Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Г. Рудой, Метрика Боголюбова как глобальная характеристика семейства метрик в гильбертовой алгебре наблюдаемых, *ТМФ*, 2009, том 160, номер 2, 352–369

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6403>

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: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 15:28:16

© 2009 г.

Ю. Г. Рудой*

МЕТРИКА БОГОЛЮБОВА КАК ГЛОБАЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СЕМЕЙСТВА МЕТРИК В ГИЛЬБЕРТОВОЙ АЛГЕБРЕ НАБЛЮДАЕМЫХ

Проведен сравнительный анализ однопараметрического семейства билинейных комплексных функционалов, имеющих смысл “деформированных” скалярных произведений Вигнера–Яназе–Дайсона, на гильбертовой алгебре операторов физических наблюдаемых. Установлены зависимости этих функционалов и соответствующих им метрик от параметра деформации, а также экстремальные свойства метрик Кубо–Мартина–Швингера и Вигнера–Яназе в квантовой статистической механике. Показано, что метрика Боголюбова–Кубо–Мори является глобальной (интегральной) характеристикой указанного семейства. Она занимает промежуточное положение между экстремальными метриками и имеет ясный физический смысл обобщенной изотермической восприимчивости. Рассмотрен пример для алгебры наблюдаемых $SU(2)$ в простейшей модели идеального квантового спинового парамагнетика.

Ключевые слова: операторные метрики, корреляционные функции, функции Грина, спектральная интенсивность, соотношения неопределенностей.

1. ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Важной задачей квантовой механики является вычисление корреляционных функций (вообще говоря, комплексных) как в чистых, так и в смешанных состояниях физических величин, которые описываются линейными операторами A , B . Эти операторы могут быть неограниченными (например, операторы координат или импульсов частиц), не коммутировать друг с другом и даже не являться самосопряженными ($A \neq A^\dagger, \dots$, знак $\dagger$ означает эрмитово сопряжение).

Операторы A , B , $\dots$ действуют в гильбертовом пространстве состояний адиабатически изолированной физической системы, которая характеризуется эрмитовым оператором Гамильтона $H = H^\dagger$, причем совокупность операторов A , B , H , $\dots$ образует алгебру наблюдаемых с инволюцией и единицей. Именно операторный, или алгебраический, подход считается наиболее удобным для формулировки квантовой статистической механики (см., например, [1]–[4]).

*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия. E-mail: rudikar@mail.ru

Для физической системы, находящейся в состоянии теплового равновесия с термостатом с фиксированной температурой Кельвина $0 \leq T < \infty$, справедливо квантовое обобщение подхода Гиббса, построенное фон Нейманом [5]. Состояние системы характеризуется тогда оператором плотности $e^{\Phi(\beta) - \beta H}$, где $\beta = 1/k_B T \geq 0$ – обратная температура в энергетических единицах, k_B – постоянная Больцмана, $\Phi(\beta) = \ln Z(\beta)$ – характеристическая функция Массе–Планка, причем статистическая сумма $Z(\beta) = \text{Sp } \rho(\beta)$. В дальнейшем для простоты используется ненормированный аналог положительно-определенного и ограниченного оператора плотности фон Неймана $\rho(\beta) = \rho^\dagger(\beta) = e^{-\beta H}$.

Среднее значение любого оператора A (также ненормированное) имеет вид

$$\langle A \rangle = \text{Sp } A(\beta), \quad A(\beta) = \rho(\beta)A, \quad A(0) = A, \quad (1)$$

где предполагается, что $A(\beta)$, как и $\rho(\beta)$, является ядерным оператором с конечным следом. Для этого необходимо, чтобы A являлся оператором Гильберта–Шмидта, поскольку оператор $\rho(\beta)$ при $\beta > 0$ ограничен, $0 \leq \|\rho(\beta)\| \leq 1$. Это имеет место, если A ограничен; в противном случае можно использовать известный прием перехода к ограниченным функциям оператора A (см. [1]–[4]).

По аналогии с (1) корреляционная функция $K_{AB}(\beta)$ для пары операторов A и B определяется билинейным комплексным функционалом

$$K_{AB}(\beta) \equiv \langle AB^\dagger \rangle = \text{Sp } A(\beta)B^\dagger = \text{Sp } B^\dagger A(\beta); \quad (2)$$

в частности, при $B = B^\dagger = I$, где I – единичный оператор, функционал $K_{AI}(\beta) = \langle A \rangle$, как и должно быть, переходит в (1). Предполагается, что A и B являются операторами Гильберта–Шмидта, так что произведение $A(\beta)B^\dagger$ является ядерным оператором и выражение (2) имеет смысл.

Это выражение задает в алгебре операторов $A, B, \dots$ внутреннее, или скалярное, произведение (см., например, [6]), делающее эту алгебру нормированной гильбертовой алгеброй (вообще говоря, бесконечномерной); величина $K_{AA}(\beta) > 0$ определяет в ней норму оператора A и, соответственно, метрику $[K_{AA}(\beta)]^{1/2}$.

Стандартная метрика (2) типа Гильберта–Шмидта, введенная в [5], [7]–[9] на раннем этапе развития квантовой статистической механики, в физических приложениях впоследствии получила наименование метрики Кубо–Мартина–Швингера (КМШ) [10], [11]; эта метрика является наиболее простой и естественной, однако отнюдь не единственно возможной.

Интерес к применению обобщенных, или деформированных, метрик возник, в частности, в связи с теорией линейной реакции на термические возмущения, а также в связи с проблемой минимизации соотношений неопределенностей (СН). В наиболее общей форме СН установлены Шредингером, где в дополнение к обычному СН в форме Гейзенберга учитывается вклад не только коммутатора операторов A и B , но и вклад их антикоммутатора.

Примером λ -деформированных скалярных произведений является однопараметрическое семейство Вигнера–Яназе–Дайсона (ВЯД) ($0 \leq \lambda \leq 1$), предложенное Дайсоном в работе [12] в качестве обобщения скалярного произведения Вигнера–

Яназе (ВЯ) ($\lambda = 1/2$):

$$\begin{aligned} K_{AB}^{\text{WYD}}(\beta; \lambda) &= \langle A(\beta; \lambda) B^\dagger \rangle = \text{Sp } A(\beta; \lambda) B^\dagger, \\ A(\beta; \lambda) &= [\rho(\beta)]^{1-\lambda} A[\rho(\beta)]^\lambda, \quad \rho(\beta) = \rho^\dagger(\beta) = e^{-\beta H} \end{aligned} \quad (3)$$

(в очевидных случаях индекс WYD будет опускаться).

На физическом уровне строгости предполагается следующее: а) λ -деформация операторов A не выводит их из класса Гильберта–Шмидта; б) существуют дробные (неотрицательные) степени оператора $\rho(\beta)$; в) с учетом свойства $\rho(0) = I$ при $\beta = 0$ существует конечное значение $K_{AB}(0; \lambda) = \text{Sp } AB^\dagger$, не зависящее от λ . Последнее гарантирует существование $K_{AB}(\beta; \lambda)$ при всех λ и $\beta > 0$, поскольку $|K_{AB}(\beta; \lambda)| \leq |K_{AB}(0; \lambda)|$ в силу ограниченности оператора $\rho(\beta)$.

При указанных предположениях аксиоматика скалярного произведения по-прежнему выполняется, причем выражение (3) допускает эквивалентную запись через коммутаторы операторов A и $B^\dagger$ с дробными степенями $\rho(\beta)$:

$$K_{AB}(\beta; \lambda) = K_{AB}(\beta; 0) + \frac{1}{2} \text{Sp} \{ [(\rho(\beta))^\lambda, A]_- [(\rho(\beta))^{1-\lambda}, B^\dagger]_- \}.$$

Подобная запись вводилась в работе [12] и далее использовалась рядом авторов, в том числе Либом [13], Бауманом и Иостом [14], для изучения свойства выпуклости $K_{AA}(\beta; \lambda)$ по операторному аргументу $\rho(\beta)$.

Предельному значению $\lambda = 0$ в (3) соответствует максимально несимметричная по λ метрика КМШ $K_{AB}^{\text{KMS}}(\beta; 0)$, тогда как значению $\lambda = 1/2$ – максимально симметричная метрика ВЯ $K_{AB}^{\text{WY}}(\beta; 1/2)$; промежуточные значения $0 < \lambda < 1/2$ были рассмотрены Латтинжером [15], причем все эти скалярные произведения являются локальными для семейства (3).

В 1961 году в работе [16] (гл. 1, § 5) Боголюбов ввел новое скалярное произведение (метрику) на алгебре наблюдаемых, которое, как оказалось, можно связать с семейством метрик (3). Именно, величина $K_{AB}^{\text{BKM}}(\beta)$ для любой пары операторов A и B выражается интегралом $\int_0^1 d\lambda K_{AB}(\beta; \lambda)$; тем самым $K_{AB}^{\text{BKM}}(\beta)$ играет роль глобальной характеристики для семейства $K_{AB}^{\text{WYD}}(\beta; \lambda)$ из (3). Заметим, что логика введения Боголюбовым новой метрики базировалась на совершенно ином подходе, а именно на подходе функций Грина, который был развит им же (совместно с Тябликовым) несколько ранее [17] (подробнее см. ниже раздел 3).

