Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, Распределения Гиббса и Бозе–Эйнштейна для ансамбля самосопряженных операторов и в классической механике, *ТМФ*, 2008, том 155, номер 2, 312–316

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6213>

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: 52.23.180.231

26 апреля 2023 г., 15:44:48

© 2008 г.

В. П. Маслов*

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГИББСА И БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА ДЛЯ АНСАМБЛЯ САМОСОПРЯЖЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ И В КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

Вводится понятие ансамбля самосопряженных операторов и формулируются теоремы о связи чисел заполнения с числом собственных значений ансамбля. Формулируется теорема для гиббсовского распределения в классической механике.

Ключевые слова: распределение Гиббса, распределение Бозе–Эйнштейна, бозе-конденсат, упорядоченная и неупорядоченная выборка с возвращением, гиббсовский ансамбль.

В работе [1] о сверхтекучести классической жидкости в нанотрубках замечено, что “тяжелая” молекула (т.е. молекула, в которой числа протонов k_1 и нейтронов k_2 велики), содержащая четное число нейтронов, является классической, т.е. соотношение ее параметров таково, что можно полагать, что по сравнению с классическим действием константа Планка бесконечно мала в смысле нестандартного анализа. Кроме того, $3(2k_1 + k_2)N$ -мерное уравнение Шредингера для N молекул симметрично относительно перестановки молекул, а поскольку молекула состоит из четного числа фермионов, она является “тяжелой”, т.е. классическим бозоном. В силу того, что молекула является классической, плотность распределения для системы N невзаимодействующих частиц не удовлетворяет постулату (гипотезе) Гиббса о термодинамическом равновесии (см. [2], глава IV, формула (2.7)). А именно эта гипотеза лежит в основе предложенного Козловым доказательства распределения Гиббса. С другой стороны, эргодическая гипотеза, как показано Козловым [2], также не выдерживает критики (в частности, опровергается теорией КАМ). Мы опишем здесь другой подход к распределению Гиббса, не основанный на гипотезах. Мы применим этот подход к распределению классических бозонов.

В работе [3] была рассмотрена система уравнений квантового осциллятора. Однако полученные оценки без труда переносятся на достаточно общие операторы Шредингера. Это позволяет доказать приведенные ниже теоремы.

Рассмотрим самосопряженный оператор $\hat{H}$ с дискретным положительным спектром, $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \dots$, $\lambda_n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$, и соответствующие собственные

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия.
E-mail: v.p.maslov@mail.ru

подпространства $P_1, P_2, \dots, P_n, \dots$ в гильбертовом пространстве $L_2 = L_2(\mathbb{R}^k)$, где k – любое конечное целое число. Будем предполагать, что для числа собственных значений, меньших заданного E при $E \rightarrow \infty$, выполняется правило Вейля (физики говорят, что число собственных значений пропорционально фазовому объему). Иногда эту формулу называют формулой Куранта.

Рассмотрим тензорное произведение N гильбертовых пространств

$$\mathcal{L}_2 = \underbrace{L_2(\mathbb{R}^k) \otimes L_2(\mathbb{R}^k) \otimes L_2(\mathbb{R}^k) \cdots \otimes L_2(\mathbb{R}^k)}_{N \text{ сомножителей}},$$

где $N \rightarrow \infty$, и определим на нем оператор

$$\hat{H}_N = \underbrace{[\hat{H} \otimes 1 \otimes 1 \cdots \otimes 1] + [1 \otimes \hat{H} \otimes 1 \cdots \otimes 1] + \cdots + [1 \otimes 1 \cdots \otimes 1 \otimes \hat{H}]}_{N \text{ сомножителей}}.$$

Запишем уравнение

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (1)$$

с начальными условиями вида $\Psi|_{t=0} = \varphi_s^{(i)}(x)$, $x \in \mathbb{R}^k$, $\varphi_s^{(i)}(x) \in L_2(\mathbb{R}^k)$, $i = 1, 2, \dots, N$, такими, что последовательность $\varphi_s^{(i)}(x)$ при $s \rightarrow \infty$ слабо сходится к нулю, $\|\varphi_s^{(i)}(x)\|_{L_2(\mathbb{R}^k)} = 1$, а $E_s^{(i)} = (\varphi_s^{(i)}(x), \hat{H} \varphi_s^{(i)}(x)) \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$, $E_s^{(i)} \leq E$, $P_n \varphi_s^{(i)} = 0$, если $\lambda_n > E$. Соответственно, решения уравнения

$$i \frac{\partial \Psi_N}{\partial t} = \hat{H}_N \Psi_N, \quad \Psi_N \in \mathcal{L}_2, \quad (2)$$

с начальным условием вида

$$\Psi_N|_{t=0} = \varphi_s^{(1)}(x_1) \varphi_s^{(2)}(x_2) \cdots \varphi_s^{(N)}(x_N), \quad x_i \in \mathbb{R}^n, \quad (3)$$

при $N \rightarrow \infty$, $s \rightarrow \infty$ будем называть гиббсовским ансамблем.

