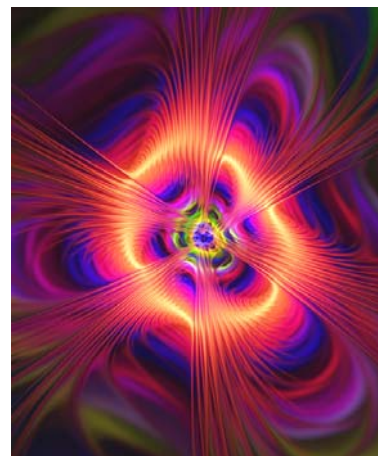


### 3 Вывод уравнения Шредингера

Данный раздел прошел апробацию в виде статьи в журнале «Инженерная физика» №3, 2016, ISSN:2072-9995, под редакцией А.А. Рухадзе; перевод данной статьи на английский язык был принят в АрХив Корнельского университета: <https://arxiv.org/abs/1702.01880>.

Основные понятия квантовой механики (такие, как: «волны материи» де Бройля, «принцип неопределенности» Гейзенберга, отсутствие размеров и траектории движения у элементарных частиц, универсальность постоянной Планка, а также уравнение Шредингера), до сих пор не достаточно логически обоснованы. Интерес к истокам квантовой механики обусловлен еще тем, что передовые рубежи науки в области изучения структурной организации материи - струнные теории, базирующиеся на квантовой механике, натолкнулись на большие трудности. Это заставляет вернуться к переосмыслению основ квантовой физики.



В нижеизложенной главе предложена модель хаотически блуждающей материальной частицы (обладающей размером и траекторией движения), на основании которой удалось:

- выразить постоянную Планка  $h$  через основные характеристики стационарного случайного процесса;
- обосновать переход от координатного представления состояния частицы к ее импульсному представлению без привлечения идеи о существовании «волн материи» де Бройля и «принципа неопределенности» Гейзенберга.
- вывести уравнение Шредингера на основании принципа экстремума усредненного действия хаотически блуждающей частицы;

При этом выявлены условия и границы применения обобщённого уравнения Шредингера к описанию явлений, как микромира, так и макромира.

Промежуточный результат «определение плотности распределения вероятности производной  $n$ -го порядка для  $n$  раз дифференцируемого, случайного, стационарного процесса» может быть применим во многих областях теории вероятности и статистической физики.

При выводе обобщенного уравнения Шредингера были применены методы теории вероятности, теории случайных процессов, теории обобщённых функций и вариационного исчисления. Также учитывался формализм квантовой механики.

### 3.1 Краткая история возникновения уравнения Шредингера

Одной из основных загадок квантовой механики и, следовательно, всех современных продолжений данной теории, остается тайна появления уравнения Шредингера. Отсутствие логически обоснованного вывода данного исходного уравнения отрицательно влияет на развитие наших представлений о структурной организации материи.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi, \quad (3.1)$$

где  $\psi = \psi(x, y, z, t)$  – волновая функция, характеризующая состояние элементарной частицы;  $U$  – потенциальная энергия элементарной частицы;  $\hbar$  – постоянная Дирака, связанная с постоянной Планка соотношением  $\hbar = h/2\pi$ ,  $m$  – масса частицы.

Считается, что это уравнение было получено Эрвином Шредингером (1887 – 1961) на основании индуктивных и дедуктивных предпосылок, сложившихся к 1926 году в результате экспериментальных исследований свойств элементарных частиц.

Особое значение в то время имела идея Луи де Бройля (1892 – 1987) о возможности существования волновых свойств у движущейся материальной частицы. В своей докторской диссертацией «Исследования по теории квантов» (1924 г.) Луи де Бройль сопоставил прямолинейную траекторию движения свободной частицы с прямым лучом света, и пришел к выводу, что они описываются одним и тем же уравнением Якоби, вытекающим из фундаментального принципа «экстремума действия». Оказалось, что траектория движения свободной частицы и луч света являются экстремалами практически одного и того же функционала действия. Данное обстоятельство натолкнуло Луи де Бройля на мысль, что если волне, описываемой уравнением

$$w = \exp\{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})\}, \quad (3.2)$$

(где  $\omega$  – циклическая частота;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор;  $t$  – время;  $\mathbf{r}$  – пространственный вектор), присущи некоторые свойства частицы, то вполне возможно обратное утверждение, что движущейся материальной частице может соответствовать некая плоская волна

$$\psi = \exp\{i(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar\}, \quad (3.3)$$

где  $E$  – кинетическая энергия движущейся частицы;  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  – ее импульс.

Кроме того, Луи де Бройль был знаком с результатами экспериментов старшего брата Мориса де Бройля, связанными с физикой рентгеновского излучения, и с пионерскими работами М. Планка и А. Эйнштейна по квантовой природе излучения и поглощения света. Это и позволило ему в 1923 – 1924 гг. предположить, что движущейся частице можно поставить в соответствие некое колебательное возмущение  $\psi$  с частотой

$$\omega = E/\hbar \quad (3.4)$$

и длиной волны

$$\lambda = 2\pi\hbar/|p|. \quad (3.5)$$

Эта идея была поддержана П. Ланжевеном и А. Эйнштейном, но большинство физического сообщества отнеслась к ней скептически. Однако в 1927 – 1930 гг. сразу несколько групп экспериментаторов (К. Дэвиссон и Л. Джермер, О. Штерн и И. Эстерман и др.) показали, что идея существования волн материи, предложенная Л. де Бройлем, применима для описания явления дифракции электронов и атомов на кристаллах.

В одной из ранних работ 1925 – 1926 гг. Эрвин Шредингер, критически относясь к статистике Бозе – Эйнштейна, задался вопросом: – «Почему бы не начать с волнового представления частиц газа, а затем наложить на такие «волны» условия квантования «а-ля условие Дебая»? После чего следует ключевая мысль: – «Это означает не что иное, как необходимость серьезно отнестись к предложенной Л. де Бройлем и А. Эйнштейном волновой теории движущихся частиц».

Данная идея послужила одной из причин получения Шредингером уравнения (3.1), которое привело интенсивному развитию квантовой механики, наряду с великими работами Макса Планка, Альберта Эйнштейна, Нильса Бора и Вернера Гейзенберга.

Доводы, приведенные Шредингером при выводе уравнения (3.1), впоследствии были признаны специалистами неверными, однако само уравнение оказалось верным. Это не единственный случай в науке. Например, основные уравнения электродинамики также были получены Джеймсом Клерком Максвеллом из неверных предположений о механических свойствах эфира.

За девяносто лет, прошедших с 1926 года многие исследователи предлагали различные способы вывода уравнений Шредингера, опираясь на аксиомы множества различных интерпретаций квантовой механики. Но неудовлетворенность в понимании логических основ квантовой физики остается до сих пор. Ситуация настолько сложная, что Дэвид Мермин предложил оставить «не нужные споры» и просто: - «Заткнуться и считать!» («Shut up and calculate»).

Тем не менее, в этой работе предлагается сделать еще одну попытку сначала подумать, а потом вычислять - «Think and calculate».

Рассмотренная в данной главе вероятностная модель хаотически блуждающей частицы (обладающей объемом и непрерывной траекторией движения), явно противоречит практически всем современным интерпретациям квантовой механики, но данная модель приводит к выводу уравнения Шредингера, в чем ниже вам и предлагается убедиться.

### 3.2 Модель блуждающей частицы

Рассмотрим частицу, обладающую небольшим объемом по сравнению с областью окружающего ее пространства (рис. 3.1). Условно будем называть данную частицу «точкой».

Допустим, что данная «точка» постоянно хаотически блуждает в окрестностях условного «центра» (совмещенного с началом системы координат  $X Y Z$ ) под действием множества не связанных между собой силовых факторов.

Примерами постоянно блуждающей «точки» могут послужить: колебания атома в кристаллической решетке, полеты мухи в банке, дрожание ядра внутри биологической клетки, шевеление эмбриона в утробе матери, блуждания кончика ветки под порывами ветра и т. п.

Предположим, что такое хаотическое движение «точки», продолжается «вечно», поскольку ее полная механическая энергия  $E$  всегда остается постоянной

$$E = T(x,y,z,t) + U(x,y,z,t) = const, \quad (3.6)$$

где  $T(x,y,z,t)$  – кинетической энергия «точки», обусловленная скоростью ее движения;

$U(x,y,z,t)$  – потенциальная энергия «точки», связанная с силой, стремящейся вернуть «точку» в условный «центр» (например, с силой упругости).

