Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Ю. Самарин, Описание процесса перехода между состояниями дискретного спектра, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2009, выпуск 2(), 226–230

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu721>

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: 54.205.225.156

26 апреля 2023 г., 05:21:29

Теоретическая физика

УДК 53.03:(539.183-539.194)

ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕХОДА МЕЖДУ СОСТОЯНИЯМИ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА

А. Ю. Самарин

Самарский государственный технический университет,
443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

E-mail: samarinay@yahoo.com

Предложены матричные элементы перехода в виде, позволяющем описывать процесс перехода квантовой системы между состояниями дискретного спектра. Показано, что альтернативность возможных траекторий движения системы приводит к возможности представления матричных элементов функций координат и времени соответствующими функциями матричных элементов функций матричных элементов в процессе перехода.

Ключевые слова: дискретный спектр, матричные элементы перехода, интегралы по траекториям, альтернативность траекторий, принцип наименьшего действия.

Процессы перехода становятся существенными, когда изменение средних значений координат системы в процессе перехода между дискретными состояниями квантовой системы приводит к значительному изменению условий ее взаимодействия с окружающей средой [1]. Они также существенны в случае, когда сравнимы время изменения внешних условий и время перехода. Под временем перехода здесь подразумевается время изменения волновой функции в процессе квантового скачка.

Отсутствие у системы энергии и других динамических характеристик квантового перехода не позволяет рассматривать их в качестве величин, непосредственно определяющих причинное поведение системы в процессе перехода между дискретными квантовыми состояниями. Поведение системы должно описываться математическими объектами, непрерывными в процессе перехода и связанными с физическими величинами, определяющими волновые функции состояний, между которыми этот переход происходит. Таковыми могут являться матричные элементы, которые содержат в себе вероятностную составляющую, непрерывно изменяющуюся в процессе квантового перехода. При этом необходима их зависимость от времени и координат системы в процессе перехода. Это обстоятельство исключает возможность подобного применения матричных элементов в операторном виде. Можно сформировать матричные элементы, соответствующие поставленной задаче, взяв за основу матричный элемент перехода в виде, содержащий интеграл по траекториям [2] (для простоты рассматривается одномерное движение отдельной частицы). Такой элемент имеет вид

$$\langle f \rangle = \int \Psi^*(x_2) \Phi(x_1) dx_1 dx_2 \int f[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right) \mathcal{D}x(t), \quad (1)$$

Алексей Юрьевич Самарин (к.ф.-м.н., доц.), докторант, каф. общей физики и физики нефтегазового производства.

где $\Psi(x_2)$, $\Phi(x_1)$ — волновые функции координат конечного и начального состояний системы. За начало отсчета времени в (1) берётся время начала перехода. Время t , входящее в континуальный интеграл, является временем эволюции начальной волновой функции и связанных с ней физических величин в состоянии, из которого осуществляется переход к волновой функции $\Psi(x_2)$ и определяющим её физическим параметрам. Сам процесс перехода при этом предполагается мгновенным. Для решения поставленной задачи в структуру матричного элемента следует ввести временную переменную, характеризующую последовательность явлений, происходящих в процессе квантового скачка. При установлении конечности времени перехода время начального и конечного состояний не будет совпадать. Это требует введения для них собственных временных переменных. Далее предположим, что процессы интерференции амплитуд вероятностей и других физических величин аналогичны для переходов дискретного и непрерывного спектров. Тогда матричный элемент будет иметь вид

$$\begin{aligned} \langle \Psi(x_2, t_2) | f | \Phi(x_1, t_1) \rangle = \\ = \int \Psi^*(x_2, t_2) \Phi(x_1, t_1) dx_1 dx_2 dt_1 dt_2 \int f[x(\tau), \tau] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]\right) \mathcal{D}x(\tau), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\Phi(x_1, t_1)$, $\Psi(x_2, t_2)$, x_1, x_2, t_1, t_2 — волновые функции, координаты и время конечного и начального состояний системы; x — координата, τ — время перехода (квантового скачка).

