2.8.7. Вывод уравнения Шредингера на основании принципа экстремума энтропии

В предыдущем пункте, на наш взгляд, Алсигне удалось вывести уравнение Шредингера на основании принципа экстремума усредненного действия замкнутой системы (в частности, хаотически блуждающего субъядрышка внутри ядра «электрона»).

Приведем теперь второй вариант вывода уравнения Шредингера для той же квантовой системы на основании принципа экстремума энтропии (или экстремума свободной энергии Гиббса).

Если волновая функция не зависит от времени $\psi(x,t) = \psi(x)$, то для блуждающего субъядрышка вместо (2.8.100) можно записать

$$\delta \overline{S} = \delta \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \hat{H} \psi^*(x) dx \int_{t_1}^{t_2} dt, \tag{2.8.110}$$

где $\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x)$ – оператор Гамильтона. Следовательно,

$$\delta \frac{\overline{S}}{\tau} = \delta \overline{E}_c = \delta \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \hat{H} \psi^*(x) dx, \tag{2.8.111}$$

откуда имеем

$$\delta \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \left(\hat{H} - E_c \right) \psi^*(x) dx = 0\,. \tag{2.8.112}$$

Экстремали $\psi(x)$ данного функционала, как известно, удовлетворяют упрощенному уравнению Шредингера

$$\hat{H} \psi(x) = E_c \psi(x), \tag{2.8.113}$$

пригодному для описания стационарных нерелятивистских марковских процессов.

Но до данной работы вариационный принцип экстремальности функционала (2.8.112) не имел основополагающего значения, т. к. он не позволял найти оператор Гамильтона $\hat{H}$. В квантовой механике этот оператор по-прежнему получали с помощью квантово-механического формализма, подставляя в гамильтонианы аналогичных классических систем вместо импульса частицы p_x оператор $i\eta\frac{\partial}{\partial x}$, а вместо координаты x – оператор $\hat{x}$.

Можно показать, что вариационный принцип (2.8.112) является лишь частным случаем более общего принципа экстремума свободной энергии изолированной системы.

Действительно, если, например, рассматривать хаотически блуждающее субъядрышко внутри ядра «электрона» как термодинамическую систему в термостате (см. рис. 2.8.1), то в стационарном состоянии, согласно канонам классической термодинамики, первая вариация свободной энергии такой системы должна быть равна нулю, а вторая больше нуля. Это записывается в виде следующих выражений:

$$\delta F = \delta\left(\overline{E}_c - kT_0 H\right) = 0, \qquad \partial^2 F > 0, \qquad (2.8.114)$$

где H – энтропия, T_0 – абсолютная температура данной системы, k – коэффициент пропорциональности аналогичный постоянной Больцмана.

Полная энтропия Шенона исследуемой системы (т. е. блуждающего субъядрышка) без учета релятивистских эффектов и спина имеет вид

$$H = -\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\rho\left(x, p'_x\right)\ln\rho\left(x, p'_x\right)dxdp'_x, \qquad (2.8.115)$$

где $\rho(x,p'_x)$ – совместная ПРВ координаты и импульса блуждающего субъядрышка.

Преобразуем выражение (2.8.115)

$$H = -\int\int\rho(x)\rho\left(p'_x / x\right)\ln\left(\rho(x)\rho\left(p'_x / x\right)\right)dp'_x dx \qquad (2.8.116)$$

и представим его в более развернутом виде

$$H = -\int\rho(x)\ln\rho(x)dx - \int\rho(x)\int\rho\left(p'_x / x\right)\ln\rho\left(p'_x / x\right)dp'_x dx, \quad (2.8.117)$$

где $\rho(p'_x /x)$ – условная ПРВ импульса блуждающего ядрышка. То есть каждой точке внутренности ядра «электрона» (рис. 2.8.1 или 2.8.2) соответствует своя ПРВ импульса, иными словами, рассматриваемая квантовая система неоднородна.

Теперь понятно, что из-за внутренней неоднородности квантовой системы любые попытки (типа функции Вигнера) определить совмест-

ную ПРВ ρ(x,p'$_x$) с точки зрения обычной квантовой механики были изначально обречены на провал.

Интеграл в (2.8.117) является усредненной энтропией, поэтому

$$H(p_x, x) = -\int \rho(x)\ln\rho(x)dx - \int \rho(p_x)\ln\rho(p_x)dp_x, \qquad (2.8.118)$$

где $\rho(p_x)$ – ПРВ импульса, измеряемая с помощью чистого ансамбля при условии марковости рассматриваемого процесса.

