Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Д. Суханов, О. Н. Голубева, К квантовому обобщению
равновесной статистической термодинамики. $(\hbar - k)$ -
Динамика, *ТМФ*, 2009, том 160, номер 2, 370–384

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6404>

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: 44.207.124.84

26 апреля 2023 г., 12:53:06

© 2009 г.

А. Д. Суханов^{*†}, О. Н. Голубева[†]

К КВАНТОВОМУ ОБОБЩЕНИЮ РАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ. $(\hbar - k)$ -ДИНАМИКА

Показано, что квантовая статистическая механика (КСМ) при описании квантовых и тепловых свойств объектов имеет смысл только своеобразного квазиклассического приближения. Предложено более общее, чем в КСМ, микроописание объектов в термостате с явным учетом вакуума, названное $(\hbar - k)$ -динамикой. Сформулирована качественно новая модель окружения объекта – QT-стат. Исследованы ее свойства, включая случаи “холодного” и “теплого” вакуумов. Введен оператор стохастического воздействия и показана его фундаментальная роль в микроописании. Установлено, что соответствующий макропараметр – эффективное воздействие – играет столь же существенную роль в макроописании. Через него выражаются важнейшие эффективные макропараметры равновесной квантовой статистической термодинамики – внутренняя энергия, температура и энтропия.

Ключевые слова: $(\hbar - k)$ -динамика, QT-стат, “холодный” и “теплый вакуум”, оператор стохастического воздействия, эффективное воздействие, квантово-тепловая энтропия.

1. ВОЗМОЖНЫЕ ПОДХОДЫ К ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОМУ КВАНТОВО-ТЕПЛОВОМУ ОПИСАНИЮ ОБЪЕКТОВ ПРИРОДЫ

Довольно долго господствовало убеждение, согласно которому равновесная квантовая статистическая механика (КСМ) представляет собой не только адекватное описание микрообъектов в термостате, но и образует фундамент соответствующего макроописания. Иначе говоря, было принято считать, что КСМ позволяет вывести из микроописания термодинамические макропараметры и установить наблюдаемые взаимосвязи между ними (начала термодинамики, уравнения состояния и т.п.) [1]. Вместе с тем известно, что существуют такие макропараметры, например температура, аналоги которых на микроуровне до сих пор не рассматривались. Это привело к выдвижению идеи определенной самостоятельности и равноправия микро- и макроописаний природы при наличии некоторой взаимосвязи между ними [2], [3].

^{*}Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., Россия

[†]Российский университет дружбы народов, Москва, Россия. E-mail: ogol@oldi.ru

Проанализируем кратко проявившиеся к сегодняшнему дню элементы ограниченности равновесной КСМ как теории, претендующей на последовательное описание всех квантовых и тепловых явлений. В основе КСМ, как известно, лежит понятие матрицы (оператора) плотности, которая в энергетическом представлении имеет вид квантового канонического распределения Гиббса–фон Неймана

$$w_n = e^{(F - \varepsilon_n)/\Theta}, \quad (1)$$

где ε_n – спектр энергии объекта, F – свободная энергия, определяемая условием нормировки, а Θ – обратный модуль распределения. Он имеет смысл множителя Лагранжа при выводе распределения (1) из принципа максимума энтропии в условиях теплового равновесия [4].

Ограниченность КСМ проявляется в трех отношениях. Во-первых, распределение (1) нечувствительно к учету вклада энергии нулевых колебаний $\varepsilon_0 = \hbar\omega/2$ в энергию объекта, поскольку такой учет автоматически компенсируется изменением выражения для свободной энергии F вследствие условия нормировки. Между тем на опыте при сверхнизких температурах вклад энергии ε_0 – это вполне наблюдаемый эффект. Более того, как видно из модели квантового осциллятора, пренебрежение вкладом ε_0 равносильно пренебрежению принципиальной для квантовой физики величиной $\hbar/2$ в правой части соотношения неопределенностей Гейзенберга. Действительно, в основном состоянии квантового осциллятора

$$\Delta p_0 \Delta q_0 = \frac{\hbar}{2} = \frac{\varepsilon_0}{\omega}, \quad (2)$$

что подтверждает непосредственную связь между величинами ε_0 и $\hbar/2$.

Во-вторых, в КСМ предполагается, что температура объекта не флуктуирует, тогда как для малых объектов, включая наночастицы, при сверхнизких температурах флуктуации температуры на опыте достаточно заметны [5]. Кроме того, сегодня вызывает серьезные сомнения автоматически следующее из распределения (1) утверждение о равенстве нулю минимального значения энтропии [6].

В-третьих, отметим еще одну внутреннюю непоследовательность КСМ. Согласно формуле (1) в качестве обратного модуля распределения для любых объектов при любых температурах в КСМ используется выражение

$$\Theta = k_B T. \quad (3)$$

Это соответствует выбору классической модели термостата [7], [8] как совокупности слабо связанных классических осцилляторов. Однако в такой термостат помещается микрообъект с квантованной энергией, даже в условиях, когда $k_B T < (\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})$.

Иными словами, равновесная КСМ, основанная на распределении (1), не является последовательной теорией ни для квантовых, ни для тепловых явлений. Поэтому сегодня ее можно рассматривать лишь как своеобразное квазиклассическое приближение и по квантовым, и по тепловым характеристикам, определяемым соответственно постоянными Планка $\hbar$ и Больцмана k_B .

Конечно, нельзя полностью исключить возможность того, что ограниченность стандартной КСМ будет преодолена путем усовершенствования аппарата, основанного на операторе плотности для смешанных состояний. Однако, на наш взгляд,

для достижения последовательного квантово-теплового описания объектов природы возможны и два иных, отличных от КСМ, подхода. В их основе, тем не менее, лежит одна общая идея – замена классической модели термостата на адекватную квантовую модель, или кванто-термостат (QT-стат) [9]. В этой модели тепловое равновесие между объектом и окружением характеризуется эффективной температурой T_{eff} [10], имеющей ненулевое ограничение снизу. Эта величина учитывает совместное стохастическое воздействие окружения квантового и теплового типов.

