Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, Квантование больцмановской энтропии, пары и корреляционная функция, *ТМФ*, 2002, том 131, номер 2, 261–277

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf329>

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: 54.224.135.184

26 апреля 2023 г., 07:14:46

КВАНТОВАНИЕ БОЛЬЦМАНОВСКОЙ ЭНТРОПИИ, ПАРЫ И КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

Рассматривается статистический ансамбль Гиббса. Введен оператор статистического веса $\hat{\Gamma}$, оператор энтропии ансамбля $\hat{S}$ определен формулой Больцмана $\hat{S} = \ln \hat{\Gamma}$. Введен оператор свободной энергии. В пределе, когда число систем в ансамбле стремится к бесконечности, найдена асимптотика его собственных значений с учетом парных корреляций.

1. КВАНТОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ

В предыдущих работах [1]–[4] автор ввел квантование термодинамики. Для этого были рассмотрены различные операторы в пространстве ультравторичного квантования, и квантованные значения термодинамических величин, таких как внутренняя энергия, свободная энергия, энтропия, определены как собственные значения этих операторов. Причем было показано, что обычные термодинамические значения [5] указанных величин являются минимальными собственными значениями соответствующих квантованных операторов. В данной работе вводится оператор вероятности, который позволяет обосновать введение квантового оператора энтропии с точки зрения подхода Больцмана [5].

Простой пример из теории вероятностей. Рассмотрим серию из k независимых опытов, причем будем считать, что в каждом опыте возможны два различных равновероятных исхода, т.е. вероятность каждого исхода в одном опыте равна $1/2$ [6]. Рассмотрим следующее событие: в серии из k независимых опытов первый исход встречается k_1 раз, а второй – $k_2 = k - k_1$ раз. В каком порядке следуют исходы, не имеет значения. Очевидно, что число разных исходов рассматриваемой серии из k независимых опытов равно 2^k , причем все эти исходы серии опытов равновероятны; кроме того, рассматриваемое событие реализуется в

$$\Gamma(k_1, k_2) = \frac{k!}{k_1! k_2!} \quad (1)$$

*Московский государственный университет, Москва, Россия

исходах из общего числа 2^k . Поэтому для вероятности рассматриваемого события получается хорошо известная в теории вероятностей формула [6]

$$W(k_1, k_2) = \frac{k!}{k_1! k_2!} \frac{1}{2^k}.$$

На практике такая серия из k независимых опытов может быть реализована в опыте с бросанием монет [6], а аналогом такой серии опытов в статистической физике является, например, система k невзаимодействующих спинов $1/2$ [7] или любая квантовая система, состоящая из k невзаимодействующих подсистем, у каждой из которых есть два возможных состояния. Пространство состояний такой квантовой системы есть $\mathbb{C}^{2^k}$, и согласно квантовой механике состояния описываются функциями дискретного переменного $\Phi(j_1, \dots, j_k)$, где j_s принимает значения $1, 2$. Гамильтониан $\hat{H}_k$ системы из k невзаимодействующих подсистем, каждая из которых может находиться в двух состояниях, имеет вид

$$(\hat{H}\Phi)(j_1, \dots, j_k) = \sum_{s=1}^k \lambda_{j_s} \Phi(j_1, \dots, j_k), \quad (2)$$

где λ_1, λ_2 – некоторые действительные числа, возможные значения энергии подсистемы. Полная система собственных функций гамильтониана (2) есть

$$\Phi_{\{n\}}(j_1, \dots, j_k) = \prod_{s=1}^k \delta_{j_s n_s}, \quad (3)$$

где $\{n\}$ – некоторый набор чисел $n_1, n_2, \dots, n_k = 1, 2$, δ – символ Кронекера. Больцман предложил следующее соотношение между энтропией состояния и числом способов, которыми это состояние реализуется: $S = \ln \Gamma$ [5] (здесь и далее используется безразмерная энтропия). Введем в пространстве $\mathbb{C}^{2^k}$ оператор $\hat{\Gamma}$ вида

$$(\hat{\Gamma}\Phi)(j_1, \dots, j_k) = \frac{k!}{k_1! k_2!} \Phi(j_1, \dots, j_k), \quad (4)$$

где k_1, k_2 зависят от переменных $j_1, \dots, j_k$ следующим образом:

$$k_1 = \sum_{s=1}^k \delta_{1j_s}, \quad k_2 = \sum_{s=1}^k \delta_{2j_s} \quad (5)$$

(эта зависимость в (4) опущена, чтобы не загромождать формулу). Функции (3) соответствуют состояниям, у которых k_1 подсистем находится в первом состоянии и k_2 подсистем – во втором, где k_1 и k_2 выражаются формулами (5), в которых вместо j_s надо подставить n_s . Очевидно, что эти функции являются собственными функциями оператора (4), причем соответствующее собственное значение задается формулой (1), т.е. равно возможному числу состояний с заданными k_1 и k_2 . Поэтому естественно интерпретировать оператор (4) как оператор статистического веса. Теперь, следуя подходу Больцмана, определим оператор энтропии как

$$\hat{S} = \ln \hat{\Gamma}. \quad (6)$$

Соответствие между теорией вероятностей и квантовой механикой, а также определение операторов статистического веса и энтропии легко переносятся на общий случай.

Операторы статистического веса и энтропии в общем случае. Прежде чем перейти к общему случаю, рассмотрим квантование энтропии и вероятности для систем, состоящих из k не взаимодействующих подсистем, каждая из которых имеет M уровней. Пространство состояний квантовой системы в этом случае есть $\mathbb{C}^{kM}$, состояния системы описываются функциями $\Phi(j_1, \dots, j_k)$, где j_s принимает значения $1, \dots, M$. Гамильтониан системы задается формулой (2), в которой надо учесть, что дискретные переменные j_s изменяются от 1 до M , а $\lambda_1, \dots, \lambda_M$ — действительные числа. Набор собственных функций этого гамильтониана задается формулой (3), в которой числа $n_1, n_2, \dots, n_k$ принимают значения $1, \dots, M$. Аналогом такой квантовой системы в теории вероятностей является серия из k независимых опытов, в каждом из которых возможны M исходов. Число разных исходов этой серии опытов равно M^k . Рассмотрим следующее событие: в серии из k независимых опытов первый исход встречается k_1 раз, второй — k_2 раз, $\dots$, M -й — $k_M = k - \sum_{s=1}^{M-1} k_s$ раз, причем безразлично, в каком порядке следуют эти исходы. Число различных исходов серии испытаний, в которых реализуется рассматриваемое событие, равно

$$\Gamma(k_1, \dots, k_M) = \frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^M k_{\alpha}!}. \quad (7)$$

Используя соотношение (7), введем аналогично тому, как это было сделано выше, следующий оператор статистического веса $\hat{\Gamma}$ в пространстве состояний рассматриваемой квантовой системы:

$$(\hat{\Gamma}\Phi)(j_1, \dots, j_k) = \frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^M k_{\alpha}!} \Phi(j_1, \dots, j_k), \quad (8)$$

где $k_1, \dots, k_M$ зависят от переменных $j_1, \dots, j_k$:

$$k_{\alpha} = \sum_{s=1}^k \delta_{\alpha j_s}, \quad \alpha = 1, \dots, M \quad (9)$$

(эта зависимость в (8) опущена). Соответствующий оператор энтропии выражается формулой (6).

