Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Кузьменков, С. Г. Максимов, Об обобщенном координатно-импульсном представлении в квантовой механике, *ТМФ*, 2005, том 143, номер 3, 401–416

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1821>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 18:29:09

ОБ ОБОБЩЕННОМ КООРДИНАТНО-ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Получено однопараметрическое семейство (q, p) -представлений квантовой механики, которому в качестве частных случаев принадлежат функция распределения Вигнера и функция распределения, полученная нами ранее. Решения уравнений эволюции микроскопических классической и квантовой функций распределения найдены в виде континуальных интегралов по траекториям в фазовом пространстве. Показано, что при варьировании канонических переменных в функции Грина квантового уравнения Лиувилля в форме интеграла по траекториям необходимо использовать полное приращение функционала действия, в то время как в функции Грина классического уравнения Лиувилля достаточно только линейной части приращения. Соответствие между классической и квантовой схемами устанавливается лишь при определенном выборе значения параметра семейства представлений. Это значение соответствует найденной нами функции распределения.

Ключевые слова: (q, p) -представления, уравнение Лиувилля, континуальный интеграл.

1. ВВЕДЕНИЕ

Согласно постулатам канонического квантования алгебре Ли динамических функций вида $A(q, p, t)$ ($q \in \mathbb{R}^s$, $p \in \mathbb{R}^s$, s — число степеней свободы) ставится в соответствие алгебра Ли эрмитовых операторов $\hat{A}$ в гильбертовом пространстве, так что скобки Пуассона $\{, \}$ переходят в коммутаторы $\frac{i}{\hbar}[\ , \]$. Однако при сопоставлении операторов динамическим функциям возникает неоднозначность, связанная с некоммутативностью канонически-сопряженных динамических переменных. Как правило, эту неоднозначность устраняют, постулируя дополнительную процедуру упорядочения операторов координат и импульсов в операторной функции $A(\hat{q}, \hat{p}, t)$ (принцип соответствия Вейля, $\hat{q}\hat{p}$ -, $\hat{p}\hat{q}$ -квантования и др. [1]).

Принцип соответствия Вейля устанавливает однозначную связь между эрмитовым оператором и классической динамической функцией посредством интеграла Фурье:

$$A(q, p) \xrightarrow{W} A(\hat{q}, \hat{p}) = \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi)^s} e^{i(u\hat{q} + v\hat{p})} \int \frac{d^s q d^s p}{(2\pi)^s} e^{-i(uq + vp)} A(q, p), \quad (1)$$

*Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: lsk@phys.msu.ru

†Instituto Tecnológico de Morelia, Morelia, Michoacán, México.
E-mail: sgmaximov@yahoo.com.mx

где $uq = \sum_{i=1}^s u_i q_i$.

Однако этот принцип, как и правила $\hat{q}\hat{p}$ - и $\hat{p}\hat{q}$ -квантования, не обеспечивает отображения алгебраической операции $C = \{A, B\}$ для любых динамических функций A, B и C в операцию $\hat{C} = \frac{i}{\hbar}[\hat{A}, \hat{B}]$ для соответствующих операторов из L_2 . Коммутаторы произвольных операторов также не переходят в классические скобки Пуассона. Алгебре коммутаторов квантово-механических операторов в представлении Вейля соответствует не алгебра скобок Пуассона динамических функций, а алгебра экзотических скобок Мойяла [2], [3], которые в классическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ переходят в скобки Пуассона:

$$\{A, B\}_M = \frac{i}{\hbar}(A \star B - B \star A) = A \frac{2}{\hbar} \sin\left(\frac{\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q - \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p)\right) B = \{A, B\} + \mathcal{O}(\hbar^2), \quad (2)$$

где $A \star B$ – произведение Мойяла (или $\star$ -произведение), которое имеет вид

$$A \star B = A \exp\left(\frac{\hbar}{2i}(\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q - \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p)\right) B.$$

Можно не ставить вопроса об упорядочении операторов координат и импульсов в операторных функциях, так что соотношение (1) не будет больше служить определением квантовых операторов на основе заданных классических динамических функций $A(q, p)$. Оно может рассматриваться в качестве особого представления квантовой механики, в котором квантово-механические уравнения движения допускают наибольшую аналогию с классическими. Коммутаторы операторов в этом случае будут переходить в скобки Мойяла (2) для соответствующих “динамических функций”. Такая функция координат и импульсов $A(q, p)$, фигурирующая в (1), или представление Вигнера оператора $\hat{A}$, может быть выражена через его ядро:

$$A_W(q, p) = \int d^s \xi \langle q - (\xi/2) | \hat{A} | q + \xi/2 \rangle e^{ip\xi/\hbar}, \quad (3)$$

и является действительной, если соответствующий оператор $\hat{A}$ эрмитов. Квантовое среднее от оператора $\hat{A}$ может быть выражено в представлении Вигнера в форме статистического среднего с функцией Вигнера $f_W(q, p)$ [4]:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \text{tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \int d^s q \int d^s p A_W(q, p) f_W(q, p), \\ f_W(q, p, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^s} \int d^s \xi \langle q - (\xi/2) | \hat{\rho}(t) | q + \xi/2 \rangle e^{ip\xi/\hbar}, \end{aligned}$$

где $\hat{\rho}$ – матрица плотности фон Неймана. Эволюция функции Вигнера описывается уравнением

$$\partial_t f_W + \{H_W, f_W\}_M = 0,$$

которое в пределе $\hbar \rightarrow 0$ переходит в классическое уравнение Лиувилля. Функция Гамильтона H_W здесь также является представлением Вигнера гамильтониана $\hat{H}$.

Альтернативный способ введения функции распределения в квантовой механике рассматривался нами в работах [5]–[8]. Он основан на непосредственном квантовании классической микроскопической функции распределения, представляющей собой произведение плотности вероятности обнаружить систему в точке $p \in \mathbb{R}^s$ импульсного пространства и плотности вероятности обнаружить систему в точке $q \in \mathbb{R}^s$ координатного пространства:

$$f(q, p, t) = n(p, t)n(q, t), \quad (4)$$

где

$$n(q, t) = \prod_{i=1}^s \delta(q_i - \bar{q}_i(t)) \equiv \delta(q - \bar{q}(t)) = \int \frac{d^s v}{(2\pi\hbar)^s} e^{iv(p - \bar{q}(t))/\hbar},$$

$$n(p, t) = \prod_{i=1}^s \delta(p_i - \bar{p}_i(t)) \equiv \delta(p - \bar{p}(t)) = \int \frac{d^s u}{(2\pi\hbar)^s} e^{iu(q - \bar{p}(t))/\hbar},$$