При первом из этих подходов можно модифицировать макроописание объектов в термостате путем учета квантовых эффектов в рамках статистической термодинамики Эйнштейна (см. [11] и гл. 9 в [12]) с учетом флуктуаций температуры, но без использования операторного формализма. В этом случае, основываясь на интуитивных соображениях и физических аналогиях, мы приходим к квантовой статистической термодинамике [10] как феноменологической теории для макроописания объектов природы в условиях равновесия с окружением (включая случай $T = 0$).

Заметим, однако, что вполне допустим и второй подход, в рамках которого можно модифицировать фундаментальное микроописание тех же объектов в условиях теплового равновесия. Для этих целей предлагается сформулировать квантово-тепловую динамику, или кратко $(\hbar-k)$ -динамику ($\hbar kD$), как модификацию стандартной квантовой механики с учетом тепловых эффектов. Принципиальное отличие такой теории от КСМ состоит в том, что в ней в условиях контакта с QT-статом состояние микрообъекта в общем случае описывается не матрицей плотности, а комплексной волновой функцией, зависящей от температуры.

В настоящей статье, являющейся продолжением работы [13], в которой были введены исходные понятия $\hbar kD$, эта теория развивается далее как микроописание объекта в условиях теплового равновесия. В ее основу положен новый микропараметр – оператор стохастического воздействия. При этом продемонстрировано, что при усреднении соответствующих микропараметров по волновой функции, зависящей от температуры, можно получить важнейшие эффективные макропараметры, включая внутреннюю энергию, температуру и энтропию. Они будут иметь физический смысл стандартных термодинамических величин, характерных для феноменологического макроописания.

2. МОДЕЛЬ QT-СТАТА. “ХОЛОДНЫЙ” ВАКУУМ

При построении $\hbar kD$ мы исходим из того, что изолированных объектов в природе не существует. Иными словами, следуем модели Фейнмана [8], согласно которой любую систему можно представлять как совокупность исследуемого объекта и его окружения (“the rest of the Universe”). Окружение может оказывать на объект как регулярное, так и стохастическое воздействия. В данной работе мы исследуем только стохастическое воздействие. К нему можно отнести два типа воздействия – квантовое и тепловое, характеризуемые постоянными Планка и Больцмана соответственно.

Для описания окружения, оказывающего целостное стохастическое воздействие и названного ранее Умэдзавой [14] термополевым вакуумом, мы вводим конкретную модель – QT-стат. Она является естественным обобщением модели классического

термостата, используемого в стандартных теориях тепловых явлений [1]. В соответствии с этим QT-стат – это совокупность слабо связанных квантовых осцилляторов всех возможных частот. Прообразом такой модели в природе может служить равновесное тепловое излучение.

Особенность нашего понимания этой модели состоит в том, что мы считаем необходимым применять ее как к “теплому” ($T \neq 0$), так и к “холодному” ($T = 0$) вакуумам. Тем самым, в духе Эйнштейна (см. [15]) мы исходим из более общего понимания теплового равновесия, которое в принципе может установиться при любом типе стохастического воздействия окружения (чисто квантовом, квантово-тепловом и чисто тепловом).

Начнем изложение с рассмотрения “холодного” вакуума и обсудим с новой точки зрения описание одиночного квантового осциллятора из числа осцилляторов, образующих модель QT-стата при $T = 0$. В целях будущего обобщения на случай $T \neq 0$ наиболее пригодными оказываются не его известные собственные состояния $\Psi_n(q)$ в q -представлении, а когерентные состояния (КС) [16].

Напомним, однако, что низшее состояние в обоих наборах состояний одинаково. В представлении чисел заполнения этому состоянию соответствует “холодный” вакуум, в котором число частиц $n = 0$. В свою очередь, в q -представлении то же самое основное состояние квантового осциллятора описывается вещественной волновой функцией

$$\Psi_0(q) = [2\pi(\Delta q_0)^2]^{-1/4} e^{-q^2/4(\Delta q_0)^2}. \quad (4)$$

Вследствие свойств распределения Гаусса фурье-образ этой функции $\Psi_0(p)$ имеет аналогичный вид (с заменой q на p), причем дисперсии координаты и импульса равны соответственно

$$(\Delta p_0)^2 = \frac{\hbar m \omega}{2}, \quad (\Delta q_0)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (5)$$

Как известно, КС являются собственными состояниями неэрмитова оператора уничтожения частиц $\hat{a}$ с комплексными собственными значениями. Однако среди них есть одно выделенное состояние $|0_a\rangle$ вакуума частиц, в котором собственное значение оператора $\hat{a}$ равно нулю:

$$\hat{a}|0_a\rangle = 0|0_a\rangle. \quad (6)$$

В дальнейшем нам будет удобнее описывать QT-стат в q -представлении. Поэтому выразим операторы уничтожения $\hat{a}$ и рождения $\hat{a}^\dagger$ традиционным способом через операторы $\hat{p}$ и $\hat{q}$. Имеем

$$\hat{a} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{\Delta p_0^2}} - i \frac{\hat{q}}{\sqrt{\Delta q_0^2}} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}}{\sqrt{\Delta p_0^2}} + i \frac{\hat{q}}{\sqrt{\Delta q_0^2}} \right). \quad (7)$$

Тогда оператор числа частиц принимает вид

$$\hat{N}_a = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{\hbar \omega} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} - \frac{\hbar \omega}{2} \hat{I} \right), \quad (8)$$

где $\hat{I}$ – единичный оператор.