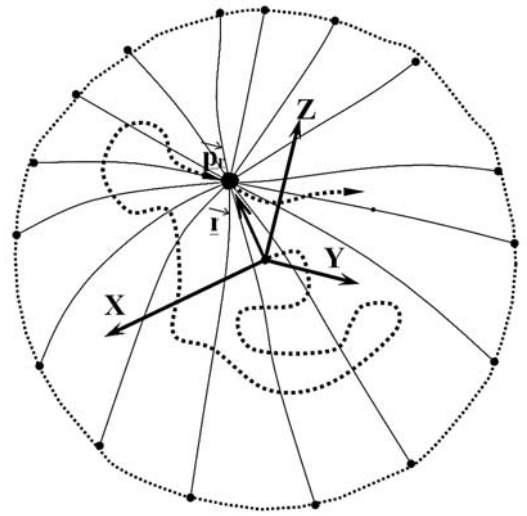
Таким образом, в рассматриваемой модели каждая из энергий  $T(x,y,z,t)$  и  $U(x,y,z,t)$  «точки» является случайной функцией времени и места ее положения относительно «центра». Но эти энергии плавно перетекают друг в друга таким образом, что их сумма (т. е. полная механическая энергия  $E$ ) всегда остается постоянной.

Если скорость хаотического блуждания «точки» в окрестности условного «центра» (рис. 3.1) невелика, то согласно нерелятивистской механике, она обладает кинетической энергией

$$T(x,y,z,t) = \frac{p_x^2(x,y,z,t) + p_y^2(x,y,z,t) + p_z^2(x,y,z,t)}{2m}. \quad (3.7)$$

Для сокращения записей вместо (3.7) будем писать

$$T(t) = \frac{p_x^2(t) + p_y^2(t) + p_z^2(t)}{2m}, \quad (3.8)$$



**Рис. 3.1.** Частица («точка»), хаотически блуждающая в окрестности условного «центра» таким образом, что ее полная механическая энергия  $E$  всегда остается постоянной ( $E = const$ )

где  $p_x(t), p_y(t), p_z(t)$  – мгновенные значения компонент импульса блуждающей «точки»,

$$|\vec{p}| = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}, \quad (3.9)$$

$$p_i = mv_i = m \frac{dx_i}{dt} = m \cdot x_i'. \quad (3.10)$$

Вид потенциальной энергии «точки»  $U(x, y, z, t)$  не конкретизируется.

Действие рассматриваемой «точки»  $S$  в нерелятивистской механике определено следующим образом [56]

$$S(t) = \int_{t_1}^{t_2} [T(p_x, t) - U(x, t)] dt + Et. \quad (3.11)$$

Для упрощения выкладок здесь рассмотрен одномерный случай, не ограничивающий общность заключений. В случае трех измерений увеличивается только число интегрирований.

Из-за сложности движения блуждающей «точки» нас будет интересовать не само действие (3.11), а его усреднение по времени (или по реализациям)

$$\bar{S} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(t) = \int_{t_1}^{t_2} \overline{[T(p_x, t) - U(x, t)]} dt + \bar{E}t. \quad (3.12)$$

*Напомним, что для эргодического случайного процесса имеет место равенство между усреднением по времени и усреднением по реализациям.*

Усреднение (3.12) осуществляется по реализациям, взятым за один и тот же промежуток времени

$$\Delta t = t_2 - t_1.$$

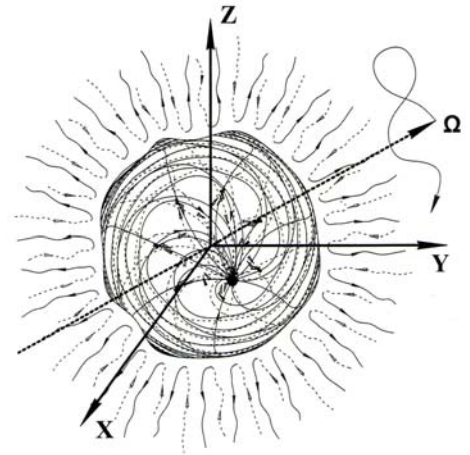
Усредненную кинетическую энергию блуждающей «точки» представим в виде

$$\overline{T(p_x, t)} = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(p_x) p_x^2 dp_x, \quad (3.13)$$

где  $\rho(p_x)$  – плотность распределения вероятности (ПРВ) составляющей импульса  $p_x$  материальной «точки».

Усредненную потенциальную энергию «точки» представим в виде

$$\overline{U(x, t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) U(x) dx, \quad (3.14)$$



**Рис. 3.2.** В среднем сферически симметричное образование, внутри которого постоянно хаотически блуждает частица («точка»)

где  $\rho(x)$  – ПРВ места нахождения проекции на ось  $x$  «точки», блуждающей в окрестности условного «центра» (рис. 3.1 и 3.2).

Подставляя (3.13) и (3.14) в усредненное действие (3.12), получим

$$\bar{S} = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(p_x) p_x^2 dp_x - \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) U(x) dx \right\} dt + \bar{E}t. \quad (3.15)$$

Для дальнейшего вывода уравнения Шредингера ниже приведены два вспомогательных пункта. Первый пункт, являющийся разработкой автора [20], посвящен определению плотности распределения вероятности производной  $n$ -го порядка  $n$  раз дифференцируемого, случайного стационарного процесса. Второй пункт «Координатное представление усредненного импульса частицы» позаимствован из книги Д.И. Блохинцева [13], поскольку данный пункт имеет большое значение для цели, поставленной в этой работе.

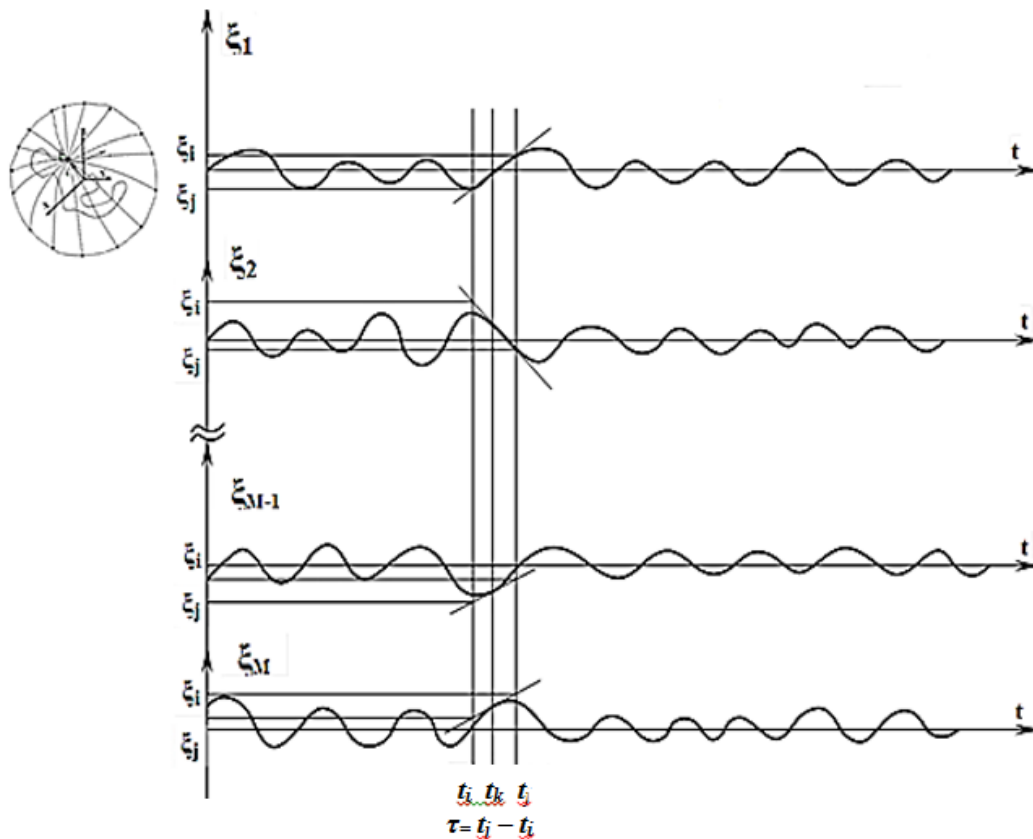
### 3.3 Определение плотности распределения вероятности производной $n$ -го порядка $n$ раз дифференцируемого, случайного, стационарного процесса

Определение способа нахождения плотности распределения вероятности (ПРВ) производной стационарного в узком смысле случайного процесса при известной ПРВ самого этого процесса является ключом к пониманию квантовой механики и границ ее применения. Решение данной задачи позволяет обосновать квантово-механическую процедуру перехода от координатного представления к импульсному представлению, и наоборот, без привлечения гипотезы о существовании волн материи де Бройля. Это становится возможным в силу того, что импульс частицы (материальной «точки») линейно связан с производной от ее координаты

$$p_x = m \partial x / \partial t = mx'.$$

Кроме того, проблема определения одномерной ПРВ  $\rho[\zeta^n(t)]$  – производной  $n$ -го порядка  $n$  раз дифференцируемого случайного стационарного процесса  $\zeta(t)$ , при известной только его одномерной ПРВ  $\rho[\zeta(t)]$ , возникает в ряде других задач радиофизики и статистической механики.