Очевидно, что в формулах для операторов энтропии и статистического веса число M формально может быть заменено на ∞ , т.е. эти операторы определяются в пространстве l_2^k для квантовой системы k не взаимодействующих подсистем, каждая из которых имеет бесконечное счетное число уровней. Кроме того, операторы могут быть введены в другом представлении. Рассмотрим случай, когда пространство состояний квантовой системы k не взаимодействующих подсистем есть пространство $L_2(\mathbb{R}^{kd})$, а пространство состояний подсистемы — $L_2(\mathbb{R}^d)$. Пусть гамильтониан подсистемы — оператор $h(x, -i\partial/\partial x)$ в пространстве $L_2(\mathbb{R}^d)$, где $x \in \mathbb{R}^d$, а числа над операторами обозначают порядок их действия [8], [9]. Будем считать, что известна полная ортонормированная

система собственных функций этого гамильтониана: $\varphi_\alpha(x)$, $\alpha = 1, 2, \dots$. Гамильтониан системы k невзаимодействующих подсистем в таком случае есть следующий оператор $\hat{H}_k$ в пространстве $L_2(\mathbb{R}^{kd})$:

$$\hat{H}_k = \sum_{s=1}^k h \left(x_s^2, -i \frac{\partial}{\partial x_s} \right). \quad (10)$$

Полная ортонормированная система функций оператора (10) в пространстве $L_2(\mathbb{R}^{kd})$ имеет вид

$$\Phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}(x_1, \dots, x_k) = \prod_{s=1}^k \varphi_{\alpha_s}(x_s), \quad \alpha_s = 1, 2, \dots \quad (11)$$

Каждой из функций (11) сопоставим набор чисел $k_\beta(\alpha_1, \dots, \alpha_k)$, $\beta = 1, 2, \dots$, таких, что

$$k_\beta(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = \sum_{s=1}^k \delta_{\beta \alpha_s}. \quad (12)$$

Очевидно, k_β равно числу тех α_s , $s = 1, \dots, k$, которые равны β . Кроме того, только конечное число из k_β отлично от нуля, и имеет место равенство $\sum_{\beta=1}^\infty k_\beta = k$. Поэтому каждой функции (11) можно сопоставить число

$$\frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^\infty k_\alpha!}. \quad (13)$$

Это число, очевидно, совпадает с числом функций (11), у которых наборы чисел (12) одинаковые. Оператором статистического веса для рассматриваемой системы будем называть оператор $\hat{\Gamma}_k$ в пространстве $L_2(\mathbb{R}^{kd})$, ядро которого имеет вид

$$\begin{aligned} \Gamma_k(x_1, \dots, x_k; y_1, \dots, y_k) &= \\ &= \sum_{\alpha_1=1}^\infty \cdots \sum_{\alpha_k=1}^\infty \frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^\infty k_\alpha!} \Phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}(x_1, \dots, x_k) \Phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}^*(y_1, \dots, y_k), \end{aligned} \quad (14)$$

где у чисел k_α опущена зависимость от $\alpha_1, \dots, \alpha_k$. Оператором энтропии будем называть оператор $\hat{S}$ в пространстве $L_2(\mathbb{R}^{kd})$, который выражается через оператор статистического веса (14) по формуле

$$\hat{S}_k = \ln \hat{\Gamma}_k. \quad (15)$$

Вторичное и ультравторичное квантование операторов статистического веса и энтропии. Рассмотрим в пространстве $L_2(\mathbb{R}^{kd})$ подпространство, элементами которого являются функции $\Phi(x_1, \dots, x_k)$, симметричные относительно перестановок переменных x_s и $x_{s'}$, $x_s \in \mathbb{R}^d$. Будем называть это подпространство симметричным и обозначим его через $L_2^{\text{Symm}}(\mathbb{R}^{kd})$. Рассмотрим пространство $\mathcal{L} = \bigoplus_{k=0}^\infty L_2^{\text{Symm}}(\mathbb{R}^{kd})$. Это пространство является бозонным фоковским пространством [10]. Это означает, что

в $\mathcal{L}$ определены операторы рождения $\hat{\psi}^+(x)$ и уничтожения $\hat{\psi}^-(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$, и вакуумный вектор Ψ_0 . Операторы рождения и уничтожения и вакуумный вектор обладают следующими свойствами [10]:

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}^-(x), \hat{\psi}^+(x')] &= \delta(x - x'), & [\hat{\psi}^\pm(x), \hat{\psi}^\pm(x')] &= 0, \\ \hat{\psi}^-(x)\Psi_0 &= 0, & (\Psi_0, \Psi_0) &= 1. \end{aligned} \quad (16)$$

Кроме того, любой вектор Ψ пространства $\mathcal{L}$ единственным образом представляется в виде [10]

$$\Psi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{k!}} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_k \Psi_k(x_1, \dots, x_k) \hat{\psi}^+(x_1) \dots \hat{\psi}^+(x_k) \Psi_0, \quad (17)$$

где $\Psi_k(x_1, \dots, x_k) \in L_2^{\text{Symm}}(\mathbb{R}^{kd})$. Заметим теперь, что подпространство $L_2^{\text{Symm}}(\mathbb{R}^{kd})$ пространства $L_2(\mathbb{R}^{kd})$ является инвариантным подпространством операторов (14) и (15), это следует из явного вида функций (11). Поэтому операторам статистического веса и энтропии соответствуют вторично-квантованные операторы в пространстве $\mathcal{L}$ [10]. Используя свойства (16) и (17), легко показать, что оператор (14) в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\hat{\Gamma} = \frac{\Gamma(\hat{k} + 1)}{\prod_{\alpha=1}^{\infty} \Gamma(\hat{k}_{\alpha} + 1)}, \quad (18)$$

где $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция, а $\hat{k}$, $\hat{k}_{\alpha}$ – следующие операторы в пространстве $\mathcal{L}$:

$$\hat{k}_{\alpha} = \iint dx dy \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^-(y) \varphi_{\alpha}(x) \varphi_{\alpha}^*(y), \quad \hat{k} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \hat{k}_{\alpha}, \quad (19)$$

а вторично-квантованная энтропия, соответствующая (15), выражается через оператор (18) по формуле (6).

