

МОДЕЛИ КВАНТОВЫХ ВОЛНОВЫХ УРАВНЕНИЙ И ПРИЛОЖЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНЫХ НАНОТЕХНОЛОГИЯХ Ч. 1: КВАНТОВЫЙ ПОСТУЛАТ НА ОСНОВЕ ХАРАКТЕРИСТИК ОБОБЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ГАМИЛЬТОНА-ЯКОБИ

Ульянов Сергей Викторович

*Доктор физико-математических наук, профессор;
ГОУ ВПО «Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
PronetLabs;
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;
e-mail: ulyanovsv@mail.ru.*

Дано доступное описание основ квантовой механики и вывода основных уравнений квантовой механики (Шрёдингера, Фока-Клейна-Гордона, Дирака и Максвелла) из классической механики с применением метода характеристик дифференциальных уравнений в частных производных и уравнений Гамильтона-Якоби. Такой подход позволяет перенести методы классической теории управления на квантовые объекты и компьютерные нанотехнологии.

Ключевые слова: уравнения квантовой механики, уравнения Гамильтона-Якоби, характеристики.

MODELS OF QUANTUM WAVE EQUATIONS PT. 1: QUANTUM POSTULATE BASED ON CHARACTERISTIC OF GENERALIZED HAMILTON-JACOBI EQUATION

Ulyanov Sergey

*Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor;
Dubna International University of Nature, Society and Man,
Institute of system analysis and management;
PronetLabs;
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;
e-mail: ulyanovsv@mail.ru.*

Simplified description of quantum mechanics background and the derivation of main quantum mechanics equations (Schrodinger, Fock-Klein-Gordon, Dirac and Maxwell) from classical mechanics with application of characteristic method of partial differential equations are introduced. This approach helps to transfer methods of classical control theory on quantum objects and computer science nanotechnology.

Keywords: quantum wave equations, Hamilton-Jacobi equations, characteristics manifold.

Введение

Во многих работах по основам квантовой механики основное внимание уделено разработке и анализу традиционных моделей квантовых динамических систем (модели Шрёдингера, Гейзенберга, Дирака, Паули, Вигнера, Вейля, Фейнмана, Блохинцева, Широкова, Маслова) и обоснованию корректности соответствующих уравнений квантовой теории (уравнения Шрёдингера, Вейля, Паули, Фока-Клейна-Гордона, Прока-Кеммера-Дэффина, Гельфанда-Яглома, Тамма-Гинзбурга-Манько, Рариты-Швингера, Фирца-Паули и др.). Особенности перечисленных моделей и традиционной интерпретации связи с классической механикой отмечены в [1-8] и др.

Так как по квантовой теории существует обширная (к настоящему времени почти необозримая) журнальная и монографическая литература [9], то в данной работе основное внимание сосредоточено на разработке новой методологии обучения основам квантовой механики для инженерии компьютерных нанотехнологий, управления, робототехники и интеллектуальных информационных технологий (ИТ).

На необходимость перехода от традиционных методов к новым инновационным технологиям доступного изложения основ квантовой механики указывалось неоднократно¹ [10-13].

В данной статье рассмотрена математическая модель квантового постулата, предложенного в [14, 15] на основе модифицированного уравнения Гамильтона-Якоби и его характеристического многообразия. Такой подход позволяет объединить волновые уравнения квантовой механики в единую систему и перенести методы классической теории управления и алгоритмов на квантовую область. Обсуждение физической интерпретации основных квантовых операторов, структур квантовых алгоритмов, их взаимоотношений и свойств, часто используемых в решении задач глобальной оптимизации и в процессах проектирования робастных интеллектуальных систем управления (ИСУ), основано на свойствах решений уравнений Шрёдингера и Дирака. Применение результатов интерпретации решений соответствующих волновых уравнений квантовой механики позволяет дать корректную физическую интерпретацию вводимых понятий и определений в инженерии компьютерных нанотехнологий.

Необходимость перехода от традиционных методов к новым инновационным технологиям доступного изложения основ квантовой механики связана также с фактом, что существовал психологический барьер восприятия инженерной аудиторией математического аппарата квантовой механики, «парадоксов» выводов квантовой логики и решений, получаемых на основе квантовых алгоритмов [16]. Поэтому для разработки прикладных моделей новых видов интеллектуальных вычислений и их эффективного применения в прикладных задачах управления возникла необходимость более детального и доступного изложения основ квантовой механики, используемых, например, в теории квантовых вычислений и квантовых алгоритмов.

В частности, в настоящее время в институте системного анализа и управления (ИСАУ) Международного университета природы, общества и человека «Дубна» особое внимание данному вопросу уделяется при подготовке бакалавров, магистров и инженеров-исследователей в области компьютерных технологий, ИСУ и принятия решений, робототехники и мехатроники.

В результате, к настоящему времени возник определенный разрыв в университетских программах и методологии учебных процессов при освещении вопросов физических аспектов и структурной реализации квантовых вычислений и квантовых алгоритмов на доступном (для инженерных специальностей) уровне.

Более того, вопросы обучения в области квантовых вычислений и квантовых алгоритмов в основном рассматриваются для физико-математического образования², игнорируя потребности инженерной аудитории, например в области оптимального проектирования современных элементов и средств ЭВМ³ или проектирования ИСУ.

В данной статье отражен также важный (и необходимый для практики) методологический аспект подробного описания (и доступного для специалистов в области теории и систем управления) физических и математических основ аксиоматики релятивистской квантовой механики, используемых в моделях интеллектуальных квантовых мягких вычислений, а также для проектирования робастных ИСУ в непредвиденных ситуациях управления.

Необходимость данного описания объясняется во многом трудностями восприятия квантовых и релятивистских эффектов, результатов квантовой теории информации и возникающих при физической интерпретации логических «парадоксов», противоречащих выводам классической Булевой логики.

Так, например, трудности для интерпретации вызывает экспериментально установленное явление дефекта массы как релятивистского эффекта (две сталкивающиеся частицы малой массы и ограниченной энергии в неподвижной системе отсчета (системе покоя) выделяют энергию, на порядки превосходящую сумму энергий подсистем – явление взрыва атомной бомбы).

¹ Гольденблат И.И., Ульянов С.В. Релятивистская кинематика и элементы квантовой механики (Учебное пособие для слушателей высших военных учебных заведений). – М.: МО СССР, 1977.

² Стефанова Т.С. Отбор содержания обучения квантовым вычислениям бакалавров физико-математического образования // Известия Рос. Гос. Педаг. университета им. А.И. Герцена. – 2008. – № 27(60). – С. 467-469.

³ Курейчик В.М., Неупокоева Н.В. Квантовые и генетические алгоритмы размещения компонентов ЭВА. – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010.

Другим примером является трудность разъяснения самоорганизации запутанных состояний (две подсистемы, находящиеся в хаотическом смешанном состоянии с максимальными энтропиями, образуют чистое состояние с нулевой энтропией) как квантового синергетического эффекта теории информации.

Оба данных эффекта, разных по своей физической природе, для корректной интерпретации требуют привлечения новых понятий, таких как *синергетический* эффект. Например⁴, новый информационный синергетический эффект самоорганизации знаний заключается в приобретении системой требуемого свойства робастности за счет информационного (а не прямого физического) взаимодействия не робастных баз знаний (БЗ), т.е. появления нового качества в объединенной системе, отсутствующего во взаимодействующих подсистемах, составляющих единую систему.

При этом подчеркнем еще раз, подсистемы не содержат нового качества (робастности), содержащегося в составной системе и сформированного из качеств данных подсистем (не робастности). Данный эффект реализуется процессом обмена и переноса скрытой квантовой информации и является следствием формирования виртуальных каналов передачи квантовой информации между классическими состояниями сигналов управления.

Неклассические физические свойства нелокальности суперпозиции с квантовой корреляцией между подсистемами как математического объекта приводят к парадоксу нарушения элементарного арифметического правила⁵ в виде: $2 \neq 1 + 1$. Информационный анализ неопределенности в состоянии составной квантовой системы позволяет четко разъяснить наличие необычных (неклассических) свойств: игнорирование в ней части информации о состоянии подсистемы приводит к увеличению квантовой неопределенности.

В результате, имеем факт^{6,7}, что в «части» (подсистеме) количества квантовой неопределенности может быть больше, чем в «полной» (составной) квантовой системе. Такой эффект отсутствует в классических системах в силу свойств и определения классической меры информационной энтропии Шеннона.

С точки зрения логики корректной интерпретации физических явлений, проблема заключается в том, что классическая Булева логика не может объяснить формирование нового качества в единой системе, не содержащегося в составных подсистемах.

Отметим, что корректное объяснение средствами квантовой логики достигается за счет отказа от аксиомы дистрибутивности классической логики или от закона исключения третьего (в нечеткой логике). При этом традиционно используется основной тезис фон Неймана: «Квантовым уравнениям, описывающим движение квантовой частицы, может быть сопоставлена адекватная логическая система». Расширенный (уточненный) вариант этого тезиса можно сформулировать следующим образом: физическое явление, имеющее пространственно-временную динамику, может быть описано как в рамках динамических уравнений движения, так и адекватно в виде логико-динамической системы (на уровне логики причинно-следственных связей).

В дальнейших исследованиях было установлено, что квантовая логическая система интерпретации результатов физических наблюдений и измерений существенно отличается от аналогов классической логики. Так в трехзначной квантовой логике используется третье значение истинности (*неопределенный*). Поскольку оба дизъюнкта истинной дизъюнкции могут быть ложными, здесь возникает асимметрия между дизъюнкцией и конъюнкцией, т.е. законы дистрибутивности в общем случае не выполняются.

Накопленный педагогический опыт автора (за период 1972-2012 гг.) чтения лекций по теории относительности, квантовой механике, термодинамике, мягким и квантовым вычислениям (в области

⁴ Ulyanov S. V. Self-organized intelligent robust control based on quantum fuzzy inference // Recent Advances in Robust Control – Novel approaches and design methods. – Publ.: In Tech. – 2011. – Pp. 187-220.

⁵ Shih Y. The physics of $2 \neq 1 + 1$ // LANL E-print arXiv: quant-ph / 0706.2097v2. – 2007. – P. 44. – [Электронный ресурс]. URL: <http://xxx.lanl.gov>.

Voss D. One plus one is not two // Science. – 1996. – Vol. 274. – № 5287. – P. 527.

⁶ Vidick T., Wehner S. Does ignorance of the whole imply ignorance of the parts? Large violations of noncontextuality in quantum theory // Physical Review Letters. – 2011. – Vol. 107. – № 3. – P. 030402.

⁷ Odendaal R.Q., Plastino A.R. Entangled quantum particles in an infinite square well: knowledge of the whole versus knowledge of the parts // European J. Physics. – 2010. – Vol. 31. – № 2. – Pp. 193-203.

интеллектуальной робототехники и высоких ИТ проектирования ИСУ для нанотехнологий и квантового управления) и его анализ показал также следующее⁸. Трудности изучения и особенно применения квантовых вычислений специалистами в области системной инженерии, компьютерных технологий, вычислительных процессов и в теории и систем управления носят часто психологический и инерционный когнитивный характер ассоциативного (порой негативного) восприятия идей и принципов квантовой механики или теории относительности, основанного на попытках применения механических аналогий восприятия и интерпретации квантовых явлений из классической физики. Так происходит до сих пор, например, при попытках студентами интерпретации квантового эффекта туннелирования [12, 13], которые постоянно прибегают к механическим аналогиям. Отказ от привычных аналогий носит порой драматичный характер⁹. Данные факты объясняются, с другой стороны, многообразием моделей самой квантовой механики [17]. К настоящему времени вопрос о полноте доказательности корректности той или иной модели квантовой механики остается открытым [7, 8] из-за существования ряда «парадоксов» и их неоднозначности в интерпретации [16, 18].

Более того, в отечественной и зарубежной литературе отсутствуют проблемно-ориентированные методологические учебные пособия (см., например, дискуссию в [10, 11]) с конкретными наглядными инженерными приложениями, иллюстрирующих их практическую эффективность, например, для решения задач теории и проектирования систем управления. Все перечисленное и ряд других¹⁰ методологических трудностей, приводят к проблеме разработки эффективной теории квантового интеллектуального управления ОУ в макро-, микро- и нанотехнологиях [19, 20].

Рассмотрим предварительно некоторые из перечисленных выше вопросов.

Аксиоматика квантовой механики

Трудности в разработке непротиворечивой физической и логической интерпретации результатов, полученных на основе квантовых моделей, породили многочисленные дискуссии и, как следствие, предложены различные формы модельных представлений аксиом, представляющих базис квантовой механики [8, 21-32] и мн. др. Сущность проблемы составляет тот факт, что квантовая механика была разработана, в отличие от теории относительности или термодинамики, в виде абстрактной математической модели, исходя из ряда аксиом, и строилась по аналогии с классической механикой на основе принципа соответствия. Однако такие физические понятия как дуальность «частица – волна», принцип дополнительности, изменение состояния частицы при измерении, принцип неопределенности Гейзенберга, вероятностная и информационная природа квантовых моделей, дискретность энергетических уровней и мн. др. необходимо было объединить в одну логическую систему аксиом. В данном разделе рассмотрим некоторые результаты системного анализа интерпретации аксиоматики квантово-механических представлений и выявленных квантовых эффектов, которые играют роль при изучении применения методов квантовой механики в компьютерных нанотехнологиях, инженерии управления, квантовых вычислений и квантовых алгоритмов.

Системный анализ аксиоматики квантовой механики

В упрощенном виде аксиомы квантовой механики (Копенгагенская интерпретация) и их физическая интерпретация представлены в Табл. 1 и 2.

⁸ Предварительные результаты и выводы были представлены в работе: С.В. Ульянов, Релятивистские и квантовые модели физических объектов и интеллектуальных процессов управления // Итоги Науки и Техники (Н и Т). Сер. Техническая кибернетика. – М.: ВИНТИ АН СССР, 1986. – Т. 35.

⁹ См., например, Гольденблат И.И., Ульянов С.В. Релятивистская кинематика и элементы квантовой механики (Учебное пособие для слушателей высших военных учебных заведений). – М.: МО СССР, 1977.

¹⁰ Eldar Y.C., Oppenheim A.V. Quantum signal processing: Measurement, quantization, consistency // IEEE Signal Processing Magazine. – 2002. – №11. – Pp. 12-32.

Таблица 1: Аксиомы квантовой механики

Постулат 1	Изолированная физическая система	\Rightarrow \Leftarrow	Гильбертово пространство состояний
Постулат 2	Эволюция физической системы	\Rightarrow \Leftarrow	Унитарное преобразование
Постулат 3	Измерения состояний физической системы	\Rightarrow \Leftarrow	Операторы измерений
Постулат 4	Составные физические системы	\Rightarrow \Leftarrow	Тензорное произведение компонент

В Табл. 2 дана физическая интерпретация приведенных в Табл. 1 аксиом.

Таблица 2: Физическая интерпретация аксиом квантовой механики

Постулат 1:	Существует ассоциированное с некоторой изолированной физической системой комплексное векторное пространство с внутренним произведением векторов (т.е., пространство Гильберта), именуемое как пространство состояний системы. В данном пространстве описание поведения системы определяется полностью вектором состояний, который имеет единичную длину в пространстве состояний системы.
Постулат 2:	Эволюция изолированной квантовой системы описывается унитарным преобразованием U . Это означает, что состояние системы $ \psi\rangle$ в момент времени t_1 переходит в момент времени t_2 в состояние $ \psi'\rangle$ на основе применения унитарного оператора U , которое зависит только от момента времени t_1 и t_2 , т.е., $ \psi'\rangle = U \psi\rangle$.
Постулат 3:	<p>Квантовые измерения описываются набором операторов измерения $\{M_m\}$. Операторы измерения действуют в пространстве состояний системы. Индекс m означает возможный выходной результат измерения в эксперименте. Если $\psi\rangle$ описывает динамическое состояние квантовой системы непосредственно перед измерением, то вероятность результата измерения m определяется в виде $P(m) = \langle\psi M_m^+M_m \psi\rangle$, а состояние системы после измерения определяется как:</p> $\frac{M_m \psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi M_m^+M_m \psi\rangle}}.$ <p>Операторы измерения удовлетворяют условию полноты $\sum_m M_m^+M_m = I$.</p>
Постулат 4:	<p>Пространство состояний составной физической системы определяется тензорным произведением пространств состояний компонент подсистем составной системы. Кроме того, если подсистемы пронумерованы от 1 до n, и подсистема i is приготовлена в состоянии $\psi_i\rangle$, то обобщенное состояние всей системы определяется как</p> $ \psi_1\rangle \otimes \psi_2\rangle \otimes \dots \otimes \psi_n\rangle.$

Достаточно общая ситуация, имеющая место в квантовой механике, отражена в Табл. 3, принадлежащей Вигнеру. Постулаты квантовой механики, представленные в Табл. 1, 2 и 3 подвергались многочисленным формам анализа и критике. Отметим, что существует множество публикаций, посвященных вопросу анализа корректности аксиом квантовой механики [7, 8, 25-32]. В данной статье вопрос корректности аксиом квантовой механики выходит за её рамки и поэтому не обсуждается. Используются только понятия и фрагменты квантовой механики, необходимые для физической интерпретации квантовых эффектов, которые применяются в компьютерных нанотехнологиях, инженерии искусственного интеллекта (ИИ) самоорганизации знаний, для проектирования квантовых алгоритмов интеллектуального робастного управления и др. Отметим, согласно [10, 11, 13], что аксиоматическая форма представления квантовой механики очень трудно воспринимается инженерной аудиторией и недостаточна для ясной физической интерпретации при обучении специалистов в области компьютерных информационных технологий и системной инженерии.