Прежде чем приступить к поиску соотношений, определяющих развитие системы в процессе перехода, следует обратить внимание на следующее обстоятельство. Траектории в континуальном интеграле в (2) альтернативны. Являясь выражением факта неделимости частиц при выборе возможной траектории движения, альтернативность предполагает зависимость функций координат и времени для частиц, движущихся по одной из траекторий, исключительно от переменных, соответствующих этой траектории. Пусть, для простоты, имеется одномерное движение частицы с альтернативными траекториями $x_R(\tau)$, где индекс R обозначает возможную траекторию движения при переходе. Для упрощения записи введём следующие обозначения:

$$\langle f \rangle = \int F_R(x, \tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathcal{D}R, \quad \langle x \rangle = \int x_R(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathcal{D}R. \quad (3)$$

Эти величины являются аналогом матричных элементов физических величин (2) только при переходе из одной точки пространства и времени в другую. Матричные элементы в виде (2) получаются из (3) следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int \Psi^*(x_2, t_2) \Phi(x_1, t_1) \langle f \rangle dx_1 dx_2 dt_1 dt_2, \\ \langle X \rangle &= \int \Psi^*(x_2, t_2) \Phi(x_1, t_1) \langle x \rangle dx_1 dx_2 dt_1 dt_2. \end{aligned} \quad (4)$$

Матричный элемент производной по координате имеет вид

$$\langle F' \rangle = \iint \Psi^*(x_2, t_2) \Phi(x_1, t_1) dx_1 dx_2 dt_1 dt_2 \int \frac{\partial F_R(x, \tau)}{\partial x_R} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathcal{D}R. \quad (5)$$

Функция $F_R(x, \tau)$ зависит от координаты только траектории R . Это значит, что производные по координатам всех других траекторий равны нулю. Тогда

$$dF_R = \int_{R'} \frac{\partial F_R}{\partial x_{R'}} dx_{R'} \mathcal{D}R' = \frac{\partial F_R}{\partial x_R} dx_R,$$

откуда следует, что

$$\frac{\partial F_R}{\partial x_R} = \int_{R'} \frac{dF_R}{dx_{R'}} \mathfrak{D}R'.$$

Если подставить это выражение в (5), то с учётом (3) матричный элемент производной $\langle f' \rangle$ примет вид

$$\begin{aligned} \langle f' \rangle &= \iint \frac{dF_R(x, \tau)}{dx_{R'}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathfrak{D}R \mathfrak{D}R' = \iint \frac{dF_R(x, \tau)}{d\langle x \rangle} \cdot \frac{d\langle x \rangle}{dx_{R'}} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathfrak{D}R \mathfrak{D}R', \\ \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial x_{R'}} &= \int \frac{\partial x_{R''}}{\partial x_{R'}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{R''}\right) \mathfrak{D}R'' = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{R'}\right). \end{aligned}$$

Откуда

$$\langle f' \rangle = \frac{\partial}{\partial \langle x \rangle} \int F_R(x, \tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathfrak{D}R \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{R'}\right) \mathfrak{D}R' = \langle 2|1 \rangle \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial \langle x \rangle},$$

где $\langle 2|1 \rangle$ — амплитуда вероятности перехода между двумя точками пространства и времени. Эти переходы также альтернативны, что позволяет записать:

$$\langle F' \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle \frac{\partial \langle F \rangle}{\partial \langle X \rangle}. \quad (6)$$

Разложив произвольную функцию координат в ряд Тейлора в матричном элементе аналогично можно показать, что

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle X \rangle). \quad (7)$$

Так как при данном рассмотрении время одинаково для всех траекторий, то можно записать:

$$\langle F(x, \tau) \rangle = F(\langle X \rangle, \tau) \langle \Psi | \Phi \rangle = F(\langle X \rangle, \langle \tau \rangle), \quad (8)$$

где

$$\langle \tau \rangle = \int \Psi^*(x_2, t_2) \Phi(x_1, t_1) dx_1 dx_2 dt_1 dt_2 \int \tau \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_R\right) \mathfrak{D}R = \tau \langle \Psi | \Phi \rangle.$$

Поскольку структура матричных элементов (2) включает в себя вероятное движение по бесконечной совокупности траекторий, а изменение системы в процессе перехода полностью им определяется, то временная эволюция системы должна полностью определяться соотношениями между матричными элементами перехода. Причём эти соотношения должны являться прямым следствием структуры матричных элементов перехода (2).