Существенно, что метрика Боголюбова совпала с выражением, введенным несколько ранее независимо Кубо [10] и Мори [18]: оказалось, что величина $K_{AB}^{\text{BKM}}(\beta)$ имеет ясный физический смысл и описывает обобщенную изотермическую восприимчивость $\chi_{AB}(\beta)$ (подробнее см. ниже конец раздела 2). Возможно, именно с этим фактом связано замечание Стритера [19] о том, что метрика Боголюбова–Кубо–Мори (БKM) предпочтительна по сравнению с метрикой КМШ (а также, по-видимому, и со всеми остальными λ -метриками).

Цель данной работы состоит в том, чтобы дать сравнительное описание всего семейства λ -деформированных метрик, основанных на скалярном произведении (3), а также метрики БKM, которая не принадлежит этому семейству, но порождается им. Основное внимание уделено обобщенному СН в форме Шредингера для пары

операторов A и B , которое выражается неравенством Коши–Буняковского–Шварца (КБШ), справедливому как для функционала (2), так и для его λ -деформированного аналога (3).

При вычислениях использовано полученное Латтинжером [15] обобщение на случай $\lambda \neq 0$ спектрального представления для $K_{AB}(\beta; \lambda)$, впервые введенного Кэлленом и Вельтоном [20], а также метод функций Грина в формулировке Боголюбова и Тябликова [17] (см. также [21], [22]).

2. ОБЩИЕ СВОЙСТВА λ -ДЕФОРМИРОВАННОГО СКАЛЯРНОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ

Будем далее предполагать, что ни A , ни $B^\dagger$ не являются интегралами движения, причем коммутатор $[A, B^\dagger]_-$ может быть как оператором, так и комплексным числом, в том числе равным нулю. Указанное ограничение обусловлено тем, что если хотя бы один из операторов A или $B^\dagger$ коммутирует с гамильтонианом H , то λ -деформация (3) становится тривиальной и $K_{AB}(\beta; \lambda) = K_{AB}(\beta; 0)$. Действительно, если $[A, H]_- = 0$, то это очевидно, поскольку $A(\beta; \lambda) = A(\beta; 0)$, а если $[B^\dagger, H]_- = 0$, то следует учесть циклическую инвариантность следа.

Одно из важных общих свойств, присущих величине (3) как скалярному произведению, связано с эрмитовым сопряжением аргумента $A(\beta; \lambda)B^\dagger$:

$$K_{BA}(\beta; \lambda) = K_{AB}^*(\beta; \lambda), \quad K_{AA}(\beta; \lambda) \geq 0, \quad (4)$$

где учтено, что оператор $[\rho(\beta)]^\alpha$ эрмитов при любом $\alpha \geq 0$ и что $\text{Sp } XY = \text{Sp } YX$ и $\text{Sp } X^\dagger = (\text{Sp } X)^*$ для операторов X и Y из класса Гильберта–Шмидта. Заметим, что с физической точки зрения $K_{AA}(\beta; \lambda)$ представляет собой квантовую автокорреляционную функцию, всегда неотрицательную в силу (4).

Дополнительные свойства, связанные с зависимостью $K_{AB}(\beta; \lambda)$ от вещественного параметра λ , можно получить, если учесть, что $[A(\beta; \lambda)]^\dagger = A^\dagger(\beta; 1 - \lambda)$. Тогда имеем

$$\begin{aligned} K_{A^\dagger B}(\beta; \lambda) &= K_{B^\dagger A}(\beta; 1 - \lambda) = K_{AB^\dagger}^*(\beta; 1 - \lambda), \\ K_{AB^\dagger}(\beta; \lambda) &= K_{BA^\dagger}(\beta; 1 - \lambda) = K_{A^\dagger B}^*(\beta; 1 - \lambda), \end{aligned}$$

а также

$$K_{A^\dagger B^\dagger}(\beta; \lambda) = K_{BA}(\beta; 1 - \lambda) = K_{AB}^*(\beta; 1 - \lambda), \quad (5)$$

где использована, например, цепочка равенств, приводящая к (5): $K_{BA}(\beta; \lambda) = \text{Sp } B(\beta; \lambda)A^\dagger = \text{Sp } [A(\beta; \lambda)]^\dagger B = \text{Sp } A^\dagger(\beta; 1 - \lambda)B = K_{A^\dagger B}(\beta; 1 - \lambda) = K_{AB}^*(\beta; \lambda)$.

Другим важным свойством величины (3) как скалярного произведения является неравенство КБШ [4], которое удобно записать, используя всегда неотрицательную КБШ-разность:

$$\Delta_{AB}(\beta; \lambda) \equiv K_{AA}(\beta; \lambda)K_{BB}(\beta; \lambda) - |K_{AB}(\beta; \lambda)|^2, \quad \Delta_{AB}(\beta; \lambda) \geq 0. \quad (6)$$

Физический интерес представляет вопрос о том, влияет ли значение λ на величину (6) и, в частности, возможно ли при данных A , B и λ получить значение $\Delta_{AB}(\beta; \lambda) = 0$, т.е. насыщение неравенства КБШ.

Ограничимся в дальнейшем классом эрмитовых операторов $A = A^\dagger$, $B = B^\dagger$, для которых из (5) следует важное свойство симметрии $K_{AB}(\beta; \lambda) = K_{BA}(\beta; 1 - \lambda)$. В частности, при $A = B$ получаем для нормы оператора (метрики) $K_{AA}(\beta; \lambda) = K_{AA}(\beta; 1 - \lambda)$. Это свойство позволяет изучать $K_{AA}(\beta; \lambda)$ только на отрезке $0 \leq \lambda \leq 1/2$, причем метрики КМШ и ВЯ являются тогда граничными для семейства (3), а метрика БКМ сохраняет для этого семейства смысл интегральной характеристики.

Произведение некоммутирующих эрмитовых операторов A и B не является эрмитовым, поэтому квантовая корреляционная функция $K_{AB}(\beta; \lambda)$ при $A \neq B$ остается комплексной, так что $K_{AB}(\beta; \lambda) = K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda) + iK_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda)$; с учетом свойства симметрии (5) вещественная и мнимая части $K_{AB}^{(\pm)}(\beta; \lambda)$ могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda) &= \frac{1}{2} \{K_{AB}(\beta; \lambda) + K_{BA}(\beta; \lambda)\}, \\ K_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda) &= \frac{1}{2i} \{K_{AB}(\beta; \lambda) - K_{BA}(\beta; \lambda)\}. \end{aligned} \quad (7)$$

С помощью (7) выражение (6) для КБШ-разности можно записать в виде

$$\Delta_{AB}(\beta; \lambda) \equiv K_{AA}(\beta; \lambda)K_{BB}(\beta; \lambda) - \{[K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda)]^2 + [K_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda)]^2\}, \quad (8)$$

более удобном для применений, поскольку одна из величин $K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda)$ или $K_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda)$ часто оказывается равной нулю.

Величины $K_{AB}^{(\eta)}(\beta; \lambda)$, $\eta = \pm 1$, выражаются через коммутаторы ($\eta = -1$) или антикоммутаторы ($\eta = +1$) λ -деформированных операторов $A(\beta; \lambda)B + \eta B(\beta; \lambda)A$; последние, однако, не выражаются в замкнутом виде через коммутаторы или антикоммутаторы исходных операторов $[A, B]_\eta \equiv AB + \eta BA$ (пусть даже и λ -деформированные). Подобное выражение оказывается возможным лишь в предельных случаях $\lambda = 0$ или $\lambda = 1$ (для них имеет место верхний или нижний знак соответственно):

$$K_{AB}^{(+)}(\beta) = \pm \frac{1}{2} \langle [A, B]_+ \rangle, \quad K_{AB}^{(-)}(\beta) = \pm \frac{1}{2i} \langle [A, B]_- \rangle. \quad (9)$$

Заметим, что коммутатор и антикоммутатор $[A, B]_\eta$ пары эрмитовых операторов являются соответственно эрмитовым и антиэрмитовым операторами, $([A, B]_\eta)^\dagger = \eta[A, B]_\eta$.

Рассмотрим далее общие свойства гладкости квантового коррелятора $K_{AB}(\beta; \lambda)$ как непрерывной функции параметра λ . Дифференцируемость $K_{AB}(\beta; \lambda)$ обусловлена наличием для дробных степеней¹⁾ оператора $\rho(\beta)$ (непрерывных по λ) операторных уравнений Блоха:

$$\frac{1}{\beta} \frac{d}{d\lambda} \rho^\lambda = \rho^\lambda H, \quad \frac{1}{\beta} \frac{d}{d\lambda} \rho^{1-\lambda} = -H \rho^{1-\lambda}. \quad (10)$$

Очевидно, что операция дифференцирования по λ сохраняет общую структуру (3).