а $\bar{q}(t)$ и $\bar{p}(t)$ – канонические переменные. В соответствии с этим квантовая операторная функция распределения будет иметь вид произведения операторов $\hat{n}(p)$ и $\hat{n}(q)$:

$$\hat{f}(q, p) = \int \frac{d^s v}{(2\pi\hbar)^s} e^{iv(p - \hat{p})/\hbar} \int \frac{d^s u}{(2\pi\hbar)^s} e^{iu(q - \hat{q})/\hbar}. \quad (5)$$

Здесь оператор $\hat{f}(q, p)$ не является эрмитовым, а соответствующая функция распределения $f(q, p, t) = \text{tr}(\hat{f}(q, p)\hat{\rho}(t))$ является комплексной. Для ядра оператора (5) найдем

$$\langle q' | \hat{f}(q, p) | q'' \rangle = \langle q' | p \rangle \langle p | q \rangle \langle q | q'' \rangle, \quad (6)$$

а квантовое среднее от этого оператора имеет вид

$$f(q, p, t) = \int d^s q' d^s q'' \langle q' | p \rangle \langle p | q \rangle \langle q | q'' \rangle \langle q'' | \hat{\rho}(t) | q' \rangle = \langle p | q \rangle \langle q | \hat{\rho}(t) | p \rangle. \quad (7)$$

Функция Вигнера $f_W(q, p, t)$ и функция $f(q, p, t)$ “нормированы”, как и классическая функция распределения:

$$\int d^s q d^s p f_W(q, p, t) = \int d^s q d^s p f(q, p, t) = 1 \quad (8)$$

(строго говоря, интегралы в (8) не могут служить определениями норм функций f_W и f), и имеют правильный классический предел при $\hbar \rightarrow 0$. Вместе с тем функция $f_W(q, p, t)$ не является положительно-определенной, а $f(q, p, t)$, призванная задавать состояние системы наряду с волновой функцией, не является вещественной. Могут быть построены и другие, отличающиеся от рассмотренных выше функции распределения. Мы видим, что без решения задачи об отыскании семейства функций распределения, которому принадлежат функции $f_W(q, p, t)$ и $f(q, p, t)$, без вывода и решения уравнений эволюции для семейства, анализа решений нельзя определить принципы отбора наиболее предпочтительных распределений.

В данной работе выводится обобщенная форма различных (q, p) -представлений квантовой механики, зависящая от произвольного параметра $\chi \in \mathbb{R}$. Функция распределения Вигнера $f_W(q, p, t)$ и функция $f(q, p, t)$ (7) входят в нее как частные случаи при значениях параметра $\chi = 1/2$ и $\chi = 0$, соответственно. Эволюция функции распределения $f_\chi(q, p, t)$ в обобщенном (q, p) -представлении находится в форме континуального интеграла. Показывается, что при варьировании канонических переменных q и p в классической функции Грина достаточно линейной части приращения функционала действия, а в квантовой функции Грина необходимо использовать полное его приращение. Существует единственное (q, p) -представление квантовой механики, в котором функционалы действия в функции Грина квантового уравнения Лиувилля соответствуют классической вариационной схеме. Это представление соответствует значению параметра $\chi = 0$. Другое возможное представление, соответствующее $\chi = 1$, является дуальным представлению $\chi = 0$ и поэтому не рассматривается как самостоятельное.

2. ОБОБЩЕННОЕ (q, p) -ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Наиболее общий вид “вигнероподобных” функций распределения можно вывести из следующих соображений. Классическая микроскопическая функция распределения для динамической системы с s степенями свободы имеет вид произведения плотностей вероятности (4). Функция (4), с одной стороны, является динамической функцией, так как зависит от координат $\bar{q}(t)$ и импульсов частиц $\bar{p}(t)$, а с другой стороны, является полевой функцией переменных q и p . Формулу (4) можно представить в виде интеграла Фурье:

$$\begin{aligned} f(q, p, t) &= \int \frac{d^s v}{(2\pi)^s} e^{iv(p - \bar{p}(t))} \int \frac{d^s u}{(2\pi)^s} e^{iu(q - \bar{q}(t))} = \\ &= \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi)^{2s}} \exp\{i\alpha v(p - \bar{p}(t))\} \times \\ &\quad \times \exp\{i[(1 - \alpha)v(p - \bar{p}(t)) + (1 - \beta)u(q - \bar{q}(t))]\} \exp\{i\beta u(q - \bar{q}(t))\}, \end{aligned} \quad (9)$$

где α и β — произвольные числа. Будем рассматривать квантовое обобщение формулы (9), при котором $\bar{q}(t)$ и $\bar{p}(t)$ в правой части заменяются на соответствующие операторы:

$$\begin{aligned} \hat{f}(q, p) &= \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi\hbar)^{2s}} \exp\{i\alpha v(p - \hat{p})/\hbar\} \times \\ &\quad \times \exp\{i[(1 - \alpha)v(p - \hat{p}) + (1 - \beta)u(q - \hat{q})]/\hbar\} \exp\{i\beta u(q - \hat{q})/\hbar\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Поскольку согласно тождеству Вейля справедливо соотношение

$$\begin{aligned} \exp\{i(1 - \alpha)v(p - \hat{p})/\hbar + i(1 - \beta)u(q - \hat{q})/\hbar\} &= \\ = \exp\{-i(1 - \alpha)(1 - \beta)vu/2\hbar\} \exp\{i(1 - \alpha)v(p - \hat{p})/\hbar\} \exp\{i(1 - \beta)u(q - \hat{q})/\hbar\}, \end{aligned}$$

формула (10) дает операторное обобщение функции распределения в произвольном (q, p) -представлении:

$$\hat{f}_\chi(q, p) = \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi\hbar)^{2s}} e^{-i\chi vu/\hbar} e^{iv(p - \hat{p})/\hbar} e^{iu(q - \hat{q})/\hbar}, \quad (11)$$

где $\chi = (1 - \alpha)(1 - \beta)/2$. Требование эрмитовости оператора (11) ($\hat{f}_\chi^+ = \hat{f}_\chi$) сразу же приводит к значению $\chi = 1/2$, и мы получаем функцию Вигнера $\hat{f}_{\chi=1/2} = \hat{f}_W$. Значение параметра $\chi = 0$ соответствует функции распределения (5), $\hat{f}_{\chi=0} = \hat{f}$.