Сумма первого и второго слагаемых в последней скобке образует гамильтониан $\mathcal{H}$ квантового осциллятора, так что после домножения соотношения (8) слева и справа на $\hbar\omega$ получим стандартную взаимосвязь выражений для гамильтониана в q - и p -представлениях:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{N}_a + \frac{1}{2} \hat{I} \right). \quad (9)$$

С точки зрения термодинамики нас интересует внутренняя энергия квантового осциллятора, находящегося в равновесии с “холодным” QT-статом. Ее величина равна среднему от гамильтониана по состоянию $|0_a\rangle \equiv |\Psi_0(q)\rangle$:

$$U_0 = \langle \Psi_0(q) | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0(q) \rangle = \hbar\omega \langle \Psi_0(q) | \hat{N}_a | \Psi_0(q) \rangle + \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\omega}{2} = \varepsilon_0. \quad (10)$$

Из формулы (10) следует, что в данном случае состояние без частиц совпадает с состоянием гамильтониана с минимальной энергией ε_0 . Сама же величина ε_0 , традиционно трактуемая как энергия нулевых колебаний, приобретает физический смысл внутренней энергии U_0 квантового осциллятора в равновесии с “холодным” вакуумом.

3. МОДЕЛЬ QT-СТАТА. ПЕРЕХОД К “ТЕПЛОМУ” ВАКУУМУ

Переход от “холодного” к “теплому” вакууму в духе Умэдзавы можно осуществить с помощью (u, v) -преобразования Боголюбова с коэффициентами, зависящими от температуры:

$$u = \left(\frac{1}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \frac{1}{2} \right)^{1/2} e^{i\pi/4}, \quad v = \left(\frac{1}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} - \frac{1}{2} \right)^{1/2} e^{-i\pi/4}. \quad (11)$$

В данном случае указанное преобразование является каноническим, но приводит к унитарно-неэквивалентному представлению, поскольку QT-стат при любой температуре – это система с бесконечно большим числом степеней свободы.

В конечном итоге такое преобразование сводится к переходу от совокупности КС квантового осциллятора к более общей совокупности состояний, называемых тепловыми коррелированно-когерентными состояниями (ТККС) [14]. Они выделены тем, что обеспечивают насыщение соотношения неопределенностей Шредингера “координата-импульс” при любой температуре. С точки зрения аппарата вторичного квантования (u, v) -преобразование Боголюбова обеспечивает переход от исходной системы частиц с “холодным” вакуумом $|0_a\rangle$ к системе квазичастиц, описываемой операторами уничтожения $\hat{b}$ и рождения $\hat{b}^\dagger$ с “теплым” вакуумом $|0_b\rangle$. При этом выбор (11) коэффициентов преобразования фиксируется требованием, чтобы при любом способе описания выражение для средней энергии квантового осциллятора в тепловом равновесии определялось формулой Планка, которую можно получить из эксперимента:

$$\mathcal{E}_{Pl} = \hbar\omega (e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^{-1} + \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \quad (12)$$

Как было показано в работе [13], состоянию “теплого” вакуума $|0_b\rangle \equiv |\Psi_T(q)\rangle$ в q -представлении соответствует комплексная волновая функция

$$\Psi_T(q) = [2\pi(\Delta q)^2]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{q^2}{4(\Delta q)^2} (1 - i\alpha)\right\}, \quad (13)$$

где

$$(\Delta q)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}, \quad \alpha = \left[\operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right]^{-1}. \quad (14)$$

Для ее фурье-образа $\Psi_T(p)$ справедливо аналогичное выражение с тем же коэффициентом α и

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar m\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \quad (15)$$

Заметим, что выражения для плотностей вероятности $\rho_T(q)$ и $\rho_T(p)$ были получены еще Блохом [17]. Однако выражения для фаз, зависящих от параметра α , которые играют весьма существенную роль, ранее известны не были. Нетрудно также видеть, что при $T \rightarrow 0$ параметр $\alpha \rightarrow 0$, а сама функция $\Psi_T(q)$ из совокупности ТККС переходит в функцию $\Psi_0(q)$ из совокупности КС.

Разумеется, состояния из ТККС являются собственными состояниями неэрмитова оператора уничтожения квазичастиц $\hat{b}$ с комплексными собственными значениями. Среди них также есть одно выделенное состояние вакуума квазичастиц, в котором собственное значение оператора $\hat{b}$ равно нулю,

$$\hat{b}|0_b\rangle = 0|0_b\rangle. \quad (16)$$

Пользуясь условием (16) и выражением (13) для волновой функции “теплого” вакуума, находим выражение для оператора $\hat{b}$ в q -представлении:

$$\hat{b} = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{\Delta p_0^2}} - i \frac{\hat{q}}{\sqrt{\Delta q_0^2}} \left(\operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right)^{-1} (1 - i\alpha) \right]. \quad (17)$$

Соответствующий оператор рождения квазичастиц имеет вид

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{\Delta p_0^2}} + i \frac{\hat{q}}{\sqrt{\Delta q_0^2}} \left(\operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right)^{-1} (1 + i\alpha) \right]. \quad (18)$$

Можно убедиться, что при $T \rightarrow 0$ операторы $\hat{b}^\dagger$ и $\hat{b}$ для квазичастиц переходят в операторы $\hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}$ для частиц.

Действуя, как и выше, получим выражение для оператора числа квазичастиц в q -представлении

$$\hat{N}_b = \hat{b}^\dagger \hat{b} = \frac{1}{4} \left[\frac{\hat{p}^2}{\Delta p_0^2} + \frac{\hat{q}^2}{\Delta q_0^2} - 2 \left(\operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right)^{-1} \left(\hat{I} + \frac{\alpha}{\hbar} \{\hat{p}, \hat{q}\} \right) \right], \quad (19)$$

где при вычислении второго слагаемого было учтено, что $1 + \alpha^2 = \operatorname{cth}(\hbar\omega/2k_B T)$.