После разложения функции $\ln\rho(p_x) = \ln\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x)e^{\frac{i2p_x x}{h}}dx$ в ряд Маклорена и несложных преобразований с учетом (2.8.93) вместо (2.8.118) получим

$$H = -\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)\ln\psi^*(x)\psi(x)dx + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\phi_\nu}{\nu}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\nu}\psi(x)dx\right), \qquad (2.8.119)$$

где ϕ_ν кумулянты ν-го порядка ($\phi_1 = m_1$, $\phi_2 = m_2 - m_1^2$, $\phi_3 = m_3 - 3m_1m_2 + 2m_1^3\ldots$; здесь $m_i = \int_{-\infty}^{\infty}x^i\rho(x)dx$ – начальные статистические моменты i - го порядка.

В частном случае, когда не равен нулю и конечен только кумулянт второго порядка (т. е. дисперсия места нахождения блуждающего субъядрышка) $\phi_2 = m_2 - m_1^2 = \sigma^2$, энтропия (2.8.119) принимает вид

$$H = -\frac{1}{kT}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)U(x)\psi^*(x)dx - F_x\right) - \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left(\phi_2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x)dx. \quad (2.8.120)$$

Здесь использовано выражение

$$H(x) = \frac{1}{kT_0}\left(\overline{U}(x) - F_x\right), \qquad (2.8.121)$$

где

$$F_x = kT_0\ln\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{U(x)}{kT_0}}dx \qquad (2.8.122)$$

– свободная энергия напряженной вакуумной протяженности, окружающей ядро «электрона».

После подстановки (2.8.120) в (2.8.114) и несложных преобразований окончательно получим условия экстремальности

$$\delta F_{P_x} = -\delta \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(-\phi_2^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) - E_c)\psi(x)dx = 0, \qquad (2.8.123)$$

где

$$F_{P_x} = F - F_x = 2\phi_2 \ln \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-T_0(p'_x)}{2\phi_2^2}} dp'_x \qquad (2.8.124)$$

– свободная энергия блуждающего субъядрышка.

Здесь также использовано имеющее в данном случае место соотношение $\phi_2 = \frac{1}{2}kT_0$. Дисперсию ϕ_2 можно представить в виде

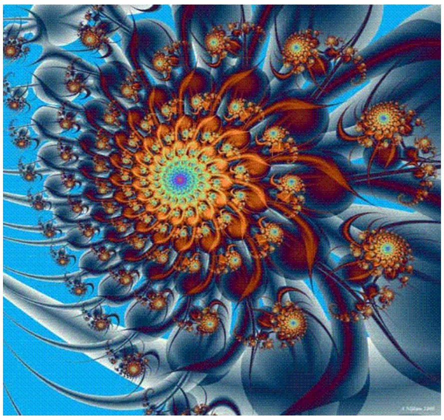
$$\phi_2 = \frac{h}{\mu\omega}, \qquad (2.8.125)$$

где ω – частота так называемого гармонического осциллятора. Размерность этой конструкции из фундаментальных констант h, μ и ω соответствует размерности дисперсии координаты блуждающего субъядрышка.

Очевидно, что (2.8.123) с точностью до множителя в первом члене подынтегрального выражения соответствует условию (2.8.112), которое приводит к уравнению, имеющему вид уравнения Шредингера (2.8.113)

$$\hat{H}\psi(x) = E_c\psi(x), \qquad (2.8.126)$$

Как известно, для изолированных систем вместо того, чтобы минимизировать свободную энергию, можно искать экстремали $\psi(x)$, соответствующие максимуму функционала энтропии (2.8.120). Это вытекает из условия (2.8.114), т. к. энергия блуждающего субъядрышка (т. е. изолированной квантовой системы) всегда постоянна. Оба подхода приводят к идентичным результатам.



http://i268.photobucket.com/

Итак, принцип экстремума энтропии стационарного, марковского случайного процесса для изолированной квантовой системы приводит практически к тому же результату, что и принцип экстремума действия.

Иными словами, Алсигна пришла к весьма любопытному выводу, что волновые функции $\psi(x)$, являющиеся решениями стационарного уравнения Шредингера, являются, как экстремалями функционала действия, так и экстремалями функционала энтропии квантовой системы.

Оба основополагающих принципа экстремума действия и экстремума энтропии изолированной системы удивительным образом приводят к выводу одного и того же уравнения Шредингера. Это, по всей видимости, и послужило причиной столь успешного применения данного уравнения к описанию явлений микромира.