Найдем ядро оператора $\hat{f}_\chi$ в обобщенном (q, p) -представлении. Имеем

$$\begin{aligned} \langle q'' | \hat{f}_\chi(q, p) | q' \rangle &= \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi\hbar)^{2s}} e^{-i\chi v u / \hbar} \times \\ &\times \int d^s p' \langle q'' | e^{iv(p-\hat{p})/\hbar} | p' \rangle \langle p' | e^{iu(q-\hat{q})/\hbar} | q' \rangle = \\ &= \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi\hbar)^{2s}} e^{-i\chi v u / \hbar} \int d^s p' e^{iv(p-p')/\hbar} e^{iu(q-q')/\hbar} \langle q'' | p' \rangle \langle p' | q' \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^s} e^{-ip(q'-q'')/\hbar} \int \frac{d^s u}{(2\pi\hbar)^s} \exp\{iu(q - \chi q'' - (1 - \chi)q')/\hbar\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Интеграл в правой части (12) расходится при $\text{Im } \chi \neq 0$. Таким образом, следует положить $\text{Im } \chi = 0$. Тогда из уравнения (12) находим

$$\langle q'' | \hat{f}_\chi(q, p) | q' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^s} e^{-ip(q'-q'')/\hbar} \delta(q - \chi q'' - (1 - \chi)q'), \quad (13)$$

авычисляя квантовое среднее от такого оператора, находим квантовую функцию распределения в обобщенном (q, p) -представлении:

$$\begin{aligned} f_\chi(q, p, t) &= \text{tr}(\hat{f}_\chi(q, p) \hat{\rho}(t)) = \\ &= \int \frac{d^s q' d^s q''}{(2\pi\hbar)^s} e^{-ip(q'-q'')/\hbar} \delta(q - \chi q'' - (1 - \chi)q') \langle q' | \hat{\rho} | q'' \rangle = \\ &= \int \frac{d^s \xi}{(2\pi\hbar)^s} e^{ip\xi/\hbar} \langle q - \chi\xi | \hat{\rho} | q + (1 - \chi)\xi \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

3. ЭВОЛЮЦИЯ КЛАССИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ФОРМЕ КОНТИНУАЛЬНОГО ИНТЕГРАЛА

Уравнение Лиувилля для микроскопической функции распределения (4) системы с s степенями свободы и гамильтонианом $H(q, p, t)$ следует непосредственно из определения этой функции и уравнений Гамильтона и может быть представлено в форме уравнения Шредингера в фазовом пространстве:

$$\partial_t f = [H]f, \quad f_{t=t_0} = f_0. \quad (15)$$

Здесь $[H]$ – дифференциальный оператор

$$[H] = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) \equiv \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}, \quad (16)$$

а $f(q, p, t_0) = f_0(q, p)$ – начальное распределение. В рамках такой интерпретации уравнения Лиувилля фурье-разложение вектора состояния $f(q, p)$ по какому-либо полному ортогональному набору функций удобно представлять как переход от одного

представления некоего абстрактного вектора состояния $|f\rangle$ к другому. Функцию $f(q, p)$ будем считать его (q, p) -представлением: $f(q, p) = (q, p | f)$. Переход к другому (Q, P) -представлению (преобразование Фурье) осуществляется по формуле

$$f(Q, P) = (Q, P | f) = \int d^s q d^s p (Q, P | q, p) (q, p | f).$$

Ортонормированность и полнота функций перехода $(q, p | Q, P)$ выражаются уравнениями

$$\begin{aligned} \int d^s q d^s p (Q, P | q, p) (q, p | Q', P') &= (Q, P | Q', P') = \delta(Q - Q') \delta(P - P'), \\ \int d^s Q d^s P (q, p | Q, P) (Q, P | q', p') &= (q, p | q', p') = \delta(q - q') \delta(p - p'). \end{aligned}$$

Тогда условие нормировки преобразуется так, что

$$\int d^s q d^s p (q, p | f(t)) = \int \mu(Q, P) f(Q, P, t) d^s Q d^s P = 1, \quad (17)$$

где $\mu(Q, P) = \int d^s q d^s p (q, p | Q, P)$.

Мы хотим получить решение начальной задачи для микроскопической функции распределения. Найдем с этой целью ядро оператора $[H]$ в (q, p) -представлении:

$$\begin{aligned} [H]f(q, p) &\equiv (q, p | [H] | f) = \int d^s q' d^s p' (q, p | [H] | q', p') (q', p' | f) = \\ &= \left(\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \right) f(q, p) = \\ &= \int d^s q' d^s p' \left(\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \right) \delta(q - q') \delta(p - p') f(q', p'). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$(q, p | [H] | q', p') = \delta(q - q') \frac{\partial H(q, p)}{\partial q} \frac{\partial \delta(p - p')}{\partial p} - \delta(p - p') \frac{\partial H(q, p)}{\partial p} \frac{\partial \delta(q - q')}{\partial q}. \quad (18)$$

Решение задачи (15) имеет вид

$$\begin{aligned} (q, p | f(t)) &= (q, p | G(t, t_0) | f(t_0)) = \\ &= \int d^s q_0 d^s p_0 G(q, p, t | q_0, p_0, t_0) (q_0, p_0 | f(t_0)), \end{aligned} \quad (19)$$

где пропагатор $G(t, t_0)$ – оператор вида

$$G(t, t_0) = \exp \left\{ \int_{t_0}^t [H(\tau)] d\tau \right\} \quad (20)$$

из однопараметрической группы Ли. Разбивая отрезок времени $[t_0, t]$ на n сегментов $[\tau_k, \tau_{k+1}]$, где $k = \overline{0, (n-1)}$, $\tau_0 = t_0$, $\tau_n = t$, находим

$$G(t, t_0) = \prod_{k=1}^n G(\tau_k, \tau_{k-1}).$$

Вследствие полноты набора векторов $|q, p\rangle$ получаем для ядра оператора $G(t, t_0)$ следующее выражение:

$$G(q, p, t | q_0, p_0, t_0) = \int \prod_{j=1}^{n-1} d^s q_j d^s p_j \prod_{k=1}^n G(q_k, p_k, \tau_k | q_{k-1}, p_{k-1}, \tau_{k-1}), \quad (21)$$

где $q_n = q$, $p_n = p$. С учетом формул (20) и (18) имеем

$$\begin{aligned} G(q_k, p_k, \tau_k | q_{k-1}, p_{k-1}, \tau_{k-1}) &= \left(q_k, p_k \left| \exp \left\{ \int_{\tau_{k-1}}^{\tau_k} [H(\tau)] d\tau \right\} \right| q_{k-1}, p_{k-1} \right) \simeq \\ &\simeq \delta(q_k - q_{k-1}) \delta(p_k - p_{k-1}) + (q_k, p_k | [H(\tau_k)] | q_{k-1}, p_{k-1}) \Delta \tau_k = \\ &= \delta(q_k - q_{k-1}) \delta(p_k - p_{k-1}) + \left(\delta(q_k - q_{k-1}) \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial q_k} \frac{\partial \delta(p_k - p_{k-1})}{\partial p_k} - \right. \\ &\quad \left. - \delta(p_k - p_{k-1}) \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial p_k} \frac{\partial \delta(q_k - q_{k-1})}{\partial q_k} \right) \Delta \tau_k, \end{aligned}$$

где $\Delta \tau_k = \tau_k - \tau_{k-1}$. Поскольку

$$\delta(q_k - q_{k-1}) = \int \frac{d^s u_k}{(2\pi)^s} e^{i u_k (q_k - q_{k-1})}, \quad \delta(p_k - p_{k-1}) = \int \frac{d^s v_k}{(2\pi)^s} e^{-i v_k (q_k - q_{k-1})},$$