Теперь введем операторы статистического веса и энтропии в случае ультравторичного квантования. Ультравторичное квантование было введено автором в цикле работ [1]–[4]. В этом разделе будет использован вариант ультравторичного квантования, несколько отличный от введенного в этих работах. Рассмотрим пространство $\mathcal{G}_k$, элементами которого являются функции $\Phi(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k)$, где $x_j \in \mathbb{R}^d$, $j = 1, \dots, k$, $s_j = 0, 1, \dots, J$ – дискретная переменная, называемая номером или статистическим спином [1]–[4], J – натуральное число или бесконечность. Эти функции симметричны относительно перестановок любых пар переменных x_j, s_j и x_i, s_i , и для них выполнено неравенство

$$\sum_{s_1=0}^J \cdots \sum_{s_k=0}^J \int \cdots \int dx_1 \dots dx_k |\Phi(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k)|^2 < \infty, \quad (20)$$

левая часть которого задает квадрат нормы вектора пространства $\mathcal{G}_k$. Введем теперь пространство $\mathcal{G} = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{G}_k$. Это пространство в силу симметрии функций, из которых состоят пространства $\mathcal{G}_k$, является бозонным фоковским пространством. В нем стандартным образом [10], [1]–[3] вводятся операторы рождения $\hat{b}^+(x, s)$ и уничтожения $\hat{b}^-(x, s)$ пары частица–номер и существует вакуумный вектор Φ_0 , свойства этих операторов аналогичны (16):

$$\begin{aligned} [\hat{b}^-(x, s), \hat{b}^+(x', s')] &= \delta_{ss'} \delta(x - x'), & [\hat{b}^\pm(x, s), \hat{b}^\pm(x', s')] &= 0, \\ \hat{b}^-(x, s) \Phi_0 &= 0, & (\Phi_0, \Phi_0) &= 1. \end{aligned} \quad (21)$$

Кроме того, любой вектор пространства $\mathcal{G}$ единственным образом представляется в виде, аналогичном (17). Вторично-квантованным операторам (18) и (6) в ультравторично-квантованном случае соответствуют в пространстве $\mathcal{G}$ операторы

$$\bar{\bar{\Gamma}} = \frac{\Gamma(\bar{\bar{k}} + 1)}{\prod_{\alpha=1}^{\infty} \Gamma(\bar{\bar{k}}_{\alpha} + 1)}, \quad (22)$$

$$\bar{\bar{S}} = \ln \bar{\bar{\Gamma}}, \quad (23)$$

где $\bar{\bar{k}}, \bar{\bar{k}}_{\alpha}$ – следующие операторы в пространстве $\mathcal{G}$:

$$\bar{\bar{k}}_{\alpha} = \sum_{s=0}^J \iint dx dy \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(y, s) \varphi_{\alpha}(x) \varphi_{\alpha}^*(y), \quad \bar{\bar{k}} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \bar{\bar{k}}_{\alpha}. \quad (24)$$

В работах [1]–[4] введены специальные симметричные $\mathcal{F}^{\text{Symm}}$ и антисимметричные $\mathcal{F}^{\text{Asymm}}$ подпространства пространства ультравторичного квантования $\mathcal{F}$, а ультравторично-квантованные операторы отличны от нуля только на этих подпространствах. Однако операторы (22) и (23) отличны от нуля на всем пространстве $\mathcal{G}$. Это связано с тем, что здесь рассматривается квантование с учетом всех возможных симметричных свойств функций, а не только симметричный или антисимметричный случаи. Подробное разъяснение будет дано ниже.

2. АНСАМБЛЬ ГИББСА И КВАНТОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ

Статистический ансамбль. В статистической физике широко используется концепция статистического ансамбля [5]. Статистический ансамбль представляет собой систему большого числа невзаимодействующих одинаковых термодинамических систем. Если термодинамическая система состоит из N частиц на трехмерном торе $\mathbf{T}$, длина сторон которого равна L , то пространство состояний этой системы есть $L_2(\mathbf{T}^N)$.

Пусть гамильтониан системы есть оператор $H(x, \partial/\partial x)$ в пространстве $L_2(\mathbf{T}^N)$, где $x \in \mathbf{T}^N$. Рассмотрим статистический ансамбль как квантовую систему k одинаковых, но различных частиц (т.е. не бозонов и не фермионов, роль “частицы” в данном случае играет термодинамическая система). Пространство состояний такой системы есть

$L_2(\mathbf{T}^{kN})$, а гамильтониан есть сумма гамильтонианов, поскольку нет взаимодействия между “частицами”:

$$\hat{H}_k = \sum_{j=1}^k H\left(x_j, \frac{\partial}{\partial x_j}\right). \quad (25)$$

Поскольку оператор (25) не является бозонным, вторичное квантование не применимо для рассмотрения статистического ансамбля. Поэтому рассмотрим ультравторичное квантование этого оператора. В представлении ультравторичного квантования без учета тождественности частиц оператору (25) соответствует следующий оператор в пространстве $\mathcal{G}$:

$$\widehat{H} = \sum_{s=0}^J \int dx \hat{b}^+(x, s) H\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) \hat{b}^-(x, s). \quad (26)$$

Этот оператор отличается от рассмотренных в работах [1]–[3] тем, что не содержит операторов проектирования на симметричное или антисимметричное относительно переменных x подпространства, а среди собственных функций этого оператора есть функции с любыми симметричными свойствами, поэтому можно говорить, что он учитывает все парастатистики.