Отметим вначале общие свойства первой производной случайного стационарного процесса  $\zeta(t)$ . Для этого рассмотрим  $M$  его реализаций (рис. 3.3).



**Рис. 3.3.** М реализаций дифференцируемого случайного стационарного процесса  $\zeta(t)$ . Показано, что величина  $\zeta(t_k) = \zeta_k$  в сечении  $t_k$  и производная стационарного случайного процесса в том же сечении  $\zeta'(t_k) = \zeta'_k$  являются независимыми случайными величинами

Из рис. 3.3 видно, что значение случайной величины  $\zeta(t_k)$  в сечении  $t_k$  и значение производной этого процесса  $\zeta'(t_k) = \frac{\partial \zeta(t_k)}{\partial t}$  при том же значении аргумента  $t_k$  являются независимыми, а следовательно, и некоррелированными, случайными величинами. Данное утверждение может быть выражено аналитически [45]

$$\langle \zeta(t_k) \zeta'(t_k) \rangle = \left\langle \frac{d}{dt} \frac{1}{2} [\zeta(t_k)]^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle [\zeta(t_k)]^2 \rangle = 0, \quad (3.16)$$

где  $\langle \rangle$  означает усреднение по реализациям. Здесь учтено, что операции дифференцирования и усреднения в данном случае являются коммутативными, и что все усредненные характеристики стационарного в узком смысле процесса являются постоянными величинами, в том числе его дисперсия не зависит от времени  $\langle [\zeta(t_k)]^2 \rangle = const$ .

Реализации стационарного случайного процесса  $\zeta(t)$ , показанные на рис. 3.3, можно интерпретировать, как изменения со временем проекции места нахождения блуждающей «точки» на ось  $X$  (рис. 3.2 и 3.3), т.е.  $x(t) = \zeta(t)$ .

Однако даже при статистической независимости случайных величин  $\zeta(tk) = \zeta_k$  и  $\zeta'(tk) = \zeta'_k$  некая связь между ПРВ  $\rho(\zeta_k)$  и ПРВ  $\rho(\zeta'_k)$  существует. Это вытекает из известной процедуры получения ПРВ производной  $\rho(\zeta'_k)$  при известной двухмерной ПРВ случайного стационарного процесса (смотрите рис. 3.3) [45, 46]

$$\rho(\xi_i, \xi_j) = \rho(\xi_i, t_i; \xi_j, t_j). \quad (3.17)$$

Для этого в выражении (3.17) необходимо сделать замену переменных

$$\xi_i = \xi_k - \frac{\tau}{2} \xi'_k, \quad \xi_j = \xi_k + \frac{\tau}{2} \xi'_k, \quad t_i = t_k - \frac{\tau}{2}, \quad t_j = t_k + \frac{\tau}{2}, \quad (3.18)$$

где

$$\tau = t_j - t_i; \quad t_k = \frac{t_j + t_i}{2}$$

с якобианом преобразования  $[J] = \tau$ . В результате из ПРВ (3.17) получим

$$\rho_2(\xi_k, \xi'_k) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \tau \rho_2\left(\xi_k - \frac{\tau}{2} \xi'_k, t_k - \frac{\tau}{2}; \xi_k + \frac{\tau}{2} \xi'_k, t_k + \frac{\tau}{2}\right). \quad (3.19)$$

Далее, интегрируя полученное выражение по  $\xi_k$ , найдем искомую ПРВ производной исходного процесса в сечении  $t_k$  [45, 46]:

$$\rho(\xi'_k) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\xi_k, \xi'_k) d\xi_k. \quad (3.20)$$

Формальная процедура (3.17) – (3.20) позволяет решить задачу определения ПРВ  $\rho_1(\xi')$  при известной двухмерной ПРВ (3.17). Однако двухмерные ПРВ определены для очень ограниченного класса случайных процессов. Поэтому необходимо рассмотреть возможность получения ПРВ  $\rho(\xi')$  при известной одномерной ПРВ  $\rho(\xi)$ .

Для решения поставленной задачи воспользуемся следующими свойствами случайных процессов:

1. Двухмерная ПРВ любого случайного процесса может быть представлена в виде [45, 46]

$$\rho(\xi_i, t_i; \xi_j, t_j) = \rho(\xi_i, t_i) \rho(\xi_j, t_j / \xi_i, t_i), \quad (3.21)$$

где  $\rho(\xi_j, t_j / \xi_i, t_i)$  – условная ПРВ.

2. Для стационарного в узком смысле случайного процесса справедливо тождество [45, 46]

$$\rho(\xi_i, t_i) = \rho(\xi_j, t_j). \quad (3.22)$$

3. Условная ПРВ случайного стационарного процесса при  $t_i \rightarrow t_j$  вырождается в дельта-функцию [46]

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \rho(\xi_i, t_i / \xi_j, t_j) = \delta(\xi_i - \xi_j). \quad (3.23)$$



На основании вышеперечисленных свойств рассмотрим случайный процесс на участке  $] t_i = t_k - \tau/2; t_j = t_k + \tau/2 [$  при  $\tau \rightarrow 0$  посредством следующей формальной процедуры. Функции плотности распределения вероятности  $\rho(\xi_i) = \rho(\xi_i, t_i)$  и  $\rho(\xi_j) = \rho(\xi_j, t_j)$  всегда можно представить в виде произведения двух функций

$$\begin{aligned}\rho(\xi_i) &= \varphi(\xi_i) \varphi(\xi_i) = \varphi^2(\xi_i), \\ \rho(\xi_j) &= \varphi(\xi_j) \varphi(\xi_j) = \varphi^2(\xi_j),\end{aligned}\tag{3.24}$$

где  $\varphi(\xi_i)$  – плотность амплитуды вероятности (ПАВ) случайной величины  $\xi_i$  в сечении  $t_i$ .

Для стационарного случайного процесса справедливо тождество

$$\varphi(\xi_i) = \varphi(\xi_j),\tag{3.25}$$

в чем легко убедиться, взяв квадратный корень от обеих частей тождества (3.22). Тогда, согласно (3.24), получим (3.25). Отметим, что тождество (3.25) приближенно справедливо и для большинства нестационарных случайных процессов при  $\tau \rightarrow 0$ , т. е.

$$\varphi(\xi_i, t_i) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \varphi(\xi_j, t_j = t_i - \tau).\tag{3.26}$$

При выполнении условия (3.25) выражение (3.21) может быть представлено в симметричном виде

$$\rho(\xi_i, \xi_j) = \varphi(\xi_i) \rho(\xi_j / \xi_i) \varphi(\xi_j),\tag{3.27}$$

где  $\rho(\xi_j / \xi_i)$  – условная ПРВ, или в развернутом виде

$$\begin{aligned}\rho\left[\xi_i, t_i = t_k - \frac{\tau}{2}; \xi_j, t_j = t_k + \frac{\tau}{2}\right] &= \\ = \varphi\left[\xi_i, t_j = t_k - \frac{\tau}{2}\right] \rho\left[\xi_j, t_j = t_k + \frac{\tau}{2} / \xi_i, t_i = t_k - \frac{\tau}{2}\right] \varphi\left[\xi_j, t_i = t_k + \frac{\tau}{2}\right].\end{aligned}\tag{3.28}$$

Устремим в (3.28)  $\tau$  к нулю, но таким образом, чтобы интервал  $\tau$  равномерно слева и справа стягивался в момент времени  $t_k = (t_j - t_i)/2$ , тогда с учетом (3.23) из (3.27) получим

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \rho(\xi_i, \xi_j) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \left\{ \varphi(\xi_i) \rho(\xi_j / \xi_i) \varphi(\xi_j) \right\} = \varphi(\xi_{ik}) \delta(\xi_{ik} - \xi_{ik}) \varphi(\xi_{jk}),\tag{3.29}$$

где  $\xi_{ik}$  – результат стремления случайной величины  $\xi(t_i)$  к случайной величине  $\xi(t_k)$  слева;  $\xi_{jk}$  – результат стремления случайной величины  $\xi(t_j)$  к случайной величине  $\xi(t_k)$  справа.

Проинтегрировав обе части выражения (3.29) по  $\xi_{ik}$  и  $\xi_{jk}$ , получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi_{ik}) \delta(\xi_{jk} - \xi_{ik}) \varphi(\xi_{jk}) d\xi_{ik} d\xi_{jk} = 1.\tag{3.30}$$

Выражение (3.30) является формальным математическим тождеством из теории обобщенных функций, учитывающим свойства дельта-функции ( $\delta$ -функции). Для того, чтобы

наполнить выражение (3.30) физическим содержанием, необходимо задать конкретный вид  $\delta$ -функции.

Определим вид  $\delta$ -функции для марковского случайного процесса.