то найдем

$$\begin{aligned} G(q_k, p_k, \tau_k | q_{k-1}, p_{k-1}, \tau_{k-1}) &\simeq \\ &\simeq \int \frac{d^s u_k d^s v_k}{(2\pi)^{2s}} \exp \{ i (u_k (q_k - q_{k-1}) - v_k (p_k - p_{k-1})) \} \times \\ &\quad \times \left\{ 1 - i \left(v_k \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial q_k} + u_k \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial p_k} \right) \Delta \tau_k \right\} \simeq \\ &\simeq \int \frac{d^s u_k d^s v_k}{(2\pi)^{2s}} \exp \left\{ i u_k \left(q_k - q_{k-1} - \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial p_k} \Delta \tau_k \right) - \right. \\ &\quad \left. - i v_k \left(p_k - p_{k-1} + \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial q_k} \Delta \tau_k \right) \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Остается подставить формулу (22) в уравнение (21) и перейти к пределу $\max\{\Delta \tau_k\} \rightarrow 0$. В результате мы получим функцию Грина уравнения Лиувилля в форме континуального интеграла:

$$\begin{aligned} G(q, p, t | q_0, p_0, t_0) &= \lim_{\max\{\Delta \tau_k\} \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^s} \int \prod_{k=1}^{n-1} \frac{d^s q_k d^s p_k}{(2\pi)^s} \int \prod_{k=1}^n \frac{d^s u_k d^s v_k}{(2\pi)^s} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \sum_{k=1}^n \left[i u_k \left(\dot{q}_k - \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial p_k} \right) - i v_k \left(\dot{p}_k + \frac{\partial H(q_k, p_k, \tau_k)}{\partial q_k} \right) \right] \Delta \tau_k \right\} \equiv \\ &\equiv \frac{1}{(2\pi)^s} \int \prod_{\tau} \frac{d^s q(\tau) d^s p(\tau)}{(2\pi)^s} \int \prod_{\tau} \frac{d^s u(\tau) d^s v(\tau)}{(2\pi)^s} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ i \int_{t_0}^t u \left(\dot{q} - \frac{\partial H(q, p, \tau)}{\partial p} \right) d\tau + i \int_{t_0}^t v \left(-\dot{p} - \frac{\partial H(q, p, \tau)}{\partial q} \right) d\tau \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\dot{q}_k = \lim_{\max\{\Delta\tau_k\} \rightarrow 0} \frac{q_k - q_{k-1}}{\Delta\tau_k}, \quad \dot{p}_k = \lim_{\max\{\Delta\tau_k\} \rightarrow 0} \frac{p_k - p_{k-1}}{\Delta\tau_k}.$$

Формальная аналогия между классическим и квантовым описаниями эволюции системы известна давно. В работе Н. Н. Боголюбова и Н. Н. Боголюбова (мл.) ([9], с. 20) указано, что “ею можно воспользоваться для перенесения некоторых методов квантовой механики на случай исследования эволюции... классических систем”. Здесь мы фактически воспользовались этой рекомендацией, что позволит установить путем сопоставления, какая из функций распределения рассматриваемого семейства обеспечивает наиболее полную аналогию между микроскопическими классическим и квантовым описаниями эволюции одной и той же системы взаимодействующих частиц.

4. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И ОБОБЩЕННОЕ (q, p) -ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Квантовым аналогом классического уравнения Лиувилля является, как известно, уравнение для матрицы плотности $\hat{\rho}$:

$$\partial_t \hat{\rho} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad \hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0. \quad (24)$$

Решение задачи (24) имеет вид унитарного преобразования

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{-1}(t, t_0), \quad (25)$$

где

$$\hat{U}(t, t_0) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau) \right\}, \quad \hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t),$$

так что

$$\text{tr} \hat{\rho}(t) = \text{tr}(\hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{-1}(t, t_0)) = \text{tr} \hat{\rho}(t_0) = 1.$$

Существующая аналогия между матрицей плотности и классическим вектором состояния позволяет считать, что эрмитов оператор $\hat{\rho}$ может отличаться от кет-вектора состояния коэффициентом $\zeta > 0$:

$$|f\rangle = \zeta \hat{\rho}. \quad (26)$$

Пусть $|A\rangle$ – произвольный вектор пространства динамических функций. Тогда его наблюдаемая $\langle A \rangle$ есть функционал вида

$$\langle A \rangle = (f|A) = \text{tr}(\zeta \hat{\rho} \zeta^{-1} \hat{A}). \quad (27)$$

Из (27) следует, что $|A\rangle = \zeta^{-1} \hat{A}$.

Матричные элементы оператора матрицы плотности задают конкретное представление вектора состояния $|f\rangle$:

$$\langle q' | \zeta \hat{\rho} | q'' \rangle = \text{tr}(|q''\rangle \langle q' | \zeta \hat{\rho}) = (q', q'' | f). \quad (28)$$

Наряду с бра-векторами $(q', q'' | = |q''\rangle\langle q'|$ можно рассматривать кет-векторы $|q', q''\rangle = |q'\rangle\langle q''| = (q', q'')^+$. Множество $\{|q', q''\rangle\}$ образует ортогональную систему векторов:

$$(q', q'' | \tilde{q}', \tilde{q}'') = \text{tr}(|q''\rangle\langle q'|\tilde{q}'\rangle\langle \tilde{q}''|) = \delta(q' - \tilde{q}')\delta(q'' - \tilde{q}'').$$

Полнота $\{|q', q''\rangle\}$ следует из полноты системы собственных векторов $|q'\rangle$ оператора координаты, так что имеем для произвольного вектора

$$|A\rangle = \int d^s q' d^s q'' |q', q''\rangle (q', q'' | A) \equiv \int d^s q' d^s q'' |q'\rangle\langle q''| \langle q' | \zeta^{-1} \hat{A} | q'' \rangle.$$

Динамическая функция в фазовом пространстве $A(q, p)$ есть (q, p) -представление абстрактного вектора $|A\rangle$. Переход из (q', q'') -представления в (q, p) -представление должен осуществляться при помощи линейного функционала:

$$A(q, p) \equiv (q, p | A) = \int d^s q' d^s q'' (q, p | q', q'') \langle q' | \zeta^{-1} \hat{A} | q'' \rangle. \quad (29)$$

Задание функции перехода $(q, p | q', q'')$ полностью определяет вид динамической функции, в том числе функции распределения $f(q, p)$. Квантовое среднее оператора $\hat{A}$ в новом (q, p) -представлении с учетом (29) принимает вид статистического среднего:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int d^s q d^s p f^*(q, p) A(q, p) = \\ &= \int d^s q' d^s q'' \langle q'' | \zeta \hat{\rho} | q' \rangle \int d^s q d^s p (q', q'' | q, p) A(q, p), \end{aligned}$$

