Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, Двухфлюидная картина надкритических явлений, *ТМФ*, 2014, том 180, номер 3, 394–432

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8658>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.224.187.69

26 апреля 2023 г., 10:11:23

© 2014 г.

В. П. Маслов*

ДВУХФЛЮИДНАЯ КАРТИНА НАДКРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ

Рассматривается парастатистика, не различающая объективно различные объекты. Она описывает кластеры в надкритическом состоянии. Определена связь мезоскопической физики кластеров и макроскопической термодинамики надкритических изотерм. Строится надкритическая картина изохор и изотерм при условии, что известны температура Бойля, плотность Бойля и критическая точка. Математически обоснована двухфлюидная модель надкритической термодинамики. Для “кластерной губки” это приводит к новым соотношениям, отличным от соотношений известной статистики Джентилиа. Вычислена температура Френкеля перехода жесткой жидкости в мягкую.

Ключевые слова: парастатистика, уравнение Ван-дер-Ваальса, мезоскопическая физика, контуры, критическая температура, изохоры, изотермы, условие Бачинского, Zeno line, температура Бойля, плотность Бойля, температура Френкеля.

DOI: 10.4213/tmf8658

1. ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей статье [1] мы говорили о бозе-конденсате в теории чисел и в системах, в которых мы считаем объекты неразличимыми с точки зрения их измерения. Например, в известном примере IV века до нашей эры, так называемом “парадоксе кучи”, ставится вопрос о понятии кучи. Отличие “кучи” от “не кучи” заключается в одном моменте: если при перемене мест любых двух песчинок состояние не меняется, это куча. Чтобы определить понятие “кучи”, прежде всего нужно ответить на вопрос: две песчинки – это куча или не куча?

Если мы производим измерение песка на весах, то аптекарские весы могут измерить вес и двух песчинок, и от того, что мы поменяли их местами, вес их не изменится.

С другой стороны, может быть очень много песчинок, которые в принципе все реально различимы (например, алмазные песчинки), и в какой-то ситуации, как бы много их ни было, перемена мест двух песчинок оказывается существенной. Тогда это не куча.

*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, Москва, Россия. E-mail: v.p.maslov@mail.ru

Следовательно, понятие кучи не зависит от числа частиц, и в этом смысле нет перехода от конечного числа к куче. Просто в какой-то момент мы переходим к новой статистике – к статистике, не различающей объективно различимые объекты (UD-статистика) [2].

В этой новой статистике имеет место математическое явление, которое в квантовой теории называется бозе-конденсатом. Это как бы переполнение системы, когда число частиц становится больше, чем некоторое значение, связанное с плотностью.

Таким образом, квантовый эффект, обнаруженный Эйнштейном и названный бозе-конденсатом, имеет место для любой статистики, которая связана с понятием процента. Например, процент песчинок в устрицах при перестановке песчинок не меняется.

Приведем другой пример, который ближе к теме этой работы. Как известно экспериментаторам-химикам, определенный процент димеров есть в любом газе, температура которого ниже температуры Бойля. Отметим, что когда мы говорим о наличии определенного процента каких-либо объектов, то тем самым мы их не различаем, поскольку при перестановке отдельных объектов процент их концентрации не меняется. Но в случае димеров ситуация более экзотическая.

Димер живет примерно 10^{-4} с и затем разбивается мономером. Поэтому димеры рождаются и уничтожаются в разных точках рассматриваемого объема. Тем не менее, при данных температуре T , давлении P , числе частиц N и объеме V их процент не меняется, и, значит, как отмечалось выше, они “неразличимы” с точки зрения независимости от перестановки, и, следовательно, для них имеет место математическое явление, которое мы называем по математической аналогии бозе-конденсатом.

2. КЛАСТЕРЫ И МЕЗОСКОПИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

2.1. Надкритические состояния и парастатистика. Чтобы представить себе бозе-конденсат для классического газа, предложим такой эксперимент. Возьмем пробирку из гидрофобного материала, заткнем ее пробкой и поставим ее в вертикальное положение. Допустим, что в пробирке находится идеальный газ при комнатной температуре и атмосферном давлении. Будем эту пробирку охлаждать до тех пор, пока не дойдем до точки бинодали, т. е. до точки росы. Точка, в которой образуется роса, еще не дает жидкости, так как для того чтобы появилась невиртуальная капля, нужно, чтобы капля имела радиус больше чем критический. Тогда капля “не схлопнется”. Мы только достигли такой температуры бинодали, при которой радиус флуктуационной капли еще не достиг критического значения, но флуктуационная капля образуется близко ко дну пробирки, потому что есть земное притяжение, которое тянет эту флуктуационную каплю на дно. Значит, образуются флуктуации-капли и они постоянно “схлопываются”. В результате мы можем сказать, что дно пробирки будет давать тень, несмотря на то что жидкости как таковой еще не образовалось.

Эта картина очень похожа на картину бозе-конденсата для классического газа. Отметим, что когда мы понизили температуру и образовалась капля, т. е. радиус капли превысил критический, тогда условие равновесия между газом и жидкостью нарушилось, потому что давление внутри капли (жидкости) больше, чем давление газа. Чтобы найти выход из этой ситуации, нужно либо пренебречь этим давлением,

либо пренебречь взаимодействием, либо включить дополнительные члены в уравнение состояний. Мы говорим здесь о флуктуации такого типа, когда образуется большая плотность на дне пробирки и это состояние как бы не меняется и дает тень, которая стоит на месте. На самом деле эта виртуальная флуктуационная капля и газ непрерывно обмениваются частицами, и мы не можем сказать, что частицы в этой более плотной части пробирки остаются на месте, они все время меняются местами с другими частицами, однако более высокая плотность все равно остается на дне этой пробирки. Эта картина отвечает математическому явлению, аналогичному явлению бозе-конденсата, если пренебречь визуальным моментом – образованием виртуальной капли. Виртуальная капля образуется, разумеется, в результате увеличения плотности (бозе-конденсата) и уменьшения расстояния между молекулами. Последнее приводит к квантово-механическому эффекту диполь-дипольного притяжения. Если пренебречь этим притяжением, то тень останется, так как увеличение плотности на дне пробирки останется. Это самое естественное с математической точки зрения пренебрежение. Увеличение плотности – математический факт, который имеет место в теории чисел, как показал автор в работе [3].

Как отмечалось выше, а ранее получено в работе [2], при $T = T_B$ (T_B – температура Бойля) димеры не могут образовываться. Однако в силу изложенного выше димер можно считать флуктуацией. Поэтому из-за общей хаотичности при $T = T_B$ разные молекулы, вообще говоря, обладают разными энергиями. Отсюда можно сделать заключение, что на изотерме $T = T_B$ на уровнях энергии может находиться не более, чем по одной частице. Следовательно, на изотермах $T > T_B$ выполняется условие статистики Ферми.

При $T \leq T_c$ (T_c – критическая температура), как показано в работе [2], имеет место статистика Бозе–Эйнштейна, т. е. на каждом уровне может находиться сколько угодно большое число частиц, но меньшее, чем общее число частиц N . Поэтому общий случай относится к статистике, в которой число частиц на уровне энергии не превосходит некоторого числа $K(T)$. Для подкритических состояний это число велико, но не превосходит N : $K(T) \leq N$.

Такая статистика включает в себя при $K = N = \infty$ бозе-статистику, а при $K = 1$ – ферми-статистику. Отметим, что основной момент – “тождественность” частиц, – как было доказано в [1], выполняется для классической равновесной термодинамики. Парастатистика, подобно ферми-статистике, не имеет ограничения на химический потенциал вида $\mu \leq 0$, как это имеет место для бозе-статистики.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Если число K велико, то при $\mu < 0$ парастатистическая поправка экспоненциально мала и не сказывается на изотермах. Исключением является точка $\mu = 0$. Поэтому все результаты и графики работы [2] при достаточно большом K ($K > 200$) остаются в силе.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Существенный момент UD-статистики заключается в математическом явлении, аналогичном физическому явлению бозе-конденсата. Именно это явление позволяет полностью перестроить классическую термодинамику и по-новому объяснить все физические эксперименты. В парастатистике явление, аналогичное бозе-конденсату, также имеет место при достаточно больших K . Однако,

в отличие от распределения Бозе–Эйнштейна, в парастатистике химический потенциал μ может принимать и положительные значения. Максимум энтропии, однако, достигается при $\mu = 0$.

Хотя модель Ван-дер-Ваальса эвристическая, но, как мы видели в [2], сравнение с этой моделью показывает, насколько рассматриваемая статистика, в данном случае парастатистика практически неразличимых молекул (различимых более чувствительными приборами), приближается к термодинамике Ван-дер-Ваальса.

Определим $K(T)$ при $T \geq T_c$ исходя из формулы Бачинского, описывающей пересечение критической изохоры (при $\mu = 0$) и Zeno line (линии $Z = PV/VT = 1$).

При $\mu \leq 0$ зависимости $P(T_r, \mu)$ и $N(T_r, \mu)$ выражаются через полилогарифмы следующим образом:

$$P_r(T_r, \mu) = \frac{T_r^{\gamma+2}}{\zeta(2 + \gamma_c)} \left\{ \text{Li}_{\gamma+2}(e^{\mu/T_r}) - \frac{1}{K^{\gamma+1}} \text{Li}_{\gamma+2}(e^{K\mu/T_r}) \right\}, \quad (1)$$

$$N(T_r, \mu) = \frac{T_r^{\gamma+1}}{\zeta(1 + \gamma_c)} \left\{ \text{Li}_{\gamma+1}(e^{\mu/T_r}) - \frac{1}{K^\gamma} \text{Li}_{\gamma+1}(e^{K\mu/T_r}) \right\}, \quad (2)$$

где при $\mu = 0$ используется нормировка согласно Ван-дер-Ваальсу

$$T_r \equiv T_{\text{red}} = \frac{T}{T_c}, \quad P_r \equiv P_{\text{red}} = \frac{P}{P_c}, \quad (3)$$

а *addend* (добавленное слагаемое) γ_c , как и в работе [2], определяется из условия

$$Z_c \equiv \frac{P_c}{\rho_c T_B} = \frac{\zeta(2 + \gamma_c)}{\zeta(1 + \gamma_c)}. \quad (4)$$

Здесь $\zeta(\cdot)$ – дзета-функция Римана, а Li – полилогарифм.

Таким образом, в (1), (2) при $\mu \leq 0$ добавляется член порядка $1/K^{\gamma+1}$ для давления и член порядка $1/K^\gamma$ для плотности N . Когда $K \rightarrow \infty$, эти члены стремятся к нулю. Как следует из замечания 1, при $\mu < 0$ они столь быстро стремятся к нулю, что для мезоскопических значений $K \sim 200$ ими можно пренебречь.

Переход к надкритическому состоянию связан с весьма тонким переходом от микро- и макротермодинамики при $T < T_c$, $P < P_c$ к мезоскопической термодинамике, когда играют особую роль кластеры, состоящие из конечного числа частиц.

Кластер с точки зрения равновесной и подкритической термодинамики может трактоваться как флуктуация. При $T > T_c$, $P > P_c$, т.е. для надкритических состояний, число молекул в кластерах конечно и может быть довольно большим (10^2 – 10^3). В таком случае имеет место переход к мезоскопической физике. Очевидно, что этот переход происходит лишь в некоторых интервалах [4], [5] значений числа молекул, температуры и химического потенциала, который в надкритической области может принимать и положительные значения.

Обозначим через K_0 максимальное число молекул, образующих максимальный кластер во флюиде, т.е. в надкритической системе.

Таким образом, мы имеем интервал $[N, K_0]$, где N – число частиц в исследуемом объеме: $N \sim 10^{23}$ и $K_0 \sim 10^2$ – 10^3 . Одновременно, как это получено в работе [1], химический потенциал $|\mu| \ll 1$, $|K_0\mu/T| \leq C < 3$.