Таблица 3: Аналогии в квантовой механике

Состояние системы	Волновая функция ψ	Луч ψ функционального пространства
Физическая или наблюдаемая величина	Эрмитов оператор A , действующий на ψ	Эрмитова матрица отображения функционального пространства самого на себя
Наблюдаемое значение α	Собственное значение α_i оператора или характеристические постоянные уравнения $A\psi = \alpha\psi$	Собственное значение матрицы, приведенной унитарным преобразованием координат к диагональному виду
Определенное значение α_i	Собственная функция ψ_i оператора A , соответствующая собственному значению α_i	Луч функционального пространства, который оператор A умножает на α_i

В связи с отмеченными замечаниями, обсудим особенности постулата 2 из Табл. 2, так как физическая интерпретация данного постулата связана с разработкой математической модели унитарного оператора U , описывающего эволюцию квантовых систем, используемых широко в задачах квантового управления, квантовых вычислений и квантовых алгоритмов.

Пример 1. Допустим, что оператор $U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} At\right)$ генерируется эрмитовым оператором A .

Рассмотрим инфинитезимальную форму постулата 2 в виде: $|\psi(t+dt)\rangle = U(dt)|\psi(t)\rangle$. Если положить,

что $U(dt)$ генерируется некоторым эрмитовым оператором H типа $U(dt) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Hdt\right)$,

то, разлагая $|\psi(t+dt)\rangle$ в ряд Тейлора с учетом до первого порядка dt членов ряда, получим

$$|\psi(t+dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + dt \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle + \dots, \quad U(dt) = 1 - \frac{i}{\hbar} Hdt + \dots$$

Тогда имеем в результате: $|\psi(t)\rangle + dt \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} Hdt\right) |\psi(t)\rangle$. Следовательно, можно после несложных алгебраических преобразований получить вывод уравнения Шрёдингера:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle,$$

т.е., уравнение Шрёдингера следует непосредственно из *второго постулата* квантовой механики.

Данная квантовая модель в виде уравнения Шрёдингера служит основой инженерии моделей квантового управления, квантовых вычислений и квантовых алгоритмов. Поэтому ниже рассмотрим вывод модели волновых квантовых уравнений, описывающих унитарные операторы U типа

$|\psi_{fin}\rangle = U|\psi_{in}\rangle$, где кет-вектор $|\psi_{in}\rangle$ – начальное состояние квантовой системы, $|\psi_{fin}\rangle$ – конечное состояние квантовой системы, U – унитарный оператор, описывающий эволюцию квантовой системы, и переводящий ее из начального $|\psi_{in}\rangle$ в конечное состояние $|\psi_{fin}\rangle$; проведем также системный анализ такого класса квантовых систем. Такой анализ возможен на основе квантового постулата, позволяющего вывести квантовые волновые уравнения, описывающие движение объекта управления (ОУ), исходя из единой системы, основанной на модифицированном уравнении Гамильтона-Якоби (см. Приложение).

Квантовый постулат

В данном разделе показано, что между уравнением Шрёдингера и классическим уравнением Гамильтона-Якоби (соответственно между квантовыми релятивистскими уравнениями и релятивистским уравнением Гамильтона-Якоби) существуют не приближенные, а точные связи.

На основе системного анализа взаимосвязей между моделями пространственно-временных континуумов и базисными свойствами уравнений Гамильтона-Якоби показано, что существуют единая система квантовых релятивистских волновых уравнений и конструктивный алгоритм, позволяющий корректно вывести известные уравнения квантовой механики и формировать новые модели квантовых релятивистских волновых уравнений с произвольным спином.

В основе вывода квантовых релятивистских волновых уравнений лежит модель квантового постулата, представленная на рис. 1.



Рис. 1. Обобщенная модель формирования квантовых релятивистских волновых уравнений в заданных пространственно-временных континуумах

Задавая модель пространственно-временного континуума, и записывая уравнения Гамильтона-Якоби в данном пространственно-временном континууме, по представленному на рис. 1 алгоритму можно вывести соответствующее квантовое волновое уравнение с заданным спином и соответствующей данному пространственно-временному континууму группой преобразования пространственно-временных координат и волновых функций. При этом в данной модели рассматриваются как целочисленные, так и дробные варианты механики.

Так, например, в данной модели рассмотрены дробные уравнения Шрёдингера, Фока-Клейна-Гордона, Дирака, Максвелла и др., на основе моделей дробных уравнений Гамильтона-Якоби, записанных в соответствующих пространственно-временных континуумах. При этом выполняются корректные переходы между моделями механик.

В Части 1 данной статьи рассмотрим некоторые математические особенности квантового постулата, представленного на рис. 1.

Математическая модель квантового постулата

Рассмотрим кратко этапы построения математического алгоритма квантового постулата [15].

Трансформированное уравнение Гамильтона-Якоби

Допустим, что задано релятивистское уравнение Гамильтона-Якоби [14]:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x^i} - \frac{e}{c} A_i \right)^2 + m^2 c^2 = 0, \quad i = 1, 2, 3, 0,$$

где e – заряд частицы, $A_i = (\varphi^0, A)$ – 4-потенциал электромагнитного поля. Введем функцию $\Omega(x^1, x^2, x^3, t, S) = \text{const}$, с помощью которой функция действия S выражается в неявном виде, т.е. $S = S(x^1, x^2, x^3, x^0 = ct)$. Воспользовавшись теперь известным преобразованием (П4), вышеприведенное уравнение можем представить в виде:

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial x^i} - \frac{e}{c} A_i \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 + m^2 c^2 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 = \{ \tilde{A} - B \} = 0, \quad i = 1, 2, 3, 0.$$

Полученное уравнение будем называть в дальнейшем *трансформированным* уравнением Гамильтона-Якоби и обозначать символом $\{ \Gamma. - Я. \}$.

Основные положения алгоритма квантового постулата

Следуя [15], обсудим этапы, входящие в представленный на рис. 1 алгоритм.

На рис. 2 представлен фрагмент (из обсуждаемого на рис. 1) алгоритма.

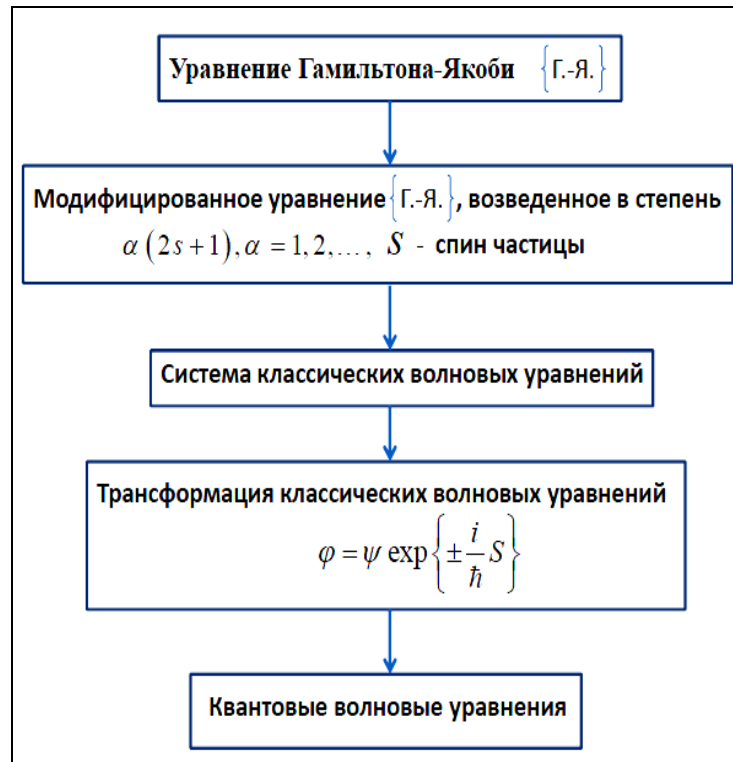


Рис. 2. Структура алгоритма квантового постулата

Согласно этапам на рис. 2, необходимо выполнить следующие этапы.

1. Трансформированное уравнение $\{\Gamma. - Я.\}$ в целочисленную степень $\alpha(2s+1)$, где s – спин частицы. Число $\alpha = 1, 2, \dots$ зависит от условий, указанных ниже.
2. Полученное уравнение (в том числе, когда можно принять $\alpha = 1$) рассматривается как характеристическое многообразие для системы $(4s+2)$ линейных уравнений первого порядка

$$Lu = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial S} \right) \text{ для } (4s+2), \text{ которые в дальнейшем будем называть фундаментальными.}$$
 Эта совокупность $(4s+2)$ фундаментальных функций должна быть спинором для полуцелого спина или тензором для целого спина. Если систему уравнений первого порядка, удовлетворяющую указанным условиям, написать невозможно, то выписывается система второго порядка, имеющая вид:
$$Lu = \lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial S^2} \right).$$
 При этом принимается $\alpha = 2$ и т.д. Все полученные таким образом уравнения должны быть релятивистски инвариантными и содержать только старшие производные.

Примечание 1. Перечисленная совокупность однозначно определяет классические волновые уравнения с точностью до линейного преобразования, не меняющего релятивистской инвариантности. Однако могут существовать случаи вырождения [14]. Так, например, в случае спина $s = 0$ (скалярные частицы) должны, согласно принятому правилу, существовать две функции ψ_1 и ψ_2 , так как $(4s+2) = 2$. Но такие две функции не могут образовать тензора в псевдоевклидовом пространстве. Следовательно, они должны быть скалярами, тождественно совпадающими друг с другом. Соответствующие волновые уравнения также оказываются тождественными. Отметим, что все приведенные линейные уравнения должны содержать только старшие производные и быть релятивистски инвариантными (за исключением уравнения Шрёдингера в классической области). Эти волновые уравнения можно рассматривать как классический аналог квантовых волновых уравнений.

3. Полученные в предыдущем пункте «классические» волновые уравнения подвергаются стандартному преобразованию:

$$\varphi_k(x^1, x^2, x^3, x^0, S) = \psi_k(x^1, x^2, x^3, x^0) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} S\right\}$$

или

$$\varphi_k(x^1, x^2, x^3, x^0, S) = \psi_k(x^1, x^2, x^3, x^0) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\right\},$$

где $\varphi(x, S)$ – вектор классических волновых функций; $\psi(x)$ – вектор квантовых волновых функций. Полученные с помощью указанных выше трансформаций уравнения будут квантовыми уравнениями для частиц с различными спинами. Эти уравнения будут иметь вид $Lu = \lambda u$, где L – линейный оператор, u – вектор-функция.

Может иметь место случай, когда не существует ни спинора, ни тензора, имеющих в точности $(4s + 2)$ компонент. Тогда следует ввести спинор или тензор с n компонентами, причем ближайшее большее целочисленное n должно удовлетворять соотношению $n > (4s + 2)$. К полученной таким образом системе n уравнений для n волновых функций в соответствии с изложенным алгоритмом следует добавить $[n - (4s + 2)]$ инвариантных алгебраических соотношений. Тогда число независимых компонент волновых функций будет в точности равно $(4s + 2)$.

Приведенные основные положения алгоритма квантового постулата проиллюстрируем применением к выводу основных уравнений квантовой теории моделей динамических систем.

Модифицированное уравнение Гамильтона-Якоби и вывод квантовых волновых уравнений: особенности применения в компьютерных нанотехнологиях

Основное внимание при изложении материала данного раздела уделено физическому содержанию вывода квантовых волновых уравнений на наглядных примерах с использованием максимально простых математических средств (без потери необходимой математической и физической строгости изложения).

Уравнение Шрёдингера для частицы, движущейся в заданном потенциальном поле

Классическое уравнение Гамильтона-Якоби имеет, согласно (П7), вид:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial S}{\partial x_i} \right)^2 + U(x_1, x_2, x_3, t) = 0. \quad (1)$$

Трансформированное уравнение Гамильтона-Якоби (П8) имеет вид:

$$-\frac{\partial \Omega}{\partial S} \frac{\partial \Omega}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_i} \right)^2 + U(x_1, x_2, x_3, t) \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 = 0. \quad (2)$$

Соответствующее классическое волновое уравнение, для которого (2) является уравнением характеристик, принимает вид (П9):

$$-\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t \partial S} + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} + U(x_1, x_2, x_3, t) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial S^2} = 0. \quad (3)$$

Применив выше приведенную трансформацию вида:

$$\varphi(x_1, x_2, x_3, t, S) = \psi(x_1, x_2, x_3, t) \exp\left\{-\frac{iS}{\hbar}\right\},$$

получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j^2} + U(x_1, x_2, x_3, t) \psi, \quad (4)$$

где $\varphi(x, S)$ – вектор классических волновых функций; $\psi(x, t)$ – вектор квантовых волновых функций. Если обозначить Гамильтониан в (4) как $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + U(x_1, x_2, x_3, t)$, то уравнение (4) примет вид:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H \psi. \quad (5)$$

Примечание 2. Вывод уравнения (4) был получен¹¹ И.И. Гольденблатом и С.В. Ульяновым в 1964г, и повторен¹² И.С. Аржаных в 1965г. Выводу уравнения Шрёдингера за последние годы посвящено много работ. Приведенный в данном примере вывод уравнения Шрёдингера принципиально отличается от известных работ [33-53].

Рассмотрим некоторые следствия из уравнения Шрёдингера.

Вывод уравнения фон Неймана из уравнения Шрёдингера

Рассмотрим вывод одного важного для квантовой теории информации и теории квантовых алгоритмов уравнения фон Неймана для оператора плотности $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ квантового состояния из уравнения Шрёдингера, описывающего эволюцию квантового состояния $|\psi\rangle$. В общем виде оператор плотности может быть записан как внешнее произведение векторов состояния, т.е. $\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$.

Для кет и бра-векторов $|\psi_k\rangle$ и $\langle\psi_k|$ имеем уравнения Шрёдингера в виде:

$$\frac{d|\psi\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H |\psi\rangle \text{ и } \frac{d\langle\psi|}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle\psi| H,$$

где использовано свойство эрмитовости Гамильтониана H . Тогда производная от оператора плотности будет иметь вид: $\frac{d}{dt} \rho(t) = \sum_k p_k \frac{d|\psi_k(t)\rangle}{dt} \langle\psi_k(t)| + \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \frac{d\langle\psi_k(t)|}{dt}$.

Используя значения производных от векторов квантовых состояний, получим:

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \sum_k p_k H |\psi_k(t)\rangle \langle\psi_k(t)| - \sum_k p_k |\psi_k(t)\rangle \langle\psi_k(t)| H \right\}.$$

Правую часть приведенного выражения можно представить через коммутатор $[A, B] = AB - BA$ в виде:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]. \quad (6)$$

Уравнение (6) называется уравнением фон Неймана для оператора плотности.

Примеры применения решений уравнений Шрёдингера

Пример 2: Квантовый бит. Рассмотрим задачу движения частицы в одномерной потенциальной яме с ограниченными по высоте стенками. Движение частицы в потенциальной яме описывается одномерным стационарным уравнением Шрёдингера в виде линейного дифференциального уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi,$$

¹¹ Гольденблат И.И., Ульянов С.В. Избранные лекции по теории относительности и квантовой механике. – М.: МО СССР, 1964.

¹² Аржаных И.С. Поле импульсов. – Ташкент: Наука, 1965.

где m – масса элементарной частицы, \hbar постоянная Планка, и потенциальная энергия $V(x) = 0$ для $0 < x < L$ и $V(x) = \text{const}$, как показано на рис. 3.

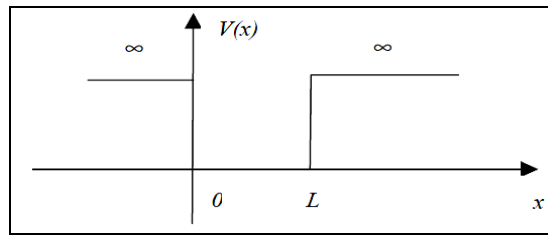


Рис. 3. Частица в потенциальной яме

Граничные условия для волновой функции ψ запишутся в виде $\psi(0, t) = 0$ и $\psi(L, t) = 0$.

Решением дифференциального уравнения является: $\psi(x, t) = \sum_n \alpha_n \psi_n(x, t)$, где $\sum_n |\alpha_n|^2 = 1$

и $\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$, где $k_n = \frac{n\pi}{L}$; $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL} n^2$. Число n целое, энергия частицы будет иметь квантованный характер, а вид волновых функций для $n = 1, 6, 10$ показан на рис. 4.

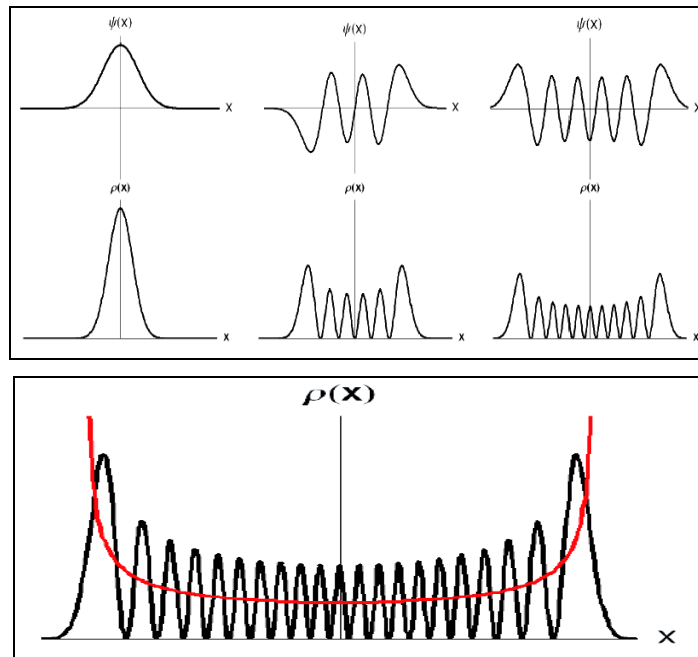


Рис. 4. Вид волновых функций и вероятности распределения

Кроме того, не трудно проверить, что комплексные значения функции $\psi_n(x, t)$ ортонормированы. Если мы рассматриваем двухуровневую квантовую систему, то волновая функция $\psi(x, t)$ будет иметь следующий вид:

$$\psi(x, t) = \alpha_1 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_1 x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + \alpha_2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_2 x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t}.$$

Определим кет-вектора как:

$$|0\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_1 x), |1\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_2 x), \quad a(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \text{ и } b(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t}.$$

Тогда $\psi(x, t)$ может быть записано как $\psi(x, t) = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle$. Комплексные коэффициенты удовлетворяют условию нормировки $a^2(t) + b^2(t) = 1$. Следовательно, решением уравнения Шрёдингера для 2-уровневой системы является квантовый бит (кубит).

