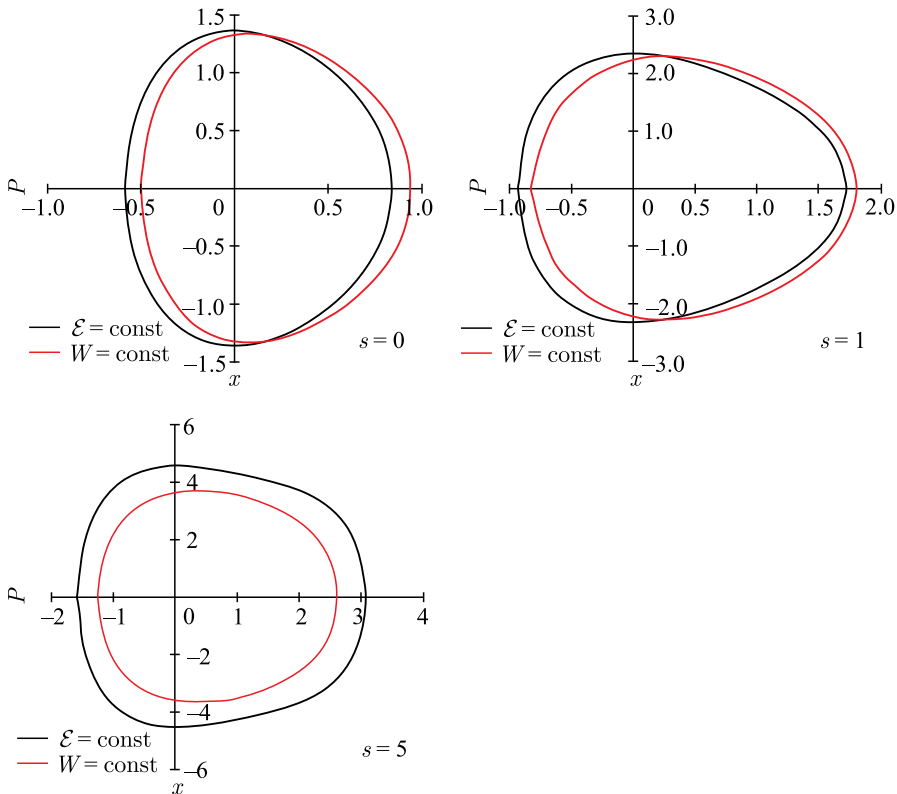
Рис. 11. Функция Вигнера W_0

Рис. 12. Функция Вигнера W_1 Рис. 13. Функция Вигнера W_5

незаметной. В результате негауссова волновая функция (см. рис. 10) Ψ_0 дает функцию Вигнера W_0 , имеющую отрицательные значения. Наличие отрицательных значений у остальных функций W_s при $s = 1, 2, \dots$ непосредственно видно на рис. 12, 13.

На рис. 11–13 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 квазивероятностей W_s вдоль фазовых траекторий $\mathcal{E}_s = \text{const}$. На рис. 14 показаны графики фазовых траекторий $\mathcal{E}_s = \text{const}$ и графики линий уровня $W_s = \text{const}$, которые отличаются друг от друга. Для

Рис. 14. Фазовые траектории $W_s = \text{const}$ и $\mathcal{E}_s = \text{const}$

гармонического осциллятора ($Q_2 = 0$) соответствующие функции Вигнера имеют линии уровня, совпадающие с фазовыми траекториями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Фазовое пространство позволяет естественным образом подойти к описанию макро- и микросистем, рассмотреть их связь, произвести предельные переходы из квантовой в классическую физику. В разд. 1 благодаря фазовому пространству было наглядно продемонстрировано, как получается дискретный энергетический спектр квантовой системы, показаны свойства полюсов «кинетической» энергии, наличие которых определяется отрицательностью функции Вигнера.