Квантовая свободная энергия. Рассмотрим оператор

$$\widehat{F}_\theta = \widehat{H} - \theta \widehat{S}, \quad (27)$$

который будем называть ультравторично-квантованным оператором свободной энергии статистического ансамбля при температуре θ , операторы $\widehat{H}$ и $\widehat{S}$ определены соответственно в (26) и (23). Будем называть собственными значениями свободной энергии термодинамической системы N частиц на торе $\mathbf{T}$ при температуре θ такие числа λ , для которых существует последовательность векторов $\Phi_k \in \mathcal{G}$, $\Phi_k \neq 0$, таких, что

$$\widehat{F}_\theta \Phi_k = \omega_k \Phi_k, \quad \widehat{k} \Phi_k = k \Phi_k, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\omega_k}{k} = \lambda. \quad (28)$$

Из явного вида операторов $\widehat{H}$ (26) и $\widehat{S}$ (23) следует, что для нахождения асимптотики собственных значений оператора $\widehat{F}_\theta$ (27) в пределе при $k \rightarrow \infty$ (k – собственное значение оператора $\widehat{k}$) применимы методы, развитые в работах [8], [9], [11], поскольку при операторах $\hat{b}^\pm(x, s)$ стоит малый параметр $1/\sqrt{k}$. Оператору $\widehat{F}_\theta$ в пределе при $k \rightarrow \infty$ соответствует следующий символ (см. определение символа в [11]):

$$F_\theta[b^*(\cdot), b(\cdot)] = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \varepsilon_\alpha k_\alpha - \theta \sum_{\alpha=1}^{\infty} k_\alpha \ln\left(\frac{k_\alpha}{k}\right), \quad (29)$$

где k_α , k – функционалы вида

$$k_\alpha = \sum_{s=0}^J \iint dx dy b^*(x, s) b(y, s) \varphi_\alpha(x) \varphi_\alpha^*(y), \quad k = \sum_{\alpha=1}^{\infty} k_\alpha. \quad (30)$$

Кроме того, при получении соотношения (29) использовано то, что $\{\varphi_\alpha\}$, $\alpha = 1, 2, \dots$, — полный ортонормированный набор собственных функций оператора $H(\overset{2}{x}, \overset{1}{\partial}/\partial x)$ в пространстве $L_2(\mathbf{T}^N)$, а $\{\varepsilon_\alpha\}$ — набор соответствующих собственных значений. Согласно [8], [9], [11] собственные значения свободной энергии (28) являются решениями уравнения

$$\frac{\delta F_\theta}{\delta b^*(x, s)} = \lambda b(x, s). \quad (31)$$

Для функционала F_θ (29), (30) уравнение (31) может быть записано в виде системы

$$\left(\varepsilon_\alpha - \theta \ln \left(\frac{k_\alpha}{k} \right) - \lambda \right) \int dy b(y, s) \varphi^*(y) = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \quad s = 0, 1, \dots, J. \quad (32)$$

Эта система уравнений эквивалентна следующей:

$$\begin{aligned} H\left(\overset{2}{x}, \overset{1}{\partial}/\partial x\right) \Psi_\alpha(x) + \theta \ln \left(\frac{\|\Psi_\alpha\|^2}{\sum_{\beta=1}^\infty \|\Psi_\beta\|^2} \right) \Psi_\alpha(x) &= \lambda \Psi_\alpha(x), \\ \Psi_\alpha &\in L_2(\mathbf{T}^N), \quad (\Psi_\alpha, \Psi_\beta) = 0 \text{ при } \alpha \neq \beta. \end{aligned} \quad (33)$$

Решения унитарно-нелинейного уравнения. Исследуем решения уравнения (33). Это уравнение является так называемым уравнением с унитарной нелинейностью, общая теория таких уравнений развита автором в работе [4]. Поскольку система N частиц находится на трехмерном торе $\mathbf{T}$, то $x = (x_1, \dots, x_N)$, $x_j = (x_{j1}, x_{j2}, x_{j3})$, $0 \leq x_{jn} \leq L$. Будем далее для определенности считать, что гамильтониан этой системы $H(\overset{2}{x}, \overset{1}{\partial}/\partial x)$ имеет вид

$$\hat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j + \sum_{j=1}^N \sum_{i=j+1}^N V(x_j - x_i), \quad (34)$$

где $\Delta_j = \sum_{n=1}^3 \partial^2 / \partial x_{jn}^2$ — оператор Лапласа на торе $\mathbf{T}$, $V(x)$ — гладкая функция на торе. Теперь уравнение (33) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \lambda \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) &= \hat{H}_N \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) + \theta \ln \left(\frac{\|\Psi_\alpha\|^2}{\sum_{\beta=1}^\infty \|\Psi_\beta\|^2} \right) \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N), \\ (\Psi_\alpha, \Psi_\beta) &= 0 \text{ при } \alpha \neq \beta. \end{aligned} \quad (35)$$

Все решения системы (35) могут быть выписаны в явном виде. Например, уравнения (35) имеют решения вида $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \delta_{\alpha n} \varphi_n(x_1, \dots, x_N)$, $\lambda = \varepsilon_n$, где $\varphi_n(x_1, \dots, x_N)$ и ε_n , $n = 1, 2, \dots$, — полный ортонормированный набор собственных функций оператора (34) и соответствующий набор собственных значений (мы учитываем, что $a \ln a = 0$ при $a = 0$). Легко также убедиться, что существуют решения вида

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) &= a_1 \delta_{\alpha n_1} \varphi_{n_1}(x_1, \dots, x_N) + a_2 \delta_{\alpha n_2} \varphi_{n_2}(x_1, \dots, x_N), \\ \lambda &= -\theta \ln(e^{-\varepsilon_{n_1}/\theta} + e^{-\varepsilon_{n_2}/\theta}), \end{aligned} \quad (36)$$

где

$$a_{1,2} = \sqrt{e^{-\varepsilon_{n_1, n_2}/\theta} / (e^{-\varepsilon_{n_1}/\theta} + e^{-\varepsilon_{n_2}/\theta})}.$$

Формулы (36) очевидным образом обобщаются на случай любого $l \geq 1$: функции

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^l a_j \delta_{\alpha n_j} \varphi_{n_j}(x_1, \dots, x_N), \quad (37)$$

где n_j – произвольный набор чисел $n_1 \neq n_2 \neq \dots \neq n_l$, являются решениями системы (35) с собственным значением

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{j=1}^l e^{-\varepsilon_{n_j}/\theta} \right) \quad (38)$$

при условии, что

$$a_j = \sqrt{e^{-\varepsilon_{n_j}/\theta} / \sum_{r=1}^l e^{-\varepsilon_{n_r}/\theta}}.$$

Формулы (37) и (38) справедливы и в случае бесконечного числа l . Таким образом, справедливо следующее утверждение: набор функций $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N)$ является решением системы уравнений (35) тогда и только тогда, когда этот набор имеет вид

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = a_\alpha \varphi_{n_\alpha}(x_1, \dots, x_N) b_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \quad (39)$$

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

$$a_\alpha = \sqrt{e^{-\varepsilon_{n_\alpha}/\theta} / \sum_{\beta=1}^{\infty} b_\beta e^{-\varepsilon_{n_\beta}/\theta}},$$