Пример 3: Роль вида потенциала на решение уравнения Шрёдингера и функции Вигнера. Рассмотрим важный для теории управления и компьютерных нанотехнологий пример влияния вида потенциала на решение уравнения Шрёдингера при исследовании квантового эффекта туннелирования. Анализ осуществляется на основе функций Вигнера, которые описаны ниже.

Роль вида симметричного и асимметричного потенциалов. Рассмотрим уравнение Шрёдингера для первых двух нижних состояний ($n = 0$ и $n = 1$) следующего вида [54]:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi_n''(x) + [E_n - V(x)] \psi_n(x) = 0.$$

Допустим, что $\hbar^2 / 2m = 1$. Предположим, что основное ψ_0 и первое ψ_1 состояния связаны мультипликативной функцией ϕ в виде $\psi_1 = \phi \psi_0$. Подставляя данное соотношение в уравнение Шрёдингера для $n = 1$, получим:

$$(\phi \psi_0)'' + [E_1 - V] \phi \psi_0 = 0.$$

Уравнение Шрёдингера для $n = 0$ после умножения на ϕ примет вид:

$$\phi \psi_0'' + [E_0 - V] \phi \psi_0 = 0.$$

Вычитая данное уравнение из предыдущего, получим выражение для новой функции:

$$\chi(x) = \frac{\phi'' + \Delta E \phi}{2\phi'} = -\frac{\psi_0'}{\psi_0} = -\frac{d \ln \psi_0}{dx},$$

где $\Delta E = E_1 - E_0$ определяет энергию перехода между базовым и первым возбужденным состоянием. Тогда соответствующее базовое состояние ψ_0 определяется как:

$$\psi_0 = \mathcal{N} \exp\left(-\int_0^x \chi(x') dx'\right),$$

где \mathcal{N} – нормирующий множитель. Из уравнения Шрёдингера для базового состояния ψ_0 можно определить (с точностью до аддитивной постоянной) вид потенциала $V(x)$ как:

$$V(x) = \frac{\psi_0''}{\psi_0} + E_0 = \chi^2 - \chi' + E_0.$$

На рис. 5,а показаны возможные формы потенциала $V(x)$. В случае симметричного двойного потенциала (см. рис. 5,а и 5,в) примем:

$$\phi(x) = \frac{\sinh(ax)}{\cosh(bx)}, \quad a = \sqrt{-E_0}, b = \sqrt{-E_1}, \quad E_0 < E_1 < 0.$$

Функция

$$\chi(x) = \frac{\sinh(ax)(2b^2 - 2a^2 \cosh(bx)) + ab \cosh(ax) \sinh(2bx)}{b \sinh(ax) \sinh(2bx) - 2a \cosh(ax) \cosh^2(bx)}$$

и соответствующий потенциал $V(x) = \frac{2(b^2 - a^2)(a^2 \cosh^2(bx) + b^2 \sinh^2(ax))}{[a \cosh(ax) \cosh(bx) - b \sinh(ax) \sinh(bx)]^2}.$

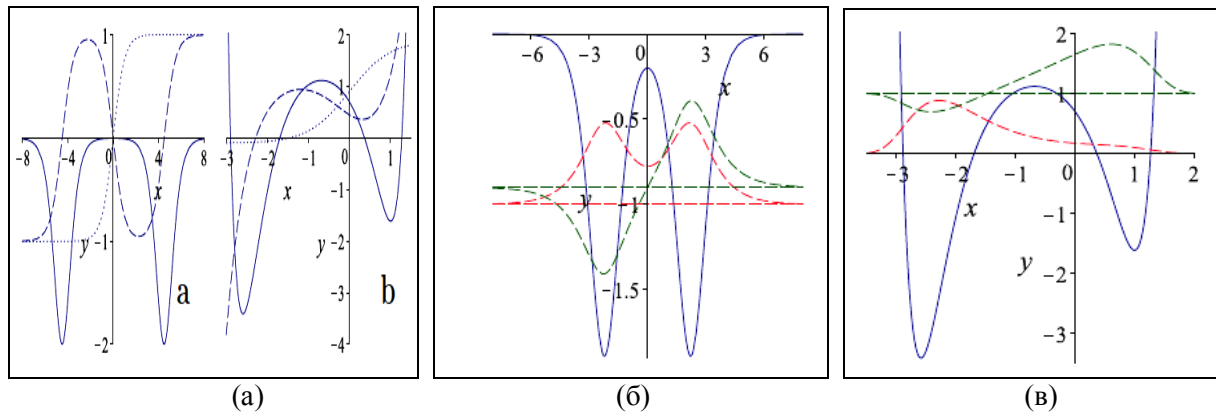


Рис. 5. (а) – вид двойного потенциала $V(x)$ (сплошная линия), функции $\chi(x)$ (штриховая линия) и мультипликативной функции ϕ (пунктирная линия); (б) – вид симметричного потенциала (сплошная линия), соответствующее основное состояние ψ_0 (пунктирная красная линия) и первое возбужденное состояние ψ_1 (пунктирная зеленая линия) для $E_0 = -1, E_1 = -0.9$; (в) – асимметричный потенциал (сплошная линия), соответствующее основное состояние ψ_0 (пунктирная красная линия) и первое возбужденное состояние ψ_1 (пунктирная зеленая линия) для $\alpha = 0.9, \beta = 1, E_0 = 0, \Delta E = 1$ [54]

Основное невозбужденное состояние

$$\psi_0(x) = \frac{\psi_0(0)(e^{2bx} + 1)(a - b)e^{ax}}{(e^{2(b+a)x} + 1)(a - b) + (a + b)(e^{2ax} + e^{2bx})}$$

и первое возбужденное состояние

$$\psi_1(x) = \frac{\psi_1(0)(e^{2ax} - 1)(a - b)e^{bx}}{(e^{2(b+a)x} + 1)(a - b) + (a + b)(e^{2ax} + e^{2bx})}.$$

Обе функции имеют четную и нечетную составляющие (см. рис. 5,б).

Для асимметричного потенциала примем:

$$\phi(x) = \alpha + \tanh(\beta x), \quad \chi(x) = \frac{\Delta E}{4\beta} [\sinh(2\beta x) + 2\alpha \cosh(\beta x)] - \beta \tanh(\beta x)$$

и соответствующий асимметричный потенциал:

$$V(x) = \beta^2 - \Delta E \alpha \sinh(2\beta x) + \cosh^2(\beta x) \left(\frac{\Delta E^2}{4\beta^2} \alpha \sinh(2\beta x) - \frac{\Delta E^2}{4\beta^2} - 2\Delta E \right) + \frac{\Delta E^2}{4\beta^2} (\alpha^2 + 1) \cosh^4(\beta x) + \frac{3}{2} \Delta E + E_0.$$

Соответственно волновые функции двух первых нижних уровней имеют вид:

$$\psi_0(x) = \psi_0(0) \cosh(\beta x) \exp \left\{ -\frac{\Delta E}{4\beta^2} \left(\cosh^2(\beta x) + \alpha \beta x + \frac{\alpha}{2} \sinh(2\beta x) \right) \right\},$$

$$\psi_1(x) = \psi_1(0) [\alpha \cosh(\beta x) + \sinh(\beta x)] \exp \left\{ -\frac{\Delta E}{4\beta^2} \left(\cosh^2(\beta x) + \alpha \beta x + \frac{\alpha}{2} \sinh(2\beta x) \right) \right\}.$$

Из результатов на рис. 5,в видно, что асимметрия потенциала существенно меняет качественное поведение двух нижних волновых функций по сравнению с симметричным случаем (при $\alpha = 0$).

Функции Вигнера и эффект туннелирования. Эффект туннелирования имеет важное значение при планировании процессов проектирования новых наноматериалов и наноустройств, элементной базы квантовых компьютеров и др. Как отмечалось в [12], существуют определенные трудности при его изучении и корректной физической интерпретации.

Эффект туннелирования проиллюстрирован на рис. 6. В случае одного барьера с определенной вероятностью частица за счет волновых свойств (дуализм «частица – волна») проходит барьер, несмотря на тот факт, что ее кинетическая энергия меньше высоты барьера V_0 . Сама вероятность и время прохождения зависят от соотношения V_0 / W . Существует однако эффект резонанса, когда при прохождении двух потенциальных барьеров амплитуда волны существенно увеличивается между двумя барьерами.

Эти эффекты играют большую роль при проектировании устройств спинтроники, спиноптики, наноматериалов и др.

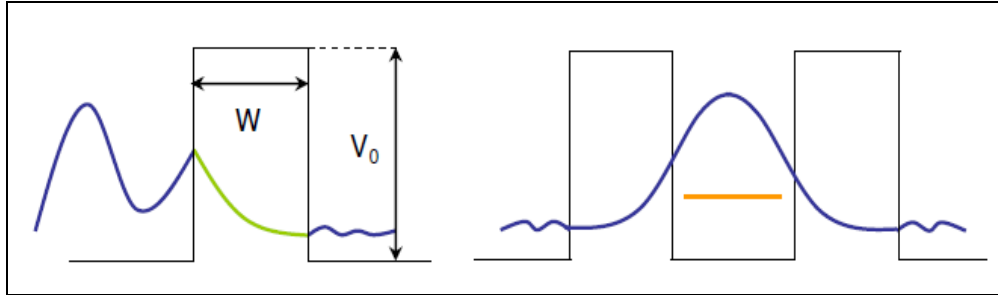


Рис. 6. Эффект квантового туннелирования при прохождении потенциальных барьеров

Для изучения динамики эффекта туннелирования используем нормированную суперпозицию состояний:

$$\psi(x, t) = \sin(\theta) \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right) \psi_0(x) + \cos(\theta) \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) \psi_1(x), \quad \theta \in [0, \dots, \pi/2].$$

Энергия ΔE определяет период времени туннелирования $T = 2\pi\hbar / \Delta E$, т.е., T определяет время, необходимое частице инициализироваться, например, в левом барьере и находиться в стадии колебаний «влево-вправо-влево». Физически это означает, что с увеличением количества энергии сцепления колебаний имеем более короткий период колебаний.

Евгений Вигнер в 1932г. ввел понятие функции квази-распределения вероятностей $W(x, p, t)$ для исследования квантовой корреляций в классической статистической механике. Данная функция является генерирующей функцией для всех пространственных автокорреляционных функций заданных квантовомеханических волновых функций ψ и определяется в виде:

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x+y, t) \psi(x-y, t) e^{\frac{2ipy}{\hbar}} dy,$$

где x и y описывают положение частицы, и p описывает момент.

Функция $W(x, p, t)$ является действительной функцией распределения на фазовом пространстве, но предполагает наличие отрицательных значений и поэтому носит наименование квазираспределения. Маргинальные квантовомеханические распределения вероятностей положения $P(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p, t) dp$ и момента $\tilde{P}(p, t) = |\Phi(p, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p, t) dx$ и геометрически являются проекциями функции $W(x, p, t)$ на плоскости в фазовом пространстве. Условие нормировки имеет вид $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p, t) dp dx = 1$ и огибающая функций Вигнера $W_\psi(x, p, t)$ и $W_\chi(x, p, t)$ двух различных квантовых состояний $\psi(x, t)$ и $\chi(x, t)$ имеет квадратичную амплитуду от огибающих магнитуд двух данных квантовых состояний:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_\psi(x, p, t) W_\chi(x, p, t) dp dx = \frac{2}{\pi\hbar} |\langle \psi | \chi \rangle|^2.$$

На рис. 6,а,б показана эволюция во времени функций Вигнера для симметричных и асимметричных потенциалов и ассоциированные с ними маргинальные функции плотности распределения вероятностей $P(x,t)$ и $\tilde{P}(p,t)$, полученные численным интегрированием [54].

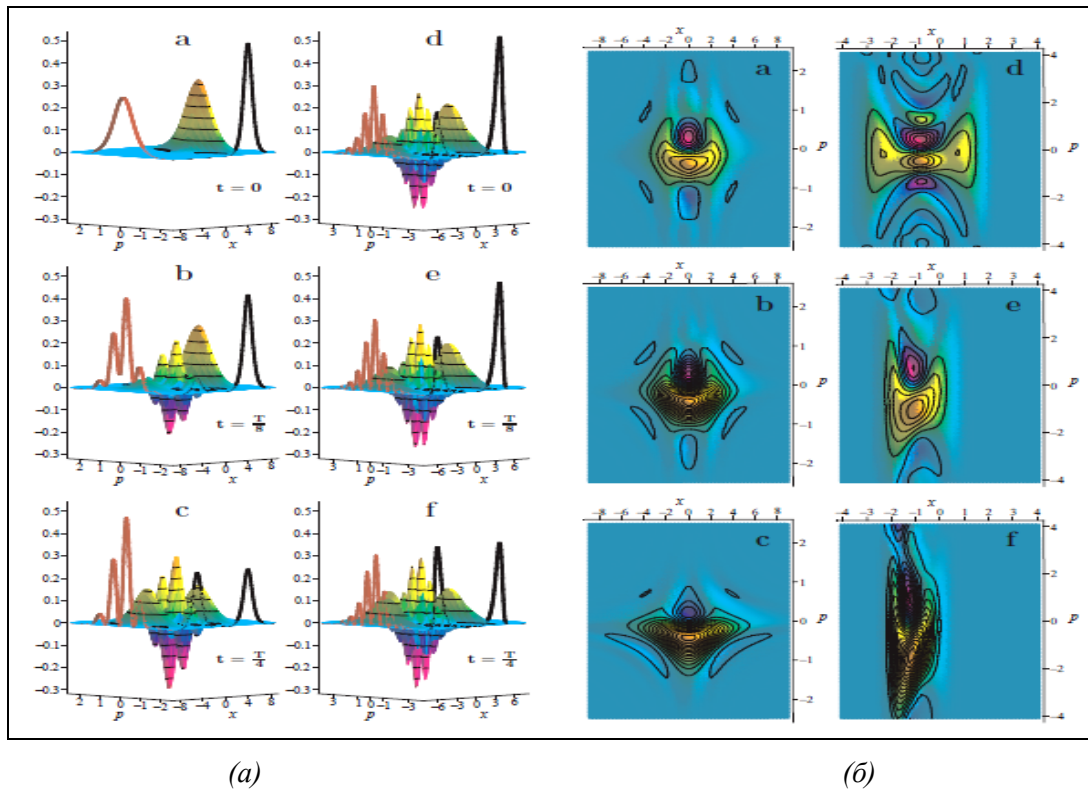


Рис. 6 (а,б). Эволюция функций Вигнера (пояснения в тексте)

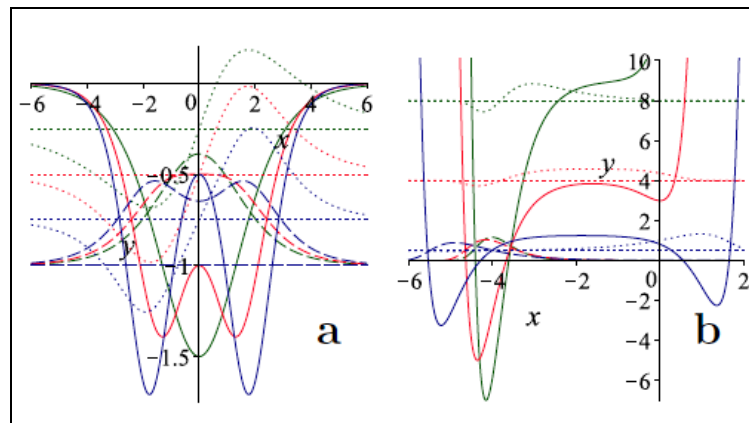


Рис. 7. Изменение потенциалов V . (а) – симметричный потенциал при изменении расстояния между стенками при $E_0 = -1, \Delta E = 0.25, 0.5, 0.75$ синий, красный, зеленый цвета соответственно; и (в) – асимметричный потенциал $\alpha = 0.9, \beta = 1, E_0 = 0, \Delta E = 0.5, 4, 8$ синий, красный, зеленый цвета соответственно, и соответствующие основное и первое возбужденное состояния ψ_0 и ψ_1

Максимумы пространственных волновых функций перемещаются в зависимости от возрастания пространственной области краев в ассоциированном представлении моментов в фазовом пространстве волновых функций, и рассматривается как пространственная частотность интерференции функций Вигнера. Более общий случай рассмотрен в [55].

Рассмотрим теперь важный пример о корректности математической модели и ее физической интерпретации в задачах планирования и интеллектуального управления физическими экспериментами.

Пример 4: Квантовый отражатель (Quantum bounce [56 - 58]). Рассмотрим не зависящее от времени в пространстве состояний уравнение Шрёдингера для амплитуды вероятностей $\psi(z)$ следующего вида:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + mgz\right) \psi(z) = E \psi(z), \quad (7)$$

где потенциал $U(z) = \begin{cases} +\infty & \text{для } z \leq 0 \\ Fz & \text{для } z > 0 \end{cases}$, что соответствует влиянию постоянной силы $F = mg$ гравитации, но с бесконечным потенциальным барьером при $z = 0$, от которого отталкивается частица массой m .