С одной стороны, отрицательная вероятность, определяемая функцией Вигнера, является необычным свойством для классической физики. С другой стороны, квантовая механика за время своего развития создала немало прецедентов, свидетельствующих о необычной природе микромира. На этом фоне отрицательная и даже комплексная вероятность не выглядит столь вызывающе противоречивой. Стоит отметить, что площадь фазовой области, в которой функция Вигнера имеет отрицательные значения, по порядку величины сравнима с постоянной Планка. Таким образом, принцип неопределенности Гейзенберга может «не чувствовать» такие области. С математической точки зрения теория вероятностей связана с теорией меры в функциональном анализе [68]. Даже в рамках математического анализа интеграл от функции может иметь отрицательные значения.

Важным является то, что, используя аппарат квантовой механики в фазовом пространстве, можно производить оценку необходимых параметров квантовых систем, а численные методы, описанные в разд. 2, позволяют производить такие вычисления эффективно.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-29-10014, и Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wigner E. P.* On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium // *Phys. Rev.* 1932. V. 40. P. 749–759.
2. *Weyl H.* The Theory of Groups and Quantum Mechanics. New York: Dover, 1931.
3. Вопросы причинности в квантовой механике / Под ред. Я. П. Терлецкого, А. А. Гусева. М.: Изд-во иностр. лит., 1955.
4. *Balazs N. L., Jennings B. K.* Wigner's Functions and Other Distribution Functions in Mock Phase Spaces // *Phys. Rep.* 1984. V. 104. P. 347–391.
5. *Hillery M., O'Connell R. F., Scully M. O., Wigner E. P.* Distribution Functions in Physics: Fundamentals // *Phys. Rep.* 1984. V. 106. P. 121–167.
6. *Englert B.-G.* On the Operator Bases Underlying Wigner's, Kirkwood's and Glauber's Phase Space Functions // *J. Phys. A.* 1989. V. 22. P. 625–640.
7. *Bialynicki-Birula I., Cieplak M., Kaminski J.* Theory of Quanta. Oxford Univ. Press, 1992.
8. *Ozorio de Almeida A. M.* The Weyl Representation in Classical and Quantum Mechanics // *Phys. Rep.* 1998. V. 295. P. 265–342.
9. *Scheibe E.* Die Reduktion physikalischer Theorien. Band II. Heidelberg: Springer, 1999.
10. *Kano Y.* A New Phase-Space Distribution Function in the Statistical Theory of the Electromagnetic Field // *J. Math. Phys.* 1965. V. 6. P. 1913–1915.
11. *Glauber R. J.* Photon Correlations // *Phys. Rev. Lett.* 1963. V. 10. P. 84–86.