соответствующее собственное значение есть

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{\alpha=1}^{\infty} b_\alpha e^{-\varepsilon_{n_\alpha}/\theta} \right). \quad (40)$$

Рассмотрим подробно множество собственных значений свободной энергии (40). Так как b_α принимает значения 0 или 1, $\theta > 0$, то выражение (40) тем меньше, чем больше слагаемых в сумме отлочно от нуля. Очевидно, что минимальное из всех значений (40) есть $\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/\theta} \right)$, что совпадает со свободной энергией системы N частиц на торе $\mathbf{T}$ с гамильтонианом $\hat{H}_N$ при температуре θ [5]. Будем считать, что $\varepsilon_n \leq \varepsilon_{n+1}$. В этом случае ближайшее к минимальному значению λ будет $-\theta \ln \left(\sum_{n=2}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/\theta} \right)$, и т. д. Как было показано, среди собственных значений (40) содержатся все собственные значения ε_n гамильтониана $\hat{H}_N$. Кроме того, все собственные значения (40) разбиваются на классы следующим образом: при $\theta \rightarrow 0$ выражение (40) в зависимости от b_α сходится к какому-либо значению ε_n , а все собственные значения λ , имеющие одинаковый предел при $\theta \rightarrow 0$, относятся к одному классу.

Метастабильные состояния и соответствующая свободная энергия. Итак, выше были определены возможные значения квантованной свободной энергии термодинамической системы. При этом вполне естественно, что минимальное из этих квантованных значений совпадает с “обычной” термодинамической свободной энергией системы. В работах [1]–[4] автор ввел и развил понятие *серии* для многочастичных задач статистической физики и квантовой механики. Серия – это некоторый набор собственных функций и собственных значений гамильтониана системы. Основное свойство серии заключается в том, что матричные элементы операторов из достаточно широкого класса для функций из разных серий экспоненциально малы в термодинамическом пределе. При отличной от нуля температуре статистическая система всегда стремится к состоянию термодинамического равновесия, которое описывается распределением Гиббса по всем собственным функциям гамильтониана. Однако это состояние равновесия может достигаться за очень большое время. Например, если в начальный момент система распределена только по состояниям некоторой серии, то в силу малости матричных элементов вероятность перехода из одной серии в другую мала, поэтому за относительно короткое время в системе установится распределение Гиббса по состояниям серии и система довольно долгое время может находиться в таком метастабильном состоянии. Устойчивость состояния определяется малостью величины $e^{-\varepsilon/\theta}$, где ε – максимальное собственное значение серии. Можно говорить о свободной энергии метастабильного температурного распределения, отвечающего данной серии, и естественно считать, что эта свободная энергия определяется выражением (40), в котором набор ε есть набор собственных значений рассматриваемой серии.

3. УЛЬТРАВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ УНИТАРНО-НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ

В предыдущем разделе в предположении, что известны собственные значения гамильтониана термодинамической системы, были найдены в явном виде решения унитарно-нелинейного уравнения (35) и таким образом получены собственные значения квантовой свободной энергии. Однако в случае произвольного гамильтониана вида (34) не известны его собственные значения. Поэтому важную роль играют методы нахождения асимптотик решений уравнения (35) в различных предельных случаях. Уравнение (35) было получено в пределе из ультравторично-квантованного уравнения, ниже будет показано, что к самому этому уравнению также можно применить процедуру ультравторичного квантования и в представлении ультравторичного квантования может быть построена асимптотика его решений.

Ультравторичное квантование. В работах [1]–[4] было введено ультравторичное квантование для задач квантовой механики и статистической физики. Напомним обозначения и основные факты в случае квантования по парам частица–номер и по парам из двух частиц. Квантование с учетом пар позволит далее учесть парные корреляции частиц при построении асимптотики. Пространством ультравторичного квантования является бозонное пространство Фока $\mathcal{F}$ [10], $\hat{b}^+(x, s)$ и $\hat{b}^-(x, s)$ – соответственно операторы рождения и уничтожения частиц с номером s в пространстве $\mathcal{F}$, $\hat{B}^+(x, x')$ и

$\hat{B}^-(x, x')$ – операторы рождения и уничтожения пары частиц в этом пространстве. Эти операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{b}^-(x, s), \hat{b}^+(x', s')] &= \delta_{ss'} \delta(x - x'), & [\hat{b}^\pm(x, s), \hat{b}^\pm(x', s')] &= 0, \\ [\hat{B}^-(x_1, x_2), \hat{B}^+(x'_1, x'_2)] &= \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2), \\ [\hat{B}^\pm(x_1, x_2), \hat{B}^\pm(x'_1, x'_2)] &= 0, \\ [\hat{b}^\pm(x, s), \hat{B}^\pm(x'_1, x'_2)] &= [\hat{b}^\pm(x, s), \hat{b}^\mp(x'_1, x'_2)] = 0. \end{aligned} \quad (41)$$

Вакуумный вектор в пространстве $\mathcal{F}$ будем обозначать Φ_0 . Он обладает следующими свойствами:

$$\hat{b}^-(x, s)\Phi_0 = 0, \quad \hat{B}^-(x_1, x_2)\Phi_0 = 0. \quad (42)$$

Переменная x лежит на трехмерном торе $L \times L \times L$, который будем обозначать $\mathbf{T}$. Дискретная переменная s , $s = 0, 1, \dots$, называется номером или статистическим спином. Любой вектор Φ пространства $\mathcal{F}$ единственным образом представляется в виде

$$\begin{aligned} \Phi &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k!M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \\ &\times \Phi_{k,M}(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M}) \times \\ &\times \hat{b}^+(x_1, s_1) \dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \hat{B}^+(y_1, y_2) \dots \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \Phi_0, \end{aligned} \quad (43)$$

где функция $\Phi_{k,M}(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M})$ симметрична относительно перестановок пар переменных (x_j, s_j) и (x_i, s_i) и симметрична относительно перестановок пар переменных (y_{2j-1}, y_{2j}) и (y_{2i-1}, y_{2i}) . В бозонном случае вводится подпространство $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Symm}}$, состоящее из векторов Φ , у которых $\Phi_{k',M'} = 0$ при $(k', M') \neq (k, M)$, а $\Phi_{k,M}$ является симметричной функцией переменных $x_1, x_2, \dots, x_k, y_1, y_2, \dots, y_{2M}$. В фермионном случае аналогично вводится подпространство $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Asymm}}$, состоящее из векторов Φ таких, что $\Phi_{k',M'} = 0$ при $(k', M') \neq (k, M)$ и $\Phi_{k,M}$ – антисимметричная функция переменных $x_1, x_2, \dots, x_k, y_1, y_2, \dots, y_{2M}$. Ортогональный проектор пространства $\mathcal{F}$ на подпространство $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Symm}}$ имеет вид [1]–[4]