На этом интервале аналитическое продолжение величин в фигурных скобках в правых частях соотношений (1), (2) для положительных $\mu/T \sim 3/K$ может быть вычислено с помощью программы **Mathematica**. Температуры, соответствующие $K \sim \infty$ (судя по недавней работе [6]), отвечают переходу мягкой жидкости в жесткую. На мягкое и жесткое состояния жидкости указывал еще Френкель: спектр жесткой жидкости приближается к колебательному спектру кристалла.

Продолжение формул (1), (2) для положительных химических потенциалов было получено Джентилем в 1941 г. Однако это продолжение не совпадает с аналитическим продолжением (1) и (2), которое дает программа **Mathematica** для $T_r > 1$, $\mu > 1$, $K \gg 1$. Следовательно, продолжение для $\mu > 0$, полученное Джентилем, не единственно.

Если же ограничить интегралы, отвечающие полилогарифмам, сверху конечным пределом A , то оказывается, что соответствующая разность не будет иметь особенностей и однозначно продолжается для $\mu > 0$.

Рассмотрим интеграл

$$I = B \int_0^A \left(\frac{1}{e^{bx-b\mu} - 1} - \frac{k}{e^{k(bx-b\mu)} - 1} \right) x^\gamma dx, \quad (5)$$

где $-1 < \gamma \leq 1$, B – константа, зависящая от b , A и K – некоторые константы. Имеет место основное тождество

$$I \equiv -\frac{B}{b^{\gamma+1}} c_{b\mu, \gamma}^{(Ab)} + \frac{Bk^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}} c_{kb\mu, \gamma}^{(kAb)}, \quad (6)$$

где

$$c_{\mu, \gamma}^{(A)} = \int_0^A \left(\frac{1}{\xi - \mu} - \frac{1}{e^{\xi - \mu} - 1} \right) \xi^\gamma d\xi. \quad (7)$$

Докажем это тождество.

Заметим, что от числа B выкладки не зависят (оно присутствует в качестве множителя в исходном и конечном соотношениях), поэтому при доказательстве положим $B = 1$.

Сделаем в рассматриваемом интеграле (5) замену $\xi = bx$. Тогда

$$I = \frac{1}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \left(\frac{1}{e^{\xi-b\mu} - 1} - \frac{k}{e^{k(\xi-b\mu)} - 1} \right) \xi^\gamma d\xi.$$

Добавляя и вычитая слагаемые, представим рассматриваемый интеграл в виде следующей суммы трех интегралов:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \left(\frac{1}{e^{\xi-b\mu} - 1} - \frac{1}{\xi - b\mu} \right) \xi^\gamma d\xi + \\ & + \frac{1}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \left(\frac{1}{\xi - b\mu} - \frac{1}{(\xi - b\mu)(1 + k(\xi - b\mu)/2)} \right) \xi^\gamma d\xi - \\ & - \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \left(\frac{k^{\gamma+1}}{e^{k(\xi-b\mu)} - 1} - \frac{k^{\gamma+1}}{k(\xi - b\mu)(1 + k(\xi - b\mu)/2)} \right) \xi^\gamma d\xi. \end{aligned} \quad (8)$$

Введя обозначение (7), заключаем, что первый интеграл в (8) равен

$$-\frac{1}{b^{\gamma+1}}c_{b\mu,\gamma}^{(Ab)}.$$

Во втором интеграле (8) вычитаем дроби, а затем делаем замену $\eta = k\xi$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \left(\frac{1}{\xi - b\mu} - \frac{1}{(\xi - b\mu)(1 + k(\xi - b\mu)/2)} \right) \xi^\gamma d\xi = \\ &= \frac{1}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \frac{1 + k(\xi - b\mu)/2 - 1}{(\xi - b\mu)(1 + k(\xi - b\mu)/2)} \xi^\gamma d\xi = \\ &= \frac{1}{b^{\gamma+1}} \frac{k}{2} \int_0^{Ab} \frac{1}{1 + k(\xi - b\mu)/2} \xi^\gamma d\xi = \\ &= \frac{1}{b^{\gamma+1}} \frac{k^{-\gamma}}{2} \int_0^{Abk} \frac{1}{1 + (\eta - kb\mu)/2} \eta^\gamma d\eta = \frac{k^{-\gamma}c_1}{b^{\gamma+1}}, \end{aligned}$$

где мы ввели обозначение

$$c_1 = \int_0^{Abk} \frac{1}{2(1 + (\eta - kb\mu)/2)} \eta^\gamma d\eta.$$

В третьем интеграле (8) делаем ту же самую замену $\eta = k\xi$ и получаем

$$\begin{aligned} & \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Ab} \left(\frac{k^{\gamma+1}}{e^{k(\xi - b\mu)} - 1} - \frac{k^{\gamma+1}}{k(\xi - b\mu)(1 + k(\xi - b\mu)/2)} \right) \xi^\gamma d\xi = \\ &= \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Abk} \left(\frac{1}{e^{\eta - kb\mu} - 1} - \frac{1}{(\eta - kb\mu)(1 + (\eta - kb\mu)/2)} \right) \eta^\gamma d\eta = \\ &= \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}} \int_0^{Abk} \left(\frac{1}{e^{\eta - kb\mu} - 1} - \frac{1}{\eta - kb\mu} + \frac{1}{2(1 + (\eta - kb\mu)/2)} \right) \eta^\gamma d\eta = \\ &= \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}} \left(\int_0^{Abk} \left(\frac{1}{e^{\eta - kb\mu} - 1} - \frac{1}{\eta - kb\mu} \right) \eta^\gamma d\eta + \int_0^{Abk} \frac{1}{2(1 + (\eta - kb\mu)/2)} \eta^\gamma d\eta \right) = \\ &= -\frac{k^{-\gamma}c_{kb\mu,\gamma}^{(Abk)}}{b^{\gamma+1}} + \frac{k^{-\gamma}c_1}{b^{\gamma+1}}. \end{aligned}$$

Таким образом, получаем, что сумма трех рассматриваемых интегралов (8) равна

$$-\frac{1}{b^{\gamma+1}}c_{b\mu,\gamma}^{(Ab)} + \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}}c_1 + \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}}c_{kb\mu,\gamma}^{(Abk)} - \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}}c_1 = -\frac{1}{b^{\gamma+1}}c_{b\mu,\gamma}^{(Ab)} + \frac{k^{-\gamma}}{b^{\gamma+1}}c_{kb\mu,\gamma}^{(Abk)},$$

т. е. интеграл c_1 в итоге сократился. Тожество (6) доказано.

Из приведенного тождества следует, что если аппроксимировать разность полилогарифмов конечными интегралами с одинаковым верхним пределом, то получится аналитическая функция и ее аналитическое продолжение единственно.

Значит, продолжение Джентили не единственно. Оно зависит от способа предельного перехода. Именно, пусть верхний предел $A(\mu)$ зависит аналитически от μ : $A(\mu/T)$ стремится к бесконечности при μ , стремящемся к бесконечности. Тогда статистика Джентили будет зависеть от $A(\mu/T)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 3. Исходный интеграл слабо зависит от A при $A \rightarrow \infty$. Действительно,

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \left(\frac{1}{e^{bx-b\mu}-1} - \frac{K}{e^{K(bx-b\mu)}-1} \right) x^\gamma dx = \\
 & = \int_0^A \left(\frac{1}{e^{bx-b\mu}-1} - \frac{K}{e^{K(bx-b\mu)}-1} \right) x^\gamma dx + \\
 & + \int_A^\infty \left(\frac{1}{e^{bx-b\mu}-1} - \frac{K}{e^{K(bx-b\mu)}-1} \right) x^\gamma dx = \\
 & = \int_0^A \left(\frac{1}{e^{bx-b\mu}-1} - \frac{K}{e^{K(bx-b\mu)}-1} \right) x^\gamma dx + \\
 & + O(e^{-b(A-\mu)} A^{\gamma+1}) + O(K e^{-bK(A-\mu)} A^{\gamma+1}).
 \end{aligned} \tag{9}$$

ЗАМЕЧАНИЕ 4. Первое слагаемое функции $c_{\mu,\gamma}^{(A)}$ (см. (7)) вида

$$\int_0^A \frac{1}{\xi - \mu} \xi^\gamma d\xi \tag{10}$$

является регуляризатором. В точке $\xi = \mu$ он сокращает особенность второго слагаемого.

Обратим внимание на то, что этот член при $A \rightarrow \infty$ и $\gamma \geq 0$ стремится к бесконечности. Этот регуляризатор как в первом члене в правой части, так и во втором члене в правой части формулы (6) дает бесконечность, однако, как видно из формулы (9), подынтегральное выражение вовсе не стремится к бесконечности при $A \rightarrow \infty$, а довольно быстро убывает. Поэтому этот регуляризатор в первом члене формулы (6) сокращается при $A \rightarrow \infty$. Это легко видеть, если во втором члене в этом интеграле-регуляризаторе мы сделаем замену $\xi = \eta K$.

Таким образом, мы получаем переход от отрицательных значений μ к положительным с помощью регуляризатора, который мы ввели в (7). Это дает возможность регулярного перехода для распределения Бозе, в котором K любое, сколь угодно большое, т. е. на любом уровне энергии может находиться сколько угодно частиц (но не больше N).

Максимальное значение $K = K_0$ при $\mu = 0$ подбирается так, чтобы было выполнено условие Бачинского.

Для уравнения Ван-дер-Ваальса $K_0 \cong 2700$. Это позволяет определить температуру, при которой $K \sim \infty$. Будем, следуя работе [6], называть значение температуры T_r^F температурой Френкеля. Для уравнения Ван-дер-Ваальса она равна $T_r^F = 0.935$. Подберем малое положительное значение химического потенциала так, чтобы изохора в критической точке совпадала с изохорой Ван-дер-Ваальса. Получаем $\mu = 1/850T_c$ (рис. 1).

Проделав ту же процедуру для азота, получаем $K_0 = 210$, $\mu = 1/37T_c$, $T_r^F = 0.74$. При этом изохора отличается от критической изохоры $\rho_c = 0.30$ на рис. 13 работы [1], не превышая значение изохоры $\rho_c = 0.35$ на этом рисунке.

Поскольку соотношение Бачинского в конкретном случае [1] выполняется с точностью до 3%, то этот интервал значений описывается полученной изохорой с той же точностью.

Рис. 1. Сравнение критической изохоры Ван-дер-Ваальса (жирная кривая) с критическими изохорами парастатистики (для $\mu = 0$ и $\mu = 1/800$).

2.2. Закон Гука, jamming-эффект и ширина нижней зоны при положительном химическом потенциале в надкритическом состоянии. Кластер не является чистой флуктуацией, т. е. флуктуацией, которая относится к идеальному газу. Кластер может быть скоплением нескольких частиц, и это скопление движется гораздо медленнее, чем соответствующие мономеры. Это значит, что энергия кластера очень маленькая, и тогда мы можем говорить о ширине зоны вблизи нулевой энергии. А это значит, что мы должны ввести параметр – номер уровня энергии частиц. Следовательно, интеграл по энергии для плотности берется до некоторого A , которое есть функция от μ : при $\mu > 0$ значение A уменьшается. Так, параметр A , который присутствует в тождестве (5)–(7), зависящий от значения положительного химического потенциала, показывает, что изменился параметр ширины нижней зоны. Обычно A столь велико, что от значения A ничего не зависит: можно писать бесконечность, и получится по сути то же самое. Сокращение нижней зоны, в отличие от бозе-конденсата, связано с притяжением, т. е. с взаимодействием.

Как известно (см. [7]), в одномерном случае для отрицательного потенциала $-u_0 u(x)$, отличного от нуля на конечном интервале $a \leq x \leq -a$, $x \in \mathbb{R}^1$, уравнение Шредингера при достаточно малом u_0 имеет единственную точку дискретного спектра λ_0 . При этом чем меньше a , тем λ_0 ближе к точке минимума потенциала. Разумеется, мы можем вести отсчет энергии, подняв энергетическую шкалу на величину $b = u_0 \min u(x)$. Тогда $u_0 u(x)$ при $x \rightarrow \pm\infty$ будет равно именно этой величине b . Если потенциал $u(x)$ периодически продолжать, то собственное значение λ_0 за счет резонанса “расплывется” в зону непрерывного спектра. Размер этой зоны тем меньше, чем меньше a .

