Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. В. Коваль, Асимптотика по числу элементов статистического ансамбля в уравнениях квантовой термодинамики В.П. Маслова, *Матем. заметки*, 2003, том 73, выпуск 4, 631–633

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm627>

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: 54.162.127.20

26 апреля 2023 г., 15:44:20

АСИМПТОТИКА ПО ЧИСЛУ ЭЛЕМЕНТОВ СТАТИСТИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ В УРАВНЕНИЯХ КВАНТОВОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ В.П. МАСЛОВА

Г.В. Коваль

В данной работе на примере простой модели показано, что при построении асимптотик решений следует рассматривать не только периодические траектории возникающей классической Гамильтоновой системы уравнений, но и траектории, заполняющие инвариантные торы. В рассмотренной модельной задаче найдены инвариантные торы и показано, что отвечающий им канонический оператор является асимптотическим решением задачи.

В работах В.П. Маслова [1], [2], посвященных квантованию термодинамики, возникла следующая задача на собственные значения:

$$\sum_{\alpha=1}^m \left(\lambda_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} + \theta \hat{n}_{\alpha} \ln \left(\frac{\hat{n}_{\alpha}}{k} \right) \right) \Phi = f \Phi, \quad \Phi \neq 0, \quad (1)$$

$$\sum_{\alpha=1}^m \hat{n}_{\alpha} \Phi = k \Phi, \quad (2)$$

где $0 < \theta$ – действительный параметр, $0 \leq k$ – заданное целое число, Φ – вектор бозонного фockовского пространства $\mathcal{F}_B$ [3], порожденного вакуумным вектором Φ_0 и операторами рождения $\hat{b}_{\alpha}^{+}$ и уничтожения $\hat{b}_{\alpha}^{-}$, $\alpha = 1, \dots, m$, удовлетворяющими соотношениям

$$[\hat{b}_{\alpha}^{-}, \hat{b}_{\alpha'}^{+}] = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad [\hat{b}_{\alpha}^{\pm}, \hat{b}_{\alpha'}^{\pm}] = 0, \quad \hat{b}_{\alpha}^{-} \Phi_0 = 0;$$

кроме того, в формулах (1), (2) $\hat{n}_{\alpha}$ – следующие операторы в пространстве $\mathcal{F}_B$: $\hat{n}_{\alpha} = \hat{b}_{\alpha}^{+} \hat{b}_{\alpha}^{-}$. Собственные значения f согласно [1], [2] являются собственными значениями свободной энергии при температуре θ ансамбля из k одинаковых систем, каждая из которых имеет дискретный спектр энергии λ_{α} , $\alpha = 1, \dots, m$. Решения уравнения (1) с дополнительным условием (2) хорошо известны, они имеют вид

$$f_{\{n\}} = \sum_{\alpha=1}^m \left(\lambda_{\alpha} n_{\alpha} + \theta n_{\alpha} \ln \left(\frac{n_{\alpha}}{k} \right) \right), \quad \Phi_{\{n\}} = \prod_{\alpha=1}^m \frac{(\hat{b}_{\alpha}^{+})^{n_{\alpha}}}{\sqrt{n_{\alpha}!}} \Phi_0, \quad (3)$$

где $\{n\}$ обозначает набор целых чисел $0 \leq n_{\alpha}$, $\alpha = 1, \dots, m$, таких что

$$\sum_{\alpha=1}^m n_{\alpha} = k.$$

В пределе при $k \rightarrow \infty$ согласно [1], [2] из множества значений (3) можно выделить серии собственных значений (понятие серии см. в [4]). Каждая такая серия определяется набором целых чисел J , где J – подмножество множества $\{1, \dots, m\}$, а главный член асимптотики минимального значения f , принадлежащего серии, имеет вид

$$F_J = -k\theta \ln \left(\sum_{\alpha \in J} e^{-\lambda_{\alpha}/\theta} \right), \quad (4)$$

где через $\sum_{\alpha \in J}$ обозначена сумма по всем числам α , принадлежащим множеству J .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 02-01-1062.