Пусть $\eta(\tau)$ — вариация каждой из вероятных траекторий движения системы при переходе $x(\tau)$. При этом вариация матричного элемента произвольного функционала траектории будет равна нулю в силу полноты множества возможных траекторий. Это же относится и к матричному элементу траектории движения:

$$\delta \langle x(\tau) \rangle = 0,$$

откуда

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int x(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau)]\right) \mathfrak{D}x(\tau) = \\ &= \int x(\tau) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(\tau) + \eta(\tau)]\right) \mathfrak{D}x(\tau) = \langle x \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \delta S \rangle + \dots \end{aligned}$$

и окончательно

$$\langle \delta S \rangle = 0. \quad (9)$$

Выражение (9) означает, что «усреднённая» по всем траекториям вариация действия равна нулю. Добавление в матричный элемент вариации действия волновых функций начального и конечного состояний не изменит соотношения (9). Тогда с учётом соотношения (7) можно записать:

$$\delta S[\langle X(\tau) \rangle] = 0. \quad (10)$$

Таким образом, бесконечное множество зависимостей функционала действия в (9) может быть сведено к одной зависимости (для одномерного движения) от функции $\langle x(\tau) \rangle$. Эта последняя зависимость играет роль «средней» траектории движения, хотя содержит в себе вероятностную составляющую и в общем случае является комплексной величиной. В такой интерпретации выражение (10) представляет собой принцип наименьшего действия для «средней» траектории. Этот принцип определяет динамический характер соотношений между матричными элементами перехода (статистический, вероятностный характер содержится в самих матричных элементах). Для одномерного движения частицы в потенциальном поле справедливо уравнение

$$m \frac{d^2 \langle X(\tau) \rangle}{d\langle \tau \rangle^2} + \frac{\partial U(\langle X(\tau) \rangle, \langle \tau \rangle)}{\partial \langle X(\tau) \rangle} = 0. \quad (11)$$

Поскольку матричный элемент времени отличается от времени перехода на величину, равную амплитуде вероятности перехода $\langle \Psi | \Phi \rangle$, которая является нормировочной постоянной в уравнении (11), то он может быть заменен переменной τ .

Столь полная аналогия с классической механикой позволяет использовать при рассмотрении процесса перехода законы сохранения классической механики. При этом форма этих законов будет отличаться лишь заменой классических переменных на соответствующие матричные элементы.

Таким образом, предложенный здесь подход позволяет исследовать поведение микросистемы в области, недоступной для описания волновой функцией. При этом математически задача сводится к решению дифференциального уравнения второго порядка для матричных элементов. Начальные и конечные условия определяются из волновых функций состояний, между которыми переход происходит.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Самарин А. Ю. Возникновение стабильных состояний атомов и молекул за счёт обменного взаимодействия возбуждённых электронов // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2009. — № 1(18). — С. 214–221.
2. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968. — 382 с.

Поступила в редакцию 12/VIII/2009;
в окончательном варианте — 15/X/2009.

MSC: 81S40, 58D30

DESCRIPTION OF DISCRETE SPECTRUM STATES TRANSITION PROCESSES

A. Yu. Samarin

Samara State Technical University,
244, Molodogvardeyskaya str., Samara, 443100.
E-mail: samarinay@yahoo.com

Matrix elements of transition are offered in the form, allowing to describe transition process of a quantum system between discrete spectrum states. It is shown, that alternativeness of possible paths of system movement allows to express matrix elements of coordinates and time functions by the corresponding functions of coordinates and time matrix elements. Dynamic relations between these functions of matrix elements during transition are established.

Key words: *discrete spectrum, transition matrix elements, path integrals, trajectories alternativeness, minimum action principle.*

Original article submitted 12/VIII/2009;
revision submitted 15/X/2009.

Alexey Yu. Samarin (Ph.D. (Phys. & Math.)), Doctoral Candidate, Dept. of General Physics.