Эта картина отвечает модели кристаллической решетки (см. [8], [9]). Если грубо предположить, что давление на кристаллы уменьшает расстояние между атома-

ми, образующими кристалл, то в этой примитивной модели увеличение давления приводит к уменьшению параметра a , и, следовательно, сужению нижней зоны и приближению зоны к нулевой энергии. Следовательно, даже для периодического кристалла давление на кристалл должно приводить к сужению нижней зоны. Это грубое соображение особенно ярко проявляется в аperiodическом случае, отвечающем хаотическому расположению кластеров во флюиде.

Если мы рассматриваем редкие рассеиватели [10] таким образом, что они не определяют потенциал, который похож в каком-то смысле на периодический потенциал для кристалла, т. е. они не симметричны, и поэтому собственные значения не резонируют, то это, с одной стороны, приводит к растущим собственным функциям [10], а с другой стороны, отвечает той задаче для кластеров, которую мы рассматриваем. Иначе говоря, спектр сосредоточивается на некотором маленьком интервале, аналогичном понятию зоны в кристаллах, и эта зона дает значения верхнего предела энергии, который мы определяем с помощью условия Бачинского.

Оказывается, что существует такая сложная связь со спектром самосопряженного оператора типа оператора Шредингера. Именно эта связь дает возможность сделать предположение, что начиная с некоторого положительного значения химического потенциала резко сужается набор собственных значений и энергии становятся ограничены константой, которую мы обозначаем буквой A .

Известны зоны, которые возникают в металлах, и известно, что такие зоны могут быть довольно узкими, поэтому энергии частиц, которые относятся к нижней зоне, ограничены сверху некоторым достаточно малым числом. Эта связь между редкими рассеивателями и таким спектром помогает понять, как устроены кратности, потому что если мы рассматриваем представление осциллятора, то эти кратности оказываются равными нулю вне некоторого интервала, и только в этом интервале мы можем писать интегралы по энергии.

В качестве грубого примера непрерывного спектра (абсолютная непрерывность спектра в котором, по-видимому, не имеет места) рассмотрим потенциал

$$u_0 \sin^2 \left(\left| \frac{x}{a} \right|^{\pi/2} \right). \quad (11)$$

При $x \rightarrow \infty$ значение расстояния между нулями функции (11) уменьшается и стремится к нулю. Отсюда следует, что в таком потенциале собственные значения скапливаются вблизи нулевой энергии. Зона только одна, и она уменьшается при уменьшении параметра a , которое возникает при увеличении давления.

Если спектр ямок не попадает в резонанс, то может возникнуть всюду плотный точечный спектр. Однако если точка, в которой энергия равна нулю, предельная, то около нуля может возникнуть точка абсолютно непрерывного спектра. Предложенный потенциал является типичным в том смысле, что он моделирует случай, когда подпоследовательность нулей ямок имеет предельную точку собственных значений в нуле.

Если мы рассматриваем значения $\mu > 0$, то распределение (5) дополняется условиями Бачинского. А именно: мы находим значения μ и T из соотношений Бачинского $\rho/\rho_b + T/T_b = 1$. Отсюда мы находим значение P на Zeno line и тем самым находим параметр ширины нижней зоны $A(\mu)$, температуру T и химический потенциал μ на Zeno line.

Таким образом, мы ввели в термодинамику еще две величины: число степеней свободы и параметр A – аккумулятор (или ширина нижней зоны), аналогичный конденсату, который испытывает при положительном μ изменение, а также параметр $T^F < T_c$, при котором мягкая жидкость переходит в жесткую. Однако независимо от всех этих нововведений сохраняется основной закон термодинамики, а именно: *число степеней свободы при данной температуре не изменяется*. Иначе говоря, на изотерме число степеней свободы не меняется. Всевозможные изменения, которые связаны с взаимодействием, сохраняют этот инвариант, т.е. каждой температуре отвечает свое число степеней свободы, и число степеней свободы изменяется только с изменением температуры. Это основной закон новой термодинамики.

Казалось бы, отсутствие частиц на уровнях энергии $\varepsilon_0 i > A(\mu)$, т.е. частиц с большей скоростью, не отвечает экспериментальным наблюдениям. Суть этого противоречия заключается в том, что частицы с энергией $\varepsilon_0 j > A(\mu)$ относятся к другой серии. Между ними и медленными кластерами проходит потенциальный барьер, причем так, что частицы-мономеры не сталкиваются с кластерами, а проходят через кластерную сеть сверхтекучим образом, образуя аналог двухжидкостной модели Тисса–Ландау (см. ниже). Математически строго это показано в работах [11], [12]. Поэтому уровни $\varepsilon_0 j > A(\mu)$ заполнены, но частицами другой серии.

Приведем пример. Спектр двумерного осциллятора с двумя несоизмеримыми частотами ω_1 и ω_2 на высоких энергиях устроен так, что расстояния между точками спектра имеет порядок $O(h^2)$, где h – постоянная Планка. Однако переход между ближайшими уровнями порядка $O(h^2)$ запрещен, так как возможно лишь излучение порядка $O(h)$.

Согласно “двухжидкостной” картине для флюидов кластеры образуют “губку” (постоянно меняющуюся), а мономеры отвечают другой серии и проходят сквозь “губку” без столкновений, сверхтекучим образом.

При малом увеличении давления “губка” сжимается по закону Гука [13], т.е. линейно, а далее достаточно резко переходит к несжимаемому состоянию $p = \text{const}$. Расстояние между кластерами уменьшается, что приводит к сужению нижней зоны при увеличении давления.

ЗАМЕЧАНИЕ 5. Давление не может сжимать только нижнюю зону кластеров. Оно одновременно сжимает и мономеры (газ). Поэтому константа $A(\mu)$, отвечающая давлению, достаточно велика и, следовательно, отвечает формуле (1) (ср. пример 4 в п. 3.5).

Флуктуации типа крупных медленных кластеров не превышают энергии, связанной с параметром $A(\mu, \gamma)$, при положительных химических потенциалах. Нужно помнить, что мы перешли к интегралу, а следовательно, к предельному непрерывному спектру. Например, для $\gamma = 0.222$ и $K \sim 200$ этот химический потенциал равен $\mu/T = 0.16$, а $A \sim 0.01\varepsilon_0$.

Подчеркнем, что важным моментом является тот факт, что значения $\gamma(T)$ и $K(T)$ не меняются, рассматриваем ли мы насыщенный пар или насыщенную жидкость. Эти параметры связаны только с температурой. В этом смысле число степеней свободы и температура прочно связаны между собой. И это особенно важно для экономики и политики. Для разных температур эти правила и запреты разные. Температуры в обществе и в экономике могут быть четко рассчитаны в наше время. Из этого следует важный вывод: при фазовом переходе температура постоянна,

Рис. 2. Переход от отрицательных значений химического потенциала к положительным согласно идеальной парастатистике (статистике Дженгиля) для разных изотерм.

давление постоянно и, следовательно, параметр $\gamma(T)$ не меняется. Сохранение γ для данной температуры T – это строгий закон, который является основополагающим в UD-статистике.

Поскольку в нашем рассмотрении появляются достаточно большие кластеры, или контуры, и не очень большое, порядка 200–300, число частиц внутри контура, мы фактически рассматриваем мезоскопическую физику.

Для надкритической картины появляется парастатистический параметр K . В парастатистике он означает, что при данном T число частиц на уровнях энергии не превосходит $K(T)$.

ЗАМЕЧАНИЕ 6. Как в бозе-статистике, так и в парастатистике рассматривается, по существу, идеальный газ без взаимодействия. Соответственно, получается простейшая формула для энтропии, которая, как не раз уже говорилось, совпадает для квантовой и для классической статистики. В настоящей работе предложено такое обрезание исходной парастатистической формулы, в которой учтено взаимодействие частиц. Взаимодействие учтено в том факте, что от положительного химического потенциала зависит ширина нижней зоны $A(\mu, \gamma)$.

Важнейшим является следующий закон: на данной изотерме сохраняется как число степеней свободы $D = 2\gamma(T) + 2$, так и парастатистическое число $K(T)$, независимо от того, произошел ли переход к другой фазе. Если температура T одна и та же, то значения $\gamma(T)$ и $K(T)$ одни и те же.

Величина модуля (константы) в законе Гука определяется из условия Бачинского. Обозначим через $P_r^{(1)}$ значение давления на Zeno line, которое отвечает критической температуре азота. Начальное давление $P_r^{(0)}$ можно считать практически равным

Рис. 3. Теоретическая критическая изотерма для метана.

единице, что видно из рис. 2. На графике штриховыми линиями изображены изотермы, отвечающие реальной части аналитического продолжения разности полилогарифмов при положительном химическом потенциале. Статистика Джентилиа [14] дает продолжение этих изотерм.

Продолжение нижней кривой на рис. 2 согласно статистике Джентилиа практически является прямой: $Z = 0.18$.

Согласно формуле Гука

$$\tilde{A} - \frac{P_r - P_r^{(0)}}{\alpha} = A_{P_r}. \quad (12)$$

Константу α находим исходя из значения $P_r^{(1)}$. Для азота $A_{P_r^{(1)}} = 0.109$. Значение $\tilde{A}$ положим равным 10. Из закона Гука получаем

$$\alpha = \frac{\tilde{A} - A_{P_r^{(1)}}}{P_r^{(1)} - P_r^{(0)}}.$$

Переход от линейного закона Гука к jamming-эффекту для стекла и для флюида достаточно резкий и связан в наших парастатистических формулах с соотношением между величиной $K(T)$ и разностью $\mu/T - A(\mu)$. Если $K(T) \gg \ln K(T)$, то переход достаточно резкий и определяется оценкой выражения

$$\frac{K(T) + 1}{e^{(\mu/T - A(\mu)/T)(K(T) + 1)}},$$

т. е. тем, насколько быстро уменьшается это выражение при увеличении параметра μ . Этим определяется переход от сжимаемости флюида по линейному закону Гука к несжимаемости флюида, отвечающей jamming-эффекту.

Отсюда находим ширину нижней зоны как функцию от P_r (см. рис. 3 для случая $Z_c = 0.29$ (азот, метан, аргон)). Это дает однозначно изменение величины A как

функции от давления, а тем самым и как функции от μ , т. е. позволяет получить изменение ширины нижней зоны при положительных μ и малом изменении давления. Jamming-эффект дает постоянную плотность на изотерме (несжимаемая жидкость), а следовательно, прямую на Z, P -диаграмме, проходящую через точку $Z = 0, P = 0$ и касающуюся критической изотермы в точке пересечения ее с Zeno line. Отсюда получается рис. 3.

3. НОВЫЙ ПОДХОД К КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ РАССЕЯНИЯ

3.1. Новый подход к задаче двух тел в классической механике с потенциалом взаимодействия типа потенциала Леннарда-Джонса. Прежде всего напомним математическую постановку задачи рассеяния в классической механике [15].

Рассматривается вектор $z(t): z = z_1, \dots, z_n$ аргумента, который служит решением системы уравнений классической механики (где полагаем массу $m = 1/2$)

$$\ddot{z}_i = -\frac{\partial v(z)}{\partial z_i}, \quad i = 1, \dots, n,$$

и удовлетворяет при $t \rightarrow -\infty$ условиям $z_i(t) \rightarrow z_i^0$ при $i > 1$ и $z_1(t) \rightarrow 2\sqrt{E}t$, где z_i^0 — произвольные действительные числа. Кроме того, требуется, чтобы существовало значение $t = t'$, при котором траектория $z(t)$ проходила бы через заданную фиксированную точку x на действительной гиперплоскости: $z(t') = x$. Числа z_i^0 , $i = 2, \dots, n$, будут, очевидно, зависеть от x .

Этими условиями определяется, вообще говоря, не одна траектория.