Переходя от оператора числа квазичастиц к исходному гамильтониану, после домножения на $\hbar\omega$ получим

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega \left[\hat{N}_b + \frac{1}{2} \left(\text{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right)^{-1} \left(\hat{I} + \frac{\alpha}{\hbar} \{ \hat{p}, \hat{q} \} \right) \right]. \quad (20)$$

Подчеркнем, что входящий в формулу (20) оператор $\{ \hat{p}, \hat{q} \}$ также можно выразить через билинейные комбинации операторов $\hat{b}^\dagger$ и $\hat{b}$, но они будут отличаться от оператора числа квазичастиц. Это означает, что операторы $\hat{\mathcal{H}}$ и $\hat{N}_b$ не коммутируют, так что волновая функция вида (13), характеризующая состояние “теплого” вакуума, не является собственной функцией гамильтониана.

Нас по-прежнему интересует термодинамическая величина – внутренняя энергия U квантового осциллятора, находящегося теперь в тепловом равновесии с “теплым” QT-статом. Вычисляя ее, как и в разделе 2, в q -представлении получим

$$U = \langle \Psi_T(q) | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_T(q) \rangle = \hbar\omega [\langle \Psi_T(q) | \hat{N}_b | \Psi_T(q) \rangle] + \frac{\hbar\omega}{2 \text{cth}(\hbar\omega/2k_B T)} \left(1 + \frac{\alpha}{\hbar} \langle \Psi_T(q) | \{ p, q \} | \Psi_T(q) \rangle \right). \quad (21)$$

Поскольку в формуле (21) усреднение ведется по вакууму квазичастиц, первое слагаемое в ней обращается в нуль. В то же время в работе [13] было показано, что

$$\langle \Psi_T(q) | \{ \hat{p}, \hat{q} \} | \Psi_T(q) \rangle = \hbar\alpha. \quad (22)$$

В результате для внутренней энергии квантового осциллятора в “теплом” QT-стате в рамках $\hbar kD$ получаем

$$U = \frac{\hbar\omega}{2 \text{cth}(\hbar\omega/2k_B T)} (1 + \alpha^2) = \frac{\hbar\omega}{2} \text{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T} = \mathcal{E}_{P1}, \quad (23)$$

где $\mathcal{E}_{P1}$ определяется формулой Планка (12). Это означает, что средняя энергия квантового осциллятора при $T \neq 0$ имеет термодинамический смысл его внутренней энергии в случае равновесия с “теплым” QT-статом. При $T \rightarrow 0$ она переходит в аналогичную величину, соответствующую равновесию с “холодным” QT-статом.

Хотя окончательный результат (23) получился вполне ожидаемым, из него следует ряд существенных выводов.

1. В отличие от вычисления внутренней энергии в КСМ, где все определяется плотностью вероятности $\rho_T(q)$, в $\hbar kD$ в то же самое выражение дает существенный вклад квадрат параметра α , определяющего фазу волновой функции, что свидетельствует о более последовательном использовании в этой теории квантовой идеологии.

2. В $\hbar kD$ выражение для $\text{cth}(\hbar\omega/2k_B T)$, входящее в формулу (23), появляется в ней как целостная величина, тогда как в КСМ вклад ε_0 в ту же формулу обычно возникает отдельно как добавочная, не имеющая термодинамического смысла величина, и потому часто вообще не учитывается.

3. В $\hbar kD$ операторы $\hat{\mathcal{H}}$ и $\hat{N}_b$ не коммутируют, поскольку гамильтониан содержит комбинации операторов типа $\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger$ и $\hat{b} \hat{b}$. Их присутствие свидетельствует о несохранении числа квазичастиц, что характерно для ситуации со спонтанным нарушением

симметрии [18]. По нашему мнению, предложенная модель QT-стата – это универсальная модель окружения, оказывающего стохастическое воздействие на объект. Поэтому проявления спонтанного нарушения симметрии в природе вовсе не должны ограничиваться феноменами сверхтекучести и сверхпроводимости.

4. ОПЕРАТОР СТОХАСТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Эффективное воздействие как макропараметр было постулировано ранее в рамках квантовой статистической термодинамики [10] путем обобщения представлений об адиабатических инвариантах [19]. Развиваемое здесь последовательное микроописание объекта в тепловом равновесии в рамках $\hbar kD$ будем основывать на модели QT-стата, описываемой волновой функцией вида (13).

Поскольку исходным положением $\hbar kD$ является идея целостного стохастического воздействия на объект со стороны QT-стата, для ее реализации введем новый оператор в гильбертовом пространстве состояний микрообъекта. В качестве наводящих соображений воспользуемся анализом правой части соотношения неопределенностей Шредингера “координата-импульс”

$$(\Delta p)^2 (\Delta q)^2 = |\tilde{R}_{pq}|^2. \quad (24)$$

Для любого объекта, а не только квантового осциллятора в термостате, комплексная величина в правой части (24)

$$\tilde{R}_{pq} = \langle \Delta p | \Delta q \rangle = \langle | \Delta \hat{p} \Delta \hat{q} | \rangle \quad (25)$$

имеет двоякий смысл. С одной стороны, она представляет собой амплитуду перехода из состояния $|\Delta q\rangle$ в состояние $|\Delta p\rangle$, с другой стороны, ее можно трактовать как среднее или квантовый коррелятор Шредингера по произвольному состоянию $|\rangle$ от некоторого оператора.