из которого с учетом (27) следует, что

$$\int d^s q d^s p (q', q'' | q, p) A(q, p) = \langle q' | \zeta^{-1} \hat{A} | q'' \rangle, \quad (30)$$

где $(q', q'' | q, p) = (q, p | q', q'')^*$. Из уравнений (29) и (30) вытекает ортогональность и полнота системы векторов $(q', q'' | q, p)$:

$$\int d^s q' d^s q'' (q, p | q', q'') (q', q'' | \tilde{q}, \tilde{p}) = \delta(q - \tilde{q})\delta(p - \tilde{p}), \quad (31)$$

$$\int d^s q d^s p (q', q'' | q, p) (q, p | \tilde{q}', \tilde{q}'') = \delta(q' - \tilde{q}')\delta(q'' - \tilde{q}''). \quad (32)$$

Функции, обладающие свойствами (31) и (32), можно построить на основании формулы (13):

$$\begin{aligned} (q, p, \chi | q', q'') &= (2\pi\hbar)^{s/2} \langle q'' | \hat{f}_\chi(q, p) | q' \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} e^{-ip(q' - q'')/\hbar} \delta(q - \chi q'' - (1 - \chi)q'). \end{aligned} \quad (33)$$

Учитывая, что набор функций $\{(q, p, \chi | q', q'')\}$ образует полную ортогональную систему, и сравнивая уравнения (29) и (14), находим, что $|q, p\rangle = |q, p, \chi\rangle$, $\zeta = (2\pi\hbar)^{-s/2}$, т.е.

$$|f\rangle = (2\pi\hbar)^{-s/2} \hat{\rho}, \quad |A\rangle = (2\pi\hbar)^{s/2} \hat{A}.$$

Эволюция функции распределения $f(q, p, t)$, как и эволюция классического вектора состояния и динамика матрицы плотности, должна иметь вид преобразования

$$f(q, p, t) = \int d^s q_0 d^s p_0 G_Q(q, p, t | q_0, p_0, t_0) f(q_0, p_0, t_0), \quad (34)$$

причем пропагатор $G_Q(q, p, t | q_0, p_0, t_0)$ является элементом однопараметрической группы Ли. Из уравнения динамики матрицы плотности (25) с учетом отображения (29), а также обратного ему находим

$$\begin{aligned} f(q, p, t) &= \int d^s q' d^s q'' (q, p | q', q'') \times \\ &\quad \times \int d^s q'_0 d^s q''_0 \langle q' | \widehat{U}(t, t_0) | q'_0 \rangle \langle q'_0 | \zeta \hat{\rho}(t_0) | q''_0 \rangle \langle q''_0 | \widehat{U}(t_0, t) | q'' \rangle = \\ &= \int d^s q' d^s q'' (q, p | q', q'') \int d^s q'_0 d^s q''_0 \langle q' | \widehat{U}(t, t_0) | q'_0 \rangle \langle q''_0 | \widehat{U}(t_0, t) | q'' \rangle \times \\ &\quad \times \int d^s q_0 d^s p_0 (q'_0, q''_0 | q_0, p_0) f(q_0, p_0, t_0). \end{aligned}$$

Сравнивая это уравнение с уравнением (34), получаем явный вид пропагатора в (q, p) -представлении, выраженный через матричные элементы унитарного оператора $\widehat{U}(t, t_0)$ и функции перехода $(q, p | q', q'')$ и $(q', q'' | q, p)$:

$$\begin{aligned} G_Q(q, p, t | q_0, p_0, t_0) &= \int d^s q' d^s q'' \int d^s q'_0 d^s q''_0 \langle q' | \widehat{U}(t, t_0) | q'_0 \rangle \times \\ &\quad \times \langle q''_0 | \widehat{U}(t_0, t) | q'' \rangle (q, p | q', q'') (q'_0, q''_0 | q_0, p_0). \end{aligned} \quad (35)$$

Рассмотрим эволюцию динамической системы на малом промежутке времени Δt . Полагая $t_0 = t - \Delta t$, находим из (35)

$$\begin{aligned} G_Q(q, p, t | q_0, p_0, t - \Delta t) &= \int d^s q' d^s q'' \times \\ &\quad \times \int d^s q'_0 d^s q''_0 \left\langle q' \left| T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t-\Delta t}^t d\tau \widehat{H}(\tau) \right\} \right| q'_0 \right\rangle \times \\ &\quad \times \left\langle q''_0 \left| T \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t-\Delta t}^t d\tau \widehat{H}(\tau) \right\} \right| q'' \right\rangle (q, p | q', q'') (q'_0, q''_0 | q_0, p_0) = \\ &= \delta(q - q_0) \delta(p - p_0) + \\ &\quad + \frac{\Delta t}{i\hbar} \int d^s q' d^s q'' \int d^s q'_0 d^s q''_0 (q, p | q', q'') (q'_0, q''_0 | q_0, p_0) \times \\ &\quad \times [\langle q' | \widehat{H}(t) | q'_0 \rangle \delta(q''_0 - q'') - \delta(q' - q'_0) \langle q''_0 | \widehat{H}(t) | q'' \rangle] + \mathcal{O}((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (36)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} G_Q(q, p, t | q_0, p_0, t - \Delta t) &= \left(q, p \left| \exp \left\{ \int_{t-\Delta t}^t [H(\tau)]_Q d\tau \right\} \right| q_0, p_0 \right) = \\ &= \delta(q - q_0) \delta(p - p_0) + \Delta t (q, p | [H(t)]_Q | q_0, p_0) + \mathcal{O}((\Delta t)^2), \end{aligned} \quad (37)$$

где $[H(t)]_Q$ – квантовое обобщение классического оператора (16). Из уравнений (36) и (37) находим ядро оператора $[H]_Q$:

$$(q, p|[H]_Q|q_0, p_0) = \frac{1}{i\hbar} \int d^s q' d^s q'' \int d^s q'_0 d^s q''_0 (q, p | q', q'') (q'_0, q''_0 | q_0, p_0) \times \\ \times [\langle q' | \hat{H} | q'_0 \rangle \delta(q''_0 - q'') - \delta(q' - q'_0) \langle q''_0 | \hat{H} | q'' \rangle]. \quad (38)$$

Рассматривая в качестве (q, p) -представления обобщенное (q, p) -представление, т.е. полагая $|q, p\rangle = |q, p, \chi\rangle$, находим из (38)

$$(q, p|[H]_\chi|q_0, p_0) = \frac{1}{i\hbar} \int d^s q' d^s q'' \int d^s q'_0 d^s q''_0 \times \\ \times \frac{\exp\{-\frac{i}{\hbar} p(q' - q'')\}}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \delta(q - \chi q'' - (1 - \chi)q') \times \\ \times \frac{\exp\{\frac{i}{\hbar} p_0(q'_0 - q''_0)\}}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \delta(q_0 - \chi q''_0 - (1 - \chi)q'_0) \times \\ \times (q, p | q', q'') (q'_0, q''_0 | q_0, p_0) [\langle q' | \hat{H} | q'_0 \rangle \delta(q''_0 - q'') - \delta(q' - q'_0) \langle q''_0 | \hat{H} | q'' \rangle].$$