Рассмотрим непрерывный случайный марковский процесс, для которого справедливо уравнение Эйнштейна - Фоккера [15, 46]

$$\frac{\partial \rho(\xi_j / \xi_i)}{\partial t} = B \frac{\partial^2 \rho(\xi_j / \xi_i)}{\partial \xi^2}, \quad (3.31)$$

где  $B$  – коэффициент диффузии.

Это дифференциальное уравнение параболического типа имеет три решения, одно из которых может быть представлено в виде [15, 46]

$$\rho(\xi_j, t_j / \xi_i, t_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{iq(\xi_j - \xi_i) - q^2 B(t_j - t_i)\} dq, \quad (3.32)$$

где  $q$  – обобщенный параметр.

При  $t_j - t_i = \tau \rightarrow 0$  из (3.32) получим одно из определений  $\delta$ -функции

$$\lim_{\tau \rightarrow \pm 0} \rho(\xi_i / \xi_j) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{iq(\xi_{jk} - \xi_{ik})\} dq = \delta(\xi_j - \xi_i), \quad (3.33)$$

*Поскольку данный результат получен для предельного случая  $\tau \rightarrow 0$ , то не исключено, что  $\delta$ -функция (3.33) может соответствовать не только марковскому случайному процессу, но и многим другим стационарным случайным процессам.*

Подставив полученную  $\delta$ -функцию (3.33) в выражение (3.30), получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi_{ik}) \left[ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{iq(\xi_{jk} - \xi_{ik})\} dq \right] \varphi(\xi_{jk}) d\xi_{ik} d\xi_{jk} = 1 \quad (3.34)$$

Поменяв в (3.34) порядок интегрирования, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi_{ik}) \exp\{-iq\xi_{ik}\} d\xi_{ik} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi_{jk}) \exp\{iq\xi_{jk}\} d\xi_{jk} \right] dq = 1. \quad (3.35)$$

Учтем, что, согласно (3.25), для стационарного случайного процесса выполняется условие  $\varphi(\xi_{ik}) = \varphi(\xi_{jk})$ , а так же из свойств  $\delta$ -функции при  $\tau = 0$  следует, что  $\xi_{ik} = \xi_{jk} = \xi_k$ . Поэтому выражение (3.35) принимает вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q) \varphi^*(q) dq = 1, \quad (3.36)$$

где

$$\varphi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi_k) \exp\{-iq\xi_k\} d\xi_k, \quad (3.37)$$

$$\varphi^*(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi_k) \exp\{iq\xi_k\} d\xi_k. \quad (3.38)$$

Подынтегральное выражение  $\varphi(q)\varphi^*(q)$  в интеграле (3.36) отвечает всем требованиям ПРВ  $\rho(q)$  случайной величины  $q$ :

$$\rho(q) = \varphi(q)\varphi^*(q) = |\varphi(q)|^2. \quad (3.39)$$

Выясним теперь, что представляет собой случайная величина  $q$ . Для этого вернемся к рассмотрению выражения (3.32). Результат интегрирования в правой части этого выражения не зависит от величины  $q$ . Поэтому ее можно рассматривать как некую обобщенную частоту. Однако физическая постановка задачи и формализм математической записи выражения (3.32) накладывают на величину  $q$  следующие ограничения:

1)  $q$  должна быть случайной величиной.

2) величина  $q$  должна характеризовать случайный процесс в исследуемом интервале  $]t_i = t_k - \tau; t_j = t_k + \tau[$  (смотрите рис. 3.3) при  $\tau \rightarrow 0$ ;

3) величина  $q$ , согласно математической записи правой части выражения (3.32), должна принадлежать множеству действительных чисел ( $q \in R'$ ), имеющему мощность континуума, т. е.  $q$  должна иметь возможность принимать любое значение из диапазона  $]-\infty, \infty[$ ;

Всем трем требованиям удовлетворяют любая из следующих случайных величин, связанных со случайным процессом на исследуемом временном интервале  $\tau$ :

$$\xi'_i = \frac{\partial \xi_k}{\partial t}, \quad \xi''_i = \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial t^2}, \quad \dots, \quad \xi^{(n)}_i = \frac{\partial^n \xi_k}{\partial t^n}. \quad (3.40)$$

Однако эти случайные величины характеризуют процесс не в равной степени. Рассмотрим одну из реализаций исследуемого процесса. Функция  $\xi(t)$  (рис. 3.3) в интервале  $\tau = t_j - t_i$  при  $\tau < \tau_{\text{кор}}$  (где  $\tau_{\text{кор}}$  – интервал корреляции случайного процесса) может быть разложена в ряд Тейлора-Маклорена

$$\xi(t_j) = \xi(t_i) + \xi'(t_i)\tau + \frac{\xi''(t_i)}{2}\tau^2 + \dots + \frac{\xi^{(n)}(t_i)}{n!}\tau^n + \dots \quad (3.41)$$

Запишем выражение (3.41) в следующем виде

$$\frac{\xi_j - \xi_i}{\tau} = \xi'_i + \frac{\xi''_i}{2!}\tau + \dots + \frac{\xi^{(n)}_i}{n!}\tau^{n-1} + \dots \quad (3.42)$$

где  $\xi(t_i) = \xi_i$ ,  $\xi(t_j) = \xi_j$ .

Так же как в (3.33), устремим  $\tau$  к нулю, при этом (3.42) сводится к тождеству

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\xi_j - \xi_i}{\tau} = \xi'_k \quad (3.43)$$

где  $\xi_k = \xi(t_k)$  (смотрите рис. 3.3).

Таким образом, единственной случайной величиной, удовлетворяющей всем вышеперечисленным требованиям на исследуемом временном интервале  $[t_i = t_k - \tau/2; t_j = t_k + \tau/2]$ , при  $\tau \rightarrow 0$ , является первая производная исходного случайного процесса  $\xi'_k$  в сечении  $t_k$ . Следовательно, остается положить, что случайная величина  $q$  в выражениях (3.32) – (3.39) линейно связана только с  $\xi'_k$ , т. е.

$$q = \frac{\xi'_k}{\eta}, \quad (3.44)$$

где  $1/\eta$  – коэффициент пропорциональности.

Подставляя (3.44) в (3.36) – (3.39), получим следующую искомую процедуру получения ПРВ производной  $\rho(\xi'_k)$  случайного стационарного марковского (возможно и другого) процесса  $\xi(t)$  в сечении  $t_k$  при известной одномерной ПРВ  $\rho(\xi_k)$  в том же сечении:

1. Заданная одномерная ПРВ  $\rho(\xi)$  представляется в виде произведения двух плотностей амплитуд вероятности (ПАВ)  $\varphi(\xi)$ :

$$\rho(\xi) = \varphi(\xi)\varphi(\xi). \quad (3.45)$$

2. Осуществляются два преобразования Фурье

$$\varphi(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \exp\{i\xi'\xi/\eta\} d\xi, \quad (3.46)$$

$$\varphi^*(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \exp\{-i\xi'\xi/\eta\} d\xi. \quad (3.47)$$

3. Окончательно для произвольного сечения случайного стационарного марковского процесса получим искомую ПРВ производной

$$\rho(\xi') = \varphi(\xi')\varphi^*(\xi') = |\varphi(\xi')|^2. \quad (3.48)$$

Еще раз отметим, что процедура (3.45) – (3.48) может быть применима, не только к стационарным марковским процессам, но и ко многим другим стационарным случайным процессам, для которых при  $\tau \rightarrow 0$   $\delta$ -функция в (3.30) принимает вид (3.33).

Для выяснения физического смысла коэффициента пропорциональности  $1/\eta$  воспользуемся сравнением с известными результатами. Данный подход небезупречен с точки зрения ма-

тематической строгости, но позволяет достаточно эффективно получить конкретный, практически важный результат.

Рассмотрим стационарный гауссовский случайный процесс  $\zeta(t)$ . При этом в каждом сечении этого процесса случайная величина  $\xi$  распределена по гауссовому закону:

$$\rho(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\xi^2}} \exp\left\{-\frac{(\xi - a_\xi)^2}{2\sigma_\xi^2}\right\}, \quad (3.49)$$

где  $\sigma_\xi^2$  и  $a_\xi$  – дисперсия и математическое ожидание данного процесса  $\zeta(t)$ .

Осуществляя с ПРВ (3.49) последовательность операций (3.45) – (3.48), получим ПРВ производной рассматриваемого случайного процесса:

$$\rho(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi[\eta/2\sigma_\xi]^2}} \exp\left\{-\frac{\xi'^2}{2[\eta/2\sigma_\xi]^2}\right\}, \quad (3.50)$$

С другой стороны, с помощью известной процедуры (17) – (20) для аналогичного случая получим [45, 46]

$$\rho(\xi') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\xi'}^2}} \exp\left\{-\frac{\xi'^2}{2\sigma_{\xi'}^2}\right\}, \quad (3.51)$$

где  $\sigma_{\xi'} = \sigma_\xi/\tau_{кор}$ ,  $\tau_{кор}$  – интервал корреляции исходного, случайного процесса  $\zeta(t)$ .