Как известно, отличие от нуля величины (25) является основополагающим признаком неклассической теории, в которой существенную роль играет стохастическое воздействие окружения на объект. Поэтому вполне естественно допустить, что стоящий под знаком среднего в формуле (25) оператор сам имеет фундаментальный смысл. С учетом соображений размерности назовем его оператором стохастического воздействия,

$$\hat{j} \equiv \Delta \hat{p} \Delta \hat{q}. \quad (26)$$

Разумеется, следует помнить, что операторы $\Delta \hat{q}$ и $\Delta \hat{p}$ между собой не коммутируют, а их произведение представляет собой неэрмитов оператор.

Для дальнейшего анализа, следуя Шредингеру (см. с. 473 в [20]), представим данный оператор в виде

$$\hat{j} = \frac{1}{2} \langle | \Delta \hat{p} \Delta \hat{q} + \Delta \hat{q} \Delta \hat{p} | \rangle + \frac{1}{2} \langle | \Delta \hat{p} \Delta \hat{q} - \Delta \hat{q} \Delta \hat{p} | \rangle = \hat{\sigma} - i \hat{j}_0, \quad (27)$$

что позволяет отделить в нем эрмитову часть (оператор $\hat{\sigma}$) от антиэрмитовой, в которой эрмитов оператор

$$\hat{j}_0 \equiv \frac{i}{2} [\hat{p}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{2} \hat{I}. \quad (28)$$

Нетрудно видеть, что среднее значение $\sigma = \langle |\hat{\sigma}| \rangle$ оператора $\hat{\sigma}$ напоминает выражение для стандартного коррелятора флуктуаций координаты и импульса из классической теории вероятностей, в которое оно переходит при замене операторов $\Delta\hat{q}$ и $\Delta\hat{p}$ на c -числа. Оно отражает вклад в амплитуду перехода $\tilde{R}_{pq}$ стохастического воздействия окружения. Поэтому впредь будем называть оператор $\hat{\sigma}$ оператором внешнего воздействия. Ранее возможность использовать подобный оператор обсуждалась в работе Боголюбова и Крылова [7]. В ней он рассматривался как квантовый аналог классической переменной действия в совокупности переменных действие–угол.

В то же время как оператор $\hat{j}_0$, так и оператор $\hat{j}$ в целом ранее не вводились. Оператор вида (28) отражает специфическую особенность объектов независимо от их состояния “чувствовать” минимальное стохастическое воздействие “холодного” вакуума и адекватно реагировать на него. Поэтому его следует трактовать как оператор минимального стохастического воздействия. Его среднее значение $J_0 = \hbar/2$ не зависит от выбора состояния, по которому производится усреднение, так что оно имеет смысл инвариантного собственного значения оператора $\hat{j}_0$.

Отсюда следует, что в данном случае мы имеем дело с универсальной величиной J_0 , которую мы будем называть минимальным воздействием. Ее фундаментальный характер определяется уже тем, что она связана с мировой постоянной Планка $\hbar$. Однако этим все не исчерпывается. Действительно, согласно традиции, восходящей к Планку, саму величину $\hbar$ принято называть элементарным квантом действия. В то же время в величине J_0 существенную роль играет множитель $1/2$, тогда как половины кванта действия в природе не наблюдается. Тем самым, по нашему мнению, величины $\hbar$ и $\hbar/2$, совпадая по размерности, имеют различный физический смысл и потому должны именоваться по-разному. С этой точки зрения было бы более естественно называть величину $\hbar$ квантом внешнего воздействия.

Таким образом, величина $\hbar$ – это минимальная порция воздействия, передаваемого объекту от внешнего окружения или от другого объекта. Поэтому фотон и другие кванты полей – переносчиков фундаментальных взаимодействий, прежде всего, являются переносчиками минимального воздействия, равного $\hbar$. То же самое относится, конечно, и к фононам.

Наконец, заметим, что только величина $\hbar$ связана с дискретностью спектра энергии квантового осциллятора в отсутствие термостата. В то же время величина $\hbar/2$ имеет самостоятельный физический смысл, определяя согласно формуле (10) минимальное значение макропараметра – внутренней энергии U_0 квантового осциллятора в “холодном” QТ-стате (при $T = 0$).

Оценим особенности оператора стохастического воздействия, используемого ниже в микроописании. Напомним, что этот оператор является неэрмитовым. Это обстоятельство, казалось бы, противоречит стандартным требованиям, предъявляемым к операторам наблюдаемых в квантовой механике. Однако на самом деле

в этом факте нет ничего необычного. Конечно, для эрмитовых операторов характерно наличие собственных состояний с вещественными собственными значениями, которые принято сопоставлять наблюдаемым величинам. Но с физической точки зрения такие собственные значения не столь уж интересны, ибо они характеризуют нечто неизменное, как, например, стационарные состояния.

Другое дело, если нас интересует подлинная квантовая динамика, которую естественно ассоциировать с переходами из одного состояния в другое. В этом случае важнейшую роль играют как раз неэрмитовы операторы. К числу наиболее известных из них относятся операторы рождения и уничтожения или, например, матрица рассеяния. В этом же ряду занимает свое место и оператор стохастического воздействия.

Чтобы продемонстрировать близость этого оператора к другим операторам квантовой механики, сравним его, например, со стандартным оператором импульса. Нетрудно убедиться в том, что собственное значение оператора импульса вещественно и отлично от нуля только в единственном случае, когда волновая функция представляет собой бесконечную гармоническую волну де Бройля. Однако, строго говоря, такая волновая функция вообще не принадлежит гильбертову пространству (напомним, что в импульсном представлении ее прообразом служит функция $\delta(p - p_0)$). Поэтому в общем случае оператор импульса, действуя на произвольную функцию $\Psi_T(q)$, просто переводит ее в другую функцию: $\Phi_T(q) \equiv \hat{p}\Psi_T(q)$. Тем самым оператор $\hat{p}$ фактически проявляет себя как оператор перехода из одного состояния в другое и не более того. Хотя оператор импульса и эрмитов, эта его особенность сказывается только в одном состоянии.