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{k,M}^{\text{Symm}} &= \frac{1}{k!M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \\ &\times \hat{b}^+(x_1, s_1) \dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \hat{B}^+(y_1, y_2) \dots \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \times \\ &\times \text{Symm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}} (\hat{b}^-(x_1, s_1) \dots \hat{b}^-(x_k, s_k) \hat{B}^-(y_1, y_2) \dots \hat{B}^-(y_{2M-1}, y_{2M})) \times \\ &\times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \hat{B}^+(y, y') \hat{B}^-(y, y') \right), \end{aligned} \quad (44)$$

где $\text{Symm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}}$ – оператор симметризации по переменным $x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}$. Здесь и везде далее, если не оговорено особо, операторы $\hat{b}^+(x, s)$, $\hat{b}^-(x, s)$,

$\widehat{B}^+(y, y')$, $\widehat{B}^-(y, y')$ упорядочены по Вику [10]. Ортогональный проектор пространства $\mathcal{F}$ на подпространство $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Asymm}}$ имеет вид [1]–[4]

$$\begin{aligned} \widehat{\Pi}_{k,M}^{\text{Asymm}} &= \frac{1}{k! M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \\ &\times \widehat{b}^+(x_1, s_1) \dots \widehat{b}^+(x_k, s_k) \widehat{B}^+(y_1, y_2) \dots \widehat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \times \\ &\times \text{Asymm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}} (\widehat{b}^-(x_1, s_1) \dots \widehat{b}^-(x_k, s_k) \widehat{B}^-(y_1, y_2) \dots \widehat{B}^-(y_{2M-1}, y_{2M})) \times \\ &\times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \widehat{b}^+(x, s) \widehat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \widehat{B}^+(y, y') \widehat{B}^-(y, y') \right), \end{aligned} \quad (45)$$

где $\text{Asymm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}}$ – оператор антисимметризации по переменным $x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}$.

Рассмотрим систему N тождественных частиц на торе $\mathbf{T}$. Будем считать, что гамильтониан N бозонов или фермионов имеет вид

$$\widehat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j + \sum_{j=1}^N \sum_{l=j+1}^N V(x_j - x_l). \quad (46)$$

Согласно [1]–[4] этому оператору в бозонном случае отвечает ультравторично-квантованный гамильтониан следующего вида:

$$\begin{aligned} \overline{\widehat{H}}_B &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \\ &\times \widehat{b}^+(x_1, s_1) \dots \widehat{b}^+(x_k, s_k) \widehat{B}^+(y_1, y_2) \dots \widehat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \widehat{H}_{k+2M} \times \\ &\times \text{Symm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}} (\widehat{b}^-(x_1, s_1) \dots \widehat{b}^-(x_k, s_k) \widehat{B}^-(y_1, y_2) \dots \widehat{B}^-(y_{2M-1}, y_{2M})) \times \\ &\times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \widehat{b}^+(x, s) \widehat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \widehat{B}^+(y, y') \widehat{B}^-(y, y') \right), \end{aligned} \quad (47)$$

а в фермионном случае соответствующий оператор $\overline{\widehat{H}}_F$ выражается аналогичной формулой, в которой оператор Symm заменяется на Asymm . По аналогии с (46) и (47) ультравторично-квантованный оператор $\widehat{A}$ сопоставляется [1]–[4] любому N -частичному оператору

$$\widehat{A}_N \left(\overset{2}{x}_1, \dots, \overset{2}{x}_N; -i \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, -i \frac{\partial}{\partial x_N} \right).$$

Например, единичному оператору сопоставляется в бозонном случае ультратворично-квантованный единичный оператор вида

$$\begin{aligned} \widehat{\bar{E}}_B = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \\ & \times \hat{b}^+(x_1, s_1) \dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \hat{B}^+(y_1, y_2) \dots \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \times \\ & \times \text{Symm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}} (\hat{b}^-(x_1, s_1) \dots \hat{b}^-(x_k, s_k) \hat{B}^-(y_1, y_2) \dots \hat{B}^-(y_{2M-1}, y_{2M})) \times \\ & \times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \hat{B}^+(y, y') \hat{B}^-(y, y') \right), \end{aligned} \quad (48)$$

который есть сумма проекторов (44). Аналогично ультратворично-квантованный единичный оператор в фермионном случае есть

$$\widehat{\bar{E}}_F = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \hat{\Pi}_{k,M}^{\text{Asymm}},$$

а в формуле (48) оператор Symm заменяется на Asymm.

Рассмотрим задачу на собственные значения

$$\widehat{H}_{B,F} \Phi = \lambda \widehat{E}_{B,F} \Phi, \quad \widehat{E}_{B,F} \Phi \neq 0 \quad (49)$$

в бозонном и фермионном случаях. Справедливо следующее утверждение, доказанное в работе [1]: на подпространствах $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Symm}}$ и $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Asymm}}$ пространства $\mathcal{F}$ операторы $\widehat{H}_B$ и $\widehat{H}_F$, соответственно, совпадают с оператором $\widehat{H}_{k+2M}$. Поэтому собственные значения λ задачи (49) в бозонном и фермионном случаях совпадают с соответствующими собственными значениями операторов $\widehat{H}_N$ (46). В случае, когда коммутаторы между операторами $\hat{b}^-(x, s)$ и $\hat{b}^+(x, s)$, а также $\hat{B}^-(x, y)$ и $\hat{B}^+(x, y)$ малы как $1/N$, асимптотика решений задачи (49) определяется точками экстремума символа, отвечающего задаче (49) [8], [9], [11]. В бозонном случае символ имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_B[b^*(\cdot), b(\cdot), B^*(\cdot), B(\cdot)] = & \left\{ \sum_{k,M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \right. \\ & \times b^*(x_1, s_1) \dots b^*(x_k, s_k) B^*(y_1, y_2) \dots B^*(y_{2M-1}, y_{2M}) H_{k+2M} \times \\ & \times \text{Symm}_{x_1, \dots, x_k, y_1, \dots, y_{2M}} (b(x_1, s_1) \dots b(x_k, s_k) B(y_1, y_2) \dots B(y_{2M-1}, y_{2M})) \Big\} \times \\ & \times \left\{ \sum_{k', M'=0}^{\infty} \frac{1}{k'! M'!} \sum_{s'_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s'_{k'}=0}^{\infty} \int \cdots \int dx'_1 \dots dx'_{k'} dy'_1 \dots dy'_{2M'} \times \right. \\ & \times b^*(x'_1, s'_1) \dots b^*(x'_{k'}, s'_{k'}) B^*(y'_1, y'_2) \dots B^*(y'_{2M'-1}, y'_{2M'}) \times \\ & \times \text{Symm}_{x'_1, \dots, x'_{k'}, y'_1, \dots, y'_{2M'}} (b(x'_1, s'_1) \dots b(x'_{k'}, s'_{k'}) B(y'_1, y'_2) \dots B(y'_{2M'-1}, y'_{2M'})) \Big\}. \end{aligned} \quad (50)$$