При помощи замены переменных $q''_0 = \tilde{q}_0 + (1 - \chi)\xi_0$, $q'_0 = \tilde{q}_0 - \chi\xi_0$, $q'' = \tilde{q} + (1 - \chi)\xi$ и $q' = \tilde{q} - \chi\xi$ преобразуем матричные элементы оператора $[H]_\chi$ к виду

$$(q, p|[H]_\chi|q_0, p_0) = \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d^s \xi d^s \xi_0}{(2\pi\hbar)^s} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p\xi - p_0\xi_0)\right\} \times \\ \times \left(\langle q - \chi\xi | \hat{H} | q_0 - \chi\xi_0 \rangle \delta(q_0 - q + (1 - \chi)(\xi_0 - \xi)) - \right. \\ \left. - \delta(q - q_0 - \chi(\xi - \xi_0)) \langle q_0 + (1 - \chi)\xi_0 | \hat{H} | q + (1 - \chi)\xi \rangle\right). \quad (39)$$

Матричные элементы оператора $\hat{H}$ в формуле (39) могут быть выражены через динамическую функцию $H(q, p)$ с помощью уравнения (30):

$$\langle q - \chi\xi | \hat{H} | q_0 - \chi\xi_0 \rangle = \int \frac{d^s Q d^s P}{(2\pi\hbar)^s} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} P(q - q_0 - \chi(\xi - \xi_0))\right\} H_\chi(Q, P) \times \\ \times \delta(Q - \chi q_0 + \chi^2 \xi_0 - (1 - \chi)q + \chi(1 - \chi)\xi), \quad (40)$$

$$\langle q_0 + (1 - \chi)\xi_0 | \hat{H} | q + (1 - \chi)\xi \rangle = \\ = \int \frac{d^s Q d^s P}{(2\pi\hbar)^s} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} P(q_0 - q + (1 - \chi)(\xi_0 - \xi))\right\} H_\chi(Q, P) \times \\ \times \delta(Q - \chi q - \chi(1 - \chi)\xi - (1 - \chi)q_0 - (1 - \chi)^2 \xi_0). \quad (41)$$

Подставляя (40) и (41) в уравнение (39), находим

$$\begin{aligned}
 (q, p|[H]_\chi|q_0, p_0) &= \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d^s \xi d^s \xi_0}{(2\pi\hbar)^s} \int \frac{d^s Q d^s P}{(2\pi\hbar)^s} H_\chi(Q, P) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p\xi - p_0\xi_0)\right\} \times \\
 &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}P(q - q_0 - \chi(\xi - \xi_0))\right\} \delta(Q - \chi q_0 + \chi^2 \xi_0 - (1 - \chi)q + \chi(1 - \chi)\xi) \times \\
 &\times \delta(q_0 - q + (1 - \chi)(\xi_0 - \xi)) - \\
 &- \frac{1}{i\hbar} \int \frac{d^s \xi d^s \xi_0}{(2\pi\hbar)^s} \int \frac{d^s Q d^s P}{(2\pi\hbar)^s} H_\chi(Q, P) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p\xi - p_0\xi_0)\right\} \times \\
 &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}P(q_0 - q + (1 - \chi)(\xi_0 - \xi))\right\} \delta(q - q_0 - \chi(\xi - \xi_0)) \times \\
 &\times \delta(Q - \chi q - \chi(1 - \chi)\xi - (1 - \chi)q_0 - (1 - \chi)^2 \xi_0). \tag{42}
 \end{aligned}$$

В первом слагаемом правой части уравнения (42) перейдем от интегрирования по переменным Q и P к интегрированию по переменным v и u , связанным с Q и P соотношениями $Q = q + \chi\hbar v$, $P = p + (1 - \chi)\hbar u$. Во втором слагаемом правой части (42) произведем замену переменных $Q = q - (1 - \chi)\hbar v$, $P = p - \chi\hbar u$. Тогда из (42) получим

$$\begin{aligned}
 (q, p|[H]_\chi|q_0, p_0) &= \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi)^{2s}} \exp\{iu(q - q_0) - iv(p - p_0)\} \times \\
 &\times \frac{1}{i\hbar} (H_\chi(q + \chi\hbar v, p + (1 - \chi)\hbar u) - H_\chi(q - (1 - \chi)\hbar v, p - \chi\hbar u)) = \\
 &= \int \frac{d^s u d^s v}{(2\pi)^{2s}} \exp\{iu(q - q_0) - iv(p - p_0)\} \times \\
 &\times \frac{1}{i\hbar} (\exp\{\chi\hbar v \partial_q + (1 - \chi)\hbar u \partial_p\} - \exp\{-(1 - \chi)\hbar v \partial_q - \chi\hbar u \partial_p\}) H_\chi(q, p). \tag{43}
 \end{aligned}$$

Формулы (38) и (43) справедливы также для операторов произвольных динамических функций. В частности, (43) остается в силе при замене в ее правой части функции H_χ на A_χ , а в левой части оператора $[H]_\chi$ на $[A]_\chi$.

5. ЭВОЛЮЦИЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ В ОБОБЩЕННОМ (q, p) -ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Найдем пропагатор $G_\chi(q, p, t | q_0, p_0, t_0)$ в форме континуального интеграла [10], [1]. Принимая во внимание групповое свойство пропагатора

$$G_\chi(t, t_0) = \exp\left\{\int_{t_0}^t [H(\tau)]_\chi d\tau\right\},$$

ортогональность, а также полноту системы векторов $|q, p, \chi\rangle$ (33) и разбивая временной отрезок $[t_0, t]$ на n сегментов, получаем

$$G_\chi(q, p, t | q_0, p_0, t_0) = \int \prod_{j=1}^{n-1} d^s q_j d^s p_j \prod_{k=1}^n G_\chi(q_k, p_k, \tau_k | q_{k-1}, p_{k-1}, \tau_{k-1}), \tag{44}$$

