Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, Статистический ансамбль и квантование термодинамики, *Матем. заметки*, 2002, том 71, выпуск 4, 558–566

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm367>

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: 54.197.130.99

26 апреля 2023 г., 17:50:04

УДК 517.928

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ И КВАНТОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ

В. П. Маслов

В статье приведен вывод уравнений для квантованной термодинамики исходя из ансамбля Гиббса, и получено такое представление этого нового уравнения, которое позволяет формально перейти к уравнениям БКШ.

Библиография: 5 названий.

В предыдущих работах автора [1], [2] для идеального газа были введены операторы свободной энергии для разных случаев ультравторичного (по “холостым”; по “холостым” и “парам”) и вторичного квантования. Операторы свободной энергии в [1], [2] были введены, исходя из тождеств для статистической суммы. Они зависели от “духов” – параметров, от которых в термодинамическом пределе не зависела асимптотика минимального собственного значения оператора свободной энергии, причем эта асимптотика совпадает с асимптотикой статистической суммы идеального газа. В данной статье дается обобщение введенного в [1], [2] оператора свободной энергии и рассматриваются системы со взаимодействием. При этом для квантования свободной энергии используется фундаментальное представление о статистическом ансамбле [3].

Рассмотрим сначала идеальный газ. Будем считать, что N частиц находятся на трехмерном торе $\mathbb{T}$, все три окружности которого равны L . Пространство состояний такой квантовой системы есть $L_2(\mathbb{T}^N)$. Оператор Гамильтона идеального газа имеет вид

$$\hat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j, \quad (1)$$

где $\Delta_j = \sum_{\alpha=1}^3 \partial^2 / \partial x_{j\alpha}^2$ – оператор Лапласа, $x_{j\alpha}$ – координаты j -й частицы на торе $\mathbb{T}$, $x_j = (x_{j1}, x_{j2}, x_{j3})$. Стационарное уравнение Шрёдингера, отвечающее гамильтониану (1):

$$\hat{H}_N \Psi(x_1, \dots, x_N) = E \Psi(x_1, \dots, x_N), \quad (2)$$

где $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ – функция из пространства $L_2(\mathbb{T}^N)$. Мы не считаем, что газ состоит из фермионов или бозонов, поэтому никаких условий симметрии или антисимметрии на функцию Ψ не накладывается (т.е. частицы различимы). Из решений уравнения (2) можно выбрать полную ортонормированную в $L_2(\mathbb{T}^N)$ систему функций

$$\Psi_{\{K\}}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{L^{3N/2}} e^{i \sum_{j=1}^N K_j x_j}, \quad (3)$$

где K_j – трехмерные векторы вида $K_j = \frac{2\pi}{L}(l_{j1}, l_{j2}, l_{j3})$, $l_{j\alpha}$ – целые числа, $K_j x_j = \sum_{\alpha=1}^3 K_{j\alpha} x_{j\alpha}$, $\{K\}$ – обозначение для набора векторов $K_1, K_2, \dots, K_N$. Соответствующее функции (3) собственное значение оператора (1) имеет вид

$$E_{\{K\}} = \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2 K_j^2}{2m}. \quad (4)$$

Удельная свободная энергия $F(\theta, n)$ [3] системы различных частиц с гамильтонианом $\hat{H}_N$ при температуре θ и плотности n определяется как термодинамический предел величины

$$-\frac{\theta}{N} \ln \left(\frac{1}{N!} \text{Sp} e^{-\hat{H}_N/\theta} \right) = \frac{F(\theta, L^3, N)}{N}. \quad (5)$$

Под *термодинамическим пределом* понимается предел при $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, $N/L^3 = n$ – постоянная величина, $F(\theta, L^3, N)$ называют [3] *свободной энергией* системы N частиц в объеме L^3 при температуре θ , асимптотика свободной энергии в термодинамическом пределе имеет вид $Nf(\theta, n) + o(N)$. Для идеального газа с учетом (4) из (5) получается, что главный член асимптотики свободной энергии имеет вид

$$-N\theta \ln \left(\frac{e}{n(2\pi)^3} \int dq e^{-\hbar^2 q^2/(2m\theta)} \right) = -N\theta \ln \left(\frac{e}{n(2\pi)^3} \left(\frac{2m\pi\theta}{\hbar^2} \right)^{3/2} \right), \quad (6)$$

где e – основание натурального логарифма, $q \in \mathbb{R}^3$.