Если $\varphi_s^{(k)}(x_k)$ не равны друг другу при $k = 1, 2, \dots, N$, то мы определим параметр b_E из условия

$$\frac{\text{Sp}(\hat{H} e^{-b_E \hat{H}})}{\text{Sp}(e^{-b_E \hat{H}})} = E. \quad (4)$$

Обозначим $N_0 = \text{Sp} e^{-b_E \hat{H}}$. Числа заполнения оператора $\hat{H}_N$, отвечающие собственной функции Ψ_i оператора $\hat{H}$, меньшие или равные EN , будем обозначать N_i . Сумму $N_i + N_{i+1} + \cdots + N_{i+k}$ обозначим через $N_i^{(k)}$ – числа заполнения¹⁾, отвечающие набору функций $\Psi_i, \Psi_{i+1}, \dots, \Psi_{i+k}$, а проектор на подпространство, натянутое на собственные подпространства, отвечающие им, – через $P_i^{(k)}$.

Для несимметричного гиббсовского ансамбля имеет место следующая теорема.

ТЕОРЕМА 1. *Существуют такие постоянные C_l , $l = 1, 2, \dots$, что для любых $i > 1$ и $n > 0$ числа заполнений $N_i^{(n)}$ удовлетворяют неравенству*

$$\text{P}\left(|N_i^{(n)} - B \text{Sp}(P_i^{(n)} e^{-b_E \hat{H}})| > B \sqrt{N_0 \ln N_0} \psi(N_0)\right) \leq C_l N_0^{-l}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (5)$$

где $B = N/N_0$, $\psi(x)$ – положительная функция, произвольно медленно стремящаяся к $+\infty$ при $x \rightarrow +\infty$, а $\text{P}(\cdot)$ – отношение числа собственных значений гамильтониана $\hat{H}_N$, не превосходящих NE и удовлетворяющих стоящему в скобках

¹⁾Для определения числа $N_i^{(k)}$, физический смысл которого есть число частиц, можно считать частицы неразличимыми.

неравенству, к общему числу собственных значений гамильтониана $\hat{H}_N$, не превосходящих NE (плотность спектра)²⁾.

Если начальное условие (3) симметрично (т.е. $\varphi_s^{(k)}(x) = \varphi_s^{(m)}(x)$ при всех k и m), то оно разлагается только по симметрическим собственным функциям оператора $\hat{H}_N$. Выражение вида $\sum_{i=1}^n \lambda_i N_i$ для любых N_i , удовлетворяющих условию $\sum_{i=1}^n N_i \leq N$, есть собственное значение $\hat{H}_N$, отвечающее симметричным по (x_i, x_j) собственным функциям, а значит, их число равно $N_i^{(n)}$. Будем называть решения этой задачи симметричным гиббсовским ансамблем. Поскольку $\sum \lambda_i N_i$ является собственным значением оператора³⁾ $\hat{H}_N$, отвечающим симметрическим собственным функциям, то $\sum N_i$ по всем N_i является числом всех собственных значений оператора $\hat{H}_N$, меньших, чем EN .

Пусть $b_{E,N}$ — решение уравнения

$$\text{Sp}\left(\frac{\hat{H}}{e^{b_{E,N}\hat{H}} - 1}\right) = E \text{Sp}\left(\frac{1}{e^{b_{E,N}\hat{H}} - 1}\right) + \lambda_1 \left(N - \text{Sp}\left(\frac{1}{e^{b_{E,N}\hat{H}} - 1}\right)\right). \quad (6)$$

Тогда для “почти всех” чисел заполнения $N_i^{(n)}$ при $n \rightarrow \infty$ имеет место равенство

$$N_i^{(n)} \cong \text{Sp}\left(P_i^{(n)} \frac{1}{e^{b_{E,N}\hat{H}} - 1}\right), \quad (7)$$

где $P_i^{(n)} = P_i + P_{i+1} + \dots + P_{i+n}$ — проектор на подпространство, порожденное $P_i L_2, P_{i+1} L_2, \dots, P_{i+n} L_2$.