В классической механике период, с которым частица отталкивается от барьера, равняется удвоенному времени падения частицы с максимальной высоты z_0 и определяется как:

$$T_{cl} = 2\sqrt{\frac{2mz_0}{F}}.$$

Однако в квантовом случае ситуация принципиально отличается от рассмотренного классического варианта. Уравнение Шрёдингера для данной системы может быть записано как:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + Fz \psi(z) = E \psi(z)$$

и после замены переменных $z = \eta y + \sigma$, где $\eta = \left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{1/3}$, $\sigma = \frac{E}{F}$, получим уравнение Эйри:

$$\frac{d^2 \psi(y)}{dy^2} = y \psi(y).$$

Энергетический спектр имеет вид $E_n = y_n \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m}\right)^{1/3}$. В случае Венцеля-Крамерса-Бриллюэна

(ВКБ) приближении условия квантования имеют вид: $\int_0^{z_0} \sqrt{2m(E_n - Fz)} dz = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\right) \hbar \pi$, где исполь-

зуются коэффициенты нормирования $C_L = \frac{1}{2}$ при условии бесконечного потенциального барьера, и

$C_R = \frac{1}{4}$ для случая линейного потенциала. В результате энергетические уровни определяются как

$E_n = \left(\frac{3\pi}{2} \left(n + \frac{3}{4}\right)\right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m}\right)^{1/3}$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Определение соотношения между собственным на-

чальным значением состояния n_0 и начальным значением z_0 имеет вид:

$$Fz_0 = E_{initial} = \left(\frac{3\pi}{2} \left(n_0 + \frac{3}{4}\right)\right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m}\right)^{1/3}.$$

Как отмечалось, в классическом случае в терминах энергетического спектра собственных значений период определяется как:

$$T_{cl} = \frac{2\pi\hbar}{|E'(n_0)|} = \frac{3\pi\hbar(n_0 + 3/4)}{E(n_0)} = 2\sqrt{\frac{2mz_0}{F}}$$

и согласуется с классическим определением. Имеем в общем виде следующие оценки:

$$T_{cl} = \frac{2\pi\hbar}{|E'(n_0)|}, T_{rev} = \frac{2\pi\hbar}{|E''(n_0)|/2}, \text{ и } T_{super} = \frac{2\pi\hbar}{|E'''(n_0)|/6},$$

где T_{rev} – время возврата волнового пакета в исходное состояние и T_{super} – т.н. «супер-время» возврата волнового пакета в исходное состояние на длительном отрезке времени. Существует также понятие дробного времени возврата в виде $t = pT_{rev} / q$, где p и q – целые числа. При q четном имеем q мини-копий волнового пакета, а при q нечетном, имеем $q/2$ мини-копий волнового пакета. Рассмотрим частный случай в (7)

$$U(z) = \begin{cases} +\infty & \text{для } z \leq 0 \\ 0 & \text{для } 0 < z \leq z_0 \end{cases}.$$

На рис. 8 показано динамическое поведение волнового пакета до, во время и после отталкивания бесконечно большим потенциальным барьером [59].

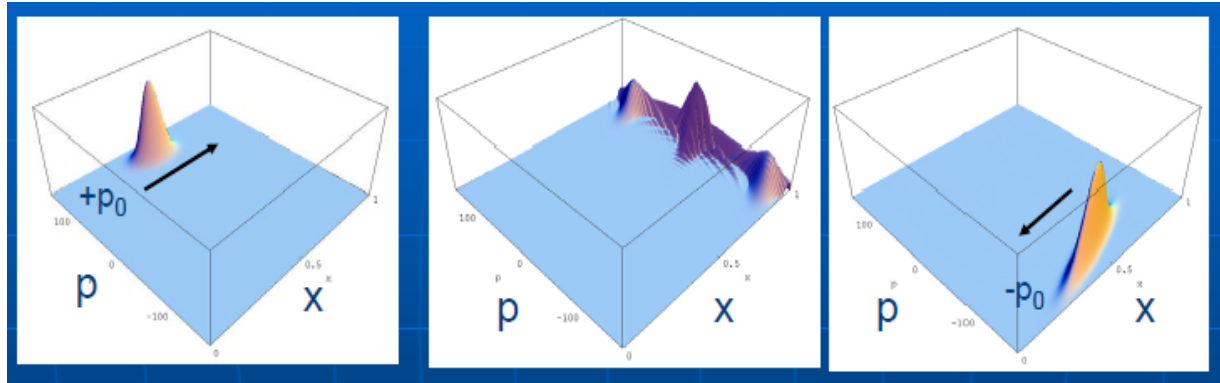


Рис. 8. Динамическое поведение волнового пакета при взаимодействии с бесконечно большим потенциальным барьером (в форме распределения Вигнера)

В случае дробного времени возврата волнового пакета имеем следующие соотношения:

$$\psi(z, t + T_{rev}/2) = -\psi(z_0 - z, t), \quad |\psi(z, t + T_{rev}/2)|^2 = |\psi(z_0 - z, t)|^2,$$

и имеем т.н. зеркальное возвращение. В пространстве моментов имеем т.н. противоположное направление $|\phi(p, t + T_{rev}/2)|^2 = |\phi(-p, t)|^2$ и формируется фазовое пространство с противоположными направлениями. Для $t = T_{rev}/4$ имеем аналог состояний кота Шрёдингера $\psi(z, t + T_{rev}/4) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ e^{-i\pi/4} \psi(z, t) + e^{+i\pi/4} \psi(z_0 - z, t) \}$, а для $t = T_{rev}/3$ воспроизводятся три мини копии с высокой корреляцией в пространственно-моментном пространстве.

На рис. 9 показана динамика поведения волновых пакетов (в форме распределения Вигнера) для случаев $t = T_{rev}/4$ и $t = T_{rev}/3$ соответственно.

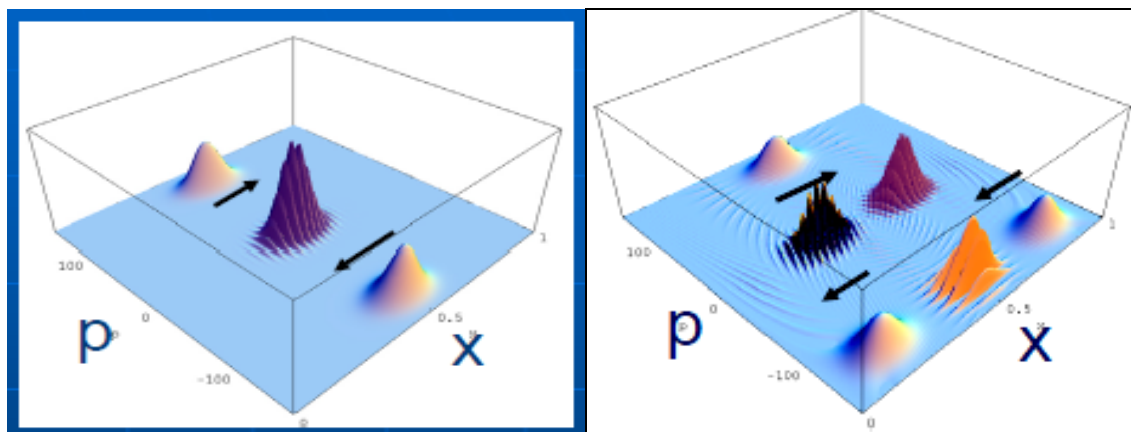


Рис. 9. Динамика поведения волновых пакетов при различных дробных значениях времени возврата

При этом в случае $t = T_{rev}/4$ происходит интерференция двух противоположных волн, показанная на рис. 10.

Рассмотрим теперь более подробно общий случай уравнения (7). Решение уравнения (7) обсуждалось во многих работах как педагогический пример особенностей квантовой механики. Точное выражение для значений энергии E_n записывается, как отмечалось, с использованием функций Эйри и зависит только от значений m, g, \hbar, n . Уровни энергии E_n соответствуют решениям следующего

уравнения: $\text{Ai}\left(-\frac{\sqrt[3]{2}}{\sqrt[3]{mg^2\hbar^2}}E\right)=0$, где $\text{Ai}(\dots)$ – функция Эйри. Собственная волновая функция

$\psi_n(z)$ в n -м квантовом состоянии на высоте z равна: $\psi_n(z) = C_n \text{Ai}\left(\frac{z}{z_0} - \alpha_n\right)$, где $\text{Ai}\left(\frac{z}{z_0} - \alpha_n\right)$ –

функция Эйри, $z_0 = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m^2g}} = 5,87\text{мкм}$ – характерный масштаб квантовых состояний, α_n – корни

функции Эйри $\text{Ai}(-\alpha_n)$, а коэффициент $C_m = \left(z_0 \int_{-\alpha_n}^{\infty} \text{Ai}(\zeta)^2 d\zeta\right)^{-1/2}$.

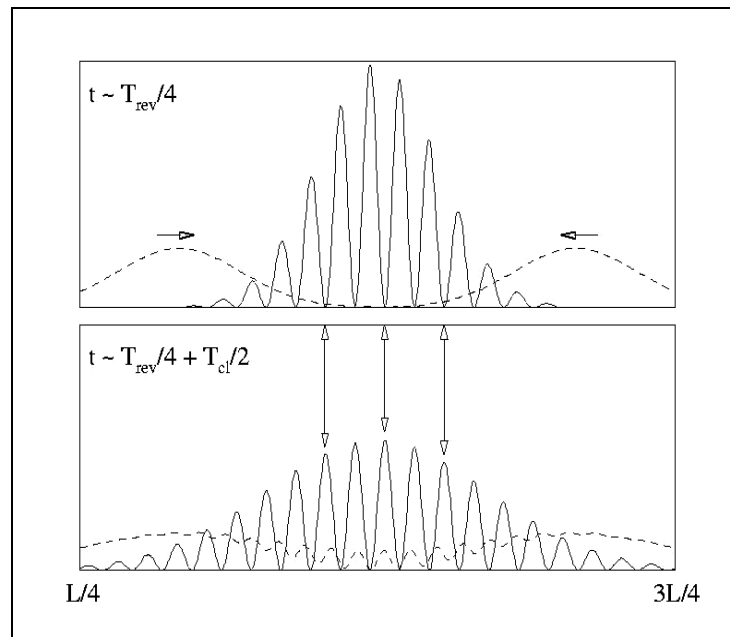


Рис. 10. Интерференция волн

На рис. 11 представлены решения¹³ для (7) в терминах функций Эйри.

¹³ Abele H., Jenke T., Leeb H., Schmiedmayer J. Ramsey's method of separated oscillating fields and its application to gravitationally induced quantum phase shifts //Arxiv: 0907.5447v1 [nucl-ex]. – 2009.

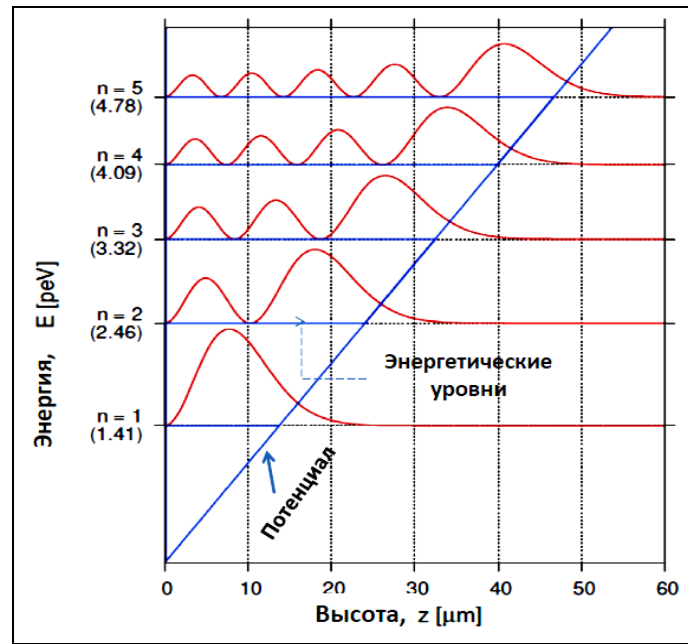


Рис. 11. Решения уравнения Шрёдингера (7)

Для Гауссовского волнового пакета при $z_0 = 25$, $\Delta z_0 = 1$ и $\hbar = 1$, $2m = 1$, $F = 1$ на рис. 12 показано динамическое поведение плотности распределения вероятностей в пространстве положение – момент (z, p) , т.е., $T_{cl} = 10$.

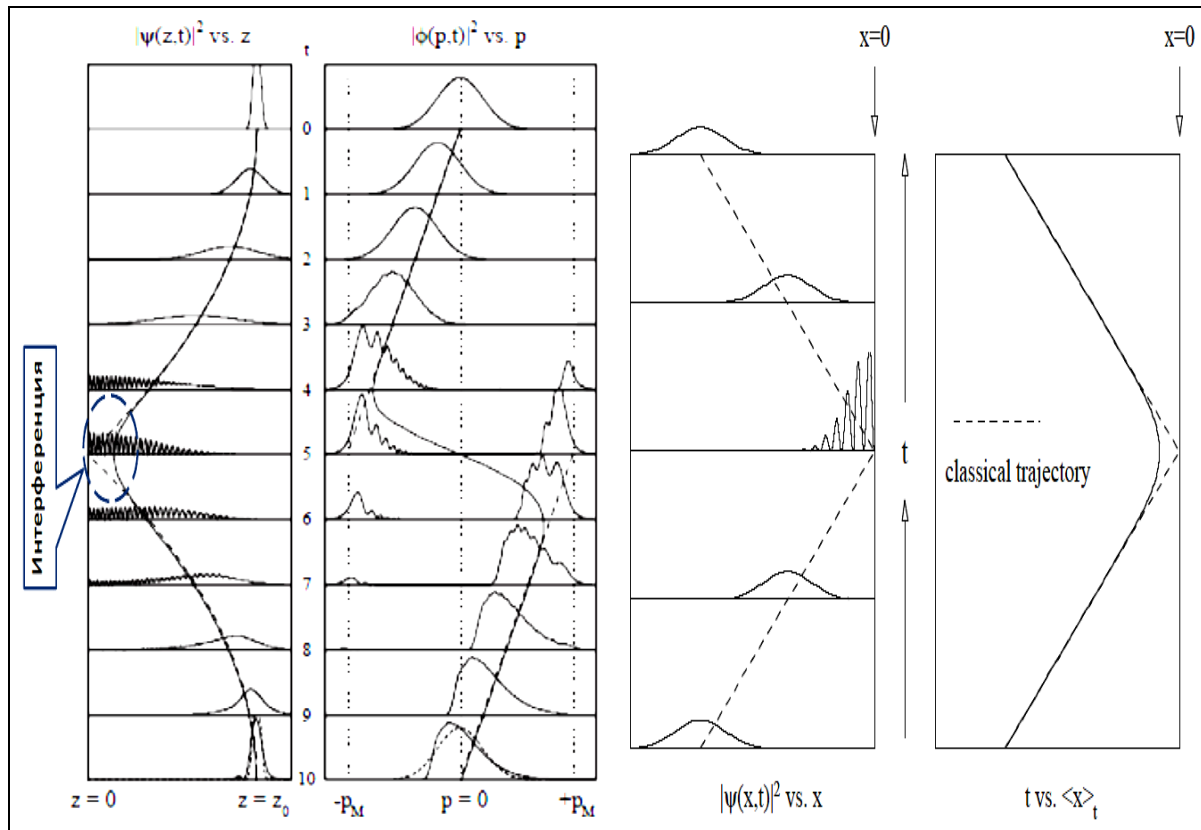


Рис. 12. Динамическое поведение отталкивания и восстановления волнового пакета (слева – для уравнения (7); справа – для бесконечного потенциала) [58]

Из рис. 12 видно, что осуществляется процесс волнового пакета, но при приближении к бесконечному потенциальному барьеру (в отличие от классического случая (пунктирная линия для классической траектории частицы)) происходит интерференция (см. рис.10) и отталкивание волнового пакета без соприкосновения с барьером.

На рис. 13 приведена обобщенная ситуация распространения волновых пакетов в условиях заданных значений времени возврата¹⁴.

Физически исследуемое явление в классическом описании заключается в том, что помещенный над горизонтально расположенной зеркальной поверхностью свободный нейтрон многократно отражается от поверхности зеркала и снова падает на нее под действием гравитационного поля. При этом его перемещение по вертикали не непрерывно, как в классической механике, а подчиняется законам квантовой механики: энергия может принимать только определенные значения, а волновая функция образует стоячую волну, квадрат амплитуды которой дает вероятность найти нейтрон на некоторой высоте над поверхностью зеркала (рис. 14 и 15).

На рис.14 представлено пространственно-временное поведение квантового отражателя. Полоса над пунктирной линией показывает плотность вероятности нахождения частицы пространственно-временной координаты в малом интервале, а сама пунктирная линия отражает пространственно-временную координату траектории движения классической частицы.

На рис. 15 показано динамическое поведение подсакивающего динамического объекта (классической и квантовой частицы) в гравитационном поле.

Из рис. 15 видно, что квантовый эффект подскока объекта моделируется волновым пакетом в соответствии с квантовой эволюцией движения частицы. Вероятность найти частицу при непосредственном измерении возрастает при увеличении по горизонтали огибающей волнового пакета. Квантовый эффект в этом случае формируется из двух слагаемых в виде размытия волнового пакета и интерференции пульсаций, возникающих при взаимодействии с основанием [60]. Интерференция пульсаций наглядно видна на рис. 15 в момент времени 5.5.мкс при взаимодействии падающих и восстановленных волн.

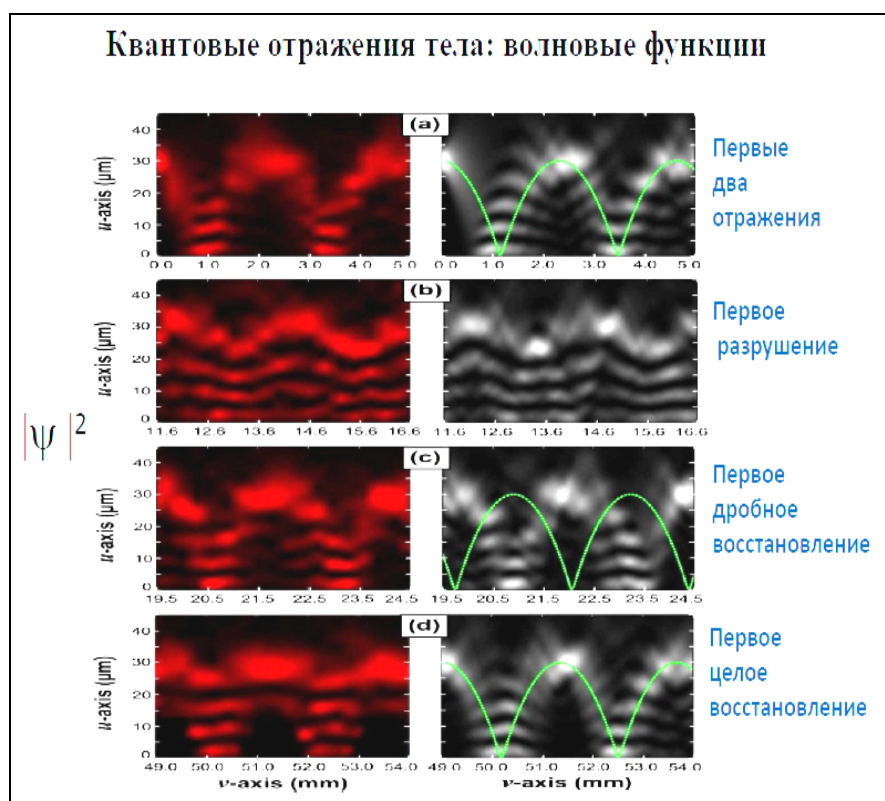


Рис. 13. Распространение волновых пакетов при заданных значениях времени возврата

¹⁴ Finazzi M. Experimental observation of a photon bouncing ball // GRANIT Workshop. – Milano, 2010.