Таким образом, оператор $\hat{j}$ выделен только тем, что имеет смысл оператора перехода из одного состояния в другое в результате стохастического воздействия окружения на объект.

5. ЭФФЕКТИВНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ КАК ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ МАКРОПАРАМЕТР. ВЗАИМОСВЯЗЬ С ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИЕЙ И ЭФФЕКТИВНОЙ ТЕМПЕРАТУРОЙ

Перейдем к макроописанию объектов на основе их микроописания в рамках $\hbar kD$. Нетрудно видеть, что среднее значение $\tilde{J}$ оператора $\hat{j}$ вида (27) совпадает с комплексной амплитудой перехода $\tilde{R}_{pq}$ и в тепловом равновесии может быть представлено в виде

$$\tilde{J} = \langle \Psi_T(q) | \hat{j} | \Psi_T(q) \rangle = \sigma - iJ_0, \quad (29)$$

где σ и J_0 – средние значения соответствующих операторов. Модуль комплексной величины $\tilde{J}$, равный

$$|\tilde{J}| = \sqrt{\sigma^2 + J_0^2} = \sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2}{4}} \equiv J_{\text{eff}}, \quad (30)$$

мы будем ниже рассматривать как новый макропараметр и называть его эффективным воздействием. Для квантового осциллятора он имеет вид

$$J_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \quad (31)$$

Эта величина совпадает с аналогичной величиной, постулированной ранее в работе [10] из интуитивных соображений.

Установим теперь взаимосвязь эффективного воздействия с традиционными термодинамическими величинами. Сравняя выражение (31) для J_{eff} и (23) для внутренней энергии U нетрудно видеть, что для квантового осциллятора

$$U = \omega |\tilde{J}| = \omega J_{\text{eff}}. \quad (32)$$

В пределе высоких температур, когда

$$\sigma \rightarrow J_T = \frac{k_B T}{\omega} \gg \frac{\hbar}{2}, \quad (33)$$

соотношение (32) принимает вид

$$U = \omega J_T. \quad (34)$$

Эта формула была получена ранее Больцманом [19] для макропараметров в классической термодинамике путем обобщения представления об адиабатических инвариантах, используемых в классической механике.

Соотношение (32) позволяет также представить в явном виде взаимосвязь эффективного воздействия с эффективной температурой T_{eff} [10]:

$$T_{\text{eff}} = \frac{\omega}{k_B} J_{\text{eff}}. \quad (35)$$

Отсюда следует, что

$$T_{\text{eff}}^{\text{min}} = \frac{\omega}{k_B} J_0 = \frac{\hbar \omega}{2k_B} \neq 0. \quad (36)$$

Наконец, заметим, что с помощью формул (32), (14) и (15) соотношению неопределенностей Шредингера для квантового осциллятора при $T \neq 0$ можно придать вид, аналогичный выражению (2) для случая $T = 0$,

$$\Delta p \cdot \Delta q = |\tilde{J}| = \frac{U}{\omega}. \quad (37)$$

Чтобы подчеркнуть роль макропараметра J_{eff} , дадим формуле (30) геометрическую трактовку. Напомним, что переход от основного состояния квантового осциллятора, принадлежащего КС, к состоянию “теплого” QТ-стата, принадлежащего ТККС, осуществляется с помощью (u, v) -преобразования Боголюбова. Оно образует группу Ли в пространстве состояний, локально изоморфную группе Лоренца в двумерном мире событий. Это означает, что в ТККС мы можем рассматривать совокупность (J_{eff}, σ) как двумерный времениподобный вектор в псевдоевклидовом пространстве состояний, а величину $J_0 = \hbar/2$ – как длину этого вектора или инвариант соответствующей группы [21]:

$$J_{\text{eff}}^2 - \sigma^2 = J_0^2 = \frac{\hbar^2}{4} = \text{inv}. \quad (38)$$

Роль традиционных лоренцевых множителей β и γ в данном случае играют величины

$$\beta_T = \left[\text{ch} \frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right]^{-1}, \quad \gamma_T = \text{cth} \frac{\hbar \omega}{2k_B T}. \quad (39)$$

Нетрудно видеть, что вектор эффективного воздействия (J_{eff}, σ) представляет собой аналог двумерного вектора энергии-импульса (ε, pc) в релятивистской механике:

$$\varepsilon^2 - p^2 c^2 = \varepsilon_0^2 = m^2 c^4. \quad (40)$$

В частности, для квантового осциллятора в ТККС величина J_{eff} является аналогом $\mathcal{E}$, а σ – аналогом pc . Если учесть взаимосвязь (32) внутренней энергии квантового осциллятора с эффективным воздействием, то выражение (38) примет вид

$$U^2 - \sigma^2 \omega^2 = U_0^2 = \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right)^2. \quad (41)$$

По физическому смыслу формулы (41) и (38) полностью аналогичны соотношению (40), характеризующему так называемую массовую оболочку в двумерном пространстве событий.

6. ЭФФЕКТИВНАЯ ЭНТРОПИЯ В $(\hbar - k)$ -ДИНАМИКЕ

Возможность введения энтропии в рамках $\hbar kD$ также опирается на использование волновой функции вместо оператора плотности. Для определения этой величины в качестве исходного мы принимаем формальное выражение

$$-k_B \left\{ \int \rho(q) \ln \rho(q) dq + \int \rho(p) \ln \rho(p) dp \right\}, \quad (42)$$

предложенное ранее в работе [22] (см. также [23]). Здесь $\rho(q) = |\Psi(q)|^2$ и $\rho(p) = |\Psi(p)|^2$ – размерные вероятности в координатном и импульсном представлениях соответственно.