Покажем теперь на примере идеального газа, что асимптотика выражения (5) совпадает с асимптотикой минимального собственного значения некоторого оператора. Рассмотрим статистический ансамбль [3] из K одинаковых систем N частиц на торе $\mathbb{T}$ с гамильтонианом (1) и будем считать, что эти K систем образуют одну систему: KN частиц на торе $\tilde{\mathbb{T}}$, все три окружности которого равны $\sqrt[3]{K}L$, с гамильтонианом $\hat{H}_{KN}$ вида (1), действующим в пространстве $L_2(\tilde{\mathbb{T}}^{KN})$. Из принципа термодинамической аддитивности [3] следует, что в термодинамическом пределе для любого значения K имеет место асимптотическое равенство

$$-\frac{\theta}{N} \ln \left(\frac{1}{N!} \text{Sp} e^{-\hat{H}_N/\theta} \right) \sim -\frac{\theta}{(KN)!} \ln(\text{Sp} e^{-\hat{H}_{KN}/\theta}). \quad (7)$$

Формула (6) в случае идеального газа позволяет убедиться в этом непосредственно. Рассмотрим $\text{Sp} e^{-\hat{H}_{KN}/\theta}$; в силу того, что $\hat{H}_{KN}$ имеет вид (1), только переменная x лежит на большом торе $\tilde{\mathbb{T}}$, собственные значения этого оператора имеют вид, аналогичный (4), и могут быть записаны в виде

$$\tilde{E}_{\{p\}} = \sum_{j=1}^N \sum_{l=1}^K \frac{\hbar^2 p_{jl}^2}{2m}, \quad (8)$$

где p_{jl} – трехмерные векторы вида $\frac{2\pi}{L\sqrt[3]{K}}(K_1, K_2, K_3)$, K_1, K_2, K_3 – целые числа. Поэтому далее

$$\text{Sp} e^{-\hat{H}_{KN}/\theta} = \left(\sum_{p_1} \sum_{p_2} \dots \sum_{p_N} e^{-\hbar^2/(2m\theta) \sum_{j=1}^N p_j^2} \right)^K. \quad (9)$$

Используя метод, аналогичный развитым в [1], [2], можно показать, что в термодинамическом пределе главный член асимптотики правой части равенства (9) совпадает с главным членом асимптотики выражения

$$K! K^N \sum_{\{N\}} \prod_{\{K\}} \left(e^{-\frac{E_{\{K\}}}{\theta} N_{\{K\}}} e^{N_{\{K\}}} e^{-N_{\{K\}} \ln N_{\{K\}}} \right), \quad (10)$$

где $E_{\{K\}}$ имеет вид (4), $\{K\}$ – введенные выше наборы векторов $K_1, \dots, K_N$, $\prod_{\{K\}}$ – произведение по всем таким наборам, $N_{\{K\}}$ – целое число, зависящее от $\{K\}$, $\{N\}$ – обозначение для набора всех таких чисел, $\sum_{\{N\}, K}$ – обозначение для суммы по всем наборам $\{N\}$ таким, что $\sum_{\{K\}} N_{\{K\}} = K$. Очевидно, что выражение (19) совпадает с выражением

$$K! K^N \text{Sp}_K(e^{-K \hat{A}/\theta}),$$

где $\hat{A}$ – вторично квантованный оператор в бозонном фоковском пространстве [4]:

$$\begin{aligned} \hat{A} = \sum_{\{K\}} \left(E_{\{K\}} \frac{\hat{N}(K_1, \dots, K_N)}{K} - \theta \frac{\hat{N}(K_1, \dots, K_N)}{K} \right. \\ \left. + \theta \frac{\hat{N}(K_1, \dots, K_N)}{K} \ln \hat{N}(K_1, \dots, K_N) \right), \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\hat{N}(K_1, \dots, K_N) = \hat{\psi}^+(K_1, \dots, K_N) \hat{\psi}^-(K_1, \dots, K_N),$$

$\hat{\psi}^+(K_1, \dots, K_N)$ и $\hat{\psi}^-(K_1, \dots, K_N)$ – операторы рождения и уничтожения [4] в фоковском пространстве, а Sp_K означает, что берется след ограниченного оператора на K -частичное подпространство пространства Фока. Все асимптотические равенства, написанные до сих пор, справедливы при любом K , поэтому мы можем рассмотреть предел $K \rightarrow \infty$.