¹⁾Здесь учтено, что параметр λ входит в экспоненциальный оператор ρ^λ или $\rho^{1-\lambda}$ в мультипликативной форме.

Обозначая указанную операцию штрихом и используя перестановочность операций $d/d\lambda$ и Sp (что предполагает равномерную сходимость ряда (3)), имеем²⁾

$$\begin{aligned} K'_{AB}(\beta; \lambda) &= K_{CB}(\beta; \lambda), & K''_{AB}(\beta; \lambda) &= K_{DB}(\beta; \lambda), & \dots, \\ C &= [A, H]_-, & D &= [C, H]_- = [[A, H]_-, H]_-, & \dots, \end{aligned} \quad (11)$$

где коммутаторы A с H возрастающего порядка $C, D, \dots$ представляют собой правые части динамических уравнений движения того же порядка для оператора A и обращаются в нуль, если A является интегралом движения и коммутирует с H .

Для выражения (3) существует и обратная к (11) операция интегрирования по λ ³⁾:

$$\int d\lambda K_{AB}(\beta; \lambda) = K_{FB}(\beta; \lambda), \quad A = [F, H]_-, \quad (12)$$

так что выражение для скалярного произведения (метрики) БКМ принимает вид

$$K_{AB}^{\text{БКМ}}(\beta) \equiv \chi_{AB}(\beta) = \int_0^1 d\lambda K_{AB}(\beta; \lambda) = K_{FB}(\beta; 1) - K_{FB}(\beta; 0). \quad (13)$$

Величина $\chi_{AB}(\beta)$ согласно Кубо [10] и Мори [18] представляет собой изотермический “отклик” физической системы, состояние которой описывается оператором $\rho(\beta) = e^{-\beta H}$, на малое возмущение гамильтониана $H \rightarrow H(\varepsilon) = H + \varepsilon A$ ($\varepsilon \ll 1$). В качестве “отклика” обычно рассматривается вариация среднего значения $\delta\langle B^\dagger \rangle = \text{Sp} \delta\rho(\beta) B^\dagger$, где $\delta\rho(\beta) = e^{-\beta H(\varepsilon)} - e^{-\beta H}$. В низшем по ε приближении имеем $\delta\langle B^\dagger \rangle \approx \chi_{AB}(\beta)$, что и является определением обобщенной изотермической ($\beta = \text{const}$) восприимчивости $\chi_{AB}(\beta)$. С другой стороны, разность экспоненциальных операторов $\delta\rho(\beta)$ в том же низшем приближении выражается интегралом Дюамеля (см., например, [6]), где $dH(\varepsilon)/d\varepsilon = A$, откуда для $\chi_{AB}(\beta)$ следует выражение (13).

3. СПЕКТРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

λ -ДЕФОРМИРОВАННОГО СКАЛЯРНОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ

Удобным средством изучения общих выражений (3) и (11) для λ -деформированного скалярного произведения и его производных является спектральное представление величины $K_{AB}(\beta; \lambda)$, впервые полученное в работе [15]:

$$K_{AB}(\beta; \lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J_{AB}(\omega; \beta, \lambda), \quad J_{AB}(\omega; \beta, \lambda) = J_{AB}(\omega; \beta, 0) e^{\lambda\beta\hbar\omega}, \quad (14)$$

где ω – вещественная частота, $\hbar$ – постоянная Планка. Подобно $K_{AB}(\beta; \lambda)$, спектральная интенсивность $J_{AB}(\omega; \beta, \lambda)$ является комплексным функционалом.

Как показано Боголюбовым в работе [16] для случая $\lambda = 0$, величина $J_{AB}(\omega; \beta, 0)$ подобно $K_{AB}(\beta; 0)$ обладает всеми свойствами скалярного произведения и играет ключевую роль в методе функций Грина, развитом Боголюбовым и Тябликовым [17] и в принципе позволяющим найти искомую величину $J_{AB}(\omega; \beta, 0)$.

²⁾Более подробно вид и свойства этих производных будут изучены ниже в разделе 3.

³⁾Выражение (12) называют иногда тождеством Кубо или интегральным представлением коммутатора.

Существенно, что λ -деформация оставляет в силе все выводы, полученные в работе [16], поскольку вся зависимость от λ в (14) представлена только вещественным и положительным множителем⁴⁾ $e^{\lambda\beta\hbar\omega} \equiv e^{2\lambda\theta}$, где $\theta = \beta\hbar\omega/2$; очевидно, что $J_{AB}^{(n)}(\omega; \beta, \lambda) = (2\theta)^n J_{AB}(\omega; \beta, \lambda)$, где n – порядок производной по λ .

Используя представление (14) в выражениях для низших производных $K_{AB}(\beta; \lambda)$, получаем в правых частях (9) вместо повторных коммутаторов низшие частотные моменты функции $J_{AB}(\omega; \beta, \lambda)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta\hbar} K'_{AB}(\beta; \lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega J_{AB}(\omega; \beta, \lambda) \equiv \overline{\omega}(\beta, \lambda), \\ \left(\frac{1}{\beta\hbar}\right)^2 K''_{AB}(\beta; \lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 J_{AB}(\omega; \beta, \lambda) \equiv \overline{\omega^2}(\beta, \lambda); \end{aligned} \quad (15)$$

исходное выражение (14) имеет смысл $\overline{\omega^0}$.

Аналогично, интегрируя (14) по λ , получаем “обратный” момент:

$$\beta\hbar \int d\lambda K_{AB}(\beta; \lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^{-1} J_{AB}(\omega; \beta, \lambda) \equiv \overline{\omega^{-1}}(\beta, \lambda), \quad (16)$$

откуда находим

$$K_{AB}^{\text{BKM}}(\beta) \equiv \chi_{AB}(\beta) = \int_0^1 d\lambda K_{AB}(\beta; \lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{\beta\hbar\omega} - 1}{\beta\hbar\omega} J_{AB}(\omega; \beta, 0), \quad (17)$$

причем в высокотемпературном пределе $\beta\hbar\omega \ll 1$ имеем $K_{AB}^{\text{BKM}}(\beta) \approx K_{AB}^{\text{KMS}}(\beta)$.

Метрика БКМ была впервые получена Боголюбовым в работе [16] именно в форме правой части⁵⁾ (17) задолго до того, как в литературе появилось семейство метрик Вигнера–Яназе–Дайсона [12]. Заметим, что в целом подход Боголюбова–Тябликова [17] отличается от излагаемого здесь тем, что вместо вещественного “температурного” параметра λ в нем использовался чисто мнимый “временной” параметр $-it/\hbar\beta$ с заменой $e^{\lambda\beta\hbar\omega}$ на $e^{-it\omega/\hbar}$ и $d/d\lambda$ на $-id/dt$.

Благодаря этому λ -деформированный оператор фон Неймана $[\rho(\beta)]^\lambda = e^{-\lambda\beta H}$ переходит в обычный оператор динамической эволюции $U(t) = e^{-itH/\hbar}$, а операторное выражение $A(\beta; \lambda)$ из (3) – в представление Гейзенберга для оператора $A(\beta; 0)$. Соответственно в работе [17] вместо статической квантовой корреляционной функции $K_{AB}(\beta; \lambda)$ рассматривался ее временной аналог – функция $K_{AB}(\beta; t)$, где после дифференцирования по t в статическом пределе всегда полагается $t = 0$.

Ввиду полного совпадения (с точностью до указанной замены переменных) уравнений Блоха (10) для $\rho(\beta)$ и динамических уравнений движения Гейзенберга для $U(t)$ становится вполне естественным возникновение одинаковой структуры⁶⁾ правых частей (11) и выражений для частотных моментов $\overline{\omega^n}$, $n = -1, 0, 1, 2, \dots$.

⁴⁾Наличие этого множителя обусловлено появлением при $\lambda \neq 0$ оператора $\rho(\beta)$ в качестве множителя под знаком следа не в одном, как при $\lambda = 0$, а в двух местах.

⁵⁾Левая часть (17) в работе [16] не обсуждалась, поскольку логика введения Боголюбовым новой метрики базировалась на методе функций Грина (см. ниже замечание после формулы (19)).

⁶⁾Это совпадение известно под названием “правил сумм” и используется для контроля вычислений.

Согласно подходу Боголюбова–Тябликова все существенные черты рассматриваемой физической системы содержатся в выражении

$$J_{AB}(\omega; \beta, 0) = \sum_{\nu, \mu} A_{\nu\mu} B_{\mu\nu} e^{-\beta E_\nu} \delta(E_\nu - E_\mu - \hbar\omega), \quad J_{AA}(\omega; \beta, 0) \geq 0, \quad (18)$$

которое представляет собой явную запись следа от произведения операторов A и B , входящего в определения квантовых корреляторов (1)–(3). Здесь E_ν – вещественные собственные значения⁷⁾ эрмитова гамильтониана H , $A_{\nu\mu}$ и $B_{\mu\nu}$ – матричные элементы операторов A и B по точным собственным функциям H (предполагается, что они существуют, образуя полный ортонормированный базис).