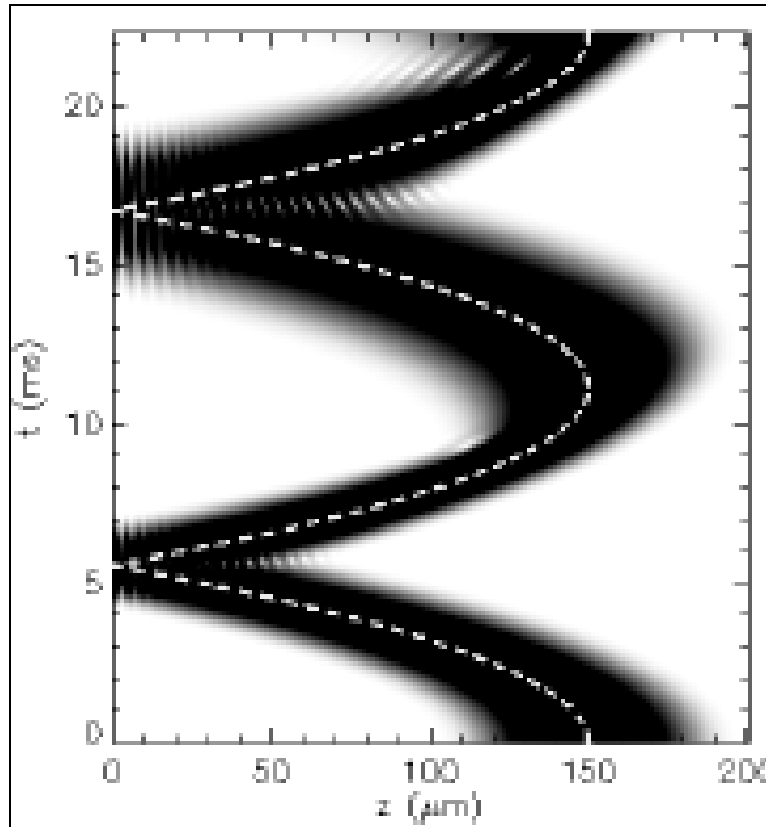


Рис. 14. Пространственно-временная динамика квантового отталкивания

Нетрудно заметить качественную картину распространения волнового пакета: с момента $t = 0$ до момента 11.1 нс форма волнового пакета существенно изменилась, а затем восстановилась в следующем цикле. Это явление известно как разрушение и восстановление волнового пакета.

В пространстве моментов импульса волновая функция может быть вычислена через волновую функцию:

$$\begin{aligned}\psi_n(z)\tilde{\phi}_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty \tilde{\psi}_n(z) e^{-ipz/\hbar} dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty \psi_n(z) \left[\cos\left(\frac{pz}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{pz}{\hbar}\right) \right] dz \equiv \\ &\equiv \tilde{\phi}_n^{(\text{Re})}(p) - i\tilde{\phi}_n^{(\text{Im})}(p).\end{aligned}$$

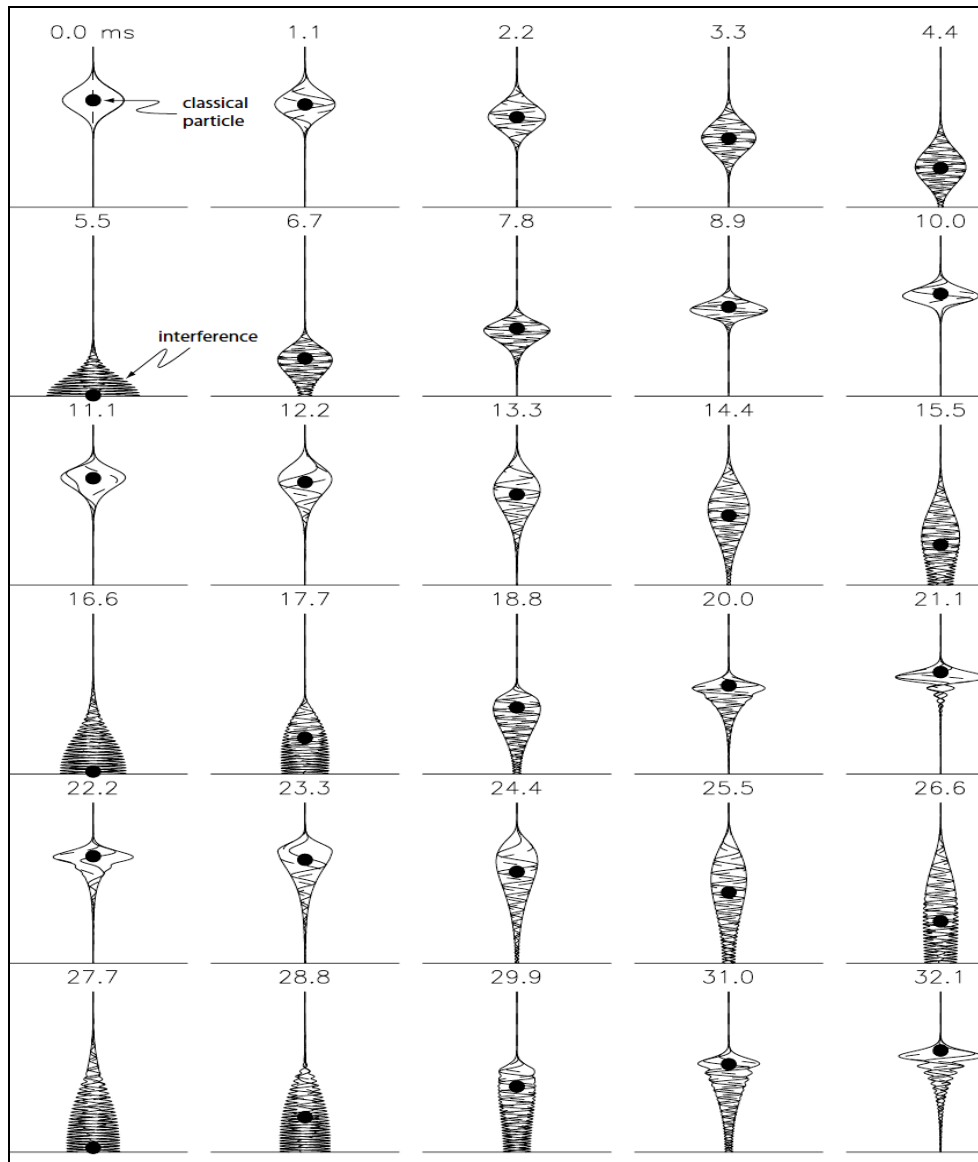


Рис. 15. Квантовая эволюция волнового пакета частицы в гравитационном поле

Графики функций $\left| \tilde{\phi}_n^{(\text{Im})}(p) \right|^2$, $\left| \tilde{\phi}_n^{(\text{Re})}(p) \right|^2$ и их сумма и сравнение с классической вероятностью представлены на рис. 16 [58].

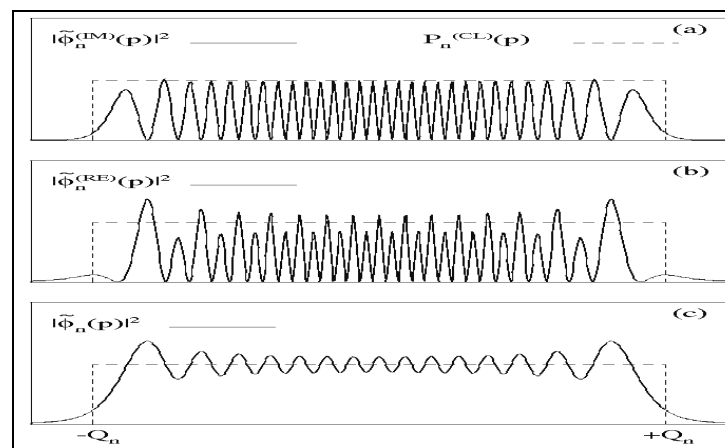


Рис. 16. Поведение функций $\left| \tilde{\phi}_n^{(\text{Im})}(p) \right|^2$, $\left| \tilde{\phi}_n^{(\text{Re})}(p) \right|^2$

Рассмотрим физическую модель описанного квантового эффекта. Изложенная выше модель оказалась адекватным прототипом для экспериментальной проверки отмеченных квантовых эффектов на основе ультра холодных нейтронов (УХН) [61] в силу их удивительных свойств: полное отражение от поверхности, благодаря которому возможно длительное удержание УХН в закрытых сосудах в течение времени, сравнимого со временем их жизни до бета-распада, которое составляет порядка 15 мин. Вероятность потерь УХН в стенках может быть заметно меньше вероятности их бета-распада. Длительное удержание позволяет проводить прецизионные или очень чувствительные измерения как свойств нейтронов, так и их взаимодействий с веществом и полями. Обычно отражение УХН строго упругое, поэтому термодинамическое равновесие между ними и ловушкой не успевает установиться.

Примером использования такого неравновесного состояния служит эксперимент по измерению квантовых состояний нейтрона в потенциальной яме, одна из стенок которой образована гравитационным полем Земли, а вторая – горизонтально расположенной отражающей поверхностью (плоским зеркалом): энергия вертикального движения нейтронов в нижнем квантовом состоянии в гравитационном поле Земли равна $\sim 1,4$ пэВ (при термодинамическом равновесии соответствует ~ 20 нК). Это много меньше температуры экспериментальной установки в нормальных условиях.

Поэтому УХН являются уникальными объектами, позволяющим провести прямое экспериментальное наблюдение квантовых состояний материи в гравитационном поле: они электрически нейтральны; их собственное время жизни достаточно велико, что позволяет обеспечить необходимое высокое энергетическое разрешение; малая масса нейтронов способствует наблюдению квантовых эффектов, так как приводит к большой неопределенности их положения; взаимодействие нейтронов с зеркалом термодинамически неравновесно, что позволяет проводить эксперименты с УХН, энергия которых на много порядков величины ниже энергии тепловых флуктуаций поверхности зеркала.

Относительно слабое гравитационное поле Земли может быть использовано в лабораторных условиях для создания только одной из стенок потенциальной ямы. Другой стенкой служит горизонтальное зеркало, которое в масштабе рассматриваемой задачи представляет собой бесконечно резкий и высокий потенциальный барьер, так что его параметры не влияют ни на значения энергии нейтронов в связанных состояниях, ни на вид соответствующих волновых функций.

На рис. 17 показана экспериментальная установка проверки квантового эффекта упругого отталкивания нейтронов и явления возврата формы волновой функции [57, 62-64].

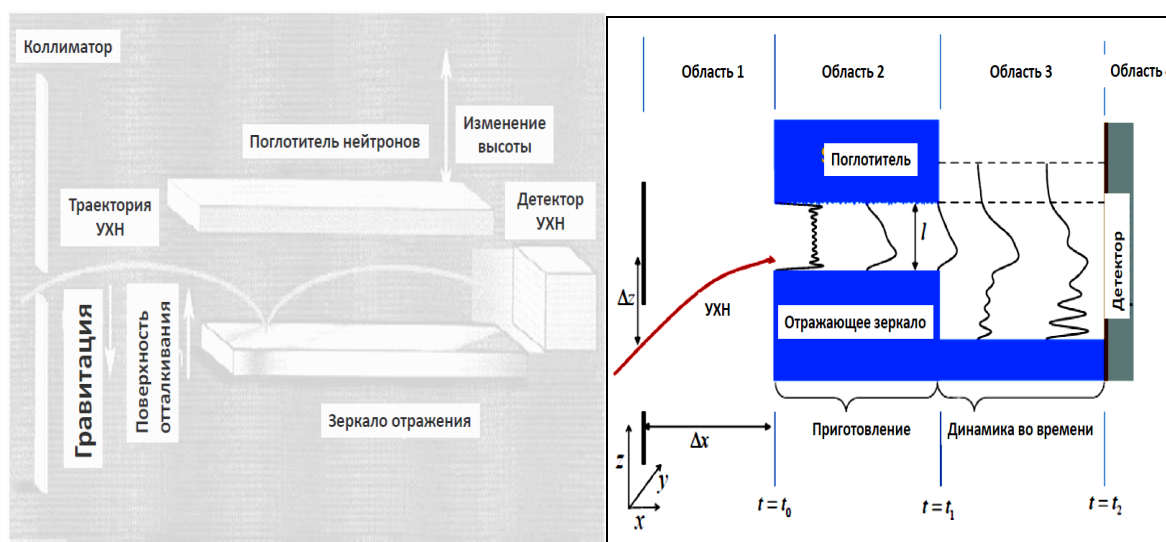


Рис. 17. Вид экспериментальной установки

На рис. 18 представлены экспериментальные данные отталкивания волнового пакета в зоне 2 и интерференции в зоне 3.

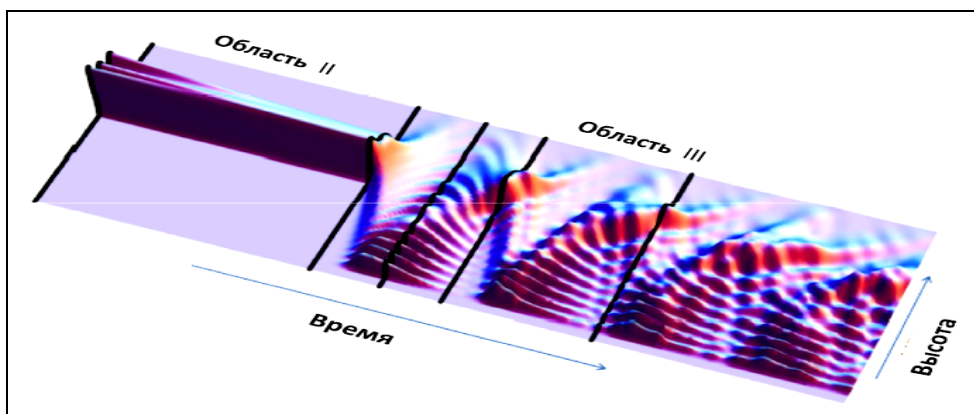


Рис. 18. Экспериментальные данные квантовой эволюции волновых пакетов [57]

На рис. 19 показана вероятность $\psi_o^2(z)$ обнаружения нейтрона на высоте z над поверхностью зеркала для четырех нижних чистых квантовых состояний [62].

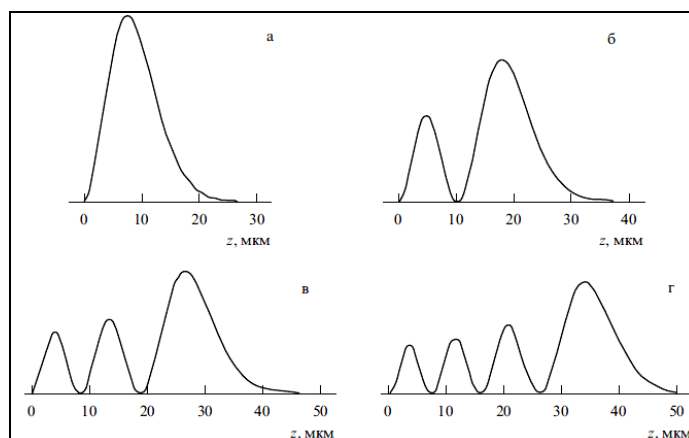


Рис. 19. Вероятность нахождения нейтрона в зависимости от высоты над зеркалом z для 1-го (а), 2-го (б), 3-го (в) и 4-го (г) квантовых состояний

Каждая зависимость $\psi_o^2(z)$ имеет n максимумов и $n-1$ минимумов между ними с нулевыми значениями в минимумах, что характерно для любой стоячей волны.

Выделение одного или нескольких чистых квантовых состояний выше первого ($n > 1$), например одного-двух нижних квантовых состояний, и непосредственное измерение вероятности обнаружения нейтрона в зависимости от высоты над зеркалом при помощи позиционно-чувствительного детектора с пространственным разрешением ~ 1 мкм возможно с помощью эксперимента, показанного на рис. 20.

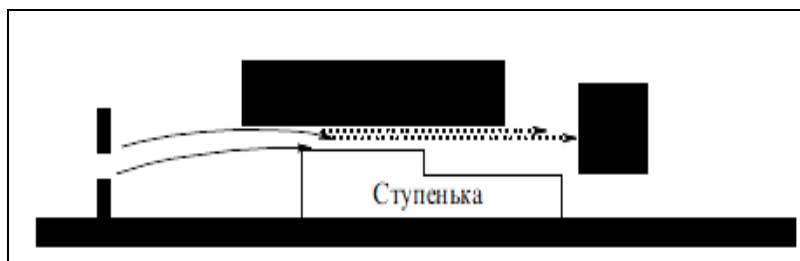


Рис. 20. Принципиальная схема эксперимента с небольшой отрицательной ступенькой на нижнем зеркале (см. рис. 17), допускающая переброс нейтронов в более высокие квантовые состояния (в область справа от ступеньки)

Как слева от ступеньки, так и справа от нее нейтроны находятся в квантовых состояниях. Однако соответствующие волновые функции оказываются сдвинутыми друг относительно друга на величину ступеньки Δz_{step} . При прохождении ступеньки нейтроны из n -го квантового состояния до ступеньки $\psi_n^{до}(z + \Delta z_{step})$ перераспределяются с некоторыми весами $\beta_{nk}^2(\Delta z_{step})$ по квантовым состояниям $\psi_n^{после}(z)$ после ступеньки. При этом ступеньку можно рассматривать как бесконечно быстрое возмущение, а матричный элемент перехода $\beta_{nk}(\Delta z_{step})$ равен:

$$\beta_{nk}(\Delta z_{step}) = \int \psi_n(z + \Delta z_{step}) \psi_k(z) dz.$$

На рис. 21,а показана вероятность перехода β_{1k}^2 из 1-го квантового состояния до прохождения ступеньки в 1-е, 2-е, 3-е и 4-е квантовые состояния после прохождения ступеньки.