Легко убедиться, аналогично тому, как это было сделано в [1], [2], что в этом пределе асимптотика $\text{Sp}_K(e^{-K \hat{A}/\theta})$ в главном члене совпадает с $e^{-K a/\theta}$, где a – минимальное собственное значение оператора $\hat{A}$ на K -частичном подпространстве. Из этого с учетом (7) и (9) следует, что свободная энергия идеального газа из N частиц на торе $\mathbb{T}$ с гамильтонианом (1) при температуре θ в термодинамическом пределе асимптотически эквивалентна минимальному собственному значению вторично квантованного оператора

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\theta, K} = \sum_{\{K\}} E_{\{E\}} \frac{\hat{N}(K_1, \dots, K_N)}{K} \\ + \theta \sum_{\{K\}} \frac{\hat{N}(K_1, \dots, K_N)}{K} \ln \left(\frac{\hat{N}(K_1, \dots, K_N)}{K} \right) - \theta + \theta N \ln N \end{aligned} \quad (12)$$

на K -частичном подпространстве при $K \rightarrow \infty$. Оператор (12) отличается от (11) на число, не зависящее от операторов $\hat{\psi}^{\pm}(K_1, \dots, K_N)$. Этот оператор является аналогом операторов свободной энергии, полученных в [1], [2]. При операторах $\hat{\psi}^{\pm}(K_1, \dots, K_N)$

стоит малый параметр $1/\sqrt{K}$, это позволяет строить асимптотику собственных значений оператора (12) методами, развитыми в [5]. Согласно [5] главный член асимптотики при $K \rightarrow \infty$ собственных значений оператора (12) совпадает с собственными значениями следующей системы уравнений:

$$\lambda \tilde{\Psi}(K_1, \dots, K_N) = \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2 K_j^2}{2m} \tilde{\Psi}(K_1, \dots, K_N) + \theta \ln(|\tilde{\Psi}(K_1, \dots, K_N)|^2) \tilde{\Psi}(K_1, \dots, K_N), \quad (13)$$

$$\sum_{K_1} \dots \sum_{K_N} |\tilde{\Psi}(K_1, \dots, K_N)|^2 = 1.$$

Перейдем в x -представление. Пусть $\{K\}_\alpha$ – некоторое упорядочивание наборов $\{K\}$, т.е. взаимно однозначное отображение натуральных чисел $\alpha = 1, 2, \dots$ и множества наборов векторов $K_1, \dots, K_N$. Введем функции

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \Psi_{\{K\}_\alpha}(x_1, \dots, x_N) |\tilde{\Psi}(K_{1\alpha}, \dots, K_{N\alpha})|, \quad (14)$$

где $\Psi_{\{K\}}(x_1, \dots, x_N)$ – функции (3). Очевидно, что функции (14) удовлетворяют системе уравнений

$$\lambda \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \hat{H}_N \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) + \theta \ln(\|\Psi_\alpha\|^2) \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N),$$

$$\sum_{\alpha=1}^{\infty} \|\Psi_\alpha\|^2 = 1, \quad (\Psi_\alpha, \Psi_\beta) = 0 \quad \text{при } \alpha \neq \beta, \quad (15)$$

где $\|\Psi_\alpha\|$ – норма функции $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N)$ в $L_2(\mathbb{T}^N)$, а $\hat{H}_N$ имеет вид (1). Будем теперь считать, что $\hat{H}_N$ – произвольный гамильтониан и нам известны его собственные значения и собственные функции $\mathcal{E}_n$, и $\Phi_n(x_1, \dots, x_M)$, $n = 1, 2, \dots$, образуют полную ортонормированную систему в $L_2(\mathbb{T}^N)$. В таком случае все решения системы (15) могут быть предъявлены. Например, уравнения (15) имеют решения вида $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \delta_{\alpha n} \Phi_n(x_1, \dots, x_N)$, $\lambda = \mathcal{E}_n$ (мы учитываем, что $a \ln a = 0$ при $a = 0$). Легко также убедиться, что существуют решения вида