В частности, при $B = A$ имеем $A_{\nu\mu} B_{\mu\nu} = |A_{\nu\mu}|^2$, так что величина $J_{AA}(\omega; \beta, 0)$ является вещественной и неотрицательной, что позволяет рассматривать ее как операторную норму (метрику). Функционал $J_{AB}(\omega; \beta, 0)$ обладает всеми свойствами скалярного произведения, присущими $K_{AB}(\beta; 0)$: действительно, его комплексность и билинейность по операторным аргументам A и B очевидны из определения (18), а согласно Боголюбову [16] для (18) выполняется и важнейшее свойство скалярного произведения

$$J_{BA}(\omega; \beta, 0) = J_{AB}^*(\omega; \beta, 0) = J_{AB}(-\omega; \beta, 0) e^{-\beta \hbar \omega}.$$

Существенно, что присущие величине $J_{AB}(\omega; \beta, 0)$ “хорошие” свойства не изменяются при умножении ее на любой строго положительный множитель, в общем случае зависящий от ω , β и λ ; в частности, при $\lambda \neq 0$ имеет место небольшая модификация указанного свойства симметрии:

$$J_{BA}(\omega; \beta, \lambda) = J_{AB}^*(\omega; \beta, \lambda) = J_{AB}(-\omega; \beta, 1 - \lambda). \quad (19)$$

Физический интерес представляют два случая, обобщающие операторную метрику $J_{AA}(\omega; \beta, 0) \equiv J_{AA}^{\text{KMS}}(\omega; \beta, 0)$: 1) случай метрики $J_{AA}^{\text{WYD}}(\omega; \beta, \lambda)$ при $\lambda \neq 0$, когда согласно (14) указанный множитель равен $e^{\lambda \beta \hbar \omega}$; 2) случай метрики $J_{AA}^{\text{BKM}}(\omega; \beta)$, когда согласно (17) указанный множитель равен $\varphi(\omega; \beta) = (e^{\beta \hbar \omega} - 1)/\beta \hbar \omega$; именно этот результат был впервые получен и сформулирован Боголюбовым в работе [16].

Разумеется, точно вычислить величину (18) удастся лишь относительно редко для простых модельных систем⁸⁾, однако в подходе Боголюбова–Тябликова имеется весьма эффективный способ вычисления $J_{AB}(\omega; \beta, 0)$ (для сложных систем, разумеется, приближенного) посредством аппарата двухвременных температурных запаздывающих и опережающих функций Грина (см. [17], [21]–[23]).

Именно, имеет место замечательная спектральная теорема, впервые установленная в работе [17]:

$$J_{AB}^{(\eta)}(\omega; \beta, 0)(e^{\beta \hbar \omega} + \eta) = G_{AB}^{(\eta)}(\omega + i\varepsilon) - G_{AB}^{(\eta)}(\omega - i\varepsilon), \quad (20)$$

⁷⁾Заметим, что при вырождении состояний, когда $E_\nu = E_\mu$, величина (18) имеет сингулярность $\delta(\omega)$.

⁸⁾В контексте данной работы в основном существенны свойства спектральной интенсивности (14) и (18), не требующие ее явного вычисления; пример такого вычисления будет приведен в разделе 5.

где E – комплексный аргумент фурье-образа $G_{AB}^{(\eta)}(E)$ коммутаторной или антикоммутаторной функции Грина с $\eta = +1$ или $\eta = -1$ соответственно. Величина $G_{AB}^{(\eta)}(E)$ удовлетворяет цепочке уравнений движения

$$EG_{AB}^{(\eta)}(E) = \frac{i}{2\pi} \langle [A, B]_{\eta} \rangle + G_{CB}^{(\eta)}(E),$$

где $C = [A, H]_-$ и т.д.; кроме того, $G_{AB}^{(\eta)}(E)$ обладает спектральным представлением и просто связана с рассмотренным выше (конец раздела 2) статическим изотермическим откликом:

$$G_{AB}^{(\eta)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J_{AB}^{(\eta)}(\omega; \beta, 0) \frac{e^{\beta\hbar\omega} + \eta}{E - \omega}, \quad \delta\langle B^{\dagger} \rangle = -2\pi G_{AB}^{(-)}(0).$$

Один из основных результатов § 5 работы Боголюбова [16] состоит в том, что нулевые фурье-образы функций Грина $G_{AB}^{(-)}(0)$ удовлетворяют аксиоматике комплексного скалярного произведения на алгебре операторов A, B , а пропорциональность $G_{AB}^{(-)}(0)$ вариации среднего значения $\delta\langle B^{\dagger} \rangle$ позволяет просто перенести эту аксиоматику на восприимчивости χ_{AB} (см. конец раздела 2).

4. СВОЙСТВА λ -ДЕФОРМИРОВАННОЙ ОПЕРАТОРНОЙ НОРМЫ

Положим $B = A$ в выражении (14) и рассмотрим подробнее свойства операторной нормы⁹⁾ $K_{AA}(\beta; \lambda) \geq 0$ и связанных с ней величин (15)–(17). Используя свойство (20) величины $J_{AA}(\omega; \beta, \lambda) \geq 0$, для которой замена ω на $-\omega$ равносильна замене λ на $1 - \lambda$, перейдем в (14)–(17) к интегрированию только по положительной полуоси $\omega \geq 0$:

$$\begin{aligned} K_{AA}(\beta; \lambda) &= \int_0^{\infty} d\omega J_{AA}(\omega; \beta, 0) \psi_+(\omega; \beta, \lambda), \\ \left(\frac{1}{\beta}\right)^2 K''_{AA}(\beta; \lambda) &= \int_0^{\infty} d\omega \omega^2 J_{AA}(\omega; \beta, 0) \psi_+(\omega; \beta, \lambda), \\ \frac{1}{\beta} K'_{AA}(\beta; \lambda) &= \int_0^{\infty} d\omega \omega J_{AA}(\omega; \beta, 0) \psi_-(\omega; \beta, \lambda), \\ \chi_{AA}(\beta) &= \int_0^{\infty} d\omega J_{AA}(\omega; \beta, 0) \varphi_-(\omega; \beta). \end{aligned} \tag{21}$$

Функции $\psi_{\pm}(\omega; \beta, \lambda)$ и $\varphi_{\pm}(\omega; \beta)$ определены равенствами

$$\psi_{\pm}(\omega; \beta, \lambda) = e^{\lambda\beta\hbar\omega} \pm e^{(1-\lambda)\beta\hbar\omega}, \quad \varphi_{\pm}(\omega; \beta) = \frac{e^{\beta\hbar\omega} \pm 1}{\beta\hbar\omega/2} \tag{22}$$

и удовлетворяют следующим полезным для дальнейшего соотношениям:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \psi_{\pm}(\omega; \beta, \lambda) &= \beta\hbar\omega \psi_{\mp}(\omega; \beta, \lambda), \\ \int_0^1 d\lambda \psi_+(\omega; \beta, \lambda) &= \varphi_-(\omega; \beta), \quad \int_0^1 d\lambda \psi_-(\omega; \beta, \lambda) = 0. \end{aligned} \tag{23}$$

⁹⁾Здесь и далее в этом разделе речь идет об общем случае метрик $K_{AA}^{\text{WYD}}(\beta; \lambda)$.

Часто удобна запись указанных функций с помощью переменной $\theta = \beta\hbar\omega/2 > 0$:

$$\begin{aligned} \varphi_+(\theta) &= 2e^\theta \frac{\text{ch } \theta}{\theta}, & \varphi_-(\theta) &= 2e^\theta \frac{\text{sh } \theta}{\theta}, & \frac{\varphi_-(\theta)}{\varphi_+(\theta)} &= \text{th } \theta \leq 1, \\ \psi_+(\theta; \lambda) &= 2e^\theta \text{ch} \left[2\theta \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \right], & \psi_-(\theta; \lambda) &= -2e^\theta \text{sh} \left[2\theta \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

Заметим, что функции $\varphi_-(\theta)$ и $\psi_+(\theta; \lambda)$ всегда положительно знакоопределены при любых значениях θ и λ , а функции $\varphi_+(\theta)$ и $\psi_-(\theta; \lambda)$ меняют знак вместе с θ . Кроме того, функция $\psi_+(\theta; \lambda)$ четна относительно замены λ на $1 - \lambda$, а функция $\psi_-(\theta; \lambda)$ нечетна, причем $\psi_-(\theta; \lambda) < 0$, если $0 \leq \lambda < 1/2$, или $\psi_-(\theta; \lambda) > 0$, если $1/2 < \lambda \leq 1$, так что $\psi_-(\theta; 1/2) = 0$.