На рис. 21,б показана вероятность обнаружения нейтрона над зеркалом в зависимости от высоты над зеркалом после прохождения нейтроном отрицательной ступеньки 15 мкм в двух случаях: для одного и двух квантовых состояний до ступеньки [63].

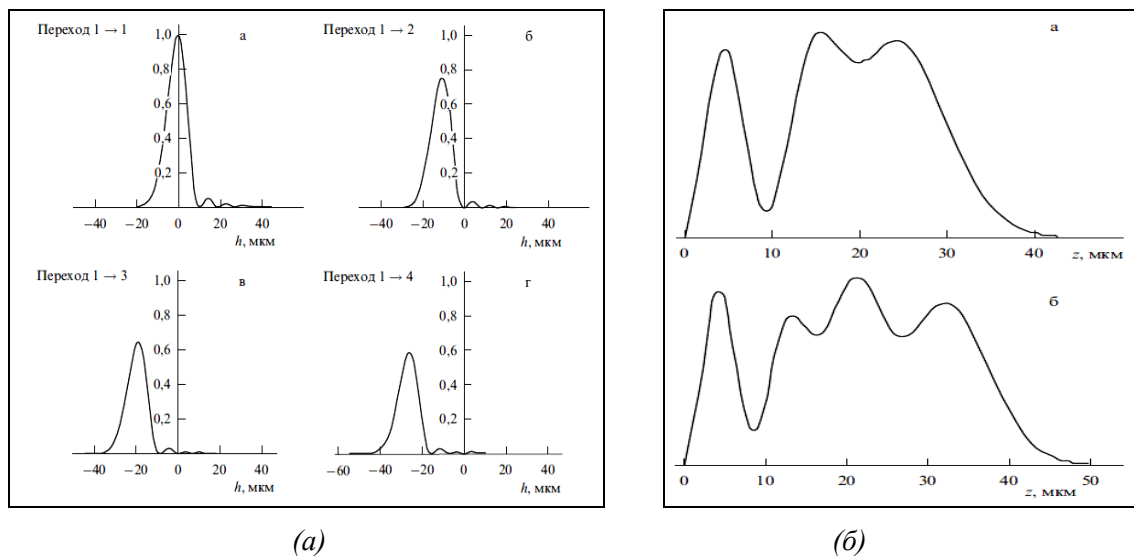


Рис. 21. Вероятность перехода нейтрона из 1-го квантового состояния до прохождения в 1-е (а), 2-е (б), 3-е (в) и 4-е (б) квантовые состояния после прохождения ступеньки в зависимости от величины ступеньки h (а); вероятность нахождения нейтрона в зависимости от высоты над зеркалом после прохождения нейтроном отрицательной ступеньки высотой 15 мкм для двух случаев: одно (а) и два (б) нижних квантовых состояний до прохождения ступеньки

Таким образом, несколько нижних квантовых состояний складываются «когерентно» и вероятность обнаружить нейтрон на высоте ~ 10 мкм систематически гораздо ниже, чем на соседних высотах.

Следовательно, экспериментально доказано, что уравнение Шрёдингера (7) описывает модель квантового эффекта отталкивания и восстановления волновых пакетов нейтрона в гравитационном поле Земли. Данный пример важен для разработки и обоснования корректной физической интерпретации моделей квантовых объектов управления.

Пример 5: Квантовые случайные блуждания и уравнение Шрёдингера. Модели квантовых случайных блужданий на линии, решетке, графах и др. нашли широкое применение в задачах компьютерных технологий и нанотехнологиях. Примером эффективного применения квантовых случайных блужданий могут служить модели квантового случайного поиска и самоорганизации квантовых наноструктур, квантового управления, квантовых алгоритмах, и для изучения динамического поведения многих физических систем.

Квантовые случайные блуждания известны к настоящему времени как обобщение классических случайных блужданий, применяя эффекты квантовой механики, такие как суперпозиция и интерференция квантовых амплитуд. В классических случайных блужданиях частица движется в пространстве состояний с определенной вероятностью, в то время как квантовые случайные блуждания в состоянии суперпозиции используют множество траекторий одновременно с амплитудой вероятности, соответствующей интерференции амплитуд различных путей траекторий движения. Это приводит, например, при случайном блуждании на линии, к эффекту квадратичного возрастания возможных шагов квантовых вариаций блуждания, в отличие от линейной зависимости в случае классических блужданий. Вероятностный результат в квантовых блужданиях получается путем измерения.

На рис. 22 показано различие вероятностных распределений квантовых и классических случайных блужданий.

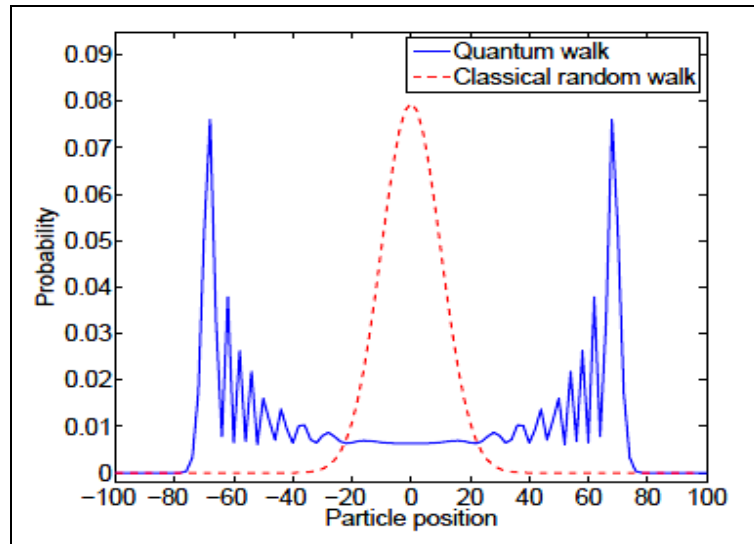


Рис. 22. Вероятностные распределения классических и квантовых случайных блужданий

Концепция квантовых случайных блужданий разработана для двух стандартных форм: непрерывные и дискретные во времени квантовые случайные блуждания.

В случае квантовых непрерывных блужданий положение частицы определяется непосредственно на Гильбертовом пространстве состояний \mathcal{H}_p .

В дискретных квантовых случайных блужданиях к пространству \mathcal{H}_p добавляется пространство квантовых операторов двухсторонних монет (типа «орел – решка»), т.е. Гильбертово пространство монет \mathcal{H}_c . В данном пространстве путем «квантового подбрасывания» монет выбирается направление, в котором должна двигаться частица (см. ниже Пример 6).

Рассмотрим случай непрерывных случайных блужданий.

При классическом случайном блуждании на графе $G = (V, E)$, где V означает множество вершин графа G с множеством ребер E . Шаг случайного блуждания описывается присоединенной матрицей A , которая преобразует распределение вероятностей над V , т.е.,

$$A_{j,k} = \begin{cases} 1 & (j,k) \in E \\ 0 & (j,k) \notin E \end{cases}$$

для всех пар $(j,k) \in V$. Другой важной матрицей ассоциированной с графом G является генерирующая матрица H , задаваемая в виде:

$$H = \begin{cases} d_j \gamma & j = k \\ -\gamma & (j, k) \in E, \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases}$$

где d_j определяет степень вершин j , а γ является вероятностью перехода между близлежащими вершинами. Если через $P_j(t)$ обозначить вероятность нахождения в вершине j в момент времени t , то переход на графе G определяется в виде решений дифференциальных уравнений:

$$\frac{d}{dt} P_j(t) = \sum_{k \in V} H_{j,k} P_k(t).$$

Решение данных дифференциальных уравнений определяется в виде $P(t) = e^{-Ht} P(0)$.

В квантовом случае вероятность P_j заменяется на квантовую амплитуду $a_j(t) = \langle j | \psi(t) \rangle$, где $|j\rangle$ определяется в ортогональном базисе Гильбертова пространства состояний \mathcal{H}_p и, вводя мнимую единицу i , получим $i \frac{d}{dt} a_j(t) = \sum_{k \in V} H_{j,k} a_k(t)$. Данное уравнение является уравнением Шрёдингера

$$i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle.$$

Так как генерирующая матрица является Эрмитовым оператором, то нормализация присутствует в динамике блужданий. Решение дифференциального уравнения можно записать в форме $|\psi(t)\rangle = e^{-Ht} |\psi(0)\rangle$. Таким образом, модель непрерывных квантовых случайных блужданий является формой уравнения Шрёдингера [65].

Для случая непрерывных квантовых случайных блужданий на линии, Гильбертово пространство состояний \mathcal{H}_p составлено базисными состояниями $|\psi_j\rangle$, где $j \in \mathbb{Z}$. Гамильтониан H определяется в этом случае как:

$$H |\psi_j\rangle = -\gamma |\psi_{j-1}\rangle + 2\gamma |\psi_j\rangle - \gamma |\psi_{j+1}\rangle \quad (8)$$

и преобразуется в уравнение временной эволюции преобразованием $U(t) = \exp(-iHt)$.

Гамильтониан H является генерирующей матрицей, которая трансформирует амплитуду вероятностей перехода γ в близлежащие состояния и является функцией времени.

Уравнение Фока-Клейна-Гордона для свободной частицы со спином $s = 0$

Релятивистское уравнение Гамильтона-Якоби для рассматриваемого случая, согласно (П1), имеет вид:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial x_3}\right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 + m^2 c^2 = 0. \quad (9)$$

Применив к уравнению (9) преобразование (П4) получим (П5) в виде:

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_3}\right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial t}\right)^2 + m^2 c^2 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S}\right)^2 = 0. \quad (10)$$

Уравнение (10) является характеристическим многообразием для следующего линейного волнового уравнения, содержащего только старшие производные:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + m^2 c^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial S^2} = 0. \quad (11)$$

Применив теперь к уравнению (11) трансформацию:

$$\varphi(x^1, x^2, x^3, x^0, S) = \psi_k(x^1, x^2, x^3, x^0) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} S\right\},$$

получим уравнение Фока-Клейна-Гордона для свободной частицы со спином $s = 0$, т.е.:

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_3^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (12)$$

Приведенный вывод уравнения Фока-Клейна-Гордона принципиально отличается от ряда работ, например, [52, 53] и был опубликован в 1979г [14] задолго до указанных публикаций.

Пример 6: Дискретные квантовые случайные блуждания и уравнение Фока-Клейна-Гордона. Дадим некоторые необходимые сведения из теории квантовых дискретных случайных блужданий. Для примера рассмотрим одномерные случайные блуждания на линии с неограниченными краями.

Квантовый оператор подбрасывания монеты для определения направления. Как отмечалось в Примере 3, направление дискретных во времени классических случайных блужданий в Гильбертовом пространстве состояний \mathcal{H}_p выбирается с помощью результата от подбрасывания монеты. Положение стороны («орел-решка») монеты определяет направление движения частицы, а последовательное действие оператора сдвига позиции передвигает частицу в пространстве состояний. Одномерное дискретное квантовое блуждание имеем большое сходство с классической составляющей. Динамика поведения монеты воспроизводится в этом случае квантовым оператором, который определяет суперпозицию направления, на котором амплитуды вероятностей частицы распространяются одновременно. Квантовый оператор эволюции монеты описывается унитарным оператором сдвига, который воспроизводится без промежуточных измерений на большом количестве шагов итераций. Во время движения на линии интерференция между амплитудами вероятностей смещения влево или вправо с увеличением числа шагов приводит к квадратичному возрастанию вариаций. В результате дискретные квантовые случайные блуждания определяются на линии в Гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = \mathcal{H}_N \otimes \mathcal{H}_p$, где \mathcal{H}_C задает Гильбертово пространство квантовой монеты и \mathcal{H}_p описывает пространство дискретных блужданий на линии. Для данного случая одномерного квантового дискретного случайного блуждания на линии пространство \mathcal{H}_C натянуто базовым (внутренним) состоянием частицы $|0\rangle$ и $|1\rangle$, а пространство \mathcal{H}_p натянуто базисным состоянием положения частицы $|\psi_j\rangle$, где $j \in \mathbb{Z}$. Для реализации дискретных квантовых случайных блужданий частицы, которая стартует из начального положения $|\psi_{in}\rangle = [\cos(\delta)|0\rangle + e^{i\eta} \sin(\delta)|1\rangle] \otimes |\psi_0\rangle$ применяется квантовый оператор подбрасывания монеты $B \in U(2)$, который в общем виде может быть записан как $B_{\zeta, \alpha, \beta, \gamma} = e^{i\zeta} e^{i\alpha\sigma_x} e^{i\beta\sigma_y} e^{i\gamma\sigma_z}$, где σ_x, σ_y и σ_z являются спинowymi операторами Паули. Параметры квантовой монеты $\zeta, \alpha, \beta, \gamma$ могут варьироваться, образуя различные типы суперпозиции состояний частицы; таким образом, квантовая операция «подбрасывания» монеты $B_{\zeta, \alpha, \beta, \gamma}$ используется для формирования суперпозиции из базовых состояний частицы так, чтобы использовать инструкции от подбрасывания монеты одновременно для принятия решения двигаться влево или вправо от сходной позиции. Квантовая операция подбрасывания монеты определяется математически условным унитарным оператором сдвига S в виде:

$$S = \exp\left\{-i(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \otimes \hat{P}l\right\} = (|0\rangle\langle 0| \otimes e^{-i\hat{P}l} + |1\rangle\langle 1| \otimes e^{i\hat{P}l}),$$

где \hat{P} определяет оператор момента, l является длиной шага блуждания, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ являются базисными состояниями частицы. Поэтому оператор S , который физически осуществляет делокализацию волнового пакета в различных базисных состояниях $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ над позициями $(j-1)$ и $(j+1)$ при длине шага $l = 1$, может быть представлен в виде $S = |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\psi_{j-1}\rangle\langle \psi_j| + |1\rangle\langle 1| \otimes \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\psi_{j+1}\rangle\langle \psi_j|$.

Состояния в новой полученной позиции опять состоят в суперпозиции с базисными состояниями и процесс квантового подбрасывания монеты $B_{\zeta, \alpha, \beta, \gamma}$ определяется условным унитарным оператором

сдвига S в виде $W_{\zeta,\alpha,\beta,\gamma} = S(B_{\zeta,\alpha,\beta,\gamma} \otimes \mathbb{I})$, и без применения промежуточных измерений реализует большое количество шагов дискретного квантового блуждания. Четыре параметра квантовой монеты $\zeta, \alpha, \beta, \gamma$ можно варьировать для формирования управления распределением амплитудой вероятностей в пространстве состояний. Наиболее простым типом дискретных квантовых блужданий является блуждание Адамара, использующий оператор Адамара $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ в качестве оператора квантовой монеты. В общем случае трехпараметрической группы $SU(2)$ квантового оператора подбрасывания монеты:

$$B_{\zeta,\theta,\zeta} = \begin{bmatrix} e^{i\zeta} \cos(\theta) & e^{i\zeta} \sin(\theta) \\ -e^{-i\zeta} \sin(\theta) & e^{-i\zeta} \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

для описания более общих случаев моделирования дискретных квантовых случайных блужданий.

Динамическая структура дискретных квантовых блужданий. Стандартная модель дискретных классических случайных блужданий определяется уравнением следующего вида: $P(j, t+1) = \frac{1}{2} [P(j-1, t) + P(j+1, t)]$, и требуется затратить единицу времени для одного шага; $P(j, t)$ означает вероятность обнаружения частицы в положении j в дискретный момент времени t . Преобразовав приведенное выше выражение относительно, получим уравнение в конечных разностях, которому соответствует в пределе дифференциальное уравнение $\frac{\partial}{\partial t} P(j, t) = \frac{\partial^2}{\partial j^2} P(j, t)$. Данное уравнение носит необратимый характер, так как монета используется каждый раз на новом шаге и далее информация теряется. Уравнение также нерелятивистское, так как не симметрично во времени и в пространстве состояний частицы. В противоположность данному уравнению в дискретном квантовом блуждании информация о состоянии квантовой монеты на предыдущем шаге используется для формирования следующего шага. Это делает квантовое блуждание обратимым.

Обратимость дискретных квантовых случайных блужданий. Рассмотрим волновую функцию, которая описывает положение блуждающей частицы, и проанализируем ее поведение во времени. Пусть t определяет время для осуществления t шагов квантового блуждания на линии. Двухкомпонентный вектор амплитуды частицы в позиции j , в момент времени t с лево- (L) и право- (R) сторонними компонентами задается в виде $\psi(j, t) = \begin{bmatrix} \psi_L(j, t) \\ \psi_R(j, t) \end{bmatrix}$.

Примем в качестве квантовой монеты однопараметрический квантовый оператор в виде $B_{0,\theta,-\frac{\pi}{2}} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -i \sin(\theta) \\ -i \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$, который используется для формирования динамики волновой функции $\psi(j, t)$. Отметим, что параметры квантовой монеты $(0, \theta, -\pi/2)$ обеспечивают симметричную форму квантового оператора монеты при блуждании частицы на линии (см. выше рис. 16 в Примере 3). Квантовая унитарная операция подбрасывания монеты следует из условного оператора сдвига S , тогда $S \left(B_{0,\theta,-\frac{\pi}{2}} \otimes \mathbb{I} \right)$ задается в терминах лево- (L) и право- (R) сторонних компонент заданных позиций j и время $t+1$ в виде:

$$\begin{bmatrix} \psi_L(j, t+1) \\ \psi_R(j, t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) a & -i \sin(\theta) a^\dagger \\ -i \sin(\theta) a^\dagger & \cos(\theta) a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_L(j, t) \\ \psi_R(j, t) \end{bmatrix},$$

где операторы a и a^\dagger действуют на $\psi(j, t)$ в виде:

$$a\psi(j, t) = \psi(j+1, t), \quad a^\dagger\psi(j, t) = \psi(j-1, t).$$

Тогда имеем:

$$\begin{aligned}\psi_L(j, t+1) &= \cos(\theta)\psi_L(j+1, t) - i\sin(\theta)\psi_R(j-1, t), \\ \psi_R(j, t+1) &= \cos(\theta)\psi_R(j-1, t) - i\sin(\theta)\psi_L(j+1, t).\end{aligned}$$

Следовательно, степень свободы монеты сохраняется в течении динамически дискретного квантового случайного блуждания и эволюция обладает обратимым характером [65].