Заметим теперь, что в уравнении (1) и условии (2) параметр k стоит таким образом, что для нахождения асимптотики решений при $k \rightarrow \infty$ применимы методы, развитые в [5]–[7]. При этом сериям, полученным в [1], [2], соответствуют периодические решения возникающей в квазиклассическом приближении системы уравнений Гамильтона. Рассмотрим представление [8], в котором элементам фазового пространства $\mathcal{F}_B$ соответствуют функции $\Psi(q_1, \dots, q_m) \in L_2(\mathbb{R}^m)$, а операторы $\hat{b}_\alpha^+$ и $\hat{b}_\alpha^-$ имеют вид

$$\hat{b}_\alpha^+ = \sqrt{\frac{k}{2}} \left(q_\alpha - \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \right), \quad \hat{b}_\alpha^- = \sqrt{\frac{k}{2}} \left(q_\alpha + \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \right).$$

В этом представлении уравнение (1) и дополнительное условие (2) принимают вид

$$\sum_{\alpha=1}^m \left(\lambda_\alpha \hat{n}_\alpha + \theta \left[\left[-\frac{1}{2k^2} \frac{\partial^2}{\partial q_\alpha^2} + \frac{q_\alpha^2}{2} - \frac{1}{2k} \right] \ln \left(\left[-\frac{1}{2k^2} \frac{\partial^2}{\partial q_\alpha^2} + \frac{q_\alpha^2}{2} - \frac{1}{2k} \right] \right) \right] \right) \Psi(q_1, \dots, q_m) = f \Psi(q_1, \dots, q_m), \quad (5)$$

$$\sum_{\alpha=1}^m \left(-\frac{1}{2k^2} \frac{\partial^2}{\partial q_\alpha^2} + \frac{q_\alpha^2}{2} - \frac{1}{2k} \right) \Psi(q_1, \dots, q_m) = k \Psi(q_1, \dots, q_m), \quad (6)$$

где $[\cdot]$ обозначает автономные скобки [5]–[7]. Задача о нахождении асимптотики решений уравнения (5) при $k \rightarrow \infty$ является задачей о построении квазиклассической асимптотики [5]–[7], роль постоянной Планка $\hbar$ играет параметр $1/k$, а оператору, действующему на функцию Φ в левой части уравнения (5), соответствует функция Гамильтона

$$H(q, p) = \sum_{\alpha=1}^m \left(\lambda_\alpha + \theta \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + p_\alpha^2}{2} \right) \right) \frac{q_\alpha^2 + p_\alpha^2}{2}. \quad (7)$$

Система уравнений Гамильтона, отвечающая функции (7), имеет вид

$$\dot{q}_\alpha = \left(\lambda_\alpha + \theta + \theta \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + p_\alpha^2}{2} \right) \right) p_\alpha, \quad \dot{p}_\alpha = - \left(\lambda_\alpha + \theta + \theta \ln \left(\frac{q_\alpha^2 + p_\alpha^2}{2} \right) \right) q_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, m. \quad (8)$$

Система уравнений (8) является системой с разделяющимися переменными, ее решения имеют вид

$$q_\alpha(t) = \sqrt{2I_\alpha} \sin(\Omega_\alpha t + \varphi_\alpha), \quad p_\alpha(t) = \sqrt{2I_\alpha} \cos(\Omega_\alpha t + \varphi_\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, m, \quad (9)$$