Более точно утверждение формулируется следующим образом.

ТЕОРЕМА 2. *Существуют такие постоянные C_l , $l = 1, 2, \dots$, что для любых $i > 1$ и $n > 0$ числа заполнения $N_i^{(n)}$ удовлетворяют неравенству*

$$\text{P}\left(\left|N_i^{(n)} - \text{Sp}\left(P_i^{(n)} \frac{1}{e^{b_{E,N}\hat{H}} - 1}\right)\right| > \sqrt{\tilde{N}_0 \ln \tilde{N}_0} \psi(N_0)\right) \leq C_l \tilde{N}_0^{-l}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (8)$$

где

$$\tilde{N}_0 = \text{Sp}\left(\frac{1}{e^{b_{E,N}\hat{H}} - 1}\right),$$

$\psi(x)$ — положительная функция, произвольно медленно стремящаяся к $+\infty$ при $x \rightarrow +\infty$, а $\text{P}(\cdot)$ — отношение числа собственных значений гамильтониана $\hat{H}_N$, отвечающих симметричным по (x_i, x_j) собственным функциям, не превосходящих NE и удовлетворяющих стоящему в скобках неравенству, к общему числу собственных значений гамильтониана $\hat{H}_N$, не превосходящих NE и отвечающих симметрическим собственным функциям.

Таким образом, в симметрическом случае $\tilde{N}_0$ зависит от N , и если $\tilde{N}_0(N) < N$, то возникает “диффузия”, при которой увеличивается кратность λ_1 на величину $N - \tilde{N}_0(N)$, т.е. при $N \gg \tilde{N}_0(N)$ возникает скопление собственных значений оператора $\hat{H}_N$ на нижнем уровне λ_1 (конденсат).

²⁾В книге [4] (с. 44) для микроканонического распределения употребляется термин “густота спектра”.

³⁾В работе [3] использовался термин “число вариантов”, который определялся как число собственных значений оператора $\hat{H}_N$.

Теоремы 1 и 2 означают, что если мы задаем $N_i^{(n)}$ на интервале $\lambda_i, \dots, \lambda_{i+n}$ и считаем отношение числа собственных значений с заданными $N_i, N_{i+1}, \dots, N_{i+n}$ и остальными произвольными значениями N_j при $j < i, j > i + n$ к общему числу собственных значений оператора $\hat{H}_N$, не превосходящих EN , то это отношение стремится к нулю как N_0^{-s} для любого s вне интервала

$$N_i^{(n)} \sim \text{Sp}(P_i^{(n)} e^{-b_E \hat{H}}) \pm B \sqrt{N_0 \ln N_0} \psi(N_0)$$

для теоремы 1 или соответствующего интервала для теоремы 2. Можно сказать, что речь идет о плотности спектра гиббсовского ансамбля и о том, что, в отличие от точки зрения физиков относительно того, что формула (4) дает среднее значение энергии, она определяет значение EN , ограничивающее плотность спектра оператора $\hat{H}_N$. Можно также сказать, что это общее число собственных значений оператора $\hat{H}_N P_{EN}$, где P_{EN} – проектор на все собственные подпространства, отвечающие всем $\mu_n^{(N)} \leq EN$, где $\mu_n^{(N)}$ – все собственные значения оператора $\hat{H}_N$, не большие, чем NE .

Пусть $\mathcal{P}_i^n$ – проектор на все собственные подпространства оператора $P_{EN} \hat{H}_N$, лежащие вне интервала, окружающего собственные значения оператора $P_i^n \hat{H} e^{-b_E \hat{H}} \pm B \sqrt{N_0 \ln N_0} \psi(N_0)$. Тогда отношение числа собственных значений оператора $\mathcal{P}_i^n \hat{H}_N$ к числу собственных значений оператора $P_{EN} \hat{H}_N$ стремится к нулю быстрее любой степени N_0^{-1} .

Перейдем теперь к классическому распределению Бозе–Эйнштейна. Пусть гамильтониан $H(p, q)$ есть выпуклая функция, растущая не медленнее, чем $|p| + |q|$, и не быстрее, чем $|p|^s + |q|^s$, где s – любое целое число, а при $p \rightarrow 0, q \rightarrow 0$ стремящаяся к нулю не медленнее, чем p^2 . Пусть N – число частиц. Найдем b из соотношения

$$\int (e^{bH(p,q)} - 1)^{-1} dp dq = N.$$

Пусть $\rho_{E_l}^\Delta$ – плотность числа частиц в интервале E_l и E_{l+1} , где $\Delta = E_{l+1} - E_l$. Дадим более точное определение.