12. *Sudarshan E. C. G.* Equivalence of Semiclassical and Quantum Mechanical Descriptions of Statistical Light Beams // *Ibid.* P. 277–279.
13. *Cahill K. E., Glauber R. J.* Density Operators and Quasiprobability Distributions // *Phys. Rev. A.* 1969. V. 177. P. 1882–1902.
14. *Groenewold H. J.* On the Principles of Elementary Quantum Mechanics // *Physica.* 1946. V. 12. P. 405–460.
15. *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. V. 2. P. 2187–2205.
16. *Simpao V. A., Valentino A.* Real Wave Function from Generalised Hamiltonian Schrödinger Equation in Quantum Phase Space via HOA (Heaviside Operational Ansatz): Exact Analytical Results // *J. Math. Chem.* 2014. V. 52, No. 4. P. 1137–1155.
17. *Fairlie D. B., Manoguei C. A.* The Formulation of Quantum Mechanics in Terms of Phase Space Functions — the Third Equation // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1991. V. 24. P. 3807–3815.
18. *Møller K. B., Jørgensen T. G., Torres-Vega G.* On Coherent-State Representations of Quantum Mechanics: Wave Mechanics in Phase Space // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106, No. 17. P. 7228–7240.
19. *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. V. 70. P. 1244–1247.
20. *Radon J.* Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte längs gewisser Mannigfaltigkeiten // *Ber. Verh. Sachs. Akad. Wiss. Leipzig, Math.-Nat. Kl.* 1917. V. 69. P. 262–277.
21. *D'Ariano G. M., Paris M. G. A., Sacchi M. F.* Quantum Tomography // *Adv. Imaging Electron Phys.* 2003. V. 128. P. 205–308.
22. *Vogel K., Risken H.* Determination of Quasiprobability Distributions in Terms of Probability Distributions for the Rotated Quadrature Phase // *Phys. Rev. A.* 1989. V. 40, No. 5. P. 2847–2849.
23. *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. V. 7. P. 76.
24. *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.* 2008. V. 41. P. 045501.
25. *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. V. 99. P. 012115.
26. *Arkhipov I. I., Barasiński A., Svozilík J.* Negativity Volume of the Generalized Wigner Function as an Entanglement Witness for Hybrid Bipartite States // *Sci. Rep.* 2018. V. 8. P. 16955.
27. *Andersen U., Neergaard-Nielsen J., van Loock P. et al.* Hybrid Discrete- and Continuous-Variable Quantum Information // *Nature Phys.* 2015. V. 11. P. 713–719.
28. *Cohen L.* Time-Frequency Analysis. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1995.

29. *Zayed A.* A New Perspective on the Two-Dimensional Fractional Fourier Transform and Its Relationship with the Wigner Distribution // *J. Fourier. Anal. Appl.* 2019. V. 25. P. 460–487.
30. *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. V. 35. P. 276–300.
31. *Brandon D., Saad N., Dong Shi-Hai.* On Some Polynomial Potentials in d -Dimensions // *J. Math. Phys.* 2013. V. 54. P. 082106.
32. *Gomez F. J., Sesma J.* Quantum Anharmonic Oscillators: A New Approach // *J. Phys. A.* 2005. V. 38. P. 3193–3202.
33. *Pan F., Klauder J. R., Draayer J. P.* Quasi-Exactly Solvable Cases of an N -Dimensional Symmetric Decatic Anharmonic Oscillator // *Phys. Lett. A.* 1999. V. 262. P. 131.
34. *Bansal M., Srivastava S., Vishwamittar M.* Energy Eigenvalues of Double-Well Oscillator with Mixed Quartic and Sextic Anharmonicities // *Phys. Rev. A.* 1991. V. 44. P. 8012.
35. *Chaudhuri R. N., Mondal M.* Improved Hill Determinant Method: General Approach to the Solution of Quantum Anharmonic Oscillators // *Ibid.* V. 43. P. 3241.
36. *Hall R. L., Saad N.* Bounds on Schrödinger Eigenvalues for Polynomial Potentials in N -Dimensions // *J. Math. Phys.* 1997. V. 38. P. 4909.
37. *Vishwamittar M.* Energy Eigenvalues for Anharmonic and Double-Well Oscillators with Even Power Polynomial Potential // *Physica A.* 1995. V. 216. P. 452–458.
38. *Liverts E. Z., Mandelzweig V. B.* Approximate Analytic Solutions of the Schrödinger Equation for the Generalized Anharmonic Oscillator // *Phys. Scripta.* 2008. V. 77. P. 025003.
39. *Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G., Burlakov E. V.* Wigner Function of a Quantum System with Polynomial Potential // *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* 2020. No. 053105.
40. *Numerov B. V.* Note on the Numerical Integration of $d^2x/dt^2 = f(x, t)$ // *Astronomische Nachrichten.* 1927. V. 230. P. 359–364.
41. *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 // *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* 2020. No. 023109.
42. *Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G., Perepelkin E. E.* Generalized Phase Space and Conservative Systems // *Dokl. Math.* 2013. V. 88, No. 11. P. 457–459.
43. *Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G.* Generalized Phase Space. M.: Moscow Univ., 2014.
44. *Sadovnikov B. I., Perepelkin E. E., Inozemtseva N. G.* Coordinate Uncertainty Principle in a Generalized Phase Space // *Dokl. Math.* 2014. V. 90, No. 2. P. 628–630.
45. *Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G.* The Quantum Mechanics of High-Order Kinematic Values // *Ann. Phys.* 2019. V. 401. P. 59–90.
46. *Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G.* The New Modified Vlasov Equation for the Systems with Dissipative Processes // *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* 2017. No. 053207.
47. *Власов А. А.* Теория многих частиц. М.: URSS, 2011. 352 с.
48. *Власов А. А.* Статистические функции распределения. М.: Наука, 1966. 356 с.