Сравнивая выражения (3.50) и (3.51), находим, что при

$$\eta = \frac{2\sigma_\xi^2}{\tau_{кор}} \quad (3.52)$$

эти ПРВ полностью совпадают.

*Выражение (3.52) получено для гауссовского случайного процесса, но среднеквадратическое отклонение  $\sigma_\xi$  и интервал корреляции  $\tau_{кор}$  – это основные характеристики любого стационарного случайного процесса. Все остальные начальные и центральные моменты в случае негауссовского распределения случайной величины  $\zeta(t)$  дадут малый (незначительный) вклад в выражение (3.52); поэтому с высокой степенью достоверности можно утверждать, что выражение (3.52) применимо для большого класса стационарных случайных процессов.*

Необходимо отметить, что в статистической физике и квантовой механике для перехода от координатного представления функции состояния элементарной частицы к ее импульсному представлению применяется формальная процедура, практически полностью аналогичная процедуре (3.45) – (3.48). Различие заключается только в определении коэффициента пропорциональности  $1/\eta$ .

В квантовой механике хорошо известно, что если проекция на ось  $x$  положения свободной элементарной частицы (например, электрона) описывается гауссовым распределением [35]

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right\}, \quad (3.53)$$

где  $\sigma_x$  – среднеквадратичное отклонение проекции положения элементарной частицы на ось  $x$  в окрестности среднего значения (т.е. «центра» системы), то в результате операций, аналогичных операциям (3.45) – (3.48), получается, что ПРВ составляющей импульса  $p_x$  элементарной частицы тоже гауссова [35]

$$\rho(p) = |\psi(p_x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{p_x}^2}} \exp\left\{-\frac{p_x^2}{2\sigma_{p_x}^2}\right\} \quad (3.54)$$

со среднеквадратичным отклонением

$$\sigma_{p_x} = \frac{\hbar}{2\sigma_x}, \quad (3.55)$$

где  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж/Гц – редуцированная постоянная Планка (или постоянная Дирака), которая связана с постоянной Планка  $h = 6,62607015 \cdot 10^{-34}$  Дж/Гц соотношением  $\hbar = h/2\pi$ .

Если теперь учесть, что составляющая импульса элементарной частицы (например, электрона)  $p_x$  равна

$$p_x = m_e \frac{dx}{dt} = m_e x', \quad (3.56)$$

где  $m_e$  – масса покоя электрона, то ПРВ (3.54) с учетом (3.55) принимает вид

$$\rho(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi[\hbar/(m_e 2\sigma_x)]^2}} \exp\left\{-\frac{x'^2}{2[\hbar/(m_e 2\sigma_x)]^2}\right\}. \quad (3.57)$$

Сравнивая (3.50) и (3.57) с учетом (3.52),  $\zeta' = x'$  и  $\sigma_{\zeta} = \sigma_x$ , обнаруживаем, что для рассматриваемого случая

$$\eta = \frac{2\sigma_x^2}{\tau_{ex}} = \frac{\hbar}{m_e}, \quad (3.58)$$

где

$$\tau_{ex} = \frac{2m_e\sigma_x^2}{\hbar} = \frac{2 \cdot 0,91 \cdot 10^{-30}}{1,055 \cdot 10^{-34}} \cdot \sigma_x^2 = 1,73 \cdot 10^4 \sigma_x^2 \quad (3.59)$$

– интервал корреляции стационарного случайного процесса, который является результатом проекции хаотического движения «точки» (электрона) на ось  $x$  возле условного неподвижного «центра» системы (смотрите рис. 3.1 и 3.2).

Из выражения (3.58) следует, что постоянная Планка это не некая фундаментальная константа, а величина, выражаемая через основные усредненные параметры стационарного случайного процесса

$$\hbar = \frac{2\sigma_{cx}^2 m}{\tau_{cx}}, \quad (3.60)$$

где в общем случае:

$\sigma_{cx}$  – среднеквадратичное отклонение проекции хаотически движущейся частицы («точки») на ось  $x$  в окрестности среднего значения (т.е. «центра» системы);

$\tau_{cx}$  – интервал корреляции данного стационарного случайного процесса;

$m$  – масса частицы («точки»).

Для многих приложений более важно не само выражение (3.60), а связанное с ним соотношение (3.52), которое в общем случае удобно представить в следующем виде

$$\eta_{\text{ч}} = \frac{2\sigma_{cx}^2}{\tau_{cx}} = \frac{\hbar}{m}, \text{ с размерностью (м}^2/\text{с)}. \quad (3.61)$$

Отметим следующие промежуточные выводы:

1. Квантово-механический переход от координатного представления к импульсному применим не только к процессам мира элементарных частиц, а к любым случайным стационарным марковским (и возможно многим другим) процессам, как в микромире, так и в макромире. Например, ветка дерева, постоянно хаотически колеблющаяся возле среднего положения (условного «центра») под действием быстро меняющихся направлений порывов ветра, ведет себя аналогично поведению элементарной частицы в «потенциальной яме». Колебания ветки также имеет дискретный (квантовый) набор усредненных состояний в зависимости от интенсивности порывов ветра. При слабых порывах ветра ветка в основном колеблется возле условного «центра», при этом положение ее конца может быть описано гауссовым распределением. При более интенсивных порывах ветра конец ветки в среднем вращается по кругу; при еще больших порывах ветра ее конец в основном описывает восьмерку, и т.д. В зависимости от силы ветра конец ветки может в среднем описывать дискретный набор фигур Лиссажу. Другими словами, квантово-механический формализм не является эксклюзивной особенностью микромира, он также применим и к статистическому описанию многих хаотических процессов макромира.

2. Алгоритм (3.45) – (3.48) перехода от координатного представления (т.е. от ПРВ  $\rho(\xi)$ ) к импульсному (т.е. к ПРВ  $\rho(m\xi')$ ) и обратно получается при конкретном виде  $\delta$ -функции (3.33). Интересно проанализировать, что получится при других видах  $\delta$ -функции?

3. На основании вышеизложенного можно получить ПРВ  $\rho(\xi'')$  второй производной исходного, по крайней мере дважды дифференцируемого, случайного процесса. Для этого в качестве случайного процесса следует рассматривать не сам процесс  $\xi(t)$ , а его первую производную  $\xi'(t) = \partial\xi(t)/\partial t$ . Тогда распределение второй производной можно определить посредством той же процедуры (3.45) – (3.48), только при этом вместо  $\rho(\xi)$  в (3.45) – (3.48) необходимо подставить уже  $\rho(\xi')$ .

Аналогично может быть получена ПРВ  $\rho(\xi_i^{(n)})$  любой производной  $n$  раз дифференцируемого случайного стационарного процесса с помощью следующей рекуррентной процедуры:

$$\rho(\xi^{(n-1)}) = \varphi(\xi^{(n-1)})\varphi(\xi^{(n-1)}); \quad (3.62)$$

$$\varphi(\xi^{(n)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi^{(n-1)}) \exp\left\{-\frac{i\xi^{(n)}\xi^{(n-1)}}{\eta_n}\right\} d\xi^{(n-1)}; \quad (3.63)$$

$$\varphi^*(\xi^{(n)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi^{(n-1)}) \exp\left\{\frac{i\xi^{(n)}\xi^{(n-1)}}{\eta_n}\right\} d\xi^{(n-1)}; \quad (3.64)$$

$$\rho(\xi^{(n)}) = \varphi(\xi^{(n)})\varphi^*(\xi^{(n)}),$$

где

$$\eta_n = \frac{2\sigma_{\xi^{(n-1)}}^2}{\tau_{кор \xi^{(n-1)}}}, \quad (3.65)$$

$\sigma_{\xi^{(n-1)}}^2, \tau_{кор \xi^{(n-1)}}$  – дисперсия и интервал корреляции  $n - 1$  раз дифференцируемого случайного стационарного процесса.

4. Процедура (3.45) – (3.48) полностью аналогичная квантово-механической процедуре перехода от координатного представления квантовой системы к ее импульсному представлению, получена здесь на основании исследования реализаций обычного случайного стационарного процесса, т.е. без привлечения феноменологических принципов корпускулярно-волнового дуализма.