Используя выражение (13) для волновой функции квантового осциллятора, приведем $\rho(q)$ к безразмерному виду:

$$\tilde{\rho}(\tilde{q}) = \left[\text{cth} \frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right]^{-1} e^{-\tilde{q}^2/2}, \quad \tilde{q}^2 = \frac{q^2}{(\Delta q)^2 \delta}, \quad (43)$$

где δ – произвольная константа. Аналогичное выражение для ее фурье-образа $\tilde{\rho}(\tilde{p})$ отличается лишь заменой q на p .

Используя безразмерные выражения, мы предлагаем определить энтропию в рамках $\hbar kD$ равенством

$$S_{qp} = -k_B \left\{ \int \tilde{\rho}(\tilde{q}) \ln \tilde{\rho}(\tilde{q}) d\tilde{q} + \int \tilde{\rho}(\tilde{p}) \ln \tilde{\rho}(\tilde{p}) d\tilde{p} \right\}. \quad (44)$$

После подстановки в (44) соответствующих выражений для $\tilde{\rho}(\tilde{q})$ и $\tilde{\rho}(\tilde{p})$ получим

$$S_{qp} = k_B \left\{ \left(1 + \ln \frac{2\pi}{\delta} \right) + \ln \text{cth} \frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right\}. \quad (45)$$

Очевидно, что окончательный результат зависит от выбора постоянной δ .

При выборе $\delta = 2\pi$ данное выражение можно трактовать как квантово-тепловую энтропию, или кратко QT-энтропию S_{QT} , ибо она в точности совпадает с эффективной энтропией, полученной в работе [10]. Это обеспечивает согласованность основных результатов предлагаемых нами микро- и макроописаний и их соответствие эксперименту.

К модификации исходного формального выражения (42) можно подойти и с другой стороны. Объединив в нем оба слагаемых, представим его в виде

$$-k_B \int dp dq \{ \rho(p) \rho(q) \} \ln \{ \rho(p) \rho(q) \}. \quad (46)$$

Нетрудно видеть, что выражение в фигурных скобках – это функция Вигнера для квантового осциллятора в термостате

$$W(p, q) = \rho(p) \rho(q) = \{ 2\pi \Delta q \Delta p \}^{-1} \exp \left\{ -\frac{p^2}{2(\Delta p)^2} - \frac{q^2}{2(\Delta q)^2} \right\}. \quad (47)$$

После подстановки в формулу (41) явных выражений (14) и (15) для Δq и Δp функция Вигнера принимает вид

$$W(p, q) = \frac{\omega}{2\pi k_B T_{\text{eff}}} e^{-\varepsilon/k_B T_{\text{eff}}}, \quad (48)$$

где $\varepsilon(p, q)$ – случайная энергия классического осциллятора в QT-стате с эффективной температурой вида (35).

Замена переменных в фазовом пространстве и переход к безразмерной функции Вигнера с учетом ее нормировки позволяет придать выражению (46) вид QT-энтропии

$$S_{QT} = -k_B \int d\tilde{\varepsilon} \widetilde{W}(\tilde{\varepsilon}) \ln \widetilde{W}(\tilde{\varepsilon}), \quad (49)$$

где

$$\widetilde{W} = \frac{\hbar\omega/2}{k_B T_{\text{eff}}} e^{-\varepsilon/k_B T_{\text{eff}}}. \quad (50)$$

Таким образом, модификация выражения (42) приводит в рамках $\hbar kD$ к выражениям для QT-энтропии вида (45) (при $\delta = 2\pi$) или (49). С микроскопической точки зрения они обосновывают выражение для эффективной энтропии как макропараметра в равновесной квантовой статистической термодинамике [10]. Заметим, что традиционное выражение для энтропии в КСМ оказывается лишь квазиклассическим приближением к предложенной выше QT-энтропии.

7. НЕКОТОРЫЕ ИТОГИ

Предыдущее изложение показало, что на основе развиваемой здесь $\hbar kD$ эффективное воздействие J_{eff} можно ввести как новый фундаментальный макропараметр. Его преимущество состоит в том, что в данном случае у него есть микроскопический прообраз – оператор стохастического воздействия $\hat{j}$. Более того, через него же в принципе можно выразить основные термодинамические характеристики объектов в тепловом равновесии. Среди них, как известно, наиболее фундаментальными

являются температура и энтропия. Принято считать, что они не имеют микроскопических прообразов, но при этом обобщенно учитывают стохастическое воздействие окружения на объект. При традиционном изложении о температуре говорят как о “степени нагретости”, а об энтропии – как о “мере хаотичности” системы.

При использовании понятия эффективного воздействия этим эвристическим соображениям можно придать наглядный смысл. Для этого обратимся к выражению (35) для T_{eff} . Из него следует, что эффективное воздействие также является *интенсивным* макропараметром, характеризующим стохастическое воздействие “теплого” QT-стата.

С учетом этого нулевому началу равновесной квантовой статистической термодинамики можно придать вид

$$J_{\text{eff}} = J_{\text{eff}}^{\text{therm}} \pm \Delta J_{\text{eff}}, \quad (51)$$

где $J_{\text{eff}}^{\text{therm}}$ – эффективное воздействие QT-стата, а J_{eff} и ΔJ_{eff} – среднее значение эффективного воздействия объекта и стандартное отклонение от него. Фактически состояние теплового равновесия можно впредь описывать в духе Ньютона, считая, что в таких ситуациях “стохастическое воздействие равно стохастическому противодействию”.