Пусть J — якобиан перехода от текущих координат траекторий $z_1(t, z_2^0, \dots, z_n^0), \dots, z_n(t, z_2^0, \dots, z_n^0)$ к координатам $t, z_2^0, \dots, z_n^0$: $J = D(z_1, \dots, z_n)/D(t, z_2^0, \dots, z_n^0)$. Запомним, что при $t \rightarrow -\infty$ якобиан равен $2\sqrt{E}$. В одномерном случае $J = z = 2\sqrt{E - v(x)}$.

Точка $(z(t_1), t_1)$ называется *фокусом траектории* $z(t)$, если якобиан J в этой точке обращается в нуль.

Действие $S(x)$ в точке x вдоль пути $z(t)$ равно

$$S(x) = \frac{1}{2}\dot{z}(-\infty)x + \frac{1}{2}\int_{z(-\infty)}^x [\dot{z}(t) - \dot{z}(-\infty)] dz(t),$$

где $z(-\infty)$ и $\dot{z}(-\infty)$ обозначают пределы $z(t)$ и $\dot{z}(t)$ при $t \rightarrow -\infty$.

ПРИМЕР 1. Пусть $n = 3$, а потенциал зависит только от $r = |x|$: $v(x) = v(r)$. Перейдем к сферической системе координат r, φ, θ текущей точки $z(t)$ и полярной системе координат ρ, θ_0 для определения начальной точки z_2^0, z_3^0 . Тогда

$$J = r^2 \sin \theta \rho^{-1} \frac{D(r, \varphi)}{D(\rho, t)}.$$

Нетрудно убедиться, что

$$\frac{D(r, \varphi)}{D(\rho, t)} = \frac{\dot{r} \partial \varphi}{\partial \rho},$$

причем $\dot{r} = 2\sqrt{E - v(r) - \rho^2 E r^{-2}}$.

Поскольку гамильтониан H равен полной энергии, имеем

$$E_{\text{tot}} = \frac{p^2}{4m} + W_{\text{eff}}(r) = \frac{p^2}{4m} + \frac{B^2 E_{\text{tot}}}{r^2} + u(r). \quad (15)$$

Из (15) получаем

$$H = E_{\text{tot}} = \frac{p^2}{4m(1 - B^2/r^2)} + \frac{u(r)}{1 - B^2/r^2}. \quad (16)$$

Таким образом, гамильтониан распадается на две части: в областях $r < B$ и $r > B$, разделенных бесконечным барьером $r = B$. Один из них (для $r < B$) притягивающий, а другой (для $r > B$) отталкивающий.

Для $r < B$ первый член в (16) отрицательный, а чтобы энергия была неотрицательной, второй член должен быть положительным, откуда следует, что $r > a$. Поэтому, исследуя прохождение через барьер падающей частицы, мы должны, взяв по оси y энергию E , перевернуть ямки. Тогда минимум энергии будет соответствовать высоте барьера, а максимум – глубине ямки.

Проанализируем согласно [16] потенциал энергии в двухчастичной задаче рассеяния, рассмотренной выше, в притягивающем случае (т. е. для $r < B$).

После замены

$$\frac{r}{a} = r', \quad \frac{B}{a} = \tilde{B} \quad (17)$$

избавляемся от параметра a . Итак, притягивающая и отталкивающая части гамильтониана разделяются бесконечным барьером $r = B$. Притягивающая часть гамильтониана имеет вид

$$\theta(r - B) \left(\frac{B^2}{r^2} - 1 \right) H = \left\{ \frac{p^2}{4m} + 4\varepsilon \left(\frac{a^6}{r^6} - \frac{a^{12}}{r^{12}} \right) \right\} \theta(r - B), \quad (18)$$

где θ – тета-функция Хевисайда.

ЗАМЕЧАНИЕ 7 (о константе Планка). Выше мы произвели замену (17). Для простоты рассмотрим одномерное уравнение Шредингера с потенциалом $V_0 \varphi(x/a)$ [17]:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2 \Psi}{dx'^2} - V_0 \varphi(x') \Psi &= E \Psi, \\ \frac{\hbar^2}{2ma^2 V_0} \frac{d^2 \Psi}{dx'^2} - \varphi(x') \Psi &= \frac{E \Psi}{V_0}, \\ \varepsilon = \frac{\hbar^2}{2ma^2 V_0} &\rightarrow 0, \end{aligned}$$

при замене $x/a = x'$. Параметр $\varepsilon \rightarrow 0$ во всех суммах, которые определяют термодинамику, означает переход к интегралам, что можно понимать как $a \rightarrow \infty$. А это означает, что в рассматриваемой задаче потенциал меняется медленно, т. е. прибор исследует тщательным образом поведение частицы в окрестности $x = 0$, а в нашей исходной задаче вблизи особенности $r = 0$ (ср. [5]).

Таким образом, ε есть параметр масштабирования, и при переходе от сумм к интегралам он исчезает, а с ним исчезает и константа Планка. Именно в этом смысле совершается “переход” в классическую физику.

Рис. 5. Ловушка для фиктивной частицы в системе центра масс, r – радиус-вектор μ -точки (масса μ -точки $\mu = m/2$). Частица падает слева из точки $r = B$. При бесконечно малой вязкости за бесконечно большое время (время релаксации) она попадает на дно ямы.

Переход от сумм к интегралам по формулам Эйлера–Маклорена равносильен квазиклассическому предельному переходу, хотя не имеет ни малейшего отношения к квантовой физике. Поэтому, чтобы не вмешивать квантовую физику в классическую термодинамику, более разумно проводить сравнение с теорией чисел и с натуральным рядом, которому соответствует с точностью до константы спектр квантового осциллятора.

В задаче о сверхтекучести слабо-неидеального бозе-газа приведенное суммирование по спектру не проводится. От квантового параметра тогда можно избавиться, положив

$$m^{1/2}a\epsilon^{1/2} = C \cdot 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с},$$

где C – безразмерный конечный параметр, a – эффективный радиус, ϵ – глубина ямы потенциала Леннарда-Джонса.

При фиксированном значении параметра B мы получим принцип соответствия задачи рассеяния с потенциалом Леннарда-Джонса (рис. 4) и гамильтониан (18). А именно, при фиксированном B будем менять энергию и полагать, что новая μ -частица ($\mu = m/2$) падает из точки $r = B$ и отражается в зависимости от значения энергии либо от барьера, либо от правой стенки.

На рис. 5 изображена траектория при таком значении энергии, что она касается максимума барьера.

При квантовании $p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \partial/\partial x$, $H = -i\hbar \partial/\partial t$ можно перейти согласно Фоку к производной по собственному времени $i\hbar \partial/\partial \tau$, включив время $t = x_4$ в число переменных. В уравнениях Гамильтона–Якоби это соответствует введению нового гамильтониана

$$\mathcal{H} = \theta(r - B) \left(\frac{B^2}{r^2} - 1 \right) H - \left\{ \frac{p^2}{4m} + 4\epsilon \left(\frac{a^6}{r^6} - \frac{a^{12}}{r^{12}} \right) \right\} \theta(r - B). \quad (19)$$

Таким образом, для фиктивной частицы в системе центра масс мы получаем новое время, которое аналогично времени в теории относительности (*собственное время димера*).

ЗАМЕЧАНИЕ 8. Отметим, что Мозер [18] рассматривает гамильтониан

$$H = \frac{1}{2}|p|^2 - \frac{1}{|x|}, \quad x \in \mathbb{R}^3,$$

и делает замену переменной t вида

$$s = \int \frac{dt}{|x|}.$$

Он показывает, что поверхность энергии $H = C$ при отрицательных C может быть компактифицирована так, что регуляризованный поток эквивалентен геодезическому потоку на трехмерной единичной сфере. Замена времени позволяет продолжить движение гладким образом. Мозер отмечает, что о такой регуляризации знали еще Леви-Чивита и Зундман.

На квантовом уровне это соответствует $SO(4)$ -симметрии в задаче Кеплера с отрицательной энергией, открытой Фоком в 1935 г. [19] (см. также [20]–[22]).

Переход от времени t в классической задаче рассеяния, сформулированной в начале этого раздела, к собственному времени τ задачи о поведении центра масс в задаче двух тел идентичен замене времени Зундмана для регуляризации особенности Леви-Чивиты. Но он не столь очевиден, подобно тому, как собственное время τ было встречено в штыки (особенно советскими философами) в эйнштейновской теории относительности.

Отметим, что для простейших молекул газа (благородных газов, метана) известны константы a и ϵ в потенциале Леннарда-Джонса. Соответствие с термодинамическими константами T_b (температурой Бойля) и T_c (критической температурой) может быть получено с помощью гамильтониана (18).

Минимум r_1 и максимум r_2 при заданном B на рис. 5 определяются из условия

$$\frac{dE}{dr} = 0. \quad (20)$$

В некоторой точке $B = B_0$ они совпадают, и, следовательно,

$$\frac{d^2E}{dr^2} = 0 \quad (21)$$

в некоторой точке r_0 .

На графике $E(r)$ (рис. 5) при $B = B_0$ точке перегиба отвечает $E = E_0$. Вообще мы будем ставить в соответствие точке B значение $E_{\max}$ – максимальную касательную к ямке, и $E_{\min}$ – минимальные значения. Пара частиц “падает из бесконечности”, т.е. из точки $r = B$, касается значения $E_{\min}$ и проскальзывает в ямку глубиной $E_{\max} - E_{\min}$. Таким образом, реальная ямка рассеяния перевернута относительно оси возрастания энергии. Это связано с тем, что притягивающая часть в потенциале Леннарда-Джонса отрицательна. Подсчет дает $E_0 = 0.8\epsilon$. При $E > E_0$ ямка (ловушка) исчезает.

Этот критерий относится лишь к двум сталкивающимся частицам. Обычное рассуждение в молекулярной физике, принадлежащее Клаузиусу, заключается в симметрии среднего движения молекул по всем шести направлениям. Следовательно,

друг другу навстречу движется $1/12$ часть всех частиц. Таких осей три, поэтому сталкивается $1/4$ часть всех молекул¹⁾. Их средняя энергия

$$k_B T_B = \frac{16}{5} \varepsilon,$$

где k_B – постоянная Больцмана. Соответствующая ей температура, по-видимому, по физическому смыслу соответствует так называемой температуре Бойля.

Точка E_{cr} , для которой глубина ямы (ловушки) максимальна, имеет значение $E_{cr} = 0.286\varepsilon$. Эта точка согласно нашей концепции соответствует критической температуре

$$k_B T_c = 0.286 \cdot 4E_{cr}.$$

Согласно экспериментальным данным для каждого из газов известна глубина ямы потенциала Леннарда-Джонса, равная 4ε . Во втором столбце таблицы 1 приводятся значения ε , в третьем столбце – экспериментальные значения $T_c/4$, в четвертом столбце – полученные нами значения $E_{cr} \cdot \varepsilon/k_B$.

ТАБЛИЦА 1

Вещество	ε , К	$T_c/4$	$E_{cr} \cdot \varepsilon/k_B$
Ne	36.3	11	10.5
Ar	119.3	37	35
Kr	171	52	50
N ₂	95.9	31	28
CH ₄	148.2	47	43
C ₂ H ₆	243.0	76	70

В работе [16] с помощью этого гамильтониана получено эмпирически соотношение Бачинского (Zeno line). Мы привели примеры из работы [16] вновь, чтобы читатели убедились в эффективности использования гамильтониана (18) в случае притяжения.