Также нет необходимости использовать гипотезу де Бройля о существовании волн материи для описания дифракции атомов и электронов на кристалле. Отсылаем, например, к п. 2.9.6 в зеленой части Алгебры сигнатур [20], где получена формула для расчёта объемной диаграммы (индикатрисы) рассеяния частиц на многослойной периодической поверхности кристалла:



$$\rho(\nu, \omega / \vartheta, \gamma) = 4\pi n_1^2 k_\kappa \frac{\sin^2[\pi n_1 / 2 - k_\kappa \sqrt{(a^2 + b^2) / c^2} / 2]}{[(\pi n_1)^2 - k_\kappa^2 (a^2 + b^2) / c^2]^2} \cdot \left| \frac{c(a'_\nu b'_\omega - a'_\omega b'_\nu) + c'_\nu (b a'_\omega - a b'_\omega)}{c^2 \sqrt{a^2 + b^2}} \right|, \quad (3.66)$$

где

$$a = \cos \nu \cos \omega + \cos \vartheta \cos \gamma, \quad b = \cos \nu \sin \omega + \cos \vartheta \sin \gamma, \quad c = \sin \nu + \sin \vartheta, \quad a'_\nu = -\sin \nu \cos \omega, \\ b'_\nu = -\sin \nu \sin \omega, \quad c'_\nu = \cos \nu, \quad a'_\omega = -\cos \nu \sin \omega, \quad b'_\omega = \cos \nu \cos \omega$$

углы  $\vartheta$ ,  $\gamma$ ,  $\omega$  и  $\nu$  показаны на рис. 3.4

$$k_\kappa = r_{\text{кор}} n_1^{1/2} / (0,066 l_1),$$

здесь:

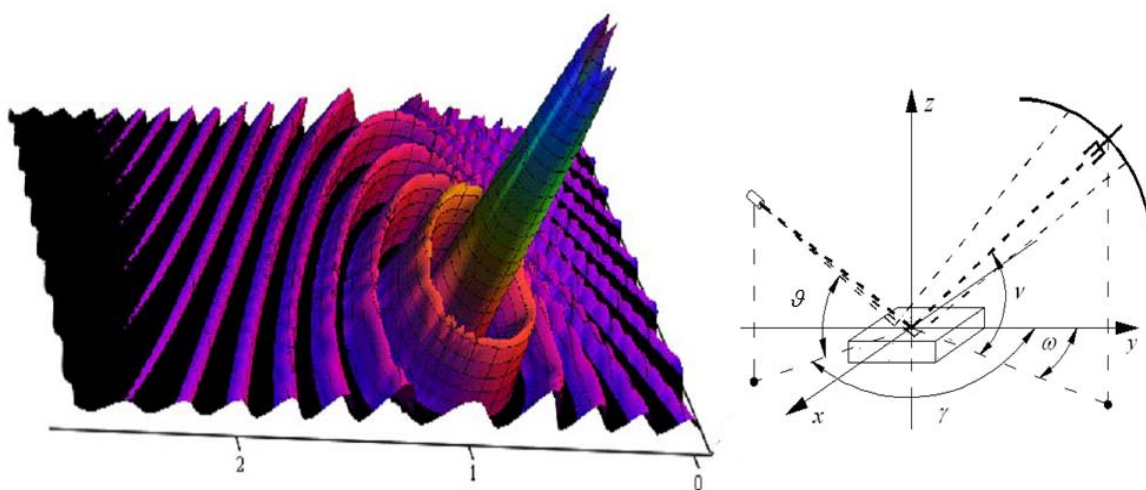
$l_1$  – толщина одного слоя, т. е. одной синусоидальной эквипотенциальной поверхности;

$n_1$  – число слоев, эффективно участвующих в рассеянии частиц;

$r_{\text{кор}}$  – усредненный радиус кривизны одной синусоидальной эквипотенциальной поверхности.

Для монокристалла у всех синусоидальных эквипотенциальных поверхностей  $r_{\text{кор}}$  один и тот же и по сути означает эффективное сечение рассеяния атомами кристалла электронов.

Результат расчёта по формуле (3.66) при угле падения частиц на поверхность кристалла  $\vartheta = 45^\circ$  и азимутальном угле  $\gamma = 0^\circ$ , а также при  $r_{\text{кор}} = 0,0000000001 = 10^{-10}$  см,  $l_1 = 10^{-9}$  см,  $n_1 = 1940$  (слоев), показан на рис. 3.4



**Рис. 3.4.** Диаграмма (индикатриса) рассеяния частиц (электронов) на 1940 слоях синусоидальных эквипотенциальных поверхностей кристалла, рассчитанная по формуле (3.66) с помощью программного обеспечения MathCad [10, 20]

### 3.4 Координатное представление усредненного импульса частицы

Содержание данного пункта хорошо известно специалистам в области квантовой механики, однако ввиду удобства ссылок и важности последующих выводов, приведенные ниже выкладки практически полностью переписаны из [13].

Напомним сначала о свойствах интеграла Дирихле, фигурирующего в теории интегралов Фурье и теории обобщенных функций [13]:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_a^b \varphi(\tau) \frac{\sin k\tau}{\tau} d\tau = \int_a^b \varphi(\tau) \delta(\tau) d\tau = \begin{cases} 0, & \text{если } a, b > 0 \text{ или } a, b < 0, \\ \varphi(0), & \text{если } a < 0, b > 0. \end{cases} \quad (3.67)$$

так как

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin k\tau}{\tau} = \delta(\tau) \quad (3.68)$$

– это одна из разновидностей  $\delta$ -функции.

Рассмотрим для сокращения выкладок случай одного измерения и докажем справедливость равенства [13]

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(p_x) p_x^n dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p_x) p_x^n \psi(p_x) dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx, \quad (3.69)$$

где  $n$  – целая, положительная степень;  $\overline{p_x^n}$  – усреднение по времени (или по реализациям) возведенной в степень  $n$  компоненты импульса

$$p_x^n = (m \cdot \partial x / \partial t)^n = (mx')^n; \quad (3.70)$$

$\psi(x)$  и  $\psi(p_x)$  – плотности амплитуды вероятности (ПАВ), которые вводятся как (3.24) [ $\psi(x) = \varphi(x)$ ] и (3.48) [ $\psi(p_x) = \varphi(p_x) = \varphi(mx')$ ], и согласно (3.46) и (3.47) связаны между собой (при условии стационарности случайного процесса) преобразованиями Фурье

$$\psi(p_x = mx') = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{e^{i \frac{x'x}{\eta_c}}}{(2\pi)^{1/2}} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{e^{i \frac{p_x x}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx; \quad (3.71)$$

$$\psi^*(p_x = mx') = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{e^{-i \frac{x'x}{\eta_c}}}{(2\pi)^{1/2}} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{e^{-i \frac{p_x x}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx; \quad (3.72)$$

где параметр  $\eta_c$  определен соотношением (3.61)

$$\eta_c = \frac{2\sigma_{cx}^2}{\tau_{cx}} = \frac{\hbar}{m}. \quad (3.73)$$

Для доказательства утверждения (3.69), подставим в него вместо  $\psi(p_x)$  и  $\psi^*(p_x)$  их выражения через интегралы (3.71) и (3.72) [13]

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_i) \frac{e^{-i\frac{p_x x_i}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx_i p_x^n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_j) \frac{e^{i\frac{p_x x_j}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} dx_j \right] dp_x. \quad (3.74)$$

Непосредственной проверкой легко убедиться, что

$$p_x^n e^{i\frac{p_x x_j}{\hbar}} = \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^n e^{i\frac{p_x x_j}{\hbar}}. \quad (3.75)$$

Подставляя (3.75) в (3.74) получим

$$\overline{p_x^n} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_i) e^{-i\frac{p_x x_i}{\hbar}} dx_i \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_j) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^n e^{i\frac{p_x x_j}{\hbar}} dx_j \right] dp_x. \quad (3.76)$$

Проинтегрируем второй интеграл в подынтегральном выражении  $n$  раз по частям, причем будем предполагать, что  $\psi(x)$  и ее производные обращаются в нуль на границах интегрирования  $x = \pm \infty$ . Выполняя данные действия, найдем [13]

$$\overline{p_x^n} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_i) e^{-i\frac{p_x x_i}{\hbar}} dx_i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{p_x x_j}{\hbar}} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^n \psi(x_j) dx_j \right] dp_x \quad (3.77)$$

Переменим порядок интегрирования, и будем сначала интегрировать по  $p_x$  [13]

$$\overline{p_x^n} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x_i) dx_i \int_{-\infty}^{+\infty} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^n \psi(x_j) dx_j \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{p_x(x_j-x_i)}{\hbar}} dp_x. \quad (3.78)$$

Введем переменные  $\zeta = p_x / \hbar$ ,  $\tau = x_j - x_i$ . Выполняя в последнем интеграле в (3.78) интегрирование по  $\zeta$  в конечных пределах от  $-k$  до  $+k$ , а затем, переходя к пределу  $k \rightarrow \infty$ , данное выражение приводится к виду [13]

$$\begin{aligned} \overline{p_x^n} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] dx \cdot \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x+\tau) \frac{\sin k\tau}{\pi\tau} d\tau = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] dx \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x+\tau) \delta(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (3.79)$$

На основании свойств интеграла Дирихле (3.67), при  $a = -\infty$ ,  $b = +\infty$  и  $\psi(z) = \psi^*(x+z)$  имеем [13]

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) \right] \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi(x) dx, \quad (3.80)$$

таким образом, выражение (3.69) доказано [13].