Обратимся теперь к эффективной энтропии. В отсутствие механического контакта ее дифференциал равен

$$dS_{\text{eff}} = \frac{\delta Q_{\text{eff}}}{T_{\text{eff}}} = \frac{dU}{T_{\text{eff}}}. \quad (52)$$

Подставляя в это соотношение выражения для внутренней энергии (32) и эффективной температуры (35), получим

$$dS_{\text{eff}} = k_B \cdot d \left(\ln \frac{J_{\text{eff}}}{J_0} \right) = dS_{\text{QT}}. \quad (53)$$

Из соотношения (53) следует, что эффективная, или QT-энтропия, будучи *экстенсивным* макропараметром, также выражается через J_{eff} .

В итоге оказывается, что две качественно различные характеристики тепловых явлений – эффективная температура и эффективная энтропия – на макроуровне олицетворяют собой наличие в природе двух сторон процесса стохастизации характеристик объекта за счет контакта QT-статом. Они при любых температурах могут быть выражены через один и тот же макропараметр – эффективное воздействие. Этот макропараметр имеет в качестве микроскопического прообраза в $\hbar kD$ оператор стохастического воздействия, зависящий совместно от постоянных Планка и Больцмана.

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность редколлегии журнала за предоставленную возможность опубликовать статью в номере, посвященном столетию со дня рождения Н. Н. Боголюбова. Один из нас (А. Д. Суханов) испытывал радость общения с Николаем Николаевичем на протяжении более тридцати пяти лет. Можно утверждать, что исходная концепция Боголюбова о необходимости совместного рассмотрения квантовых и тепловых эффектов, которую он отстаивал с 1939 г., в значительной мере определила направленность данной работы.

Выражаем также признательность участникам конференции “Renormalization Group and Related Topics” (Дубна, сентябрь 2008 г.) и семинаров ЛТФ им. Н. Н. Боголюбова (ОИЯИ), кафедры теоретической физики РУДН и ИТФ им. Н. Н. Боголюбова НАНУ (Киев) за полезные дискуссии.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-06-00239).

Список литературы

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*. Ч. 1, Физматлит, М., 2001.
- [2] Р. Б. Лафлин, *УФН*, **170**:3 (2000), 292–303; R. B. Laughlin, *Rev. Modern Phys.*, **71**:4 (1999), 863–874.
- [3] А. Д. Суханов, *ЭЧАЯ*, **36**:6 (2005), 1281–1342.
- [4] Д. Н. Zubarev, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Физматлит, М., 1971.
- [5] J. Wu, A. Widom, *Phys. Rev. E*, **57**:5 (1998), 5178–5183.
- [6] D. T. Son, A. O. Starinets, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, **57**:1 (2007), 95–118; [arXiv:0704.0240](#).
- [7] Н. Н. Боголюбов, Н. М. Крылов, “Об уравнениях Фоккера–Планка”, *Записки кафедры математической физики АН УССР*, **4**, 1939, 5–80; Н. Н. Боголюбов, “Об уравнениях Фоккера–Планка”, *Собрание научных трудов*. Т. V, ред. А. Д. Суханов, Наука, М., 2006, 58–137.
- [8] Р. Фейнман, *Статистическая механика*, Мир, М., 1975.
- [9] N. N. Bogoliubov, *Kinetic equations for the electron-phonon system*, E17-11822, JINR, Dubna, 1978; Н. Н. Боголюбов, *Собрание научных трудов*. Т. V, ред. А. Д. Суханов, Наука, М., 2006, 639–689.
- [10] А. Д. Суханов, *ТМФ*, **154**:1 (2008), 183–196.
- [11] A. Einstein, *Ann. Phys.*, **9** (1902), 417–433; **11** (1903), 170–187; **14** (1904), 351–362; А. Эйнштейн, “Кинетическая теория теплового равновесия и второго начала термодинамики”; “Теория основ термодинамики”; “К общей молекулярной теории теплоты”, *Собрание научных трудов*. Т. III, Наука, М., 1966, 34–49; 50–66; 67–74.
- [12] Дж. В. Гиббс, *Основные принципы статистической механики*, Гостехиздат, М., 1946.
- [13] А. Д. Суханов, *ТМФ*, **148**:2 (2006), 295–308.
- [14] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro and Thermal Physics*, AIP, New York, 1993.
- [15] А. Эйнштейн, “К квантовой теории”, *Собрание научных трудов*. Т. III, Наука, М., 1966, 328–335.
- [16] А. М. Переломов, *Обобщенные когерентные состояния и их применения*, Наука, М., 1987.
- [17] F. Bloch, *Z. Phys.*, **74**:5–6 (1932), 295–335.
- [18] N. N. Bogoliubov, *On Spontaneous Violation of Symmetry in Statistical Mechanics*, Physik, Plenarvortr, 37, Weinheim Bergstr, Hamburg, 1973; Н. Н. Боголюбов, *Собрание научных трудов*. Т. VIII, ред. А. Д. Суханов, Наука, М., 2007, 398–410.
- [19] Л. Больцман, “IV. Аналогии с предложениями из области физики, особенно с предложениями теории теплоты”, Отрывок из “Лекций о принципах механики”, *Вариационные принципы механики*, Сб. статей классиков науки, ред. Л. С. Полак, Физматгиз, М., 1959, 468–496.
- [20] Э. Шредингер, “К принципу неопределенностей Гейзенберга”, *Избранные труды по квантовой механике*, Наука, М., 1976, 210–217.
- [21] O. N. Golubjeva, A. D. Sukhanov, *Acta Physica Debrecina*, **XLII** (2008), 69–81.
- [22] I. I. Hirschman Jr., *Amer. J. Math.*, **79**:1 (1957), 152–156.
- [23] В. В. Додонов, В. И. Манько, *Тр. ФИАН*, **183** (1987), 5–70.