В фермионном случае символ выражается аналогично, только оператор Symm в формуле (50) заменяется на Asymm . Следующее тождество для символа (50) имеет место в бозонном случае:

$$\mathcal{H}_B[b^*(\cdot), b(\cdot), B^*(\cdot), B(\cdot)] = \frac{\text{Sp}(\hat{\rho}_B \hat{H})}{\text{Sp}(\hat{\rho}_B)}, \quad (51)$$

где $\hat{H}$, $\hat{\rho}_B$ – вторично-квантованные операторы, причем $\hat{\rho}_B$ зависит от функций $b(x, s)$, $B(y, y')$:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int dx \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}^-(x) + \\ & + \frac{1}{2} \iint dx dy V(x, y) \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^-(y) \hat{\psi}^-(x), \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_B = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M! (k+2M)!} \left(\sum_{s=0}^{\infty} \iint dx dx' b(x, s) b^*(x', s) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^-(x') \right)^k \times \\ & \times \left(\iint dy_1 dy_2 B(y_1, y_2) \hat{\psi}^+(y_1) \hat{\psi}^+(y_2) \right)^M \times \\ & \times \left(\iint dy'_1 dy'_2 B(y'_1, y'_2) \hat{\psi}^-(y'_1) \hat{\psi}^-(y'_2) \right)^M \exp \left(- \int dz \hat{\psi}^+(z) \hat{\psi}^-(z) \right), \end{aligned} \quad (53)$$

где $\hat{\psi}^+(x)$, $\hat{\psi}^-(x)$ – бозонные операторы рождения и уничтожения, упорядоченные по Вику [10]. В фермионном случае имеет место аналогичное тождество

$$\mathcal{H}_F[b^*(\cdot), b(\cdot), B^*(\cdot), B(\cdot)] = \frac{\text{Sp}(\hat{\rho}_F \hat{H})}{\text{Sp}(\hat{\rho}_F)},$$

где $\hat{H}$, $\hat{\rho}_F$ – следующие вторично-квантованные операторы:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int dx \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}^-(x) + \\ & + \frac{1}{2} \iint dx dy V(x, y) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}^-(y) \hat{\psi}^-(x), \end{aligned} \quad (52a)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_F = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M! (k+2M)!} \left(\iint dy_1 dy_2 B(y_1, y_2) \hat{\psi}^+(y_1) \hat{\psi}^+(y_2) \right)^M \times \\ & \times \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 dx'_1 \dots dx_k dx'_k \times \\ & \times b(x_1, s_1) b^*(x'_1, s_1) \dots b(x_k, s_k) b^*(x'_k, s_k) \times \\ & \times \hat{\psi}^+(x_1) \dots \hat{\psi}^+(x_k) \hat{P}_0 \hat{\psi}^-(x'_k) \dots \hat{\psi}^-(x'_1) \times \\ & \times \left(\iint dy'_1 dy'_2 B(y'_1, y'_2) \hat{\psi}^-(y'_2) \hat{\psi}^-(y'_1) \right)^M, \end{aligned} \quad (53a)$$

где $\hat{\psi}^+(x)$, $\hat{\psi}^-(x)$ – фермионные операторы рождения и уничтожения, $\hat{P}_0$ – проектор на вакуумный вектор фермионного фокковского пространства. В общем случае символ ультравторично-квантованного оператора $\hat{A}$, отвечающий вторичного-квантованному оператору $\hat{A}$, выражается следующей формулой [1]–[4]:

$$A_{B,F}[b^*(\cdot), b(\cdot), B^*(\cdot), B(\cdot)] = \frac{\text{Sp}(\hat{\rho}_{B,F}\hat{A})}{\text{Sp}(\hat{\rho}_{B,F})}. \quad (54)$$

В пространстве $\mathcal{F}$ вводятся ультравторично-квантованные операторы числа частиц [1]–[4]:

$$\overline{N}_B = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} (k+2M) \hat{\Pi}_{k,M}^{\text{Symm}}, \quad \overline{N}_F = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} (k+2M) \hat{\Pi}_{k,M}^{\text{Asymm}}. \quad (55)$$

Соответственно в бозонном случае символ оператора $\overline{N}_B$ имеет вид

$$\begin{aligned} N_B = & \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{k+2M}{k! M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 \dots dx_{k+2M} \times \right. \\ & \times b^*(x_1, s_1) \dots b^*(x_k, s_k) B^*(x_{k+1}, x_{k+2}) \dots B^*(x_{k+2M-1}, x_{k+2M}) \times \\ & \times \text{Symm}_{x_1, \dots, x_{k+2M}} (b(x_1, s_1) \dots b(x_k, s_k) B(x_{k+1}, x_{k+2}) \dots B(x_{k+2M-1}, x_{k+2M})) \Big\} \times \\ & \times \left\{ \sum_{k'=0}^{\infty} \sum_{M'=0}^{\infty} \frac{1}{k'! M'!} \sum_{s'_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s'_{k'}=0}^{\infty} \int \cdots \int dz_1 \dots dz_{k'+2M'} \times \right. \\ & \times b^*(z_1, s'_1) \dots b^*(z_{k'}, s'_{k'}) B^*(z_{k'+1}, z_{k'+2}) \dots B^*(z_{k'+2M'-1}, z_{k'+2M'}) \times \\ & \times \text{Symm}_{z_1, \dots, z_{k'+2M'}} (b(z_1, s'_1) \dots B(z_{k'+2M'-1}, z_{k'+2M'})) \Big\}^{-1}. \quad (56) \end{aligned}$$

В соответствующей формуле в фермионном случае оператор Symm заменяется на Asymm.