Несвязанные уравнения дискретных квантовых случайных блужданий в форме Клейна-Гордона. Разрешая последнее уравнение относительно ψ_L , получим:

$$\begin{aligned}\psi_L(j+1, t) &= \frac{i}{\sin(\theta)}[\psi_R(j, t+1) - \cos(\theta)\psi_R(j-1, t)], \\ \psi_L(j, t+1) &= \frac{i}{\sin(\theta)}[\psi_R(j-1, t+2) - \cos(\theta)\psi_R(j-2, t+1)].\end{aligned}$$

Подставляя данные соотношения для $\psi_R(j-1, t)$ и $\psi_R(j, t+1)$ в вышеприведенные выражения, получим

$$\begin{aligned}\psi_R(j, t+1) + \psi_R(j, t-1) &= \cos(\theta)[\psi_R(j+1, t) + \psi_R(j-1, t)], \\ \psi_L(j, t+1) + \psi_L(j, t-1) &= \cos(\theta)[\psi_L(j+1, t) + \psi_L(j-1, t)].\end{aligned}$$

Вычитая $2\psi_R(j, t) + 2\cos(\theta)\psi_R(j, t)$ из обеих сторон первого из приведенных выше уравнений, уравнение в конечных разностях, и которому соответствует дифференциальное уравнение следующего вида: $\left[\cos(\theta)\frac{\partial^2}{\partial j^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\psi_R(j, t) = 2[1 - \cos(\theta)]\psi_R(j, t)$ при единичном шаге во времени и пространстве. Аналогичное уравнение может быть выписано для компоненты $\psi_L(j, t)$. Оператор ∇_t , которому соответствует дифференциальный оператор $\frac{\partial}{\partial t}$, в конечных разностях имеет вид

$$\nabla_t = \frac{\psi\left(j, t + \frac{h}{2}\right) - \psi\left(j, t - \frac{h}{2}\right)}{h}.$$

При $h=1$ оператор $\nabla_t = \psi(j, t+0.5) - \psi(j, t-0.5)$, что соответствует дифференциальному оператору $\frac{\partial}{\partial t}$. Поэтому оператор $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ может рассматриваться как двойное применение оператора в конечных разностях к двум членам, что означает:

$$\nabla_t^2 = \frac{1}{h} \times \frac{[\psi(j, t+1) - \psi(j, t)] - [\psi(j, t) - \psi(j, t-1)]}{h} = \frac{\psi(j, t+1) - 2\psi(j, t) + \psi(j, t-1)}{h^2},$$

при $h=1$ имеем в пределе оператор $\partial^2 / \partial t^2$. Операторы в конечных разностях ∇_j и ∇_j^2 соответствуют дифференциальным операторам $\partial / \partial j$ и $\partial^2 / \partial j^2$ определяется также по аналогии для j при постоянном t . Следовательно, из уравнений для каждой компоненты дискретного квантового случайного блуждания $\psi_R(j, t)$ и $\psi_L(j, t)$ следует уравнение Фока-Клейна-Гордона:

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\phi - \mu^2\phi = 0$$

для свободной релятивистской частицы со спином $s=0$ [65] и совпадает с уравнением (12).

Эквиваленты скорости света c и массы m для каждой компоненты $\psi_R(j, t)$ и $\psi_L(j, t)$ в динамике дискретного квантового случайного блуждания определяются в виде $c \equiv \sqrt{\cos(\theta)}$,

$$\mu = \frac{mc}{\hbar} \equiv \sqrt{2[\sec(\theta) - 1]}. \text{ При } \hbar = 1 \text{ можно записать } m \equiv \sqrt{\frac{2[\sec(\theta) - 1]}{\cos(\theta)}}.$$

Отметим, что максимум скорости получается при $c = 1$, что соответствует $\theta = 0$ и $m = 0$, и находится в соответствии с релятивистскими требованиями, что масса частиц света равна нулю. Данный факт не противоречит также утверждению, что динамика квантового блуждания определяется состояниями $|0\rangle$, траектории которых расходятся друг от друга без интерференции с максимальной вариацией.

Несвязанные уравнения дискретных квантовых случайных блужданий в форме Шрёдингера. Уравнение Фока-Клейна-Гордона можно трансформировать в уравнение Шрёдингера. В этом случае дискретное во времени уравнение

$$\left[\cos(\theta) \frac{\partial^2}{\partial j^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \psi_R(j, t) = 2[1 - \cos(\theta)] \psi_R(j, t),$$

которое является уравнением второго порядка по временной координате, необходимо перевести в систему двух связанных уравнений первого порядка по времени. Этого можно достигнуть, если ввести т.н. «анзац» вида:

$$\psi_R = \varphi_R + \chi_R, \quad i\hbar \frac{\partial \psi_R}{\partial t} = \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]} (\varphi_R - \chi_R),$$

где ψ_R и производная по времени $\partial \psi_R / \partial t$ выражены через компоненты двух функций φ_R и χ_R .

Теперь можно показать, что два связанных дифференциальных уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2\sqrt{\frac{2[\sec(\theta) - 1]}{\cos(\theta)}}} \Delta(\varphi_R + \chi_R) + \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]} \varphi_R,$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi_R}{\partial t} = -\frac{1}{2\sqrt{\frac{2[\sec(\theta) - 1]}{\cos(\theta)}}} \Delta(\varphi_R + \chi_R) - \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]} \chi_R$$

эквивалентны приведенному дискретному уравнению в релятивистской форме.

Действительно, если вычесть из первого уравнения второе, то получим:

$$i\hbar \frac{\partial (\varphi_R - \chi_R)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\frac{2[\sec(\theta) - 1]}{\cos(\theta)}}} \Delta(\varphi_R + \chi_R) + \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]} (\varphi_R + \chi_R),$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{i\hbar}{\sqrt{2[1 - \cos(\theta)]}} \frac{\partial \psi_R}{\partial t} \right\} = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\frac{2[\sec(\theta) - 1]}{\cos(\theta)}}} \Delta \psi_R + \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]} \psi_R,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2[1 - \cos(\theta)]}} \frac{\partial^2 \psi_R}{\partial t^2} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2[\sec(\theta) - 1]}{\cos(\theta)}}} \Delta \psi_R - \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]} \psi_R,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2[\sec(\theta) - 1] \cos(\theta)}} \frac{\partial^2 \psi_R}{\partial t^2} = \frac{\sqrt{\cos(\theta)}}{\sqrt{2[\sec(\theta) - 1]}} \Delta \psi_R - \sqrt{2[\sec(\theta) - 1] \cos(\theta)} \psi_R.$$

Тогда имеем $\left[\frac{1}{\cos(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \psi_R = -2[\sec(\theta) - 1] \psi_R$. Полученное выражение адекватно дискретному квантовому случайному блужданию в форме Клейна-Гордона.

Представленные выше связанные уравнения для двух функций φ_R и χ_R можно преобразовать в одно уравнение, введя вектор-столбец $\psi_R = \begin{pmatrix} \varphi_R \\ \chi_R \end{pmatrix}$ и используя четыре 2×2 матрицы $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, которые удовлетворяют алгебраическим соотношениям $\sigma_k^2 = \mathbb{I}$, $\sigma_k \sigma_l = \sigma_l \sigma_k = i \sigma_m$, $k, l, m = 1, 2, 3$. Тогда используя представленные преобразования, связанные уравнения для двух функций φ_R и χ_R можно преобразовать в уравнения типа Шрёдингера [65]:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_R \right) \psi_R = 0, \text{ где } \hat{H}_R = (\sigma_3 + i\sigma_2) \frac{\hat{p}^2}{2\sqrt{2[\sec(\theta) - 1]}} + \sigma_3 \sqrt{2[1 - \cos(\theta)]}, \hat{p} = i\hbar \nabla.$$

Аналогичные уравнения можно выписать для Гамильтониана \hat{H}_L компоненты ψ_L .

Следовательно, для компонент дискретных квантовых блужданий, которые имеют структуру подобную уравнению Фока-Клейна-Гордона, можно записать эквивалентную связанную систему из уравнений Шрёдингера, которые описывают непрерывные квантовые случайные блуждания.

Проблема связанных уравнений Шрёдингера и Фока-Клейна-Гордона особенно актуальна при исследовании взаимодействия частиц и разработки соответствующей корректной модели.

Рассмотрим, например, уравнение Фока-Клейна-Гордона-Шрёдингера, описывающего систему скалярных нуклонов, взаимодействующих с нейтральными скалярными мезонами с использованием потенциала взаимодействия Юкавы следующего типа [66]:

$$\begin{aligned} i\partial_t \psi + \Delta \psi + \phi \psi + i\nu \psi &= 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad t > 0, \\ \varepsilon^2 \partial_{tt} \phi + \gamma \varepsilon \partial_t \phi - \Delta \phi + \phi - |\psi|^2 &= 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad t > 0, \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad \partial_t \phi(x, 0) = \phi_1(x), \quad x \in \mathbb{R}^d, \end{aligned}$$

где комплекснозначная функция $\psi = \psi(x, t)$ представляет скалярное поле нуклонов, действительно значимая функция $\phi = \phi(x, t)$ представляет скалярное поле мезонов, $\varepsilon > 0$ характеризует параметр, обратно пропорциональный скорости света, $\gamma \geq 0, \nu \geq 0$ – неотрицательные параметры.

На рис. 23 показана эволюция плотности $|\psi(x, t)|^2$ нуклонов и поле мезонов $\phi(x, t)$ для столкновения солитонов при разных значениях коэффициента затухания γ .

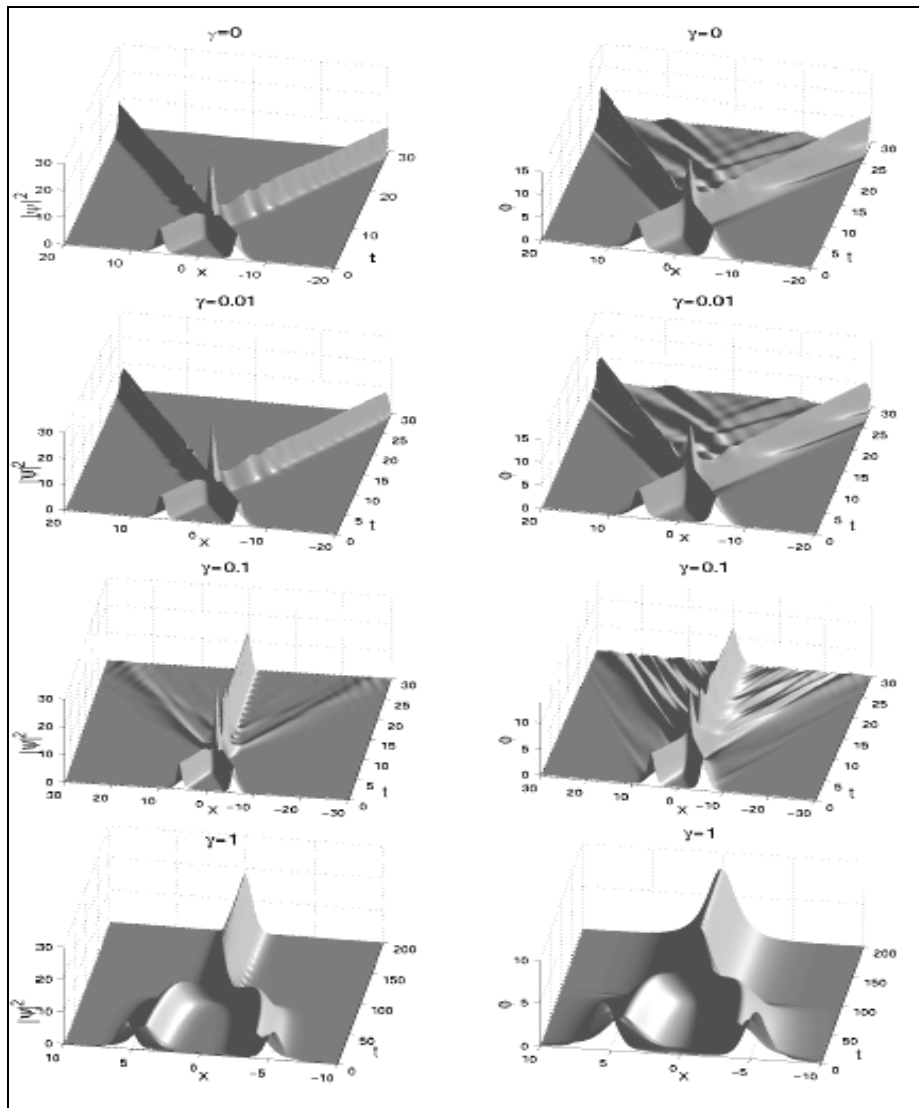


Рис. 23. Эволюция плотности $|\psi(x,t)|^2$ нуклонов (левая колонка) и поле мезонов $\phi(x,t)$ (правая колонка) для столкновения солитонов при разных значений коэффициента затухания γ

Таким образом, при $\gamma = 0$ столкновения двух солитонов носит эластичный характер, но при $\gamma > 0$ затухание существенно влияет на динамику столкновения солитонов [66].

Уравнение Дирака для заряженных частиц со спином $s = 1/2$, находящихся в заданном электромагнитном поле

Согласно квантовому постулату для частиц со спином $s = 1/2$ число компонент волновой функции должно равняться $4s + 2 = 4$. Как известно, объект, описываемый этими волновыми функциями в уравнениях Дирака, является спинором [1, 2]. Компоненты спинора имеют своеобразные законы преобразования, представленные в [14, Табл. 4.2, с. 225]. Так как уравнение Дирака является уравнением первого порядка ($\alpha = 1$), то согласно квантовому постулату имеем $\alpha(2s + 1) = 2$.

Таким образом, в соответствии с алгоритмом квантового постулата для частицы со спином $s = 1/2$ трансформированное уравнение Гамильтона-Якоби следует возвести в степень 2. В результате имеем:

$$\left[\left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 + m^2 c^2 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 \right] = 0. \quad (13)$$

Уравнения классического аналога уравнений Дирака, согласно [13, 14], будут иметь вид

$$\begin{pmatrix} 0 & (p_0 - mcp_s) & -(p_1 - ip_2) & p_3 \\ -(p_0 - mcp_s) & 0 & p_3 & (p_1 + ip_2) \\ (p_1 - ip_2) & -p_3 & 0 & -(p_0 + mcp_s) \\ -p_3 & -(p_1 + ip_2) & (p_0 + mcp_s) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (14)$$

где $p_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j p_s$; $p_s = \frac{\partial}{\partial S}$, $j = 1, 2, 3$; $p_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{c} \varphi^0 p_s$.

В (14) использованы «векторные» потенциалы (A_1, A_2, A_3) и «скалярный» потенциал φ^0 вместо 4-потенциала A_i . Для того, чтобы получить в качестве характеристического многообразия уравнений (14) трансформированное уравнение (13), необходимо после всех выкладок произвести замену $t = x_0 / ic = -ix_0 / c$.

С помощью указанной подстановки вида $\varphi(x_1, x_2, x_3, t, S) = \psi(x_1, x_2, x_3, t) \exp \left\{ \frac{iS}{\hbar} \right\}$ получим

$$\begin{pmatrix} 0 & (p_0 - mc) & -(p_1 - ip_2) & p_3 \\ -(p_0 - mc) & 0 & p_3 & (p_1 + ip_2) \\ (p_1 - ip_2) & -p_3 & 0 & -(p_0 + mc) \\ -p_3 & -(p_1 + ip_2) & (p_0 + mc) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (15)$$

где $p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j$, $j = 1, 2, 3$; $p_0 = \frac{\hbar}{ic} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c} \varphi^0$.

Покажем теперь, что уравнения (14) действительно имеют в качестве характеристического многообразия уравнение (13). Для этого перепишем (14) в виде:

$$\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & 0 & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & 0 & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (16)$$

где a_{ij} имеют вид, представленный в Табл. 4.

Таблица 4. Вид коэффициентов a_{ij}

a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	a_{23}	a_{24}	a_{34}	p_j	p_s
0	$(p_0 - mcp_s)$	$-(p_1 - ip_2)$	p_3	p_3	$(p_1 + ip_2)$	$-(p_0 + mcp_s)$	$\frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{e}{c} A_j p_s$	$\frac{\partial}{\partial S}$

Матрица (16), следовательно, кососимметричная. Определитель кососимметричной матрицы с элементами $a_{ij} = -a_{ji}$ может быть представлен в следующем виде¹⁵:

$$\begin{vmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & 0 & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & 0 & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 \end{vmatrix} = [a_{12}a_{34} - a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23}]^2, \quad (17)$$

т.е.

$$\begin{vmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & 0 & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & 0 & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 \end{vmatrix} = [a_{12}a_{34} - a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23}]^2.$$

Учитывая (17) и обозначения в Табл. 4, нетрудно получить уравнение характеристического многообразия для уравнения классического аналога квантовых уравнений Дирака:

$$\left[\left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_1} - \frac{e}{c} A_1 \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_2} - \frac{e}{c} A_2 \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_3} - \frac{e}{c} A_3 \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 - \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \Omega}{\partial t} - \frac{e}{c} \varphi^0 \frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 + m^2 c^2 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 \right]^2 = 0.$$

Учитывая, что $i\varphi^0 = -A_0$ и $x_0 = ict$, получим из последнего уравнения уравнение для характеристик (13). Инвариантность классического аналога (14) уравнений Дирака следует непосредственно из инвариантности самих уравнений Дирака и того обстоятельства, что переменная действия S является инвариантом.