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = a_1 \delta_{\alpha n_1} \Phi_{n_1}(x_1, \dots, x_N) + a_2 \delta_{\alpha n_2} \Phi_{n_2}(x_1, \dots, x_N),$$

$$\lambda = -\theta \ln(e^{-\mathcal{E}_{n_1}/\theta} + e^{-\mathcal{E}_{n_2}/\theta}),$$

где

$$a_{1,2} = \sqrt{\frac{e^{-\mathcal{E}_{n_1, n_2}/\theta}}{e^{-\mathcal{E}_{n_1}/\theta} + e^{-\mathcal{E}_{n_2}/\theta}}}.$$

Вообще, для любого $l \geq 1$ функции

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \sum_{s=1}^l a_s \delta_{\alpha n_s} \Phi_{n_s}(x_1, \dots, x_N), \quad (16)$$

где n_s – произвольный набор чисел $n_1 \neq n_2 \neq \dots \neq n_l$, являются решениями системы (15) с собственным значением

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{s=1}^l e^{-\mathcal{E}_{n_s}/\theta} \right) \quad (17)$$

при условии, что

$$a_s = \sqrt{e^{-\mathcal{E}_{n_s}/\theta} / \sum_{r=1}^l e^{-\mathcal{E}_{n_r}/\theta}}.$$

Формулы (16) и (17) распространяются и на случай бесконечного числа l . А именно, имеет место

УТВЕРЖДЕНИЕ. *Набор функций $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N)$ является решением системы уравнений (15) тогда и только тогда, когда этот набор имеет вид*

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = a_\alpha \Phi_{n_\alpha}(x_1, \dots, x_N) b_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots,$$

где n_α – взаимно однозначное отображение множества натуральных чисел на себя, b_α – коэффициенты, принимающие значения 0 и 1, a_α имеют вид

$$a_\alpha = \sqrt{e^{-\mathcal{E}_{n_\alpha}/\theta} / \sum_{\beta=1}^{\infty} b_\beta e^{-\mathcal{E}_{n_\beta}/\theta}}.$$

Соответствующее собственное значение есть

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{\alpha=1}^{\infty} b_\alpha e^{-\mathcal{E}_{n_\alpha}/\theta} \right). \quad (18)$$

Исследуем множество собственных значений (18). Так как $b_\alpha = 0$ или 1, $\theta > 0$, то выражение (18) тем меньше, чем больше в сумме слагаемых, отличных от 0. Очевидно, что минимальное из всех значений (18) есть

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\mathcal{E}_n/\theta} \right)$$

и совпадает со свободной энергией системы N частиц на торе $\mathbb{T}$ с гамильтонианом $\hat{H}_N$ при температуре θ [3]. Будем считать, что $\mathcal{E}_n \leq \mathcal{E}_{n+1}$. В этом случае ближайшим к самому нижнему значению λ будет $-\theta \ln(\sum_{n=2}^{\infty} e^{-\mathcal{E}_n/\theta})$, и т.д. Как было показано, среди собственных значений (18) содержатся все собственные значения $\mathcal{E}_n$ гамильтониана $\hat{H}_N$. Вообще, все собственные значения (18) разбиваются на классы следующим образом: при $\theta \rightarrow 0$ выражение (18) в зависимости от b_α сходится к какому-либо значению $\mathcal{E}_n$, λ , имеющие одинаковый предел при $\theta \rightarrow 0$, относятся к одному классу.

Итак, для произвольного гамильтониана $\hat{H}_N$ было показано, что минимальное собственное значение системы уравнений (15) совпадает со свободной энергией при температуре θ . Заметим, что то же самое справедливо в случае, когда рассматриваются бозоны или фермионы, т.е. система (15) и гамильтониан $\hat{H}_N$ рассматриваются только на симметричных или антисимметричных функциях. Таким образом, для случая идеального газа показано, что асимптотика свободной энергии совпадает с асимптотикой минимального собственного значения оператора (12). Естественно поэтому далее квантовать свободную энергию идеального газа следующим образом: собственными значениями свободной энергии идеального газа будем называть предел собственных значений оператора (12) при $K \rightarrow \infty$. Как было уже показано, этот предел совпадает

с собственными значениями λ системы уравнений (13). Ниже предъявляется оператор аналогичный (12) в случае, когда $\hat{H}_N$ произвольный, и статистический ансамбль ультравторично квантуется.