Указанные свойства позволяют достаточно полно описать поведение трех величин из (21) при всех значениях λ ; положение $\chi_{AA}(\beta)$ в семействе $K_{AA}(\beta; \lambda)$ будет далее рассмотрено отдельно.

Первое из соотношений (21) подтверждает полученный ранее из общих соображений вывод (см. формулы (4) и (5)): все метрики $K_{AA}(\beta; \lambda)$, образующие семейство ВЯД, действительно являются строго положительными, обладают свойством симметрии $K_{AA}(\beta; \lambda) = K_{AA}(\beta; 1 - \lambda)$ и для них справедливы утверждения, сформулированные после формулы (6).

Отметим, что в формальном пределе бесконечной температуры $\beta = 0$ все метрики $K_{AA}(\beta; \lambda)$ становятся одинаковыми и равными предельному значению

$$K_{AA}(0) = 2 \int d\omega J_{AA}(\omega; 0, 0),$$

не зависящему от λ (интегрирование проводится по $\omega \geq 0$).

Второе и третье из соотношений (21) описывают свойства гладкости $K_{AA}(\beta; \lambda)$ как функции параметра деформации λ , которые не могли быть получены из общих соображений симметрии (4) и (5), поскольку для этого необходимо и целесообразно использование спектральных представлений (14). Из второго соотношения (21) следует свойство выпуклости вниз функции $K_{AA}(\beta; \lambda)$, поскольку $(d^2/d\lambda^2)K_{AA}(\beta; \lambda) > 0$ при всех значениях λ ; как видно из сравнения первого и второго соотношений (21), зависимость от λ второй производной функции $K_{AA}(\beta; \lambda)$ повторяет поведение самой этой функции. Из третьего соотношения (21) следует монотонное убывание функции $K_{AA}(\beta; \lambda) \geq 0$ на отрезке $0 \leq \lambda < 1/2$ от максимума $K_{AA}^{\text{KMS}}(\beta; 0)$ до минимума $K_{AA}^{\text{WY}}(\beta; 1/2)$: на этом отрезке производная $(d/d\lambda)K_{AA}(\beta; \lambda)$ отрицательна, но монотонно возрастает до нуля¹⁰⁾.

Учитывая, что максимальное и минимальное значения функции $\psi_+(\omega; \beta, \lambda)$ равны соответственно $\psi_+(\omega; \beta, 0) = 1 + e^{\beta\hbar\omega} = 2e^\theta \text{ch } \theta$ и $\psi_+(\omega; \beta, 1/2) = 2e^{\beta\hbar\omega/2} = 2e^\theta$, имеем

$$\begin{aligned} K_{AA}^{\text{KMS}}(\beta; 0) &= \int_0^\infty d\omega J_{AA}(\omega; \beta, 0)(1 + e^{\beta\hbar\omega}), \\ K_{AA}^{\text{WY}}(\beta; 1/2) &= 2 \int_0^\infty d\omega J_{AA}(\omega; \beta, 0)e^{\beta\hbar\omega/2}. \end{aligned} \quad (25)$$

¹⁰⁾ Указанное свойство в литературе иногда называют “сжатием метрики”.

Как и следовало ожидать, глобальная, или интегральная, метрика БКМ $K_{AA}^{\text{БКМ}}(\beta)$ занимает промежуточное место между экстремальными метриками (24), которое регулируется всегда положительным отношением¹¹⁾ $\varphi_-(\theta)/\psi_+(\theta; \lambda)$. Это следует из простых оценок $\psi_+(\theta; 1/2) \leq \varphi_-(\theta) \leq \psi_+(\theta; 0)$, или в явном виде $\text{cth } \theta \geq 1/\theta \geq 1/\text{sh } \theta$, что равносильно паре неравенств $\theta \geq \text{th } \theta$ и $\theta \leq \text{sh } \theta$. Эти неравенства обращаются в равенства лишь в предельном случае очень высоких температур $\theta = 0$.

Нетрудно показать и более точно, что при всех температурах $\theta > 0$ значение $K_{AA}^{\text{БКМ}}(\beta)$ находится ближе к $K_{AA}^{\text{WY}}(\beta; 1/2)$, чем к $K_{AA}^{\text{KMS}}(\beta; 0)$. Составим для этого две заведомо положительные разности

$$\Delta_1(\beta) = K_{AA}^{\text{KMS}}(\beta; 0) - K_{AA}^{\text{БКМ}}(\beta), \quad \Delta_2(\beta) = K_{AA}^{\text{БКМ}}(\beta) - K_{AA}^{\text{WY}}(\beta; 1/2)$$

и покажем, что $\Delta_1(\beta) - \Delta_2(\beta) \geq 0$. Как видно из соотношений (24) и последнего из равенств (21), величины $\Delta_1(\theta)$ и $\Delta_2(\theta)$ определяются соответственно двумя положительными разностями:

$$\begin{aligned} \Delta_1(\theta) &= \psi_+(\theta; 0) - \varphi_-(\theta) = (1 + e^{2\theta}) \left(1 - \frac{\text{th } \theta}{\theta} \right), \\ \Delta_2(\theta) &= \varphi_-(\theta) - \psi_+(\theta; 1/2) = 2e^\theta \left(\frac{\text{sh } \theta}{\theta} - 1 \right). \end{aligned}$$

Тогда искомая разность $\Delta_1(\theta) - \Delta_2(\theta)$ определяется всегда положительной величиной

$$\psi_+(\theta; 0) - 2\varphi_-(\theta) + \psi_+(\theta; 1/2) = (1 + e^\theta)^2 \left(1 - \frac{\text{th } \theta}{\theta} \right) + 2e^\theta \frac{\text{th } \theta}{\theta} (\text{ch } \theta - 1). \quad (26)$$

Еще одна физически интересная величина, а именно разность максимальной и минимальной метрик $K_{AA}^{\text{KMS}}(\beta; 0) - K_{AA}^{\text{WY}}(\beta; 1/2)$, определяется суммой $\Delta_1(\theta) + \Delta_2(\theta)$:

$$\Delta_1(\theta) + \Delta_2(\theta) = \psi_+(\theta; 0) - \psi_+(\theta; 1/2) = (1 - e^\theta)^2 \geq 0,$$

также положительной при всех $\theta > 0$, т.е. при всех температурах $T = 1/k_B\beta > 0$.

Однако знания указанных выше свойств операторной нормы $K_{AA}(\beta; \lambda)$ еще недостаточно для того, чтобы вычислить представляющую физический интерес КБШ-разность $\Delta_{AB}(\beta; \lambda) \geq 0$, определенную выражением (6). Для этого необходимо знать также зависимость от λ скалярного произведения $K_{AB}(\beta; \lambda)$, которую нетрудно найти, вновь перейдя к интегрированию только по положительным частотам.

С учетом свойств (16) вещественная и мнимая части $J_{AB}(\omega; \beta, 0)$ имеют вид

$$\begin{aligned} \text{Re } J_{AB}(\omega; \beta, 0) &= \frac{1}{2} J_{AB}^{(+)}(\omega; \beta, 0), \quad \text{Im } J_{AB}(\omega; \beta, 0) = \frac{1}{2i} J_{AB}^{(-)}(\omega; \beta, 0), \\ J_{AB}^{(\pm)}(\omega; \beta, 0) &\equiv J_{AB}(\omega; \beta, 0) \pm J_{AB}^*(\omega; \beta, 0) = J_{AB}(\omega; \beta, 0) \pm J_{BA}(\omega; \beta, 0). \end{aligned}$$

¹¹⁾ Это возможно благодаря всегда положительному множителю $J_{AA}(\omega; \beta, 0)$ во всех интегралах в равенствах (21).

Тогда λ -деформированное скалярное произведение можно записать в виде

$$\begin{aligned} K_{AB}(\beta; \lambda) &= K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda) + iK_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda), \\ K_{AB}^{(\pm)}(\beta; \lambda) &= \int_0^\infty d\omega J_{AB}^{(\pm)}(\omega; \beta, 0) \psi_{\pm}(\omega; \beta, \lambda), \end{aligned} \quad (27)$$

где величины $K_{AB}^{(\pm)}(\beta; \lambda)$, определенные в (7), входят в КБШ-разность в виде (8).

Аналоги величин $K_{AB}^{(\pm)}(\beta; \lambda)$ в метрике БКМ имеют вид

$$\chi_{AB}^{(+)}(\beta) = \int_0^1 d\lambda K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda) = \int_0^\infty d\omega J_{AB}^{(+)}(\omega; \beta, 0) \varphi_-(\omega; \beta), \quad \chi_{AB}^{(-)}(\beta) \equiv 0, \quad (28)$$

где использованы второе и третье из соотношений (23). Существенно, что в общем случае ненулевой вклад в недиагональную восприимчивость в метрике БКМ может давать только вещественная часть спектральной интенсивности $J_{AB}^{(+)}(\omega; \beta, 0)$.