Рассмотрим случай $r \geq B$, отвечающий задаче отталкивания. После процедуры вторичного квантования оператора $\hat{\mathcal{H}}$ и перехода к пределу, при котором коммутатор между операторами рождения и уничтожения обращается в нуль, мы получаем нелинейное уравнение вида (ср. [24])

$$\begin{aligned} \Omega \Psi^+ = & -E \int_{|x-y| \leq B} dy |\Psi|^2 \left(1 - \frac{B^2}{r^2(x-y)} \right) \Psi^+ - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^+ \int_{|x-y| \leq B} |\Psi|^2(y) dy + \\ & + \Psi^+ \int_{|x-y| \leq B} u(x-y) |\Psi|^2 dy, \quad |\Psi|^2 = \Psi^+ \Psi^-. \end{aligned} \quad (22)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 9. Поскольку функция Ψ экспоненциально убывает в окрестности барьера $r = B$, то мы можем полагать, что интеграл от ее квадрата по области $r \geq B$

¹⁾Принцип изотропии (симметрии по всем направлениям) является одним из ключевых принципов молекулярной физики. Он также должен быть строго сформулирован математически, как принцип изотропии в теории турбулентности Колмогорова, условия Борна–Кармана в теории кристалла (проблема конечности объема кристалла), особенно в связи с бурным развитием компьютерной молекулярной динамики, подобной компьютерной анизотропной турбулентности [23].

равен единице, и $\theta(r - B)\Psi(r) \equiv \Psi(r)$, так что третий интеграл берется по $\text{Supp } \Psi(r)$ и, следовательно, может быть записан в виде

$$\int u(x - y)|\Psi|^2(y) dy, \quad (23)$$

где интегрирование проводится по всему пространству y . По этой же причине и первый интеграл в правой части (22) сходится при $r > B$. Следовательно, получаем

$$(\Omega + E)\Psi^+ = \int \frac{B^2 E}{r^2(x - y)} |\Psi|^2(y) \Psi^+(x) dy - \frac{h^2}{2m} \Delta \Psi^+ + \Psi^+ \int u(x - y) |\Psi|^2 dy. \quad (24)$$

Далее запишем уравнение в вариациях, отвечающее этому уравнению, как это сделано в работе Боголюбова 1947 года (ср. [25]):

$$\begin{aligned} \delta \Psi^+ &= F, \\ \delta \Psi^- &= G. \end{aligned}$$

Вариационная система, ассоциированная с уравнением (22), может быть получена следующим образом. Запишем сопряженное с (22) уравнение и рассмотрим вариации обоих уравнений в предположении, что вариации $\delta \psi = F$ и $\delta \psi^* = G$ независимы.

Вариационная система имеет вид

$$\begin{aligned} -\beta G_i(x) &= -\frac{h^2}{2m} \Delta G_i(x) + \int dy u(x, y) \Psi^*(x) [\Psi^*(y) F_i(y) + \Psi(y) G_i(y)] + \\ &+ \int dy \frac{EB^2}{r^2(x - y)} \Psi^*(x) [\Psi^*(y) F_i(y) + \Psi(y) G_i(y)], \\ \beta F_i(x) &= -\frac{h^2}{2m} \Delta F_i(x) + \int dy u(x - y) \Psi(x) [\Psi^*(y) F_i(y) + \Psi(y) G_i(y)] + \\ &+ \int dy \frac{EB^2}{r^2(x - y)} \Psi(x) [\Psi^*(y) F_i(y) + \Psi(y) G_i(y)]. \end{aligned} \quad (25)$$

Поскольку $B^2 E = M^2/m$, то уравнения (24), (25) совпадают с соотношениями работы [25] и дают тот же результат.

Мы получаем, таким образом, картину сверхтекучести согласно соображениям Ландау, о которых упоминает Боголюбов в работе [25]. Подробная математическая конструкция задачи многих частиц изложена в работах [26]–[28].

Тем самым мы разбиваем задачу бесконечных барьеров $r = B$ на притягивающую часть, отвечающую “нормальной” термодинамике, и отталкивающую часть, отвечающую сверхтекучей компоненте, т. е. нетормозящейся нормальной компоненте (жидкости).

ЗАМЕЧАНИЕ 10. Если выделить сколь угодно малый объем (сколь угодно малый с точки зрения нашего асимптотического предела), то в этом объеме будут содержаться обе компоненты. На самом деле сверхтекучая “жидкость” (газ, флюид) будет без сопротивления просачиваться через нанопоры нормальной “жидкости” (флюида). Получается картина, отвечающая двухжидкостной модели Тисса–Ландау

для жидкого He^4 . Однако эта модель обобщается на чисто классическую ситуацию сверхкритического флюида. Согласно Фейнману (уточнение принадлежит Г.М. Элиашбергу) сверхтекучесть метастабильна, т.е. за достаточно большое время исчезает. В экономике это отвечает переходу к другому строю (например, от феодального строя к капиталистическому).

3.2. Энергетическое представление в классической термодинамике.

Рассмотрим натуральное представление условий

$$\begin{aligned}\sum N_i &= \sum G_i \bar{n}_i = N, \\ \sum \varepsilon_i N_i &= \sum \varepsilon_i G_i \bar{n}_i = E.\end{aligned}\tag{26}$$

Эти условия для числа частиц N и энергии E , в частности, суть диофантовы уравнения теории чисел.

Физики могут легко представить себе числа G_i , как это было объяснено в § 40 учебника Ландау и Лифшица [29]. Математикам проще называть G_i кратностью собственного значения ε_i (физики называют это вырождением). Это частный случай той общей картины, точнее полотна, которое привычно глазу физика. Однако этот частный случай вместе с тем является и общим, так как математические формулы перехода от общего полотна к стандартному представлению кратности собственных значений не изменяются и могут быть однозначно перенесены на пуантилистическую картину, изображенную в [29].

Отметим, что после перехода к интегральной форме [29] естественно использовать меру $d\varepsilon$, где ε – энергия, предварительно рассматривая более привычный для физиков элемент фазового пространства $dp_x dp_y dp_z dV$ (p_x, p_y, p_z – импульсы, V – объем).

В настоящем разделе мы будем использовать в исходных формулах меру $d\varepsilon$. Если перейти от интеграла по $d\varepsilon$ к римановой интегральной сумме $\Delta\varepsilon i$, то мы приблизимся к соотношению теории чисел [30], для которой развита Рамануджаном, Харди и Эрдешем поразительная теория, строго доказанная, но не имеющая вывода, так как Рамануджан заявил, что ему во сне формулу подсказала богиня Радха²⁾.

Под знаком ε_i физики понимают энергетические уровни самосопряженного оператора $A(\hat{H})$ гамильтониана в гильбертовом пространстве $L_2(\mathbb{R}^3)$. Согласно “Математическому энциклопедическому словарю” [31] (статья “Спектральный анализ”) и “Математической энциклопедии” [32] (статья “Самосопряженный оператор”) имеет место следующее равенство:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda),$$

где $E(\lambda)$ – разложение единицы, т.е. семейство проекционных операторов, удовлетворяющее спектральным условиям. В дискретном случае

$$E(\lambda) = \sum_{\lambda_k < \lambda} E_k, \quad A = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k E_k.$$

²⁾Разница подходов математиков и физиков: у математиков приводится формула, а затем она доказывается (возможно, косвенно), а физикам необходим вывод, чтобы понимать, откуда она взялась.

Если спектральная мера абсолютно непрерывна, то

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \frac{dE(\lambda)}{d\lambda} d\lambda. \quad (27)$$

Именно этот случай мы и будем рассматривать, переходя к интегральной римановой сумме $d\lambda = \Delta\lambda i$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Сформулируем более точно. Мы предполагаем, что сужение оператора на подпространстве имеет гомоморфное отображение типа Эйлера–Маклорена на оператор с абсолютно непрерывной спектральной мерой. Каждому такому сужению отвечает спектральная серия. Каждой серии мы будем сопоставлять натуральный ряд. При этом для квантового оператора мы будем учитывать квазиклассическую асимптотику. Это означает, что инвариантность суженного оператора будет рассматриваться приближенно по $\hbar$, туннельные переходы будут запрещены и т. д.

Каждой серии будет отвечать теория комплексного роста, обобщающая $u - v$ преобразование Боголюбова, в котором существенную роль играет уравнение в вариациях. Тот удивительный факт, что член, содержащий константу Планка $\hbar$, останется в уравнении в вариациях для уравнения типа уравнения Хартри, связан с отпением двух малых параметров: параметра $\hbar$ и параметра линеаризации.

Поэтому такое представление будем называть натуральным. С нашей точки зрения, коэффициенты при значении i – это кратности собственного значения i . Кратности могут быть дробными, если осреднять по группе близких собственных значений, согласно “пуантилистическому полотну” Ландау и Лифшица.

Итак, когда мы рассматриваем UD-статистику с точки зрения теории чисел и метода неопределенных множителей Лагранжа, мы можем полагать, что собственные значения ε_i – это просто i . А все другие параметры, которые характеризуют эту систему, можно определить через G_i , иначе говоря, через кратности, т. е. мы перешли к счету натурального ряда. С физической точки зрения, говоря не совсем строго, мы перешли к осцилляторному выражению, когда собственные значения пропорциональны целым числам. Эта картина гораздо более естественна для классической термодинамики.

Перейдем к натуральному представлению самосогласованных операторов для случая, когда взаимодействие между двумя частицами имеет вид

$$V(x - y), \quad x \in \mathbb{R}^4, \quad y \in \mathbb{R}^4.$$

Мы будем рассматривать самосогласованный гамильтониан

$$\hat{H}[\psi] = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \psi(x) + V_0(x) \psi(x) + \psi(x) \int \psi(y) \overline{V(x - y) \psi(y)} dy, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (28)$$

где черта означает комплексное сопряжение, $V_0(x)$ – потенциал внешнего поля.

Нелинейный символ задается формулой

$$H[\rho](x, p) = \frac{|p|^2}{2} + V_0(x) + \iint \overline{V(x - x')} \rho(x', p') dx' dp',$$

где $V, V_0 \in S^\infty(\mathbb{R}^n)$, $\rho(x', p')$ имеет вид (33).

3.3. Некоторые факты из функционального анализа. Решение $F(x, p, t)$ уравнения Власова, рассмотренного выше, может быть интерпретировано как плотность распределения классических частиц по координатам и импульсам. Так, например, среднее значение импульса частиц в момент t равно

$$\langle p \rangle = \iint p \cdot F(x, p, t) dx dp, \quad (29)$$

а среднее значение энергии частиц с функцией Гамильтона $p^2/2m + V(x)$ равно

$$\langle E \rangle = \iint \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) F(x, p, t) dx dp. \quad (30)$$

В квантовой механике состояние системы описывается некоторой “волновой” функцией $\psi = \psi(x, t)$, непрерывной по t и принадлежащей $L^2(\mathbb{R}^n)$ по аргументу x . Среднее значение $\langle \hat{p} \rangle_q$ оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar \partial/\partial x$ в этом квантовом случае определяется интегралом вида

$$\langle \hat{p} \rangle_q = \int \psi(x, t) \overline{\hat{p} \psi(x, t)} dx, \quad (31)$$

а среднее значение оператора энергии $\hat{E} = \hat{p}^2/2m + V(x)$ — интегралом вида

$$\langle \hat{E} \rangle_q = \int \psi(x, t) \overline{\hat{E} \psi(x, t)} dx. \quad (32)$$

Говорят, что $\langle \hat{p} \rangle_q$ и $\langle \hat{E} \rangle_q$ — это средние значения операторов $\hat{p}$ и $\hat{E}$ в состоянии ψ .