Рассмотрим теперь ультравторично квантованную систему N бозонов или фермионов на торе $\mathbb{T}$, которые образуют K пар “частица и статистический спин” и M пар “частица и частица” [1], [2], $K + 2M = N$. Состояние такой системы описывается функцией $\Phi_{K,M}(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; y_1, z_1; \dots; y_{2M-1}, y_{2M})$, которая симметрична относительно перестановок пар переменных x_i, s_i и x_j, s_j и симметрична относительно перестановок пар переменных $(y_{2\alpha-1}, y_{2\alpha})$ и $(y_{2\beta-1}, y_{2\beta})$. Кроме того, в бозонном случае $\Phi_{K,M}$ – симметричная, а в фермионном – антисимметричная функция N переменных $x_1, x_2, \dots, x_K, y_1, \dots, y_{2M}$ [1], [2]. Будем считать, что гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j + \sum_{j=1}^N \sum_{l=j+1}^N V(x_j - x_l), \quad (19)$$

хотя все дальнейшие рассуждения справедливы и в случае гамильтонианов более общего вида. Рассмотрим ансамбль из Z таких систем. Аналог оператора (12) в этом случае имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\theta,Z} = & \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_K=0}^{\infty} \frac{1}{Z} \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{K+2M} \\ & \times \hat{\psi}^+(x_1, s_1; x_2, s_2; \dots; x_K, s_K; x_{K+1}, x_{K+2}; \dots; x_{K+2M-1}, x_{K+2M}) \hat{H}_{K+2M} \\ & \times \hat{\psi}^-(x_1, s_1; x_2, s_2; \dots; x_K, s_K; x_{K+1}, x_{K+2}; \dots; x_{K+2M-1}, x_{K+2M}) \\ & + \theta \int \cdots \int dx_1 dy_1 \cdots dx_{K+2M} dy_{K+2M} \\ & \times r(x_1, \dots, x_{K+2M}; y_1, \dots, y_{K+2M}) (\ln r)(y_1, \dots, y_{K+2M}; x_1, \dots, x_{K+2M}) \\ & - \theta + \theta(K + 2M) \ln(K + 2M), \end{aligned} \quad (20)$$

где $\hat{\psi}^{\pm}(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M})$ – бозонные операторы рождения и уничтожения,

$$\begin{aligned} & r(x_1, \dots, x_{K+2M}; y_1, \dots, y_{K+2M}) \\ & = \frac{1}{Z} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_K=0}^{\infty} \hat{\psi}^+(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; x_{K+1}, x_{K+2}; \dots; x_{K+2M-1}, x_{K+2M}) \\ & \times \hat{\psi}^-(y_1, s_1; \dots; y_K, s_K; y_{K+1}, y_{K+2}; \dots; y_{K+2M-1}, y_{K+2M}). \end{aligned} \quad (21)$$

Выражение (20) можно рассматривать как операторнозначное ядро оператора $\hat{r}$ в $L_2(\mathbb{T}^{K+2M})$, $(\ln r)(x_1, \dots, x_{K+2M}; y_1, \dots, y_{K+2M})$ – обозначение для операторнозначного ядра оператора $\ln \hat{r}$ в $L_2(\mathbb{T}^{K+2M})$. Собственными значениями свободной энергии ультравторично квантованной системы при температуре θ будем называть предел собственных значений оператора (20) на Z -частичном подпространстве при $Z \rightarrow \infty$. Поскольку при операторах $\hat{\psi}^{\pm}$ в операторе $\hat{F}_{\theta,Z}$ стоит малый параметр $1/\sqrt{Z}$, то для нахождения предела собственных значений этого оператора при $Z \rightarrow \infty$ применимы методы, развитые в [5]. Согласно [5] этот предел совпадает с собственными значениями λ

следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_{K+2M} + \theta \ln \hat{\rho}) \Psi(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M}) \\ & = \lambda \Psi(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M}), \quad \text{Sp } \hat{\rho} = 1, \end{aligned} \quad (22)$$

где $\hat{\rho}$ – оператор в пространстве $L_2(\mathbb{T}^{K+2M})$, ядро которого имеет вид

$$\begin{aligned} & \rho(x_1, \dots, x_{K+2M}; y_1, \dots, y_{2M+K}) \\ & = \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_K=0}^{\infty} \Psi(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; x_{K+1}, x_{K+2}; \dots; x_{K+2M-1}, x_{K+2M}) \\ & \times \Psi^*(y_1, s_1; \dots; y_K, s_K; y_{K+1}, y_{K+2}; \dots; y_{K+2M-1}, y_{K+2M}). \end{aligned} \quad (23)$$

Система (22) согласно [1] является системой уравнений с унитарной нелинейностью, так как умножение решения Ψ на множитель $e^{i\varphi}$, $\varphi \in \mathbb{R}$, также дает решение (22) с тем же самым значением λ . Методы нахождения решений таких уравнений развиты в [1]. Запишем систему (22) в виде одного ультравторично квантованного уравнения.