Несмотря на внешнее сходство выражений (27) и (28) с выражениями (21), положительно определенное отношение $\varphi_-(\omega; \beta)/\psi_+(\omega; \beta, \lambda)$ уже не определяет (как это было в (26)) положение восприимчивости $\chi_{AB}^{(+)}(\beta)$ относительно недиагонального коррелятора $K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda)$. Это различие связано с отсутствием знакоопределенности величины $J_{AB}^{(\pm)}(\omega; \beta, 0)$ в отличие от $J_{AA}(\omega; \beta, 0)$ (см. сноску 11).

Аналогично относительное положение тождественно равной нулю восприимчивости $\chi_{AB}^{(-)}(\beta)$ и коррелятора $K_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda)$ не может быть определено однозначно, поскольку оно зависит от знаков входящих в (27) функций $\psi_-(\omega; \beta, \lambda)$ и $J_{AB}^{(+)}(\omega; \beta, 0)$, причем ни одна из них в общем случае не является знакоопределенной.

Минимизация КБШ-разности $\Delta_{AB}(\beta; \lambda)$ могла бы, на первый взгляд, достигаться при использовании метрики $K_{AA}^{WY}(\beta; 1/2)$, минимизирующей всегда положительное произведение $K_{AA}(\beta; \lambda)K_{BB}(\beta; \lambda)$, или уменьшаемое $\Delta_{AB}(\beta; \lambda)$. Однако нет никаких оснований считать, что при этом то же самое значение $\lambda = 1/2$ максимизирует также всегда положительную величину $|K_{AB}(\beta; \lambda)|^2$, или вычитаемое $\Delta_{AB}(\beta; \lambda)$. Более того, как будет показано ниже, для $|K_{AB}(\beta; \lambda)|^2$ имеет место как раз обратное поведение.

Рассмотрим практически важный случай, когда спектральная интенсивность оказывается чисто мнимой¹²⁾, так что $J_{AB}^{(+)}(\omega; \beta, 0) = 0$ и $K_{AB}^{(+)}(\beta; \lambda) = 0$. В этом случае вклад в вычитаемое КБШ-разности для семейства ВЯД определяется только величиной $|K_{AB}^{(-)}(\beta; \lambda)|^2$, неотрицательной при всех значениях λ , но в силу свойства $\psi_-(\omega; \beta, 1/2) = 0$ имеющей при $\lambda = 1/2$ абсолютный минимум, равный нулю. При этом, как было показано выше, обе величины, входящие в произведение $K_{AA}(\beta; \lambda)K_{BB}(\beta; \lambda)$ (уменьшаемое КБШ-разности), в силу свойств функции $\psi_+(\omega; \beta, \lambda)$ также достигают абсолютного минимума (отличного от нуля) в той же точке $\lambda = 1/2$. Для метрики БКМ в рассматриваемом случае равны нулю обе величины $\chi_{AB}^{(\pm)}(\beta)$, так что КБШ-разность содержит только уменьшаемое $\chi_{AA}(\beta)\chi_{BB}(\beta)$.

¹²⁾ Согласно спектральной теореме (19) это соответствует наличию у $G_{AB}(E)$ только вещественных полюсов; см. ниже пример в разделе 5.

Таким образом, априори нельзя утверждать, что значение $\lambda = 1/2$ (и, следовательно, “минимальная” метрика ВЯ) или какое-либо другое фиксированное значение λ (или даже метрика БКМ) доставляет минимум значению КБШ-разности для любой физической системы и любой пары операторов A и B .

Более того, как показывает простой модельный пример (раздел 5), возможны случаи, когда КБШ-разность для всего семейства метрик ВЯД вообще не зависит от λ и при этом не превышает КБШ-разности в метрике БКМ.

5. ПРИМЕР: ИДЕАЛЬНЫЙ СПИНОВЫЙ ПАРАМАГНЕТИК И АЛГЕБРА НАБЛЮДАЕМЫХ $SU(2)$

Рассмотрим идеальный газ N спинов, обладающих магнитным моментом $\mu = g\mu_B$ (g – фактор Ланде, μ_B – магнетон Бора) и находящихся в постоянном магнитном поле h , направленном вдоль оси z ; при этом газ помещен в термостат с обратной температурой $\beta > 0$. В этом случае наблюдаемые образуют алгебру $SU(2)$, включающую три независимых генератора $\{S_x, S_y, S_z\}$ с перестановочными соотношениями $[S_x, S_y]_- = iS_z$ и т.д. (циклические перестановки координат x, y, z). Оператор Казимира имеет вид $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = S(S+1)$, где $S \geq 1/2$ – спиновое квантовое число (целое или полуцелое), а гамильтониан системы (в расчете на один спин) соответствует учету энергии Зеемана спина в поле и равен $H/N = -\hbar\omega_0 S_z$, где $\hbar\omega_0 = \mu h$.

Рассмотрим обобщенное СН, или КБШ-разность, для пары операторов S_x и S_y , которые не являются интегралами движения, так что построенные из них λ -деформированные скалярные произведения $K_{\alpha\beta}(\beta; \lambda) \equiv \langle S_\alpha(\lambda) S_\beta \rangle$, $\alpha, \beta = x, y$, зависят от параметра λ . Для получения КБШ-разности необходимо, используя формулы (21) и (25), найти два диагональных коррелятора $K_{\alpha\alpha}(\beta; \lambda)$, равных друг другу в силу аксиальной симметрии системы, а также недиагональный коррелятор $K_{\alpha\beta}^{(\pm)}(\beta; \lambda)$, $\alpha \neq \beta$.

Следуя описанной в разделе 4 схеме, найдем соответствующие функции Грина $G_{xx}(E)$ и $G_{xy}(E)$ и спектральные интенсивности $J_{xx}(\omega)$ и $J_{xy}(\omega)$, используя простые уравнения движения для операторов

$$i\hbar \frac{dS_{x,y}}{dt} = [S_{x,y}, H]_- = \pm i\hbar\omega_0 S_{y,x}.$$

Здесь удобны коммутаторные функции Грина с $\eta = -1$, для которых имеет место система двух линейных уравнений

$$EG_{xy}(E) = -\frac{1}{2\pi} \sigma(\beta) + i\hbar\omega_0 G_{yy}(E), \quad EG_{yy}(E) = -i\hbar\omega_0 G_{xy}(E),$$

решения которой имеют вид суперпозиций двух полюсных членов вида $(E \pm \hbar\omega_0)^{-1}$.

Учитывая, что $(x \pm i\varepsilon)^{-1} = P(1/x) \mp i\pi\delta(x)$, найдем с помощью спектральной теоремы (20) следующие выражения для спектральных интенсивностей:

$$\begin{aligned} J_{xx}(\omega; \beta, 0) = J_{yy}(\omega; \beta, 0) &= \frac{1}{2} \sigma(\beta) [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}, \\ J_{xy}(\omega; \beta, 0) = J_{yx}^*(\omega; \beta, 0) &= \frac{i}{2} \sigma(\beta) [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)] (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь $\sigma(\beta) = (1/i)\langle [S_x, S_y]_- \rangle = \langle S_z \rangle$, причем $\sigma(\beta) \geq 0$ (явное выражение см. ниже в конце данного раздела). Очевидно, что в силу симметрии $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle$, причем $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$ с учетом свойства $[S_{x,y}, H]_- \neq 0$. Как видно из (29), $J_{xy}(\omega; \beta, 0)$ содержит только мнимую часть, так что только величина $J_{xy}^{(-)}(\omega; \beta, 0)$, а тем самым и $K_{xy}^{(-)}(\beta; \lambda)$, отлична от нуля, тогда как $K_{xy}^{(+)}(\beta; \lambda) \equiv 0$. В этом случае согласно (28) в метрике БКМ равна нулю не только восприимчивость $\chi_{xy}^{(-)}(\beta)$ (как всегда), но и $\chi_{xy}^{(+)}(\beta) \equiv 0$, так что

$$\chi_{xy}(\beta) = \chi_{xy}^{(+)}(\beta) + i\chi_{xy}^{(-)}(\beta) \equiv 0.$$

Полагая, как и ранее, $\theta = \beta\hbar\omega_0/2$ ($\theta \geq 0$), согласно формулам (21), (27) и (29) находим диагональные ($\alpha = \beta = x, y$) и недиагональные ($\alpha \neq \beta$) корреляторы $K_{\alpha\beta}^{\text{WYD}}(\beta; \lambda)$:

$$\begin{aligned} K_{xy}^{(-)}(\beta; \lambda) &= -\sigma(\beta)\psi_-(\omega_0; \beta, \lambda)(e^{\beta\hbar\omega_0} - 1)^{-1} = \sigma(\theta) \frac{\text{sh}[2\theta(1/2 - \lambda)]}{\text{sh } \theta}, \\ K_{xx}(\beta; \lambda) &= K_{yy}(\beta; \lambda) = \sigma(\beta)\psi_+(\omega_0; \beta, \lambda)(e^{\beta\hbar\omega_0} - 1)^{-1} = \sigma(\theta) \frac{\text{ch}[2\theta(1/2 - \lambda)]}{\text{sh } \theta}, \end{aligned} \quad (30)$$