Нелинейное ультравторичное квантование внутренней энергии, энтропии, свободной энергии и унитарно-нелинейное уравнение. Покажем теперь, каким образом может быть ультравторично проквантовано нелинейное уравнение (35). Каждому вектору $\Phi \in \mathcal{F}$ сопоставим энтропию, равную

$$S_{B,F} = -\text{Sp}(\hat{R}_{B,F}(\Phi) \ln \hat{R}_{B,F}(\Phi)),$$

где $\widehat{R}_{B,F}(\Phi)$ – вторично-квантованный оператор

$$\begin{aligned} \widehat{R}_{B,F}(\Phi) = & \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M! (k+2M)!} \times \right. \\ & \times \sum_{s_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \cdots \int dx_1 dx'_1 \dots dx_k dx'_k dy_1 dy'_1 \dots dy_{2M} dy'_{2M} \times \\ & \times \hat{\psi}^+(y_1) \dots \hat{\psi}^+(y_{2M}) \hat{\psi}^+(x_1) \dots \hat{\psi}^+(x_k) \times \\ & \times \widehat{P}_0 \hat{\psi}^-(x'_k) \dots \hat{\psi}^-(x'_1) \hat{\psi}^-(y'_{2M}) \dots \hat{\psi}^-(y'_1) \times \\ & \times \left(\Phi, \hat{b}^+(x_1, s_1) \dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \widehat{B}^+(y_1, y_2) \dots \widehat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \times \right. \\ & \times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \widehat{B}^+(y, y') \widehat{B}^-(y, y') \right) \times \\ & \times \widehat{B}^-(y'_{2M-1}, y'_{2M}) \dots \widehat{B}^-(y'_1, y'_2) \times \\ & \left. \times \hat{b}^-(x'_k, s_k) \dots \hat{b}^-(x'_1, s_1) \Phi \right\} (\Phi, \widehat{\bar{E}}_{B,F} \Phi)^{-1}. \end{aligned} \quad (57)$$

Здесь в зависимости от рассматриваемого случая $\hat{\psi}^{\pm}(x)$ – бозонные или фермионные фоковские операторы, $\widehat{P}_0$ – оператор ортогонального проектирования на вакуумный вектор фоковского пространства. Кроме того, введем на пространстве $\mathcal{F}$ функционалы

$$\mathcal{E}_{B,F} = \frac{(\Phi, \widehat{\bar{H}}_{B,F} \Phi)}{(\Phi, \widehat{\bar{E}}_{B,F} \Phi)}, \quad (58)$$

которые будем называть внутренней энергией, отвечающей вектору Φ . Будем называть собственными значениями внутренней энергии экстремальные значения функционала $\mathcal{E}$ при дополнительных условиях

$$S_{B,F} = \text{const}, \quad \frac{(\Phi, \widehat{\bar{N}}_{B,F} \Phi)}{(\Phi, \widehat{\bar{E}}_{B,F} \Phi)} = N. \quad (59)$$

Уравнение экстремума функционалов (58) при условиях (59) принимает вид

$$(\widehat{\bar{H}}_{B,F} + \theta \widehat{\bar{L}}_{B,F}(\Phi)) \Phi = \lambda \widehat{\bar{E}}_{B,F} \Phi, \quad (60)$$

где θ – множитель Лагранжа (который имеет смысл температуры), $\widehat{\bar{L}}_{B,F}(\Phi)$ – ультравторично-квантованный оператор, отвечающий $\ln \widehat{R}_{B,F}(\Phi)$. Уравнение (60) является ультравторично-квантованным вариантом уравнения (35), и их собственные значения совпадают.

Асимптотика решений унитарно-нелинейного уравнения в специальном случае. Для нахождения асимптотики решений уравнений (60) в случае, когда коммутаторы малы как $1/N$ при $N \rightarrow \infty$, положим в функционалах $\mathcal{E}_{B,F}$, $N_{B,F}$ и $S_{B,F}$ операторы $\hat{b}^+(x, s)$ и $\hat{b}^-(x, s)$ c -числами $b^*(x, s)$ и $b(x, s)$, соответственно, а операторы $\hat{B}^+(x, y)$ и $\hat{B}^-(x, y) - B^*(x, y)$ и $B(x, y)$. Из выражений для $\mathcal{E}$ и N получим символы $\mathcal{H}_B$ (50) и N_B (56) или $\mathcal{H}_F$ и N_F соответственно в бозонном или фермионном случаях. Из выражения для $S_{B,F}$ получим символы энтропии

$$S_{B,F} = -\text{Sp} \left(\frac{\hat{\rho}_{B,F}}{\text{Sp}} \hat{\rho}_{B,F} \ln \left(\frac{\hat{\rho}_{B,F}}{\text{Sp}} \hat{\rho}_{B,F} \right) \right). \quad (61)$$

Минимум символа $\mathcal{H}_F$ при дополнительных условиях $S_F = S$, $N_F = N$ достигается при таких $B(x, y)$, $b(x, s)$, что

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{H}_F}{\delta b^*(x, s)} - \mu \frac{\delta N_F}{\delta b^*(x, s)} - \theta \frac{\delta S_F}{\delta b^*(x, s)} &= 0, \\ \frac{\delta \mathcal{H}_F}{\delta B^*(x, y)} - \mu \frac{\delta N_F}{\delta B^*(x, y)} - \theta \frac{\delta S_F}{\delta B^*(x, y)} &= 0. \end{aligned} \quad (62)$$

Если бы при ультравторичном квантовании были учтены только пары частица–номер, тогда эти уравнения были бы эквивалентны температурным уравнениям Хартри–Фока [4], [7], однако учет парных корреляций частиц, проявившийся в квантовании по парам частиц, приводит к тому, что уравнения (62) некоторой заменой переменных приводятся к хорошо известным в теории сверхпроводимости уравнениям Бардина–Купера–Шриффера [7].

Список литературы

- [1] В. П. Маслов. Функциональный анализ и его приложения. 2000. Т. 34. № 4. С. 35–48.
- [2] В. П. Маслов. ТМФ. 2000. Т. 125. № 2. С. 297–314.
- [3] В. П. Маслов. ТМФ. 2001. Т. 129. № 3. С. 464–490.
- [4] В. П. Маслов. Квантование термодинамики и ультравторичное квантование. Ижевск: НИЦ “Регулярная и Хаотическая Динамика”, УРСС, 2001.
- [5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
- [6] Е. С. Вентцель. Теория вероятностей. М.: Физматгиз, 1962.
- [7] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Статистическая физика. М.: Наука, 1979.
- [8] В. П. Маслов. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М.: Наука, 1977.
- [9] В. П. Маслов. Теория возмущений и асимптотические методы. М.: Наука, 1978.
- [10] Ф. А. Березин. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1987.
- [11] В. П. Маслов, О. Ю. Шведов. Метод комплексного роста в многочастичных задачах и задачах квантовой теории поля. М.: УРСС, 2000.

Поступила в редакцию 2.11.2002 г.