Легко проверить, что выражение (3.80) может быть представлено в виде

$$\overline{p_x^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_l(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \psi_l^*(x) dx, \quad (3.81)$$

$$\text{где } \psi_t(x) = \varphi(x) \exp\{iut\}, \quad \psi_t^*(x) = \varphi(x) \exp\{-iut\} \quad (3.82)$$

здесь  $u$  – произвольное действительное число.

С помощью (3.70) и (3.73) аналогично можно получить

$$\overline{x'^n} = \overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_t(x) \left(-i\eta_u \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \psi_t^*(x) dx. \quad (3.83)$$

Обобщение на три измерения сводится к увеличению числа интегрирований [13].

### 3.5 Вывод уравнения Шредингера

Вернемся к рассмотрению усредненного действия хаотически блуждающей частицы («точки») (3.15)

$$\bar{S} = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(p_x) p_x^2 dp_x - \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) U(x) dx \right\} dt + \bar{E}t, \quad (3.84)$$

Представим действие (3.84) в координатном виде. Для этого выполним следующие операции:

1. Запишем ПРВ  $\rho(x)$  в виде произведения двух плотностей амплитуды вероятности (ПАВ)  $\psi(x)$ :

$$\rho(x) = \psi(x) \psi^*(x). \quad (3.85)$$

2. Воспользуемся координатным представлением усредненного импульса, возведенного в  $n$ -ю степень (3.80). В частности при  $n = 2$ , имеем

$$\overline{p_x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(p_x) p_x^2 dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi^*(x) dx. \quad (3.86)$$

3. Используя (3.86), представим усредненную кинетическую энергию «точки» (3.13) в виде

$$\bar{T} = \frac{1}{2m} \overline{p_x^2} = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(p_x) p_x^2 dp_x = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{\partial^2 \psi^*(x)}{\partial x^2} dx. \quad (3.87)$$

4. Усредненная потенциальная энергия «точки» (3.14) с учётом (3.85) принимает вид

$$\bar{U} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) U(x) \psi^*(x) dx, \quad (3.88)$$

5. Проверкой легко убедиться в том, что

$$E = \bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \psi(x) e^{iEt/\hbar} \frac{\partial \psi^*(x) e^{-iEt/\hbar}}{\partial t} dx = \text{const}. \quad (3.89)$$

6. Подставляя выражения (3.87), (3.88) и (3.89) в (3.84), получим запись усредненного действия хаотически блуждающей «точки» в координатном виде

$$\bar{S} = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) U(x) \psi(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \psi(x) e^{iEt/\hbar} \frac{\partial \psi(x) e^{-iEt/\hbar}}{\partial t} dx \right\} dt,$$

или

$$\bar{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - \psi(x) U(x) \psi(x) + i\hbar \psi(x) e^{iEt/\hbar} \frac{\partial \psi(x) e^{-iEt/\hbar}}{\partial t} \right) dx dt. \quad (3.90)$$

Если предположить, что амплитуда вероятности (т.е. волновая функция)  $\psi(x)$  меняется со временем [т.е.  $\psi(x,t)$ ], но таким образом, что в каждое мгновение она описывает стационарное состояние случайного процесса, то выражение (3.90) можно представить в виде:

$$\bar{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x,t) \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} - \psi(x,t)^2 U(x) + i\hbar \psi(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + E \psi(x,t)^2 \right) dx dt, \quad (3.91)$$

или

$$\bar{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x,t) \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \psi(x,t)^2 [E - U(x)] + i\hbar \psi(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \right) dx dt. \quad (3.92)$$

Условие экстремальности усредненного действия (3.92) требует обращения в ноль его первой вариации [51]

$$\delta \bar{S} = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x,t) \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \psi(x,t)^2 [E - U(x)] + i\hbar \psi(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \right) dx dt = 0. \quad (3.93)$$

Найдем экстремаль функционала (3.92), т. е. функцию  $\psi(x,t)$ , при которой усредненное действие (3.92) принимает экстремальное значение.

Сначала напомним, что экстремаль функционала вида

$$S = \int L \left( x, t, z, \frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial t}, \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 z}{\partial t^2}, \frac{\partial^2 z}{\partial t \partial x} \right) dx dt, \quad \text{где } z = \psi(x,t), \quad (3.94)$$

определяется уравнением Эйлера – Пуассона [51]

$$L_z - \frac{\partial}{\partial x} \{L_p\} - \frac{\partial}{\partial t} \{L_g\} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{L_r\} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \{L_t\} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} \{L_s\} = 0, \quad (3.95)$$

где  $L_z$  – производная лагранжиана  $L$  по  $z = \psi(x, t)$ ; (3.96)

$$L_p - \text{производная } L \text{ по } p = \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x};$$

$$L_g - \text{производная } L \text{ по } g = \frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t};$$

$$L_r - \text{производная } L \text{ по } r = \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2};$$

$$L_t - \text{производная } L \text{ по } t = \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2};$$

$$L_s - \text{производная } L \text{ по } s = \frac{\partial^2 z}{\partial t \partial x} = \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t \partial x};$$

при этом

$$\frac{\partial}{\partial x} \{L_p\} = L_{px} + L_{pz} \frac{\partial z}{\partial x} + L_{pp} \frac{\partial p}{\partial x} + L_{pg} \frac{\partial g}{\partial x} \quad (3.97)$$

– полная частная производная по  $x$ ;

$$\frac{\partial}{\partial t} \{L_g\} = L_{gt} + L_{gz} \frac{\partial z}{\partial t} + L_{gp} \frac{\partial p}{\partial t} + L_{gs} \frac{\partial g}{\partial t}$$

– полная частная производная по  $t$ ;

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \{L_r\} = \frac{\partial^2 L_r}{\partial x^2} + L_{rz} \frac{\partial z}{\partial x^2} + L_{rp} \frac{\partial p}{\partial x^2} + L_{rg} \frac{\partial g}{\partial x^2}$$

– полная вторая частная производная по  $x$ ;

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \{L_t\} = \frac{\partial^2 L_t}{\partial t^2} + L_{tz} \frac{\partial z}{\partial t^2} + L_{tp} \frac{\partial p}{\partial t^2} + L_{tg} \frac{\partial g}{\partial t^2}$$

– полная вторая частная производная по  $t$ ;

$$\frac{\partial^2}{\partial t \partial x} \{L_s\} = \frac{\partial^2 L_s}{\partial t \partial x} + L_{sz} \frac{\partial z}{\partial t \partial x} + L_{sp} \frac{\partial p}{\partial t \partial x} + L_{sg} \frac{\partial g}{\partial t \partial x}$$

– полная смешанная частная производная по  $t$  и  $x$ .

Для определения слагаемых, входящих в уравнение Эйлера – Пуассона (3.95) используем подынтегральное выражение из усредненного действия (3.92)

$$L = \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x, t) \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \psi(x, t)^2 [E - U(x)] + i\hbar \psi(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \quad (3.98)$$

В результате подстановки лагранжиана (3.98) в выражения (3.96) и (3.97), получим

$$\begin{aligned}
 L_z &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + 2\psi(x,t)[E - U(x)] + i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}; & \frac{\partial^2}{\partial t^2} \{L_t\} &= 0; \\
 \frac{\partial}{\partial x} \{L_p\} &= 0; & \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} \{L_s\} &= 0; \\
 \frac{\partial}{\partial t} \{L_g\} &= 2i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}; & \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{L_r\} &= 2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}.
 \end{aligned}
 \tag{3.99}$$

Подставляя выражения (3.99) в уравнение Эйлера – Пуассона (3.95), получим искомое уравнение для определения экстремали  $\psi(x,t)$  функционала усреднённого действия (3.92)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{3\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + 2[E - U(x)]\psi(x,t)
 \tag{3.100}$$

Обобщение на три измерения, сводятся к увеличению числа интегрирований, при этом вместо уравнения (3.100), получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,y,z,t)}{\partial t} = \frac{3\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial z^2} \right\} + 2[E - U(x,y,z)]\psi(x,y,z,t)
 \tag{3.101}$$

или в компактном виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{3\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r},t) + 2[E - U(\vec{r},t)]\psi(\vec{r},t)
 \tag{3.102}$$

где  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор с началом в «центре» исследуемого объекта ( $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ) (рис. 3.1)

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ – оператор Лапласа.}$$

Выведенное в этой работе уравнение (3.102) несколько отличается от привычного вида уравнения Шредингера (3.1)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r},t) + U(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)
 \tag{3.103}$$

Но в случае, когда волновая функция не зависит от времени [т.е. когда  $\psi(x,t) = \psi(x)$ ], уравнение (3.102) принимает вид

$$-\frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})
 \tag{3.104}$$

который практически полностью (с точностью до коэффициента  $3/2 = 1,5$ ) совпадает с уравнением Шредингера для аналогичного случая

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})
 \tag{3.105}$$

Кроме того, с учетом выражения (3.6) уравнение (3.102) можно представить в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{3\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + 2T(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (3.106)$$

Это уравнение еще более согласуется с уравнением Шредингера, но в данном случае потенциальная энергия частицы  $U(\mathbf{r}, t)$  заменена на ее удвоенную кинетическую энергию  $T(\mathbf{r}, t)$ .