По волновой функции ψ можно построить такую квантовую функцию распределения $F_q(x, p, t)$, чтобы, например, средние значения величин $\langle \hat{p} \rangle_q$ и $\langle \hat{E} \rangle_q$ определялись по формулам (29) и (30), в которых вместо F стоит F_q . Такая квантовая функция распределения имеет вид

$$\rho_\psi = (2\pi\hbar)^{-n/2} \psi(x, t) \overline{\tilde{\psi}(p, t)} e^{-ixp/\hbar} \quad (33)$$

и называется функцией плотности, отвечающей волновой функции ψ . Таким образом, имеем

$$F_q = \rho_\psi.$$

Формулы (31) и (32) (см. [33]) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle_q &= \iint p \rho_\psi(x, p, t) dx dp, \\ \langle \hat{E} \rangle_q &= \iint \left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \rho_\psi(x, p, t) dx dp. \end{aligned}$$

Вообще, среднее оператора $\hat{f} = f(x, \frac{1}{p})$ в состоянии ψ равно

$$\begin{aligned} \langle \hat{f} \rangle_q &\stackrel{\text{def}}{=} \int \psi(x, t) \overline{\hat{f} \psi(x, t)} dx = \iint \overline{f(x, p)} \rho_\psi(x, p, t) dx dp, \\ \frac{1}{p} &= \frac{1}{\hat{p}}, \quad \hat{p} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \end{aligned} \quad (34)$$

Волновая функция ψ в линейной теории обычно подчиняется некоторому линейному дифференциальному уравнению в частных производных. Примером таких уравнений могут служить уравнения типа Хартри, а также уравнения, полученные в [33] при “квантовании” уравнений Власова. Все они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} H[\rho_\psi](\overset{2}{x}, \overset{1}{p})\psi &= 0, \\ H[\rho_\psi](x, p) &= F(x, p, I_1[\rho_\psi], \dots, I_r[\rho_\psi]), \end{aligned} \quad (35)$$

где $F(x, p, \lambda)$ — заданная функция от переменных $x, p \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in \mathbb{R}^r$, а функционалы $I_1, \dots, I_r$ имеют вид средних (34):

$$\begin{aligned} I_j[\rho_\psi] &= \iint \overline{k_j(x, p, x', p')} \rho_\psi(x', p') dx' dp' = \\ &= \int \overline{\psi(x') k_j(x, p, \overset{2}{x'}, -i \partial / \partial x') \psi(x')} dx'. \end{aligned} \quad (36)$$

Уравнения типа (35) мы будем называть унитарно-нелинейными уравнениями, а операторы $\psi \rightarrow H[\rho_\psi](\overset{2}{x}, \overset{1}{p})\psi$ — унитарно-нелинейными операторами (или кратко UN-операторами). Это название связано с тем обстоятельством, что при унитарных преобразованиях в пространстве волновых функций ψ символ UN-оператора преобразуется с помощью унитарного канонического преобразования.

Рассмотрим задачу Коши для UN-оператора

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + H[\rho_\psi](\overset{2}{x}, \overset{1}{p})\psi = 0, \quad \psi|_{t=0} = \psi_{0,h}(x). \quad (37)$$

В работах [34], [35] при некоторых предположениях на символ H методом T -отображений была доказана теорема существования решения задачи (37).

Начнем с определения UN-операторов типа Гильберта–Шмидта.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Пусть H — гладкое отображение пространства $L^2(\mathbb{R}^{2n})$ в себя:

$$\rho(x, p) \rightarrow H[\rho](x, p).$$

Унитарно-нелинейным оператором (или кратко UN-оператором) типа Гильберта–Шмидта назовем отображение $\mathcal{H}$ пространства $L^2(\mathbb{R}^n)$ в себя, определенное формулой

$$\mathcal{H}[\psi] = H[\rho_\psi](\overset{2}{x}, \overset{1}{p})\psi, \quad (38)$$

где ρ_ψ — функция плотности, отвечающая ψ . Отображение H назовем *нелинейным символом* оператора $\mathcal{H}$, а функцию $H[\rho_\psi]$ — *линейным символом* оператора $\mathcal{H}$ в состоянии ψ .

ПРИМЕР 2. Пусть нелинейный символ H является постоянным отображением: $H[\rho] = f_0$, f_0 — фиксированная функция из $L^2(\mathbb{R}^{2n})$. UN-оператор $\hat{H}$ с таким символом является линейным псевдодифференциальным оператором

$$\mathcal{H}[\psi] = f_0(\overset{2}{x}, \overset{1}{p})\psi.$$

Таким образом, класс UN-операторов включает в себя линейные псевдодифференциальные операторы.

ПРИМЕР 3. Пусть символ H является линейным ограниченным отображением пространства $L^2(\mathbb{R}^{2n})$ в себя. Представим его в виде интегрального оператора с обобщенным ядром $K(x, p, x', p')$, т. е.

$$H[\rho](x, p) = \iint \overline{K(x, p; x', p')} \rho(x', p') dx' dp'.$$

UN-оператор $\hat{H}$ с таким символом действует по формуле

$$(\mathcal{H}[\psi])(x) = \left(\int \overline{\psi(y) K\left(\frac{x}{2}, -ih \frac{\partial}{\partial x}, \frac{y}{2}, -ih \frac{\partial}{\partial y}\right) \psi(y) dy} \right) \psi(x).$$

Если $H = 1$ – единичный оператор, то

$$\mathcal{H}[\psi] = (2\pi h)^{-n} \|\psi\|^2 \cdot \psi(x).$$

Рассмотрим, как изменяется нелинейный символ UN-оператора при унитарных преобразованиях.

Имеется изометрия [34]

$$\mu: L^2(\mathbb{R}^{2n}) \rightarrow H_2, \quad \mu(f) \equiv f\left(\frac{x}{2}, \frac{p}{2}\right),$$

на класс H_2 линейных операторов Гильберта–Шмидта, действующих в пространстве $L^2(\mathbb{R}^2)$. Пусть V – некоторый линейный унитарный оператор в $L^2(\mathbb{R}^2)$. Определим в H_2 оператор Ad_V по формуле

$$\text{Ad}_V(T) = VTV^{-1}. \quad (39)$$

Сопоставим также оператору V следующий линейный унитарный оператор $\tilde{V}$ в пространстве $L^2(\mathbb{R}^{2n})$:

$$\tilde{V} = \mu^{-1} \circ \text{Ad}_V \circ \mu. \quad (40)$$

Нетрудно видеть, что верно следующее утверждение.

Пусть $\mathcal{H}$ есть UN-оператор типа Гильберта–Шмидта, а V – линейное унитарное преобразование пространства $L^2(\mathbb{R}^n)$. Тогда отображение $V^{-1} \circ \mathcal{H} \circ V$ является UN-оператором и его нелинейный символ H_V связан с символом H каноническим унитарным преобразованием:

$$H_V = \tilde{V}^{-1} \circ H \circ \tilde{V}.$$

3.4. Вывод уравнения самосогласованного поля из статистики, не различающей объективно различимые объекты. При рассмотрении задачи многих тел имеют место два аспекта. Эти многие тела могут находиться в нашем трехмерном пространстве и как-то двигаться, может быть, сталкиваться, воздействовать друг на друга. Но мы можем рассматривать их и по-другому. А именно: можем рассматривать эти N тел как одну точку (под N телами мы понимаем N материальных точек) в $3N$ -мерном пространстве. И в этом $3N$ -мерном пространстве эта одна точка совершает некоторое движение, перемещается, а мы можем следить за этим перемещением. В некоторых случаях оказывается полезен один из этих двух

подходов, двух аспектов, а в других случаях – другой. Так, с точки зрения математики проще рассматривать одну точку. А с точки зрения физики, так как мы живем все-таки в трехмерном пространстве, хотелось бы понимать, как материальные точки ведут себя в нашем трехмерном пространстве. Это более естественная картина. Можно, например, следить в трехмерном пространстве за одной частицей, которая находится в поле всех других частиц. При этом мы считаем, что все частицы примерно одинаковы и имеют одинаковое распределение. Мы можем считать, что одна частица как бы взаимодействует с другой. А та другая – это та же самая частица, т. е. распределена она точно так же, как и первая.

С математической точки зрения важно было бы не интуитивное, а точное уравнение в трехмерном пространстве, которое бы соответствовало уравнению движения частицы в $3N$ -мерном пространстве.

Оказывается, это можно сделать не интуитивно, как Власов, а точно – с помощью вторичного квантования, т. е., иначе говоря, рассматривать поведение в трехмерном пространстве не функций, а операторов – операторов рождения и уничтожения. Впервые это было сделано Дираком для квантовой механики. Однако рассматривать именно квантовую механику совершенно необязательно. Так, Шенберг рассматривал классическую механику и применил этот метод вторичного квантования к классическим объектам и к классической статистической физике. Фактически он впервые в математической литературе применил концепцию равноправной статистики для классического гамильтониана. Работы Шенберга не вполне понятны с точки зрения физики: почему частицы для многочастичной системы Ньютона мы можем считать равноправными, так что при перестановке двух частиц система не изменится? Тем не менее вывод уравнения Власова может быть осуществлен с помощью метода вторичного квантования для классических частиц. Используя этот метод при $N \rightarrow \infty$, мы получаем систему [28]

$$\begin{aligned} \dot{u}(p, q, t) &= \left(\frac{\partial U}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) u(p, q, t) + \\ &+ \iint dp' dq' v(p', q', t) \left(\frac{\partial V(q, q')}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} \right) u(p', q', t) u(p, q, t), \\ \dot{v}(p, q, t) &= \left(\frac{\partial U}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) v(p, q, t) + \\ &+ \iint dp' dq' u(p', q', t) \left(\frac{\partial V(q, q')}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} \right) v(p', q', t) v(p, q, t), \end{aligned} \quad (41)$$

где $U(q_i)$ – внешнее поле, $V(q_i, q_j)$ – парное взаимодействие.

Если мы заменим в пространстве Фока u и v на операторы рождения и уничтожения $\hat{u}$ и $\hat{v}$ соответственно, тогда система (41) будет эквивалентна N -частичной задаче для системы Ньютона.

Отметим, что подстановкой

$$u(p, q, t) = \sqrt{\rho(p, q, t)} e^{i\pi(p, q, t)}, \quad v(p, q, t) = \sqrt{\rho(p, q, t)} e^{-i\pi(p, q, t)} \quad (42)$$

система (41) может быть приведена к виду

$$\dot{\rho}(p, q, t) = \left(\frac{\partial W^t}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) \rho(p, q, t), \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \dot{\pi}(p, q, t) = & \left(\frac{\partial W^t}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) \pi(p, q, t) + \\ & + \iint dp' dq' \frac{\partial V(q, q')}{\partial q'} \frac{\partial \pi(p', q', t)}{\partial p'} \rho(p', q', t), \end{aligned} \quad (44)$$

где

$$W^t(q) = U(q) + \iint V(q, q') \rho(p', q', t) dp' dq'.$$

Первое уравнение (43) является уравнением Власова [36], которое используется в физике для изучения систем многих частиц. Второе, новое, уравнение (44) является линейным по функции $\pi(p, q, t)$.

Обычно классическую физику рассматривают “исторически” – до определенного момента исторического времени. На самом деле нужно пересмотреть классическую физику с точки зрения классического предела квантовой механики. При таком подходе в классической физике могут возникнуть новые важные объекты. Так, понятие поляризации в оптике считается следствием волновой оптики. Однако в коротковолновом пределе она остается. Поэтому поляризацию естественно рассматривать и в лучевой геометрической оптике.

Объекты, неизвестные ранее в классической механике, которые появляются из квантовой механики в квазиклассическом пределе, особенно важны, так как подчас меняют привычные представления в этой устоявшейся науке. Мы коснулись нового уравнения (44) дополнительно к уравнению Власова. В дальнейшем мы получим важнейшее дополнение к уравнению коллективных колебаний Власова, которое сохраняется в квазиклассическом пределе, т. е. для классических частиц.

3.5. Рождение и уничтожение пар (димеров). Поскольку двухчастичная функция распределения (димер) более строго описывается истинным символом при ультратворичном квантовании [37], мы рассмотрим сначала оператор $\hat{H}$, эквивалентный системе многочастичных уравнений Ньютона с парным взаимодействием.