Таким образом, уравнения Дирака полностью удовлетворяют квантовому постулату.

Из (15) и (17) нетрудно получить выражение для характеристик системы квантовых уравнений Дирака, которое будет иметь вид:

$$\left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_3} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)^2 \right]^2 = \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right)^2 \right]^2, \quad i = 1, 2, 3, 0, \quad (18)$$

что согласуется с результатами [13, 14].

Отметим, что имеем следующее выражение для скорости распространения фронта волны θ из (18) в виде:

$$v^2 = \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)^2 / \sum_{j=1}^3 \left(\left(\frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right)^2 \right) = \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)^2 / \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)^2 \right] = c^2, \quad (19)$$

т.е., скорость распространения фронта волны θ в точности равна скорости света c .

¹⁵ Гуревич Г.Б. Основы теории алгебраических инвариантов. – М.-Л.: ОГИЗ, 1948. – С. 374 (Теорема Кэли: Кососимметричный определитель $|a_{ij}|$ четного порядка n есть квадрат пфафова агрегата $P = (n-1)!! a_{[12} a_{34} \dots a_{n-1, n]}$)

Выводы

В Части 1 статьи приведено доступное описание основ квантовой механики и вывода основных уравнений квантовой механики (Шрёдингера, Фока-Клейна-Гордона, Дирака и Максвелла) из классической механики с применением метода характеристик дифференциальных уравнений в частных производных и уравнений Гамильтона-Якоби. Такой подход позволяет перенести методы классической теории управления на квантовые объекты и компьютерные нанотехнологии. Показано, что между уравнением Шрёдингера и классическим уравнением Гамильтона-Якоби (соответственно между квантовыми релятивистскими уравнениями и релятивистским уравнением Гамильтона-Якоби) существуют не приближенные, а точные связи.

На основе системного анализа взаимосвязей между моделями пространственно-временных континуумов и базисными свойствами уравнений Гамильтона-Якоби показано, что существуют единая система квантовых релятивистских волновых уравнений и конструктивный алгоритм, позволяющий корректно вывести известные уравнения квантовой механики и формировать новые модели квантовых релятивистских волновых уравнений с произвольным спином.

Приложение: Модифицированное уравнение Гамильтона Якоби и волновое представление классической механики

Рассмотрим релятивистское уравнение Гамильтона-Якоби для действия $S = S(x_1, x_2, x_3, t) = \text{const}$ в виде:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial x_3}\right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)^2 + m^2 c^2 = 0. \quad (\text{П1})$$

Допустим, что уравнение (П1) имеет зависящее от одного параметра Ω неявное решение

$$\Omega(x_1, x_2, x_3, t) = \Omega_0 = \text{const}. \quad (\text{П2})$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial x_k} + \frac{\partial \Omega}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial x_k} = 0; \quad \frac{\partial \Omega}{\partial t} + \frac{\partial \Omega}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (\text{П3})$$

Отсюда следует

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{\frac{\partial \Omega}{\partial t}}{\frac{\partial \Omega}{\partial S}}; \quad \frac{\partial S}{\partial x_k} = - \frac{\frac{\partial \Omega}{\partial x_k}}{\frac{\partial \Omega}{\partial S}}. \quad (\text{П4})$$

Подставив (П4) в (П1), получим:

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_3}\right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial t}\right)^2 + m^2 c^2 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S}\right)^2 = 0. \quad (\text{П5})$$

Уравнение (П5) будем называть¹⁶ *трансформированным* уравнением Гамильтона-Якоби, которое можно рассматривать как уравнение характеристик для волнового уравнения:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + m^2 c^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial S^2} = 0. \quad (\text{П6})$$

Отметим, что аналогичное (П6) гиперболическое волновое уравнение рассматривалось В. Масловым¹⁷ в связи с исследованиями нестандартных характеристик в асимптотических задачах.

¹⁶ Ульянов С.В. Уравнение Гамильтона-Якоби и метод характеристических многообразий: Базис квантового постулата. // Системный анализ в науке и образовании: электрон. науч. журнал. – Дубна, 2012. – № 1. – [Электронный ресурс]. URL: <http://www.sanse.ru/archive/23>.

¹⁷ Маслов В.П. Нестандартные характеристики в асимптотических задачах // Успехи Математических Наук (УМН). – 1982. – Т. 36. – № 6. – С. 3-35.

Полученное волновое уравнение (П6) будем называть классическим (т.е. не квантовым) волновым уравнением. Так как уравнением его характеристик является модифицированное уравнение Гамильтона-Якоби, то, следовательно, его бихарактеристики являются уравнениями траекторий движения частиц. Получаем, таким образом, волновое представление классической релятивистской механики.

В механике классической (ньютоновой) уравнение Гамильтона-Якоби для одной частицы, находящейся в заданном потенциальном поле $U(x_1, x_2, x_3, t)$ имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} S(x, t) + \frac{1}{2m} [\nabla S(x, t)]^2 + U(x, t) = 0. \quad (\text{П7})$$

Путем преобразования (П4) уравнение (П7) представляется в модифицированном виде:

$$-\frac{\partial \Omega}{\partial S} \frac{\partial \Omega}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial x_i} \right)^2 + U(x_1, x_2, x_3, t) \left(\frac{\partial \Omega}{\partial S} \right)^2 = 0. \quad (\text{П8})$$

Будем теперь рассматривать уравнение (П8) как уравнение характеристического многообразия для линейного волнового уравнения, содержащего только старшие производные. Нетрудно убедиться, что это волновое уравнение будет иметь вид:

$$-\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t \partial S} + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} + U(x_1, x_2, x_3, t) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial S^2} = 0. \quad (\text{П9})$$

В уравнении (П9) функция $\varphi(x_1, x_2, x_3, t, S)$ зависит от пяти координат. Следует, однако, иметь в виду, что последняя, пятая координата $S(x_1, x_2, x_3, t)$, не является независимой. Она является инвариантной функцией четырех координат (x_1, x_2, x_3, t) . Поэтому при преобразованиях Галилея функция $S(x_1, x_2, x_3, t)$ не изменяется. Следовательно, в данном случае имеем дело не с расширением объекта (в смысле проблемы Вундгейлера) а с его модифицированным представлением. Уравнение (П9) является волновым представлением классической (ньютоновой) механики, так как его характеристическим многообразием является модифицированное уравнение Гамильтона-Якоби, а его бихарактеристиками являются уравнения движения частиц. Физический смысл функции $\varphi(x_1, x_2, x_3, t, S)$ обсуждается в [14, 15].

Список литературы

1. Гельфанд И.М., Минлос Р.А., Шапиро З.Я., Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения. – М. Физматгиз, 1958.
2. Новожилов Ю.В. Элементарные частицы. – М.: Наука, 1972.
3. Малкин И.А., Манько В.И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. – М.: Наука, 1979.
4. Владимиров С.А. Группы симметрии дифференциальных уравнений и релятивистские поля. – М.: Атомиздат, 1979.
5. Гриб А.А., Мамаев С.Г., Мостепаненко В.М. Квантовые эффекты в интенсивных внешних полях (методы и результаты не связанные с теорией возмущений). – М.: Атомиздат, 1980.
6. Invariant wave equations // Lectures Notes in Physics. – N.Y.: Springer Verlag, 1978. – Vol. 73.
7. Aharonov Y., Rohrlich D. Quantum paradoxes: Quantum theory for the perplexed (Physics Textbook). – Weinheim, Cambridge: Wiley-VCH. – 2005.
8. Peres A. Quantum theory: Concepts and methods. – Fundamental Theories of Physics. – N.Y.: Kluwer Academic Publ, 2002. – Vol. 72.

9. Cabello A. Bibliographic guide to the foundations of quantum mechanics and quantum information // arXiv:quant-ph/0012089v12. – 2004.
10. Passon O. How to teach quantum mechanics // Eur. J. Phys. – 2004. – Vol. 25. – № 4. – Pp. 765-769.
11. Grau B.C. How to teach basic quantum mechanics to computer scientists and electrical engineers // IEEE Trans. Educations. – 2004. – Vol. 26. – № 1. – Pp. 1-7.
12. McKagan S. B., Perkins K. K., Wieman C. E. Deeper look at student learning of quantum mechanics: The case of tunneling // Physical Review Special Topics. – 2008. – Vol. 4 – № 2. – P. 020103.
13. Bailly C.R. Perspective in quantum mechanics: Epistemological, ontological and pedagogical – An investigation into student and expert on the physical interpretation of quantum mechanics, with implications for modern physics instruction // A thesis submitted to the Faculty of the Graduated School of the University of Colorado in partial fulfillment of the requirements for the degree of PhD Department of Physics. – 2011.
14. Гольденблат И.И., Ульянов С.В. Введение в теорию относительности и ее приложения в новой технике. – М.: Физматгиз, 1979.
15. Петров Б.Н., Уланов Г.М., Ульянов С.В. Проблемы управления релятивистскими и квантовыми динамическими системами: Информационные и термодинамические аспекты. – М.: Наука, 1982.
16. Ульянов С.В., и др. Логические и квантовые парадоксы интеллектуальных квантовых и мягких вычислений // Системный анализ в науке и образовании: электрон. науч. журнал. – Дубна, 2010. – № 2. – [Электронный ресурс]. URL: <http://www.sanse.ru/archive/17>. – 0421000111\0018.
17. Styer D.F., Balkin M.S., Becker K.M. et al. Nine formulation of quantum mechanics // Am. J. Phys. – 2002. – Vol. 70. – № 6. – Pp. 288-297.
18. Laloë F. Do we really understand quantum mechanics? Strange correlations, paradoxes, and theorems // Am. J. Phys. – 2001. – Vol. 69. – № 6. – Pp. 655-701.
19. Ульянов С.В. Интеллектуальное робастное управление: Технологии квантовых и дробных вычислений в среде МАТЛАБ. – М.: ВНИИГеосистем. – 2012.
20. Ulyanov S.V., Melik-Adamyany A.F. Design and simulation technology of quantum algorithmic gates in MATLAB. Vol. I: Information dynamic analysis. – М.: VNIIGeosystems. – 2012. М.: ВНИИГеосистем. – 2012.
21. Popescu S. Rohrlich D. Causality and nonlocality as axioms for quantum mechanics. // arXiv: quant-ph/9709026v2. – 1997.
22. Nottale L. Celerier M. - N. Derivation of the postulates of quantum mechanics from the first principles of scale relativity // J. Phys. A. – 2007. – Vol. 40. – Pp. 14471-14498.
23. Zeilinger A. Experiment and the foundations of quantum physics // Reviews of Modern Physics, – 1999. – Vol. 71. – № 2. – Pp. 288-297.
24. Hardy L. Quantum theory from five reasonable axioms // arXiv: quant-ph/0101012 v4. – 2001.
25. Agrawal M. Axiomatic / postulatory quantum mechanics. – Electrical Engineering, Stanford University. – Stanford. – 2002.
26. Goyal P. Information-geometric reconstruction of quantum theory // Physical Review A. – 2008. – Vol. 78. – № 5. – P. 052120.
27. Smolin L. A real ensemble interpretation of quantum mechanics // arXiv: 1104.2822v1 [quant-ph]. – 2011.
28. Chiribella G., D'Ariano G.M., Perinotti P. Informational derivation of quantum theory // Physical Review A. – 2011. – Vol. 84. – № 1. – P. 012311.
29. Masanes L., Muller M.P. A derivation of quantum theory from physical requirements // New Journal of Physics. – 2011. – Vol. 13 – № 6 – P.063001.
30. Faraggi A. E., Matone M. The equivalence postulate of quantum mechanics: Main theorems // arXiv:0912.1225v1 [hep-th]. – 2009; *ibid* The equivalence postulate of quantum mechanics // arXiv: hep-th/9809127v2. – 1999.
31. Gerard't Hooft On the free-will postulate in quantum mechanics // arXiv: quant-ph/0701097v1. – 2007.

32. Kok P. Advanced quantum mechanics (PHY472). – The University of Sheffield. – 2011.
33. Nelson E. Derivation of the Schrödinger equation from Newtonian mechanics // Physical Review. – 1966. – Vol. 150. – № 4. – P. 1079-1085.
34. Flatte M.S. The Schrödinger equation in classical physics // Am. J. Phys. – 1986. – Vol. 54. – № 12. – Pp. 1088-1092
35. Kreinovich V. Ya. Derivation of the Schrödinger equation from scale invariance // Teoret. Mat. Fiz. – 1976 – Vol. 26. – № 3 – Pp. 414-418.
36. Frieden B. R. Fisher information as the basis for the Schrödinger wave equation // Am. J. Phys. – 1989. – Vol. 57. – № 11. – Pp. 1004-1008.
37. Briggs J.S, Rost J.M. On the derivation of the time-dependent equation of Schrödinger // Foundations of Physics. – 2001. – Vol. 31. – № 4. – Pp. 693-712.
38. Hall M.J.W., Reginatto M. Schrödinger equation from an exact uncertainty principle // J. Phys. – 2002. – Vol. 35. – Pp. 3289-3303.
39. Grossing G. From classical Hamiltonian low to quantum theory: Derivation of the Schrödinger equation // Foundations of Physics Letters – 2004. – Vol. 17. – №. 4. – Pp. 343-362.
40. Lokajicek M.V. Schrödinger and Hamilton-Jacobi equations // arXiv: quant-ph/0611176 v1. – 2006.
41. Efthimiades S. Derivation of the Schrödinger equation // Il Nuovo Cimento. – 2003. – Vol. 118B. – № 2. – Pp. 129-132.
42. Scully, M.O. The time-dependent Schrödinger equation revisited: Quantum optical and classical Maxwell routes to Schrodinger's wave equation // Lect. Notes Phys. – 2010. – Vol. 789. – Pp.15-24.
43. Fritsche L., Haugk M. A new look at the derivation of the Schrödinger equation from Newtonian mechanics // Ann. Phys. (Leipzig). – 2003. – Vol. 12. – № 6. – Pp. 371-403.
44. Briggs J. S., Boonchui S., Khemmani S. The derivation of time-dependent Schrödinger equations // J. Physics A. – 2007. – Vol. 40 – № 6. – Pp. 1289-1302.
45. Scully M.O. The time dependent Schrödinger equation revisited I: Quantum field and classical Hamilton-Jacobi routes to Schrödinger's wave equation // J. Physics: Conference Series. – 2008. – Vol. 99. – Pp. 012019.
46. Granik A. The Schrödinger equation: Derivation from classical mechanics resulting in the wave-particle duality and other principal corollaries // arXiv: 0801.3311v1 [quant-ph]. – 2008.
47. Gao S. Derivation of the Schrödinger equation // October 22, 2010.
48. Kobe D. H. Time-dependent Schrödinger equation from the Hamilton-Jacobi equation // arXiv:1101.6031v1 [quant-ph]. – 2011.
49. Field J H Derivation of the Schrödinger equation from the Hamilton-Jacobi equation in Feynman's path integral formulation of quantum mechanics // Eur. J. Phys. – 2011. – Vol. 32 – № 1. – Pp. 63-87.
50. Rudra P. S. Direct derivation of Schrödinger equation from the Hamilton-Jacobi equation using uncertainty principle // Rom. J. Phys. – 2011. – Vol. 56. – №№. 9-10. – Pp. 1053-1056.
51. Ogiba F. Phenomenological derivation of the Schrödinger equation // Progress in Physics. – 2011. – Vol. 4. – № 1. – Pp. 25-28.
52. Frieden B.R. Science from Fisher information: A unification – Cambridge Univ. Press. – 2004.
53. Grössing G. Derivation of the Schrödinger equation and the Klein-Gordon equation from first principle // arxiv.org: 0205047[quant-ph]. – 2002.
54. Kakofengitis D., Steuernagel O. Double-well quantum tunneling visualized via Wigner's function // arXiv:1108.2214v1 [quant-ph]. – 2011.
55. Berezovoj V.P., Konchatnij M.I. Dynamics of localized states in extended supersymmetric quantum mechanics with multi-well potentials // arXiv:1107.2523v3 [hep-th]. – 2011.
56. Robinett R.W. Quantum wave packet revivals // Physics Reports. – 2004. – Vol. 392 – Pp. 1-119.
57. Jenke T. qBounce – vom Quantum bouncer zur gravitationsresonanzspektroskopie. – Dissertation. – Vienna University of Technology. – 2011.

58. Belloni M., Robinett R. W. Less than perfect quantum wavefunctions in momentum-space: How $\phi(p)$ senses disturbances in the force // arXiv:1010.4244v1 [quant-ph]. – 2010.
59. Belloni M., Doncheski M.F., Robinett R. W. Wigner quasi-probability distribution for the infinite square well: Energy eigenstates and time-dependent wave packets // Am. J. Phys. – 2004. - Vol. 72. – № 9. – Pp. 1183-1192.
60. Dimeo R. Simple quantum visualizations using IDL // NIST Center for Neutron Research. – 2009.
61. Лушиков В.И., Покотилловский Д.Н., Стрелков А.В., Шапиро Ф.Л. Наблюдение ультрахолодных нейтронов // Письма в ЖЭТФ. – 1969. – Т. 9. – Вып. 1. – С. 40-45.
62. Несвижевский В.В. Квантовые состояния нейтронов в гравитационном поле и взаимодействие нейтронов с наночастицами // УФН. – 2003. – Т. 173. – № 1. – С. 102-106.
63. Несвижевский В.В. Исследование квантовых состояний нейтронов в гравитационном поле Земли над зеркалом // УФН. – 2004. – Т. 174. – № 5. – С. 569-576.
64. Несвижевский В.В. Приповерхностные квантовые состояния нейтронов в гравитационном и центробежном потенциалах // УФН. – 2010. – Т. 180. – № 7. – С. 673-707.
65. Chandrashekar C. M., Banerjee S., Srikanth R. Relations between quantum walks and relativistic quantum mechanics // Physical Review. – 2010. – Vol. A81. – № 6. – P. 062340.
66. Yang L. Numerical studies of the Klein-Gordon-Schrodinger equations. – Dissertation. – National University of Singapore. – 2006.