В [1], [2] было введено пространство ультравторичного квантования $\mathcal{F}$, которое является частным случаем пространства Фока. Операторы рождения и уничтожения в $\mathcal{F}$ обозначаются $\hat{b}^+(x, s)$, $\hat{B}^+(y_1, y_2)$ и $\hat{b}^-(x, s)$, $\hat{B}^-(y_1, y_2)$. Кроме того, рассматриваются “обычное” бозонное или фермионное фоковское пространство $\mathcal{H}_B$ или $\mathcal{H}_F$, операторы рождения и уничтожения в этом пространстве обозначаются через $\hat{\psi}^+(x)$ и $\hat{\psi}^-(x)$. Каждому вектору $\Phi \in \mathcal{F}$ сопоставим вторично квантованный оператор $\hat{R}(\Phi)$ в пространстве $\mathcal{H}_{B,F}$:

$$\begin{aligned} \hat{R}(\Phi) = & \left\{ \sum_{K=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{K! M! (K+2M)!} \right. \\ & \times \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_K=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 dx'_1 \dots dx_K dx'_K dy_1 dy'_1 \dots dy_{2M} dy'_{2M} \\ & \times \hat{\psi}^+(y_1) \dots \hat{\psi}^+(y_{2M}) \hat{\psi}^+(x_1) \dots \hat{\psi}^+(x_K) \\ & \times \hat{\mathcal{P}}_{0B,F} \hat{\psi}^-(x'_K) \dots \hat{\psi}^-(x'_1) \hat{\psi}^-(y'_{2M}) \dots \hat{\psi}^-(y'_1) \\ & \times \left(\Phi, \hat{\hat{b}}^+(x_1, s_1) \dots \hat{\hat{b}}^+(x_K, s_K) \hat{\hat{B}}^+(y_1, y_2) \dots \hat{\hat{B}}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \right. \\ & \times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{\hat{b}}^+(x, s) \hat{\hat{b}}^-(x, s) - \iint dy dy' \hat{\hat{B}}^+(y, y') \hat{\hat{B}}^-(y, y') \right) \\ & \times \hat{\hat{B}}^-(y'_{2M-1}, y'_{2M}) \dots \hat{\hat{B}}^-(y'_1, y'_2) \hat{\hat{b}}^-(x'_K, s_K) \dots \\ & \left. \times \hat{\hat{b}}^-(x'_1, s_1) \Phi \right\} / (\Phi, \bar{\bar{E}}_{B,F} \Phi), \end{aligned} \quad (24)$$

где $\bar{\bar{E}}_{B,F}$ – введенные в [1], [2] ультравторично квантованные единичные операторы, $\hat{\mathcal{P}}_{0B,F}$ – оператор ортогонального проектирования на вакуумный вектор пространства $\mathcal{H}_{B,F}$, числа над операторами обозначают порядок их действия. Набору операторов

$\hat{H}_N, N = 0, 1, \dots$, вида (19) в работах [1], [2] сопоставлен ультравторично квантованный оператор $\widehat{\bar{H}}$. Кроме того, в этих работах предъявлен способ, с помощью которого любому вторично квантованному оператору сопоставляется ультравторично квантованный оператор. Будем обозначать через $\widehat{\bar{L}}(\Phi)$ ультравторично квантованный оператор, который согласно [1], [2] отвечает вторично квантованному оператору $\ln \hat{R}(\Phi)$. Имеет место

ТЕОРЕМА 1. Пусть вектор $\Phi \in \mathcal{F}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi = & \frac{1}{\sqrt{K!M!}} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_K=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 \cdots dx_{K+2M} \\ & \times \Psi(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; x_{K+1}, x_{K+2}; \dots; x_{K+2M-1}, x_{K+2M}) \\ & \times \hat{b}^+(x_1, s_1) \cdots \hat{b}^+(x_K, s_K) \hat{B}^+(x_{K+1}, x_{K+2}) \cdots \hat{B}^+(x_{K+2M-1}, x_{K+2M}) \Phi_0, \end{aligned} \quad (25)$$