Разобьем фазовое пространство p, q на конечное число областей $E_l \leq H(p, q) \leq E_{l+1}$, $l = 0, \dots, s-1$, $E_0 = 0$, $E_s = E$, $p \in \mathbb{R}^n$, $q \in \mathbb{R}^n$, и аналогичным образом фазовое пространство $\mathbb{R}^{2nN}$ разобьем на соответствующие области. Производя неупорядоченную выборку с возвращением N_l из разбиения областей пространства $\mathbb{R}^{2nN}$ в “ящик” $E_l \leq H(p, q) \leq E_{l+1}$ при условии

$$\sum_{i=1}^N H(p_i, q_i) \leq NE, \quad (9)$$

где $E = N^{-1} \int H(p, q) (e^{bH(p,q)} - 1)^{-1} dp dq$, мы получим $\rho_{E_l}^\Delta = N_l/N$ [5]. В приведенной ниже теореме P есть лебегова мера фазового объема, определенного в скобках в (10), относительно всего объема (9).

ТЕОРЕМА 3. *Справедливо соотношение*

$$P \left(\left| N \rho_{E_l}^\Delta - \int_{E_l \leq H(p,q) \leq E_{l+1}} (e^{bH(p,q)} - 1)^{-1} dp dq \right| \geq \sqrt{N \ln N} \psi(N) \right) = O(N^{-m}), \quad (10)$$

где m – любое целое число.

Отметим, что уравнения для “одетого” потенциала в случае распределения Бозе–Эйнштейна в классической механике принимают вид

$$\bar{u}(q) = u(q) + \int \frac{V(q - q') dp' dq'}{\exp\{b^{-1}(|p'|^2/(2m) + \bar{u}(q'))\} - 1}, \quad (11)$$

где $u(q)$ – внешнее поле, а $V(x - y)$ – потенциал парного взаимодействия.

Последнее уравнение не было известно в физике. Его впервые получил автор для общего случая в серии статей [6]. Для ферми-системы известно температурное уравнение Томаса–Ферми [7].

Рассмотрим при тех же условиях, что и выше, *упорядоченную* выборку. С физической точки зрения это означает, что рассматривается N различных частиц, а $\rho_{E_l}^\Delta$ снова обозначает “плотность” частиц в интервале энергии $E_l \leq H(p, q) \leq E_{l+\Delta}$. В этом случае при $n = 3$ имеет место распределение Гиббса.

Пусть выполнены вышеприведенные условия на функцию $H(p, q)$. Пусть задано N . Определим b из условия

$$\int_0^\infty e^{-bH(p, q)} dp dq = N. \quad (12)$$

Определим E в (9) как $N^{-1} \int_0^\infty H(p, q) e^{-bH(p, q)} dp dq$. Тогда будет иметь место следующая теорема.

ТЕОРЕМА 4. *Имеет место соотношение*

$$\mathbb{P}\left(\left|N\rho_{E_l}^\Delta - \int_{E_l \leq H(p, q) \leq E_{l+1}} e^{-bH(p, q)} dp dq\right| \geq \sqrt{N \ln N} \psi(N)\right) = O(N^{-m}), \quad (13)$$

где m – любое целое число.

Вероятность $\mathbb{P}$ здесь также есть лебегова мера фазового объема, определенного в скобках (13), относительно всего фазового объема (9).

Благодарности. Автор приносит глубокую благодарность В. Е. Назайкинскому за плодотворные обсуждения и В. Е. Подольскому за полезные консультации.

Список литературы

- [1] В. П. Маслов, *ТМФ*, **153:3** (2007), 388–408.
- [2] В. В. Козлов, *Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре*, Ин-т компьютерных исследований, М.–Ижевск, 2002.
- [3] В. П. Маслов, *ТМФ*, **154:1** (2008), 207–208.
- [4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика* Т. V. *Статистическая физика*, Наука, М., 1964.
- [5] А. Н. Ширяев, *Вероятность*, т. 1, МЦНМО, М., 2004.
- [6] V. P. Maslov, *Russ. J. Math. Phys.*, **2:4** (1994), 527–534; **3:1** (1995), 123–132; 271–276; 401–406; 529–534; **4:1** (1996), 117–122; № 2, 265–270; № 4, 539–546; **5:4** (1997), 473–488; № 1, 123–130; № 2, 273–278; № 3, 405–412; № 4, 529–534.
- [7] Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, т. 1, Мир, М., 1979.

Поступила в редакцию 22.02.2008