Обозначим через $\hat{H}$ оператор

$$\begin{aligned} \hat{H} = & i \iint dp dq \Psi^+(p, q) \left(\frac{\partial U(q)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) \Psi^-(p, q) + \\ & + i \iiint dp dq dp' dq' \Psi^+(p, q) \Psi^+(p', q') \times \\ & \times \left(\frac{\partial V(q, q')}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} \right) \Psi^-(p', q') \Psi^-(p, q). \end{aligned} \quad (45)$$

Пусть $\hat{\rho}_B$ – оператор, введенный в [37] и в формуле (19) в работе [38]. Обозначим через

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

псевдосимвол этого двухчастичного оператора. Здесь $\hat{\rho}_B$ зависит от функций $b(x, s)$, $B(y, y')$:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_B = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k! M! (k+2M)!} \left(\sum_{s=0}^{\infty} \iint dx dx' b(x, s) b^*(x', s) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^-(x') \right)^k \times \\ & \times \left(\iint dy_1 dy_2 B(y_1, y_2) \hat{\psi}^+(y_1) \hat{\psi}^+(y_2) \right)^M \times \\ & \times \left(\iint dy'_1 dy'_2 B(y'_1, y'_2) \hat{\psi}^-(y'_1) \hat{\psi}^-(y'_2) \right)^M \exp \left(- \int dz \hat{\psi}^+(z) \hat{\psi}^-(z) \right), \end{aligned} \quad (46)$$

где $\hat{\psi}^+(x)$, $\hat{\psi}^-(x)$ – бозевские операторы рождения и уничтожения, упорядоченные по Вику [39].

Пусть $\mathcal{F}$ – бозонное пространство Фока [39], $\hat{b}^+(x, s)$ – оператор рождения частиц с номером s , $\hat{b}^-(x, s)$ – оператор уничтожения частиц с номером s в пространстве $\mathcal{F}$, $\hat{B}^+(x, x')$, $\hat{B}^-(x, x')$ – соответственно операторы рождения и уничтожения пары частиц. Эти операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям для бозонов b^- и b^+

$$\begin{aligned} [\hat{b}^-(x, s), \hat{b}^+(x', s')] &= \delta_{ss'} \delta(x - x'), & [\hat{b}^{\pm}(x, s), \hat{b}^{\pm}(x', s')] &= 0, \\ [\hat{B}^-(x_1, x_2) \hat{B}^+(x'_1, x'_2)] &= \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2), \\ [\hat{B}^{\pm}(x_1, x_2), \hat{B}^{\pm}(x'_1, x'_2)] &= 0, \\ [\hat{b}^{\pm}(x, s), \hat{B}^{\pm}(x'_1, x'_2)] &= [\hat{b}^{\pm}(x, s), \hat{B}^{\mp}(x'_1, x'_2)] = 0. \end{aligned} \quad (47)$$

Эти операторы нужно подставить в символ $\mathcal{H}_B(b^*(\cdot), b(\cdot), B^*(\cdot), B(\cdot))$ и получить оператор $\hat{\mathcal{H}}_B$, а затем вычислить его истинный символ, который позволит написать самосогласованные уравнения для двухчастичной функции распределения (полуплотностей).

Рассмотрим случай ультравторичного квантования только по парам. В этом случае истинным символом является следующий функционал:

$$\begin{aligned} \sqrt{\mathcal{H}}[\Phi^+(\cdot), \Phi(\cdot)] &= i \iiint dp dq dp' dq' \Phi^+(p, q, p', q') \times \\ & \times \left(\frac{\partial U(q)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial U(q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} - p \frac{\partial}{\partial q} - p' \frac{\partial}{\partial q'} \right) \Phi(p, q, p', q') + \\ & + \frac{i\alpha}{2} \int \dots \int dp dq dp' dq' dp_1 dq_1 dp'_1 dq'_1 \Phi^+(p, q, p', q') \Phi^+(p_1, q_1, p'_1, q'_1) \times \\ & \times \left(\frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V(q, q'_1)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \right. \\ & + \frac{\partial V(q, q'_1)}{\partial q'_1} \frac{\partial}{\partial p'_1} + \frac{\partial V(q', q_1)}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} + \frac{\partial V(q', q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V(q', q'_1)}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} + \\ & \left. + \frac{\partial V(q', q'_1)}{\partial q'_1} \frac{\partial}{\partial p'_1} \right) \Phi(p_1, q_1, p'_1, q'_1) \Phi(p, q, p', q') + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{i(1-\alpha)}{2} \int \dots \int dp dq dp' dq' dp_1 dq_1 dp'_1 dq'_1 \Phi^+(p, q, p'_1, q'_1) \Phi^+(p_1, q_1, p', q') \times \\
& \times \left(\left(\frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} \right) \Phi(p_1, q_1, p'_1, q'_1) \Phi(p, q, p', q') + \right. \\
& + \left(\frac{\partial V(q'_1, q_1)}{\partial q'_1} \frac{\partial}{\partial p'_1} + \frac{\partial V(q'_1, q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} \right) \Phi(p_1, q_1, p, q) \Phi(p', q', p'_1, q'_1) + \\
& + \left(\frac{\partial V(q, q')}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} \right) \Phi(p', q', p'_1, q'_1) \Phi(p, q, p_1, q_1) + \\
& \left. + \left(\frac{\partial V(q', q'_1)}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} + \frac{\partial V(q', q'_1)}{\partial q'_1} \frac{\partial}{\partial p'_1} \right) \Phi(p_1, q_1, p'_1, q'_1) \Phi(p, q, p', q') \right), \quad (48)
\end{aligned}$$

где α – параметр, зависящий от температуры.

Соответствующая система уравнений Гамильтона состоит из двух уравнений. Первое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi}{\partial t}(p, q, p', q', t) &= \left(\frac{\partial U(q)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial U(q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} - p' \frac{\partial}{\partial q'} \right) \Phi(p, q, p', q', t) + \\
& + 2\alpha \iiint dp_1 dq_1 dp'_1 dq'_1 \Phi^+(p_1, q_1, p'_1, q'_1, t) \times \\
& \times \left(\frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V(q_1, q')}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} + \right. \\
& + \left. \frac{\partial V(q_1, q')}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} \right) \Phi(p', q', p, q, t) \Phi(p'_1, q'_1, p_1, q_1, t) + \\
& + 2(1-\alpha) \iiint dp_1 dq_1 dp'_1 dq'_1 \Phi^+(p_1, q_1, p'_1, q'_1, t) \times \\
& \times \left(\left(\frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial V(q, q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} \right) \Phi(p_1, q_1, p', q', t) \Phi(p, q, p'_1, q'_1, t) + \right. \\
& + \left. \left(\frac{\partial V(q', q_1)}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p'} + \frac{\partial V(q', q_1)}{\partial q_1} \frac{\partial}{\partial p_1} \right) \Phi(p_1, q_1, p, q, t) \Phi(p', q', p'_1, q'_1, t) \right). \quad (49)
\end{aligned}$$

Второе уравнение получается из уравнения (49) заменой функций $\Phi(p, q, p', q', t)$ и $\Phi^+(p, q, p', q', t)$ на $\Phi^+(p, q, p', q', t)$ и $\Phi(p, q, p', q', t)$ соответственно. Функции $\Phi(p, q, p', q', t)$ и $\Phi^+(p, q, p', q', t)$ симметричны относительно перестановки пар p, q и p', q' .

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. *Величина*

$$\int \Phi(p, q, p', q', t) \Phi^+(p, q, p', q', t) dp dq dp' dq'$$

не зависит от времени t .

Утверждение 1 проверяется непосредственно.

Разумеется, величина $\iint \rho(p, q, t) dp dq$ также сохраняется. Однако в силу того, что после “выпадения в конденсат” число частиц в газе вычисляется не как интеграл по всем энергиям, а как интеграл лишь по энергиям от некоторого E_l до бесконечности, одночастичная “газовая” формула распределения и число частиц в газе могут меняться со временем. С другой стороны, одночастичное распределение в жидкости, в силу наличия в ней большого числа квантованных вихрей (существенного увеличения вращательных составляющих молекул), не будет совпадать с распределением в газе, и мы можем лишь гарантировать в силу утверждения 1 сохранение полного числа частиц.

Важнейшее свойство равноправного распределения – это возможность построения для этой статистики операторов рождения и уничтожения отдельных частиц, а также операторов рождения и уничтожения димеров.

По существу, уравнение самосогласованного поля Власова неявно использует равноправную статистику: распределение для данной частицы является одновременно распределением для любой частицы. Уравнения Власова были открыты на 10 лет позже соответствующих уравнений квантовой механики – уравнений Хартри. Это показывает, что статистика типа единосущности пришла в голову ученым раньше, чем равноправная статистика.

В знаменитой работе Боголюбова о слабо-неидеальном бозе-газе [25] фактически получен член, который в квазиклассическом пределе не исчезает, а добавляется к уравнению коллективных колебаний Власова.

ЗАМЕЧАНИЕ 11. Дисперсионное уравнение Боголюбова имеет вид (массу мы положим равной единице)

$$E(k) = \sqrt{k^2 \tilde{V} + \frac{k^4 \hbar^2}{4m^2}}, \quad (50)$$

где k – волновой вектор, $V(x - y)$ – потенциал взаимодействия, $\tilde{V}$ – его преобразование Фурье.

Казалось бы, при $\hbar \rightarrow 0$ второй член под знаком корня должен исчезнуть. Однако значение k может быть сколь угодно велико, и это мешает предельному переходу. С другой стороны, если взаимодействие $V(x - y) = 0$, то возникает член $k^2 \hbar / 2m$, который еще умножается на $\hbar$. В результате получается кинетическая энергия $k^2 \hbar^2 / 2m$, и она, разумеется, не исчезает в квазиклассическом пределе. Поэтому член, содержащий $\hbar$, остается в классическом пределе. Именно этот член ответствен за сверхтекучесть Боголюбова. Тот факт, что он не исчезает в классическом пределе, не замечен в работе Боголюбова, поскольку внешнее поле (внешний потенциал $u(x)$) у него отсутствует. А в этом случае, как правило, квазиклассика совпадает с точным решением. Поэтому мы введем в самом общем виде внешний потенциал и вычислим эту поправку.

ПРИМЕР 4. Рассмотрим уравнение Шредингера с потенциалом, имеющие две несимметричные впадины, разделенные барьером (рис. 6). Более глубокая (первая) впадина, минимальная точка которой имеет нулевую энергию, отвечает нормальной серии собственных значений, а более мелкая (вторая) имеет минимальную точку, отвечающую положительной энергии. Это означает, что частицы, заполняющие другую серию собственных значений, движутся с большей скоростью, когда соответствующие собственные значения находятся вблизи минимумов потенциала.

Рис. 6

В этом смысле вторая серия собственных значений может быть названа сверхтекучей. В квазиклассическом пределе они независимы друг от друга, и среднее число частиц может быть определено для каждой из серий. Средняя энергия, отвечающая среднему по всем собственным значениям, в квазиклассическом пределе, очевидно, охватывает обе серии, что согласуется с замечанием 5 в п. 2.2.

3.6. Сверхтекучесть в классической задаче. В работе [1] мы рассматривали потенциал Леннарда-Джонса – типичный потенциал взаимодействия в равновесной термодинамике. Квантование гамильтониана с таким потенциалом не укладывается ни в обычную квазиклассику, ни в стандартную квантовую механику. Переход в p -представление здесь затруднен из-за особенностей потенциала. Это приводит к математическим трудностям в определении фейнмановского континуального интеграла [33]. Лагранжево многообразие, отвечающее такому гамильтониану, содержит особенности. Применение метода канонического оператора (называемого также интегральным оператором Фурье) для случая лагранжевых многообразий с особенностями требует специальных разбиений на карты [40]–[43]. Поэтому необходимо рассмотреть квантовые уравнения самосогласованного поля общего вида.

Рассмотрим общие уравнения типа уравнений Хартри

$$\left[H_0 \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + \int dy \psi^*(y) H_1 \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(y) \right] \psi(x) = \Omega \psi(x), \quad (51)$$

где $x, y \in \mathbb{R}^n$, $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ – комплекснозначная функция, $\hbar > 0$, $\Omega \in \mathbb{R}$, операторы $-i\hbar \partial/\partial x$ и $-i\hbar \partial/\partial y$ действуют первыми, операторы x и y действуют вторыми. Функция H_1 удовлетворяет условию $H_1(x, p_x; y, p_y) = H_1(y, p_y; x, p_x)$. Уравнение (51) обобщает стандартное уравнение Хартри (формула (1) в работе [44], где $N = 1$).