Таким образом, в данной работе на основании детального анализа хаотического поведения частицы («точки»), блуждающей так, что ее полная механическая энергия  $E$  всегда остается постоянной ( $E = const$ ), выведены уравнения (3.102) и (3.104), которые практически полностью совпадают с соответствующими уравнениями Шредингера.

Теперь поделим полную механическую энергию  $E$  и потенциальную энергию  $U(\mathbf{r}, t)$  частицы («точки») на ее массу  $m$ :

$$\varepsilon = E/m \quad (3.107)$$

- назовем эту безмассовую величину «энергетичность»;

$$v(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t)/m \quad (3.108)$$

- назовем эту безмассовую величину «потенциальность».

С учетом (3.107) и (3.108) уравнения (3.102) и (3.104) можно представить в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{3\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + 2m[\varepsilon - v(\vec{r}, t)] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.109)$$

$$-\frac{3\hbar^2}{4m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + m[\varepsilon - v(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = 0$$

Поделим обе части этих уравнений на  $\hbar$

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{3\hbar}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + \frac{2m}{\hbar} [\varepsilon - v(\vec{r}, t)] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.110)$$

$$-\frac{3\hbar}{4m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{m}{\hbar} [\varepsilon - v(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.111)$$

Теперь учтем, что согласно (3.61)

$$\frac{\hbar}{m} = \eta_u \cdot \quad (3.112)$$

При этом уравнения (3.110) и (3.111) можно представить в виде

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{3}{2} \eta_u \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + \frac{2}{\eta_u} [\varepsilon - v(\vec{r}, t)] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.113)$$

$$-\frac{3}{4} \eta_u \nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{1}{\eta_u} [\varepsilon - v(\vec{r})] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.114)$$

где

$$\eta_u = \frac{2\sigma_{ur}^2}{\tau_{ur}} = \frac{\hbar}{m} \quad (3.115)$$



зависит только от усредненных характеристик исследуемого стационарного случайного процесса:

$$\sigma_{чр} = \frac{1}{3} \sqrt{\sigma_{чх}^2 + \sigma_{чy}^2 + \sigma_{чz}^2} \quad (3.116)$$

– среднеквадратичное отклонение хаотически движущейся частицы («точки») от условного «центра» (рис. 3.1);

$$\tau_{чр} = \frac{1}{3} (\tau_{чх} + \tau_{чy} + \tau_{чz}) \quad (3.117)$$

– усредненный интервал корреляции (точнее автокорреляции) рассматриваемого случайного процесса.

Усредненные величины  $\sigma_{чр}$  и  $\tau_{чр}$  носят геометрический характер и вполне поддаются эмпирической оценке, в отличие от массы частицы («точки»)  $m$ , которую во многих случаях вообще невозможно измерить.

Уравнения (3.113) и (3.114) будем называть обобщёнными уравнением Шредингера, т.к. они пригодны для описания наиболее вероятных состояний точечных объектов как микромира, так и макромира при условии стационарности рассматриваемого случайного процесса и постоянстве его полной механической энергии.

### 3.6 Заключение и выводы

В этой главе рассмотрен стационарный случайный процесс, связанный с хаотическим движением частицы в окрестности условно выделенного центра данной стохастической системы (рис. 3.1). На основании детального рассмотрения данного процесса получено уравнение (3.104) [или (3.114)] для экстремали усредненного функционала действия хаотически блуждающей частицы, которое практически совпало с време́не-независимым уравнением Шредингера (3.105).

Уравнение (3.114) одинаково хорошо описывает дискретные наборы усредненного поведения электрона в потенциальной яме, ядра в цитоплазме биологической клетки, центра эмбриональной массы в утробе матери, ядра в недрах планеты, мухи в банке и т. д. Все эти стабильные случайные процессы обладают возможностью перехода из одного стационарного состояния в другое с поглощением или выделением конкретной порции полной механической «энергитичности». Таким образом, вместе с выводом обобщённого уравнения Шредингера (3.114) мы приходим к осознанию того, что квантовые переходы присущи не только объектам атомного масштаба, но и проявляются на всех уровнях организации бытия.

Предложенный в данной работе подход позволил вывести основное уравнение нерелятивистской квантовой физики (3.114), исходя из принципов в корне отличающихся от идейных устоев копенгагенской интерпритации квантовой механики (например, в этой работе исследуемая блуждающая частица имеет хаотическую траекторию движения и конкретные размеры). Однако математический аппарат квантовой механики при этом практически не изменился, но его логические основания стали значительно более ясными.

Подобным образом могут быть получены все основные уравнения квантовой теории поля: уравнение Клена-Гордона, уравнения Дирака, уравнения Максвелла и т. д. Алгоритм их вывода аналогичен подходу, приведенному в данной работе:

- 1) записывается детерминистское действие системы;
- 2) данное действие усредняется;
- 3) все усредненные слагаемые в подынтегральном выражении усредненного действия представляются через плотности распределения вероятности  $\rho(x)$  и/или  $\rho(p_x)$ ;
- 4) производится перевод всех слагаемых лагранжиана усредненного действия в координатное представление или в импульсное представление;
- 5) определяется уравнение для экстремали получившегося функционала усредненного действия посредством методов вариационного исчисления.

Значимость приведенного здесь вывода обобщённых уравнений Шредингера (3.113) и (3.114) заключается в следующем:

- становится понятным, к каким явлениям микро- и макромира данное уравнение относится, каковы границы и условия его применения.

- отпала необходимость в привлечении «принципа неопределённости» Гейзенберга и представлений о «волнах материи» де Бройля, поскольку при выводе уравнений (3.113) и (3.114) получена процедура (3.45) – (3.48) полностью аналогичная переходу от координатного представления к импульсному, и наоборот, опираясь только на анализ свойств стационарного случайного процесса.

- отношение  $\hbar/m$  («редуцированная постоянная Планка» деленная на массу) определяется через дисперсию и интервал корреляции исследуемого стационарного случайного процесса (3.115). Поэтому обобщенные уравнения Шредингера (3.113) и (3.114) не содержат «массу» частицы  $m$ , и из-за которой приходится вводить дополнительную размерную константу – постоянную Планка  $\hbar$ . «Масса» является (по мнению автора) одной из самых «темных» размерных величин современной физики (см. п. 1.7.10 в [19] и гл. 7 в [20]). Несомненно, что в окончательной теории понятие «масса» должно отсутствовать, и данная работа – это один из шагов в

направлении искоренения этого понятия из научных представлений об окружающей Реальности.

- возвращаются к рассмотрению объем и траектория блуждающей частицы. Вместе с ними физика микромира вновь приобретает привычную логическую «почву под ногами».

Вспомним слова основателей копенгагенской интерпретации квантовой механики Нильса Бора [58]: «Мы все согласны с тем, что ваша теория безумна. Вопрос, который разделяет нас, состоит в том, достаточно ли она безумна, чтобы иметь шанс быть верной. Мое собственное ощущение, что она не достаточно безумна»; и Вернера Гейзенберга [57]: «Неужели возможно, чтобы природа была такой безумно запутанной?»

Однако мы надеемся, что, если эта работа будет тщательно проанализирована и принята научным сообществом, то это позволит не только вычислять вероятностные исходы сложных хаотических процессов как микромира, так и макромира, но и задумываться над внутренней сущью этих процессов. То есть теперь мы сможем «Думать и вычислять».

Сердечно благодарю американского математика Дэвида Рида за его творческий перевод этой главы на английский язык и плодотворные дискуссии. Так же выражаю благодарность к.ф.м.н В.А. Лукьянову за ценные замечания, высказанные им при подготовке данной главы.

Основные тезисы данной работы были впервые частично опубликованы в порядке обсуждения в 1990 г. в [9, 10], благодаря моим наставникам: д.т.н. А. А. Кузнецову и д.ф.м.н А. И. Козлову. Также отблагодарю д.ф.м.н. А. А. Рухадзе и д.ф.м.н. А. М. Игнатова за их решение опубликовать один из вариантов данной работы в журнале «Инженерная физика» № 3 за 2016 г. Нельзя не упомянуть американского математика Дэвида Рида, который при переводе данной статьи на английский язык, высказал много полезных замечаний.