а также диагональные и недиагональные обобщенные восприимчивости $K_{\alpha\beta}^{\text{БКМ}}(\beta) \equiv \chi_{\alpha\beta}(\beta)$:

$$\begin{aligned} \chi_{xx}(\theta) &= \chi_{yy}(\theta) = \sigma(\beta)\varphi_-(\omega_0; \beta)(e^{\beta\hbar\omega_0} - 1)^{-1} = \frac{\sigma(\theta)}{\theta}, \\ \chi_{xy}(\theta) &= \chi_{yx}(\theta) = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

В соответствии с общими результатами (раздел 4, после формулы (24)) для диагональных корреляторов и восприимчивостей имеем неравенства

$$\begin{aligned} K_{xx}\left(\theta; \frac{1}{2}\right) &\leq \chi_{xx}(\theta) \leq K_{xx}(\theta; 0), \\ K_{xx}(\theta; 0) &\equiv K_{xx}^{\text{KMS}}(\theta) = \sigma(\theta) \text{cth } \theta, \quad K_{xx}\left(\theta; \frac{1}{2}\right) = K_{xx}^{\text{WY}}(\theta) = \frac{\sigma(\theta)}{\text{sh } \theta}, \end{aligned}$$

а для недиагональных –

$$\begin{aligned} 0 &= K_{xy}\left(\theta; \frac{1}{2}\right) = \chi_{xy}(\theta) \leq K_{xy}(\theta; 0), \\ K_{xy}(\theta; 0) &= K_{xy}^{\text{KMS}}(\theta) = \sigma(\theta), \quad K_{xy}\left(\theta; \frac{1}{2}\right) = K_{xy}^{\text{WY}}(\theta) = 0. \end{aligned}$$

Видно, что в обоих случаях БКМ-восприимчивость не превышает значения КМШ-коррелятора, а равенство достигается лишь в высокотемпературном пределе $\theta = 0$; интересно, что $\chi_{xy}(\theta)$ уже не просто близок к $K_{xy}^{\text{WY}}(\theta)$, как это имеет место для их диагональных аналогов $\chi_{xx}(\theta)$ и $K_{xx}^{\text{WY}}(\theta)$, но и полностью совпадает с ним.

Искомая КБШ-разность

$$\Delta_{xy}(\beta; \lambda) = K_{xx}(\beta; \lambda)K_{yy}(\beta; \lambda) - |K_{xy}^{(-)}(\beta; \lambda)|^2$$

для λ -семейства ВЯД оказывается равной $[\sigma(\theta)/\text{sh } \theta]^2$, где учтены выражения (30) и тождество $\text{ch}^2 x - \text{sh}^2 x \equiv 1$. Таким образом, вопреки ожиданиям, $\Delta_{xy}(\beta; \lambda)$ в данной модели вообще не зависит от параметра деформации λ и просто совпадает со своим значением в исходной метрике КМШ при $\lambda = 0$.

С учетом (31) КБШ-разность в метрике БКМ равна $\Delta_{xy}(\theta) = [\sigma(\theta)/\theta]^2$, так что отношение $\Delta_{xy}^{\text{БКМ}}(\theta)/\Delta_{xy}^{\text{ВЯД}}(\theta) = [\text{sh } \theta/\theta]^2 \geq 1$ при всех θ (знак равенства достигается только при $\theta = 0$). Этот результат означает невозможность понижения значения КБШ-разности и, следовательно, минимизации обобщенного СН в форме Шредингера для любой пары некоммутирующих наблюдаемых в метрике БКМ по сравнению с метрикой КМШ (а в данном случае и для всего семейства метрик ВЯД).

По-видимому, физически это соответствует большей роли тепловых флуктуаций в формировании БКМ-восприимчивостей по сравнению с ВЯД-корреляторами. Разумеется, степень общности этого утверждения следовало бы проверить и на других, не столь простых, спиновых моделях (например, на модели Изинга).

Рассмотрим в заключение поведение КБШ-разности $\Delta_{xy}(\theta)$ в любой из метрик в предельных случаях низких ($T \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow \infty$) и высоких ($T \rightarrow \infty$, $\theta \rightarrow 0$) температур. Здесь принимается, что $\hbar = \text{const}$; учитывая, что переменная $\theta = (\hbar/2k_B)(\mu h/T)$, аналогичный расчет для КБШ-разности может быть проведен также и при фиксированной температуре $T = \text{const}$ для случаев высокополевого предела, когда $h \rightarrow \infty$, $\theta \rightarrow \infty$, и низкополевого предела, когда $h \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow 0$.

Уже на качественном уровне ясно, что при низких температурах $\sigma(\theta) \rightarrow \sigma_0 > 0$, так что $\Delta_{xy} \rightarrow 0$, т.е. при $T = 0$ для идеального спинового парамагнетика всегда имеет место насыщение СН Шредингера (для метрик ВЯД и БКМ будет различен лишь темп этого стремления по переменной θ).

В высокотемпературном (квазиклассическом) пределе ситуация несколько сложнее, поскольку при $\theta \rightarrow 0$ не только $\text{sh } \theta \rightarrow 0$, но также $\sigma(\theta) \rightarrow 0$, так что для $\Delta_{xy}(\theta)$ возникает неопределенность типа $0/0$; таким образом, необходимо располагать явным выражением для $\sigma(\theta)$ и его асимптотики при $\theta \rightarrow 0$.

Элементарный расчет по формуле (1), где $A = S_z$, $\rho(\theta) = (1/Z(\theta))e^{2\theta S_z}$, $Z(\theta) = \text{Sp } e^{2\theta S_z}$, $-S \leq S_z \leq S$, приводит к выражению для $\sigma(\theta) = (1/2)d \ln Z(\theta)/d\theta$ через известную в квантовой теории магнетизма функцию Бриллюэна $B_S(\theta)$:

$$\frac{\sigma(\theta)}{\sigma_0} = B_S(\theta) = \frac{1}{2S} [(2S+1) \text{cth}(2S+1)\theta - \text{cth } \theta], \quad B_S(\infty) = 1, \quad \sigma_0 = 2S. \quad (32)$$

В пределе $\theta \rightarrow 0$ имеют место разложения $\text{cth}(a\theta) \approx 1/a\theta + a\theta/3 + \dots$, $a > 0$, и $\text{sh } \theta \approx \theta$, причем расходящиеся слагаемые $O(1/\theta)$ в (32) точно компенсируются, так что в этом пределе из (32) следует $\sigma(\theta) \approx f(S)\theta$, откуда $\Delta_{xy}(\theta) \rightarrow f(S)$, где $f(S) = (4/3)S(S+1) > 0$.

Таким образом, в высокотемпературном пределе ни в одной из метрик не достигается насыщение СН для поперечных спиновых компонент S_x и S_y спинового парамагнетика, находящегося в продольном внешнем поле. Это может означать, что вклад тепловых (классических) флуктуаций в этом пределе превышает вклад квантовых флуктуаций в низкотемпературном пределе (в основном состоянии). Этот

вывод подтверждается тем, что $\Delta_{xy}(\theta)$ растет с ростом спинового квантового числа S , т.е. с возрастанием степени классичности рассматриваемой парамагнитной системы.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Целью настоящей работы являлась демонстрация важной роли, которую играет в квантовой статистической механике операторная метрика в алгебре физических наблюдаемых, введенная Боголюбовым в 1961 г. в замечательной работе [16]. Эта метрика, сформулированная в терминах нулевых фурье-образов функций Грина, позволила Боголюбову в той же работе изящно и просто получить свои знаменитые неравенства для корреляторов, что повлекло появление значительного количества работ (см., например, [23]). В дальнейшем оказалось, что метрика БКМ является глобальной, или интегральной, характеристикой однопараметрического семейства метрик ВЯД.

В настоящей работе проведен систематический анализ как диагональных, так и недиагональных корреляционных функций в зависимости от параметра “деформации” стандартной формы скалярного произведения КМШ, известной в функциональном анализе как метрика Гильберта–Шмидта. Одновременно рассмотрены также обобщенные изотермические восприимчивости, соответствующие метрике БКМ, и получены неравенства между указанными видами диагональных корреляторов.

При проведении анализа широко использованы спектральные представления, введенные Кэлленом и Вельтоном [20], но получившие истинное теоретическое значение после создания Боголюбовым и Тябликовым [17] метода двухвременных температурных запаздывающих и опережающих функций Грина, позволяющих обойти прямое вычисление матричных элементов операторов.

В работе показано, что в общем случае корреляторы в метрике БКМ занимают промежуточное положение между корреляторами в экстремальных метриках и обладают ясным физическим смыслом обобщенной изотермической восприимчивости.