где $q_n = q$, $p_n = p$. С учетом формулы (43) находим

$$\begin{aligned} G_\chi(q_k, p_k, \tau_k \mid q_{k-1}, p_{k-1}, \tau_{k-1}) &\simeq (q_k, p_k \mid 1 + [H(\tau_k)]_\chi \Delta \tau_k \mid q_{k-1}, p_{k-1}) = \\ &= \int \frac{d^s u_k d^s v_k}{(2\pi)^{2s}} \exp\{i[u_k(q_k - q_{k-1}) - v_k(p_k - p_{k-1})]\} \times \\ &\quad \times (1 - i\hbar^{-1}[H_\chi(q_k + \chi\hbar v_k, p_k + (1 - \chi)\hbar u_k, \tau_k) - \\ &\quad - H_\chi(q_k - (1 - \chi)\hbar v_k, p_k - \chi\hbar u_k, \tau_k)] \Delta \tau_k) \simeq \\ &\simeq \int \frac{d^s u_k d^s v_k}{(2\pi)^{2s}} \exp\{i(u_k(q_k - q_{k-1}) - v_k(p_k - p_{k-1}) - \\ &\quad - \hbar^{-1}[H_\chi(q_k + \chi\hbar v_k, p_k + (1 - \chi)\hbar u_k, \tau_k) - \\ &\quad - H_\chi(q_k - (1 - \chi)\hbar v_k, p_k - \chi\hbar u_k, \tau_k)] \Delta \tau_k)\}, \end{aligned}$$

где $\Delta \tau_k = \tau_k - \tau_{k-1}$. Подставляя этот результат в формулу (44) и переходя к пределу $\max\{\Delta \tau_k\} \rightarrow 0$, получаем формулу для пропагатора G_χ в форме континуального интеграла:

$$\begin{aligned} G_\chi(q, p, t \mid q_0, p_0, t_0) &= \lim_{\max\{\Delta \tau_k\} \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^s} \int \prod_{j=1}^{n-1} \frac{d^s q_j d^s p_j}{(2\pi)^s} \int \prod_{k=1}^n \frac{d^s u_k d^s v_k}{(2\pi)^s} \times \\ &\quad \times \exp\left\{i \sum_{k=1}^n (u_k(q_k - q_{k-1}) - v_k(p_k - p_{k-1}) - \right. \\ &\quad \left. - \hbar^{-1}[H_\chi(q_k + \chi\hbar v_k, p_k + (1 - \chi)\hbar u_k, \tau_k) - \right. \\ &\quad \left. - H_\chi(q_k - (1 - \chi)\hbar v_k, p_k - \chi\hbar u_k, \tau_k)] \Delta \tau_k)\right\} \equiv \\ &\equiv \frac{1}{(2\pi)^s} \int \prod_\tau \frac{d^s q(\tau) d^s p(\tau)}{(2\pi)^s} \int \prod_\tau \frac{d^s u(\tau) d^s v(\tau)}{(2\pi)^s} \exp\left\{i \int_{t_0}^t d\tau (u\dot{q} - v\dot{p} - \right. \\ &\quad \left. - \hbar^{-1}[H_\chi(q + \chi\hbar v, p + (1 - \chi)\hbar u, \tau) - H_\chi(q - (1 - \chi)\hbar v, p - \chi\hbar u, \tau)])\right\}, \quad (45) \end{aligned}$$

которая должна рассматриваться совместно с граничными условиями $q(t) = q$, $p(t) = p$ и $q(t_0) = q_0$, $p(t_0) = p_0$.

Переход к классическому пределу осуществляется разложением функций Гамильтона в формуле (45) по степеням постоянной Планка:

$$\begin{aligned} G_\chi(q, p, t \mid q_0, p_0, t_0) &= \frac{1}{(2\pi)^s} \int \prod_\tau \frac{d^s q(\tau) d^s p(\tau)}{(2\pi)^s} \int \prod_\tau \frac{d^s u(\tau) d^s v(\tau)}{(2\pi)^s} \times \\ &\quad \times \exp\left\{i \int_{t_0}^t d\tau u \left(\dot{q} - \frac{\partial H_\chi(q, p, \tau)}{\partial p}\right) + i \int_{t_0}^t d\tau v \left(-\dot{p} - \frac{\partial H_\chi(q, p, \tau)}{\partial q}\right) + \mathcal{O}(\hbar)\right\}. \end{aligned}$$

Таким образом, в пределе $\hbar \rightarrow 0$ функция Грина (45) квантового уравнения Лиувилля переходит в формулу для классического пропагатора (23).

Если в формуле (45) положить $u = \delta p/\hbar$ и $v = \delta q/\hbar$, то с учетом граничных условий $\delta q(t_0) = \delta p(t_0) = 0$ и $\delta q(t) = \delta q$, $\delta p(t) = \delta p$ можно представить интеграл $i \int_{t_0}^t d\tau (u\dot{q} - v\dot{p})$ в виде

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau (\delta p \dot{q} - \delta q \dot{p}) &= -\frac{i}{\hbar} \delta q p \Big|_{t_0}^t + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau ((p + (1 - \chi)\delta p)(\dot{q} + \chi\delta\dot{q}) + (p - \chi\delta p)(\dot{q} - (1 - \chi)\delta\dot{q})). \end{aligned}$$

Тогда функция Грина квантового уравнения Лиувилля в обобщенном (q, p) -представлении приобретает вид

$$\begin{aligned} G_\chi(\Omega, t \mid \Omega_0, t_0) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^s} \int \prod_\tau \frac{d\Omega(\tau)}{(2\pi\hbar)^s} \int \prod_\tau \frac{d\delta\Omega(\tau)}{(2\pi\hbar)^s} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta q p + \frac{i}{\hbar} (A_{t_0}^t [q + \chi\delta q, p + (1 - \chi)\delta p] - \right. \\ &\left. - A_{t_0}^t [q - (1 - \chi)\delta q, p - \chi\delta p]) \right\}, \end{aligned} \quad (46)$$

где $A_{t_0}^t [q, p]$ – функционал действия классического вида. Сделав аналогичную замену $u = \delta p/\hbar$, $v = \delta q/\hbar$ в формуле (23), получаем функцию Грина классического уравнения Лиувилля в форме

$$G(\Omega, t \mid \Omega_0, t_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^s} \int \prod_\tau \frac{d\Omega(\tau)}{(2\pi\hbar)^s} \int \prod_\tau \frac{d\delta\Omega(\tau)}{(2\pi\hbar)^s} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \delta q p + \frac{i}{\hbar} \delta A_{t_0}^t [q, p] \right\}. \quad (47)$$

Мы видим, что при варьировании канонических переменных q и p в классической функции Грина достаточно линейной части приращения функционала действия, а в квантовой функции Грина при произвольных значениях параметра χ необходимо использовать полное приращение этого функционала. Лишь в начальный момент времени вариации $\delta q(t_0)$ и $\delta p(t_0)$ равны нулю.