где функция $\Psi(x_1, s_1; \dots; x_K, s_K; x_{K+1}, x_{K+2}; \dots; x_{K+2M-1}, x_{K+2M})$ удовлетворяет системе (22). Тогда Φ удовлетворяет уравнению

$$(\widehat{\bar{H}} + \theta \widehat{\bar{L}}(\Phi)) \Phi = \lambda \widehat{\bar{E}} \Phi. \quad (26)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО проводится непосредственно подстановкой вектора (25) в уравнение (26).

Рассмотрим на пространстве $\mathcal{F}$ функционал

$$\mathcal{E} = \frac{(\Phi, \widehat{\bar{H}} \Phi)}{(\Phi, \widehat{\bar{E}} \Phi)} \quad (27)$$

и будем искать экстремум данного функционала при дополнительных условиях

$$\overline{\bar{N}} \Phi = N \overline{\bar{E}} \Phi, \quad S = -\text{Sp}(\hat{R}(\Phi) \ln \hat{R}(\Phi)), \quad (28)$$

где $\overline{\bar{N}}$ – ультравторично квантованный оператор числа частиц [1], [2], N, S – фиксированные число частиц и энтропия системы. Уравнение экстремума функционала (27) при условиях (28) может быть приведено к виду (26), температура θ появляется как множитель Лагранжа при условии $S = \text{const}$, а экстремальное значение (27) есть $\varepsilon = \lambda + \theta S$. Таким образом, возможно проквантовать термодинамику еще одним эквивалентным способом: собственными значениями внутренней энергии системы при заданной энтропии S и числа частиц N будем называть экстремальные значения функционала (27) при условиях (28).

ТЕОРЕМА 2. Минимальное собственное значение внутренней энергии в термодинамическом пределе асимптотически совпадает с термодинамической внутренней энергией системы.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Минимальное собственное значение λ уравнения (26) совпадает со свободной энергией $F = -\theta \ln(\text{Sp } e^{-\hat{H}_N/\theta})$. В этом легко убедиться для эквивалентной системы (22) так же, как это было сделано для аналогичной системы уравнений (15). Умножая (26) на Φ , получим

$$\mathcal{E} = \frac{(\Phi, \hat{H}\Phi)}{(\Phi, \hat{E}\Phi)} = F - \theta \frac{(\Phi, \hat{L}(\Phi)\Phi)}{(\Phi, \hat{E}\Phi)}. \quad (29)$$

Используя методы, развитые в [1], [2], можно показать, что

$$\frac{(\Phi, \hat{L}(\Phi)\Phi)}{(\Phi, \hat{E}\Phi)} = -\text{Sp}(\hat{R}(\Phi) \ln \hat{R}(\Phi)) = S.$$

Поэтому из (29) для минимального собственного значения внутренней энтропии при фиксированной энтропии S получаем выражение $F - \theta S$, а это и есть термодинамическая внутренняя энергия.

В заключение отметим, что введенный способ квантования внутренней энергии удобен для построения асимптотик. Например, в пределе, когда коммутаторы между операторами $\hat{b}^-(x, s)$ и $\hat{b}^+(x', s')$, $\hat{B}^-(y_1, y_2)$ и $\hat{B}^-(y'_1, y'_2)$ малы, в функционалах (27) и (28) везде можно заменить операторы $\hat{b}^\pm$ и $\hat{B}^\pm$ на их символы. Минимум полученного таким образом символа внутренней энергии $\mathcal{E}$ при фиксированных значениях символов числа частиц и энтропии совпадают с полученным с помощью вариационного принципа в теории БКШ выражением для внутренней энергии.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Маслов В. П. Квантование термодинамики и ультравторичное квантование. НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”. Ижевск: УРСС, 2001.
- [2] Маслов В. П. О некоторых тождествах для проквантованной энтропии // ТМФ. 2001. Т. 129. № 3. С. 464–490.
- [3] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
- [4] Березин Ф. А. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986.
- [5] Маслов В. П., Шведов О. Ю. Метод комплексного роста. М.: УРСС, 2000.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Поступило
14.02.2002