где I_α , φ_α определяются значениями q_α и p_α в момент времени $t = 0$, а Ω_α , если $I_\alpha \neq 0$, выражаются следующим образом:

$$\Omega_\alpha = \lambda_\alpha + \theta + \theta \ln(I_\alpha). \quad (10)$$

В [7] показано, что периодическим решениям системы (8) вида (9) (т.е. решениям, у которых все Ω_α вида (10) равны), удовлетворяющим условию квантования [6], [7] $\sum_{\alpha=1}^m I_\alpha = (n + 1/2)/k$, где n – целое число, соответствуют серии решений уравнения (1). Дополнительное условие (6) накладывает ограничение на рассматриваемые периодические траектории: $n = k$. Легко убедиться, что все периодические решения системы (7) задаются формулой (9), в которой φ_α произвольные, а I_α имеют вид

$$I_\alpha = \exp \left(\frac{\Omega - \lambda}{\theta} - 1 \right), \quad \text{если } \alpha \in J, \quad \text{и } I_\alpha = 0, \quad \text{если } \alpha \notin J, \quad (11)$$

где J – подмножество множества $\{1, \dots, m\}$, а Ω – частота периодической траектории. Условие квантования выделяет для каждого J одну периодическую траекторию. И этой периодической траектории соответствует серия решений уравнения (5) с дополнительным условием (6), которая отвечает набору целых чисел J , а минимальное собственное значение f которой имеет вид (4).

Заметим теперь, что в общем случае, когда в формуле (9) числа Ω_α при разных $\alpha = 1, \dots, m$ несоизмеримы, траектория в фазовом пространстве $\mathbb{R}^{2m}$, задаваемая этой формулой, не является

периодической, но она всюду плотно заполняет m -мерный тор, параметрическое уравнение которого имеет вид

$$q_\alpha = \sqrt{2I_\alpha} \sin(\phi_\alpha), \quad p_\alpha = \sqrt{2I_\alpha} \cos(\phi_\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, m, \quad (12)$$

где $\phi_\alpha \in [0, 2\pi)$. Если же Ω_α соизмеримы, например все равны Ω , то имеется бесконечное множество траекторий, объединение которых равно тору (12). Например, любому набору $\varphi_\alpha \in [0, 2\pi)$, $\alpha = 1, \dots, m$, формула (9) сопоставляет свою периодическую траекторию и легко убедиться, что объединение всех таких траекторий есть множество, задаваемое формулой (12). Тор (12) является лагранжевым многообразием, инвариантным относительно гамильтоновой системы (8) [6]. В монографии [6] рассмотрено это лагранжево многообразие и приведены условия квантования, выполнение которых позволяет построить на нем канонический оператор. Условия квантования тора (12) согласно [6] есть $I_\alpha = (n_\alpha + 1/2)/k$, где n_α – целые числа. Канонический оператор, отвечающий такому квантованному тору удовлетворяет условию (6), если для чисел n_α справедливо равенство $\sum_{\alpha=1}^m n_\alpha = n$, кроме того этот канонический оператор является асимптотическим решением уравнения (5), а соответствующее значение f совпадает с точным решением, которое имеет вид (3).

Таким образом, в данной статье установлено соответствие между решениями системы уравнений Гамильтона (8), покрывающими инвариантный тор, и точными решениями уравнения (1) с дополнительным условием (2). При этом оказалось, что построенная в [1], [2], [5] асимптотика отвечает случаю, когда инвариантный тор вырождается – разбивается на непересекающиеся периодические траектории гамильтоновой системы. Поэтому представляет значительный интерес нахождение более сложных, чем периодические траектории, инвариантных многообразий гамильтоновой системы и соответствующих асимптотик в более сложных, чем рассмотренная в данной статье задачах.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Маслов В. П. // Матем. заметки. 2002 (в печати).
2. Маслов В. П. // ТМФ. 2002 (в печати).
3. Березин Ф. А. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1987.
4. Маслов В. П. Квантование термодинамики и ультравторичное квантование. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", УРСС, 2001.
5. Маслов В. П., Шведов О. Ю. Метод комплексного роста в многочастичных задачах и задачах квантовой теории поля. М.: УРСС, 2000.
6. Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976.
7. Маслов В. П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М.: Наука, 1977.
8. Березин Ф. А., Шубин М. А. Уравнение Шрёдингера. М.: Изд-во Московского ун-та, 1983.