49. *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. P. 05019.
50. *Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G.* Paradigm of Infinite Dimensional Phase Space // *Understanding the Schrödinger Equation: Some [Non]Linear Perspectives.* Nova Science Publ., Inc., 2020. 330 p.
51. *Bohm D.* A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of “Hidden” Variables I and II // *Phys. Rev.* 1952. V. 85. P. 166–193.
52. *Bohm D., Hiley B. J., Kaloyerou P. N.* An Ontological Basis for the Quantum Theory // *Phys. Rep.* 1987. V. 144. P. 321–375.
53. *Bohm D., Hiley B. J.* The Undivided Universe: An Ontological Interpretation of Quantum Theory. London: Routledge, 1993.
54. *de Broglie L.* Une Interpretation Causale et non Lineaire de la Mecanique Ondulatoire: la Theorie de la Double Solution. Paris: Gauthiers-Villiers, 1956.
55. *Шляйх В. П.* Квантовая оптика в фазовом пространстве. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 760 с.
56. *Hudson R.L.* When Is the Wigner Quasi-Probability Density Non-Negative? // *Rep. Math. Phys.* 1974. V. 6, No. 2.
57. *Husimi K.* Some Formal Properties of the Density Matrix // *Proc. Phys. Math. Soc. Japan.* 1940. V. 22. P. 264–314.
58. *Kano Y.* A New Phase-Space Distribution Function in the Statistical Theory of the Electromagnetic Field // *J. Math. Phys.* 1965. V. 6. P. 1913–1915.
59. *Glauber R.J.* Photon Correlations // *Phys. Rev. Lett.* 1963. V. 10. P. 84–86.
60. *Sudarshan E. C. G.* Equivalence of Semiclassical and Quantum Mechanical Descriptions of Statistical Light Beams // *Ibid.* P. 277–279.
61. *Cahill K.E., Glauber R.J.* Density Operators and Quasiprobability Distributions // *Phys. Rev. A.* 1969. V. 177. P. 1882–1902.
62. *Torres-Vega Go., Frederick J.H.* A Quantum Mechanical Representation in Phase Space // *J. Chem. Phys.* 1993. V. 98, No. 4. P. 3103–3120.
63. *Torres-Vega Go., Frederick J.H.* Quantum Mechanics in Phase Space: New Approaches to the Correspondence Principle // *J. Chem. Phys.* 1990. V. 93, No. 12. P. 8862–8874.
64. *Wiener N.* Hermitian Polynomials and Fourier Analysis // *J. Math. Phys.* 1929. V. 8. P. 70–73.
65. *Koepf W.* Identities for Families of Orthogonal Polynomials and Special Functions // *Integral Transforms Spec. Funct.* 1997. V. 5.
66. *Al-Salam W.A.* Operational Representations for Laguerre and Other Polynomials // *Duke Math. J.* 1964. V. 31, No. 1. P. 127–142.
67. *Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G.* Riemann Surface and Quantization // *Ann. Phys.* 2016. V. 374. P. 194–217; doi: 10.1016/j.aop.2016.11.012.
68. *Колмогоров А. Н., Фомин С. В.* Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.