В качестве иллюстрации подробно рассмотрен пример для алгебры наблюдаемых $SU(2)$ в простейшей модели идеального квантового спинового парамагнетика. В этой модели и диагональные, и недиагональные функции Грина пар спиновых операторов, не являющихся интегралами движения и не коммутирующих друг с другом, обладают двумя симметричными простыми полюсами, а соответствующие им спектральные интенсивности – дельта-образными пиками одного или противоположных знаков. Основной вывод из рассмотрения этого примера состоит в том, что обобщенное СН в форме Шредингера (известное в функциональном анализе как неравенство КБШ) может вообще не зависеть от параметра деформации, причем его значение в метрике БКМ мажорирует соответствующее значение в метрике ВЯД.

Обобщение метрики БКМ на случай бесконечных систем и неограниченных операторов в рамках подхода C^* -алгебр было дано Харрисоном и Уонгом [24]. Рёшторф [25] применил норму БКМ, обладающую логарифмической выпуклостью [15], для анализа магнитной восприимчивости в проблеме Кондо.

Метрика БКМ оказалась весьма полезной для развития так называемого метода параметрического оценивания в квантовой статистической механике, сформулированного в работах Хелстрема [26] и Холево [27]. В дальнейшем на этой основе

в некоммутативной теории вероятностей и математической статистике возникло направление, известное как геометростатистика (термин Колмогорова). Оно было начато Ченцовым [28] и Амари [29] и развивалось в работах [30]–[34].

В рамках метода параметрического оценивания вычисляется верхний предел точности определения s -численных параметров матрицы плотности, или, что эквивалентно, минимальная величина флуктуаций этих параметров¹³⁾. В классической математической статистике искомая граница устанавливается теоремой Фишера–Крамера–Рао с однозначным заданием матрицы Фишера, составленной из логарифмических производных оцениваемого вероятностного распределения. В геометростатистике матрица Фишера имеет смысл метрики в пространстве Римана параметров этого распределения. В классической статистической механике с каноническим (экспоненциальным) распределением матрица Фишера совпадает с матрицей обобщенных восприимчивостей по соответствующим параметрам и, следовательно, совпадает с корреляционной матрицей величин, термодинамически сопряженных оцениваемым параметрам. Так, в простейшем случае одномерного канонического распределения (пары β и H) неравенство Фишера–Крамера–Рао имеет смысл так называемого термодинамического СН Гиббса–Эйнштейна, поскольку матрица Фишера – это дисперсия энергии, а оцениваемая точность – дисперсия обратной температуры. В этом случае указанное неравенство оказывается насыщенным. Однако для некоммутативного аналога этого неравенства выбор матрицы Фишера становится неоднозначным. В частности, Петц и Тот [33] и Стритер [19] считают наилучшим выбором обобщенную восприимчивость в форме БКМ (более детальное обсуждение этих вопросов можно найти в работе [35]).

Заметим, что в работах [30]–[33] был введен и описан класс монотонных (сжимающих) метрик, значительно более общий по сравнению с рассмотренным здесь семейством метрик ВЯД и заслуживающий отдельного анализа с использованием аналога глобальной метрики БКМ, спектральных представлений и метода функций Грина в формулировке Боголюбова–Тябликова.

Список литературы

- [1] Н. Н. Боголюбов, А. А. Логунов, А. И. Оксак, И. Т. Тодоров, *Основы аксиоматического подхода в квантовой теории поля*, Наука, М., 1969.
- [2] Ж. Эмх, *Алгебраические методы в статистической механике и квантовой теории поля*, Мир, М., 1976.
- [3] У. Браттели, Д. Робинсон, *Операторные алгебры и квантовая статистическая механика*, Мир, М., 1982.
- [4] Р. Рихтмайер, *Принципы современной математической физики*, Т. 1, Мир, М., 1982.
- [5] И. фон Нейман, *Математические основы квантовой механики*, Наука, М., 1964.
- [6] С. Г. Крейн (ред.), *Функциональный анализ*, Справочно-математическая библиотека, Наука, М., 1972.
- [7] П. А. М. Дирак, *Принципы квантовой механики*, Физматгиз, М., 1960.
- [8] Н. Н. Боголюбов, “Лекции по квантовой статистике”, *Собрание научных трудов в 12 томах*, **6**, Наука, М., 2006, 9–235.

¹³⁾Ту же роль, но по отношению к операторам наблюдаемых, играет рассмотренная нами КВШ-разность, или обобщенное СН в форме Шредингера.

- [9] Л. Д. Фаддеев, О. А. Якубовский, *Лекции по квантовой механике для студентов-математиков*, Изд-во ЛГУ, Л., 1980.
- [10] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**:6 (1957), 570–602; *Вопросы квантовой теории необратимых процессов*, Проблемы физики, ред. В. Л. Бонч-Бруевич, ИЛ, М., 1961, 39–72.
- [11] P. C. Martin, J. Schwinger, *Phys. Rev.*, **115**:6 (1959), 1342–1373.
- [12] E. P. Wigner, M. M. Yanase, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **49** (1963), 910–918.
- [13] E. H. Lieb, *Adv. Math.*, **11**:3 (1973), 267–288.
- [14] F. Bauman, R. Jost, “Remarks on a conjecture of Robinson and Ruelle concerning the quantum mechanical entropy”, *Проблемы теоретической физики (к 60-летию акад. Н. Н. Боголюбова)*, ред. Д. И. Блохинцев, Наука, М., 1969, 285–293.
- [15] J. M. Luttinger, *Progr. Theoret. Phys.*, Suppl. No. 37–38 (1966), 35–45.
- [16] Н. Н. Боголюбов, “Квазисредние в задачах статистической механики”, *Собрание научных трудов в 12 томах*, **6**, Наука, М., 2006, 236–327; Н. Н. Боголюбов, *Квазисредние в задачах статистической механики*, Препринт Д-781, ОИЯИ, Дубна, 1961; *Избранные труды по статистической физике*, МГУ, М., 1979, 193–269.
- [17] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, *ДАН СССР*, **126** (1959), 53–56.
- [18] H. Mori, *Progr. Theoret. Phys.*, **33**:3 (1965), 423–455.
- [19] R. F. Streater, “The Information Manifold for Relatively Bounded Potentials”, *Проблемы современной математической физики*, Сб. статей К 90-летию со дня рождения академика Н. Н. Боголюбова, Тр. МИАН, **228**, Наука, М., 2000, 217–235.
- [20] H. B. Callen, T. A. Welton, *Phys. Rev.*, **83**:1 (1951), 34–40.
- [21] В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, *Метод функций Грина в статистической механике*, Физматлит, М., 1961.
- [22] Д. Н. Zubarev, Ю. А. Церковников, “Метод двухвременных температурных функций Грина в равновесной и неравновесной статистической механике”, *Теоретическая и математическая физика*, Тр. МИАН, **175**, Наука, М., 1986, 134–177.
- [23] Д. Рюэль, *Статистическая механика. Строгие результаты*, Мир, М., 1971.
- [24] J. C. Garrison, J. Wong, *Comm. Math. Phys.*, **26**:1 (1972), 1–5.
- [25] G. Roepstorff, *Comm. Math. Phys.*, **46**:3 (1976), 253–262.
- [26] К. Хелстром, *Квантовая проверка гипотез и оценивания*, Мир, М., 1979.
- [27] А. С. Холево, *Вероятностные и статистические аспекты квантовой теории*, ИКИ, Москва–Ижевск, 2003.
- [28] Н. Н. Ченцов, *Статистические решающие правила и оптимальные выводы*, Наука, М., 1972.
- [29] S.-I. Amari, *Differential Geometrical Methods in Statistics*, Lecture Notes in Statist. Vol. 28, Springer, New York, 1985.
- [30] Е. А. Морозова, Н. Н. Ченцов, “Марковская инвариантная геометрия на многообразиях состояний”, *Итоги науки и техники. Сер. Современ. пробл. матем.*, ВИНИТИ, М., 1990, 69–102.
- [31] D. Petz, *Linear Algebra Appl.*, **244** (1996), 81–96.
- [32] H. Hasegawa, D. Petz, “Non-commutative extension of information geometry”, *Quantum Communication, Computing and Measurement*, ed. H. Hirota, A. S. Holevo, C. M. Caves, Plenum, New York, 1997, 109–118.
- [33] D. Petz, G. Toth, *Lett. Math. Phys.*, **27**:3 (1993), 205–216.
- [34] Ш. Л. Люо, *ТМФ*, **143**:2 (2005), 231–240.
- [35] A. D. Sukhanov, Yu. G. Rudoy, “The geometrical aspects of the equilibrium statistical thermodynamics”, *Proc. of the 5-th Int. Conf. “Bolyai–Gauss–Lobachevsky” (BGL-5)* (Minsk, 10–13 Oct. 2006), eds. Yu. Kurochkin, V. Red’kov, Minsk, 2006, 63–75; <http://dragon.bas-net.by/bg15/proc.htm>.

Поступила в редакцию 5.02.2009