В квантовой функции Грина в функционалах $A_{t_0}^t [q + \chi\delta q, p + (1 - \chi)\delta p]$ и $A_{t_0}^t [q - (1 - \chi)\delta q, p - \chi\delta p]$ варьируются значения как координаты, так и импульса в конечный момент времени t , в то время как в классической схеме полагается, что либо вариации начальной и конечной координат равны нулю ($\delta q(t_0) = \delta q(t) = 0$) при произвольных значениях импульса, либо равны нулю вариации начального и конечного импульсов ($\delta p(t_0) = \delta p(t) = 0$) при нефиксированных координатах. Возникающее при произвольных $\chi \in \mathbb{R}$ такое рассогласование вариационных методов вычисления функций Грина может быть устранено путем надлежащего выбора этого параметра. В формуле (46) следует положить либо $\chi = 0$, либо $\chi = 1$. В частности, при $\chi = 0$ положим $p + \hbar u = p'$, $q - \hbar v = q'$. Тогда находим

$$\begin{aligned} G_{\chi=0}(\Omega, t \mid \Omega_0, t_0) &= \int \frac{d^s q'_n d^s p'_n}{(2\pi\hbar)^{2s}} \int \prod_\tau \frac{d^s q(\tau) d^s p'(\tau)}{(2\pi\hbar)^s} \int \prod_\tau \frac{d^s q'(\tau) d^s p(\tau)}{(2\pi\hbar)^s} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (pq - p_0 q_0) + \frac{i}{\hbar} (A_{t_0}^t [q, p'] - \tilde{A}_{t_0}^t [q', p]) \right\}, \end{aligned} \quad (48)$$

где $A_{t_0}^t[q, p']$ – действие классического типа с фиксированными начальными $q(t_0) = q_0$ и конечными $q(t) = q$ координатами:

$$A_{t_0}^t[q, p'] = \int_{t_0}^t d\tau [p' \dot{q} - H_{\chi=0}(q, p', \tau)],$$

а $\tilde{A}_{t_0}^t[q', p]$ – действие классического типа, в котором фиксированы начальный $p(t_0) = p_0$ и конечный $p(t) = p$ импульсы:

$$\tilde{A}_{t_0}^t[q', p] = \int_{t_0}^t d\tau [-q' \dot{p} - H_{\chi=0}(q', p, \tau)].$$

При этом функции перехода в (q, p) -представление принимают вид

$$(q', q'' | q, p, 0) = \frac{e^{ip(q' - q'')/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \delta(q - q'),$$

а для вектора $|q, p, 0\rangle$ получаем следующую компактную формулу:

$$|q, p, 0\rangle = (2\pi\hbar)^{s/2} |q\rangle \langle q|p\rangle \langle p|. \quad (49)$$

В случае $\chi = 1$ вектор $|q, p, 1\rangle$ имеет вид

$$|q, p, 1\rangle = (2\pi\hbar)^{s/2} |p\rangle \langle p|q\rangle \langle q| = |q, p, 0\rangle^+ = (q, p, 0|. \quad (50)$$

Таким образом, значение $\chi = 1$ не приводит к качественно новым результатам; $|q, p, 1\rangle$ -представление оказывается дуальным по отношению к представлению (49) квантовой механики, а функция Грина G_χ в $|q, p, 1\rangle$ -представлении связана с функцией (48) комплексным сопряжением.

В рассматриваемом (q, p) -представлении при $\chi = 0$ динамические функции имеют вид $A_{\chi=0}(q, p) = (q, p, 0 | A) = (2\pi\hbar)^s \langle p|q\rangle \langle q|\hat{A}|p\rangle$, откуда непосредственно следует, что

$$\langle q|\hat{A}|p\rangle = A_{\chi=0}(q, p) \langle q|p\rangle. \quad (51)$$

Формула (51) по форме совпадает с формулой для ядра оператора в так называемом $\hat{q}\hat{p}$ -квантовании [1], в котором все операторы в L_2 рассматриваются как полиномы вида

$$\hat{A} = \sum A_{m_1, \dots, m_n; m'_1, \dots, m'_n} \hat{q}_1^{m_1} \dots \hat{q}_n^{m_n} \hat{p}_1^{m'_1} \dots \hat{p}_n^{m'_n}, \quad (52)$$

соответствующие классическим динамическим функциям

$$A(q, p) = \sum A_{m_1, \dots, m_n; m'_1, \dots, m'_n} q_1^{m_1} \dots q_n^{m_n} p_1^{m'_1} \dots p_n^{m'_n}.$$

Из уравнения (52) легко найти, что $\langle q|\hat{A}|p\rangle = A(q, p) \langle q|p\rangle$. Принципиальное отличие представления (51) от $\hat{q}\hat{p}$ -квантования в том, что (51) служит определением квантовой динамической функции $A_{\chi=0}(q, p)$ при известном операторе $\hat{A}$ в L_2 , в отношении вида которого не делается дополнительных предположений. Формула (52) предназначена для нахождения вида операторной функции $A(\hat{q}, \hat{p})$ на основе классической динамической функции $A(q, p)$, удовлетворяющей алгебре классических скобок Пуассона. Множество функций $A_{\chi=0}$, которому принадлежит и квантовая функция распределения, не совпадает с алгеброй Ли на базе классических скобок Пуассона.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе получено обобщенное (q, p) -представление квантовой механики, а также частное ее представление ($\chi = 0$), при котором сохраняются вариационные методы в качестве универсальных для квантовой и классической схем. Свойства квантовых динамических систем в (q, p) -представлении при $\chi = 0$, а также результаты, полученные для функции Грина квантового уравнения Лиувилля как функционала на решениях уравнений движения классического вида $\delta A_{t_0}^t / \delta \Omega = 0$ и $\delta \tilde{A}_{t_0}^t / \delta \Omega = 0$ в канонической форме, составят содержание следующей работы.

Благодарности. С. Г. Максимов выражает благодарность Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT) за поддержку.

Список литературы

- [1] Ф. А. Березин. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986.
- [2] V. Ovsienko. J. Diff. Geom. 1997. V. 45. P. 390–406.
- [3] T. Curtright, C. Zachos. Mod. Phys. Lett. A. 2001. V. 15. P. 2381–2385.
- [4] K. Takahashi. Progr. Theor. Phys. Suppl. 1989. № 98. P. 109–156.
- [5] Л. С. Кузьменков, С. Г. Максимов. ТМФ. 2002. Т. 131. № 2. С. 231–243.
- [6] S. G. Maximov, L. S. Kuzmenkov. Int. J. Theor. Phys. Group Theory and Nonlinear Optics. 2004. V. 11. № 1. P. 1–29.
- [7] S. G. Maximov, L. S. Kuzmenkov. Int. J. Theor. Phys. Group Theory and Nonlinear Optics. 2004. V. 11. № 1. P. 31–54.
- [8] S. G. Maximov, L. S. Kuzmenkov, J. L. Guardado Zavala. Int. J. Quantum Chem. 2004. V. 100. P. 311–323.
- [9] Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.). Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, 1984.
- [10] А. А. Славнов, Л. Д. Фаддеев. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М.: Наука, 1978.

Поступила в редакцию 22.XI.2004 г.,
после доработки 20.I.2005 г.