Рассмотрим вариационную систему, ассоциированную с уравнением (51), которая может быть получена следующим образом. Напишем сопряженное с (51) уравнение и рассмотрим вариации обоих уравнений, предполагая, что вариации $\delta\psi = F$ и $\delta\psi^* = G$ независимы.

Вариационная система имеет вид

$$\begin{aligned}
 & \left[H_0 \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - \Omega + \int dy \psi^*(y) H_1 \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(y) \right] F(x) + \\
 & + \int dy \left(G(y) H_1 \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(y) + \right. \\
 & + \left. \psi^*(y) H_1 \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) F(y) \right) \psi(x) = -\beta F(x), \\
 & \left[H_0 \left(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - \Omega + \int dy \psi(y) H_1 \left(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi^*(y) \right] G(x) + \\
 & + \int dy \left(F(y) H_1 \left(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi^*(y) + \right. \\
 & + \left. \psi(y) H_1 \left(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; y, i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) G(y) \right) \psi^*(x) = \beta G(x).
 \end{aligned} \tag{52}$$

Уравнения (51) и (52) играют важную роль в построении асимптотических решений N -частичного уравнения Шредингера при $N \rightarrow \infty$ (см. [45]–[47]).

Например, спектр системы (52) (возможные значения β) соответствует спектру квазичастиц. А именно, разность между энергией возбужденного состояния и энергией основного состояния выражается как

$$\sum_k \beta_k n_k,$$

где числа $n_k \in \mathbb{Z}_+$, $k = \overline{1, \infty}$, равные нулю начиная с некоторого значения k , определяют собственную функцию и собственное значение возбужденного состояния, а $\beta_k \in \mathbb{R}$ – собственные значения системы (52).

В настоящей работе нас интересуют асимптотические решения уравнений (51) и (52), когда “внутреннее” значение $\hbar$ стремится к нулю.

Асимптотические решения уравнения (51), приведенные в [33], получены с помощью канонического оператора на лагранжевом многообразии $\Lambda^n = \{x = X(\alpha), p = P(\alpha)\}$, инвариантном относительно системы Гамильтона

$$\dot{x} = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x}, \tag{53}$$

где

$$H(x, p) = H_0(x, p) + \int d\mu_\alpha H_1(x, p; X(\alpha), P(\alpha)),$$

$\alpha \in \Lambda^n$, $d\mu_\alpha$ – инвариантная мера на Λ^n . Лагранжево многообразие лежит на поверхности $H(x, p) = \Omega$.

Если карта A спроецирована диффеоморфно на плоскость x , тогда канонический оператор действует как умножение на $e^{(i/\hbar)S(x)}/\sqrt{J}$, где $S(x) = \int p dx$ на Λ^n и $J = Dx/D\mu_\alpha$. Нас интересуют асимптотические решения системы (52). Мы можем рассмотреть случай x -карты без потери общности. Действительно, чтобы получить

подобные выражения для p -карты, нужно рассмотреть преобразование Фурье для уравнений (51) и (52) и применить те же приемы, так как вид уравнений остается неизменным.

Найдем асимптотические решения системы (52) на карте x в виде

$$F(x) = \tilde{f}(x)\psi(x), \quad G(x) = \tilde{g}(x)\psi^*(x), \quad (54)$$

где функции f и g , в отличие от ψ и ψ^* , имеют предел при $h \rightarrow 0$. Мы приходим к функциям f и g , которые зависят только от x .

Второе уравнение системы (52) может быть переписано в виде

$$\begin{aligned} & \left[H_0 \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x} \right) + \int dy \psi(y) H_1 \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x}; y, ih \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi^*(y); \tilde{g}(x) \right] \psi^*(x) + \\ & + \int dy \left\{ \psi(y) \tilde{c}(y) H_1 \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x}; y, ih \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi^*(y) + \right. \\ & \left. + \psi(y) \left[H_1 \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x}; y, ih \frac{\partial}{\partial y} \right); \tilde{g}(y) \right] \psi^*(y) \right\} = \beta \tilde{g}(x) \psi^*(x), \end{aligned} \quad (55)$$

где $[A; B] = AB - BA$ и

$$c(x) = \tilde{f}(x) + \tilde{g}(x). \quad (56)$$

Следовательно, предполагается, что функция c , так же как собственное значение β , имеет порядок $O(h)$. Преобразуем эти величины следующим образом:

$$c(x) = h\tilde{c}(x), \quad \beta = h\tilde{\beta}. \quad (57)$$

Теперь мы можем вывести уравнение для $\tilde{g}$, $\tilde{c}$ и $\tilde{\beta}$ в главном члене в h и первую поправку к нему из уравнения (55), используя следующие соотношения:

$$\begin{aligned} 1) \quad & \left[A \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x} \right); \xi(x) \right] = \\ & = \sum_{a=1}^n ih \frac{\partial A}{\partial p_a} \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x_a} - \sum_{a,b=1}^n \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial p_a \partial p_b} \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_a \partial x_b}, \end{aligned} \quad (58)$$

где $p_a = ih \partial / \partial x_a$, $A(x, p)$ – функция $\mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{C}$, $\xi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$;

2) $\psi(x) = \chi(x, h) e^{(i/h)S(x)}$, где $\chi = 1/\sqrt{J}$ в главном члене в h ;

$$3) \quad ih \frac{\partial}{\partial x} e^{-(i/h)S(x)} = e^{-(i/h)S(x)} \left(\frac{\partial S}{\partial x_n} + ih \frac{\partial}{\partial x} \right);$$

$$4) \quad B \left(ih \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial x} \right) =$$

$$\begin{aligned} & = B \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) + ih \sum_{a=1}^n \frac{\partial B}{\partial p_a} \frac{\partial}{\partial x_a} + \frac{ih}{2} \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 B}{\partial p_a \partial p_b} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} + \\ & + \frac{(ih)^2}{2} \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 B}{\partial p_a \partial p_b} \frac{\partial^2}{\partial x_a \partial x_b} + \frac{(ih)^2}{2} \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial^3 B}{\partial p_a \partial p_b \partial p_c} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} \frac{\partial}{\partial x_c} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(ih)^2}{6} \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial^3 B}{\partial p_a \partial p_b \partial p_c} \frac{\partial^3 S}{\partial x_a \partial x_b \partial x_c} + \\
& + \frac{(ih)^2}{8} \sum_{a,b,c,d=1}^n \frac{\partial^4 B}{\partial p_a \partial p_b \partial p_c \partial p_d} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} \frac{\partial^2 S}{\partial x_c \partial x_d} + O(h^3),
\end{aligned} \tag{59}$$

где все производные B берутся в точке $p = \partial S / \partial x$.

Эти соотношения могут быть легко получены для мономиальных функций A и B . Применение формул из п. 1–4 приводит к уравнению

$$\begin{aligned}
& i \sum_{a=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_a^x} \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a}(X(\alpha)) - \tilde{\beta} \tilde{g}(X(\alpha)) + \int d\mu_\beta \tilde{c}(X(\beta)) H_1 + \\
& + i \int d\mu_\beta \sum_{a=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a}(X(\beta)) \frac{\partial H_1}{\partial p_a^y} + \frac{h}{2} \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a}(X(\alpha)) \frac{\partial^2 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial \ln J}{\partial x_b}(X(\alpha)) - \\
& - \frac{h}{2} \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a}(X(\alpha)) \frac{\partial^3 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x \partial p_c^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_b \partial x_c}(X(\alpha)) - \frac{h}{2} \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 \tilde{g}}{\partial x_a \partial x_b}(X(\alpha)) \frac{\partial^2 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x} + \\
& + \frac{ih}{2} \int d\mu_\beta \tilde{c}(X(\beta)) \sum_{a,b=1}^n \left[\frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b}(X(\alpha)) + \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b}(X(\beta)) \right] - \\
& - \frac{ih}{2} \int d\mu_\beta \tilde{c}(X(\beta)) \sum_{a=1}^n \left[\frac{\partial H_1}{\partial p_a^x} \frac{\partial \ln J}{\partial x_a}(X(\alpha)) + \frac{\partial H_1}{\partial p_a^y} \frac{\partial \ln J}{\partial x_a}(X(\beta)) \right] + \\
& + \frac{h}{2} \int d\mu_\beta \sum_{a=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a}(X(\beta)) \left\{ \sum_{b=1}^n \left(\frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^x \partial p_b^y} \frac{\partial \ln J}{\partial x_b}(X(\beta)) + \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^x} \frac{\partial \ln J}{\partial x_b}(X(\alpha)) \right) - \right. \\
& - \sum_{b,c=1}^n \left(\frac{\partial^3 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^x \partial p_c^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_b \partial x_c}(X(\alpha)) + \frac{\partial^3 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y \partial p_c^y} \frac{\partial^2 S}{\partial y_b \partial y_c}(X(\beta)) \right) \left. \right\} - \\
& - \frac{h}{2} \int d\mu_\beta \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} \frac{\partial^2 g}{\partial x_a \partial x_b}(X(\beta)) = 0.
\end{aligned} \tag{60}$$

В этой формуле аргументы

$$x = X(\alpha), \quad p^x = P(\alpha), \quad y = X(\beta), \quad p^y = P(\beta) \tag{61}$$

функции H_1 и ее производных, так же как аргументы $x = X(\alpha)$, $p^x = P(\alpha)$ функции H , опущены.

Теперь найдем другое уравнение, связывающее $\tilde{g}$ с $\tilde{c}$. Для этого умножим первое уравнение системы (52) на $\psi^*(x)$ и второе уравнение на $\psi(x)$. Вычтем первое произведение из второго и получим

$$\beta \psi^*(x) \psi(x) c(x) = \psi(x) \left[H \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x} \right); \tilde{g}(x) \right] \psi^*(x) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \psi^*(x) \left[H \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x} \right); \tilde{g}(x) \right] \psi(x) - \psi^*(x) \left[H \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x} \right); \tilde{c}(x) \right] \psi(x) + \\
 & + \psi(x) \int dy \psi(y) \left[H_1 \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x}; y, ih \frac{\partial}{\partial y} \right); \tilde{g}(y) \right] \psi^*(y) \psi^*(x) - \\
 & - \psi^*(x) \int dy \psi^*(y) \left[\tilde{g}(y); H_1 \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x}; y, -ih \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \psi(y) \psi(x) + \\
 & + \psi(x) \int dy \psi(y) c(y) H_1 \left(x, ih \frac{\partial}{\partial x}; y, ih \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi^*(y) \psi^*(x) - \\
 & - \psi^*(x) \int dy \psi^*(y) H_1 \left(x, -ih \frac{\partial}{\partial x}; y, -ih \frac{\partial}{\partial y} \right) c(y) \psi(y) \psi(x). \tag{62}
 \end{aligned}$$

Используя уравнения (58)–(60), находим следующее уравнение для $\tilde{g}$ и $\tilde{c}$ с точностью до $O(\hbar^2)$:

$$\begin{aligned}
 & i \sum_{a=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_a^x} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a} (X(\alpha)) - \tilde{\beta} \tilde{c}(X(\alpha)) - \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial^2 \tilde{g}}{\partial x_a \partial x_b} (X(\alpha)) + \\
 & + \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a} (X(\alpha)) \frac{\partial \ln J}{\partial x_b} (X(\alpha)) - \\
 & - \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a} (X(\alpha)) \frac{\partial^3 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x \partial p_c^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_b \partial x_c} (X(\alpha)) - \\
 & - \int d\mu_\beta \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 \tilde{g}}{\partial x_a \partial x_b} (X(\beta)) \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} - \\
 & - \int d\mu_\beta \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a} (X(\beta)) \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} (X(\alpha)) \frac{\partial^3 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y \partial p_c^y} + \right. \\
 & + \left. \frac{\partial^2 S}{\partial y_a \partial y_b} (X(\beta)) \frac{\partial^3 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y \partial p_c^y} \right) + \\
 & + \int d\mu_\beta \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a} (X(\beta)) \left(\frac{\partial \ln J}{\partial x_b} (X(\alpha)) - \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} + \frac{\partial \ln J}{\partial x_b} (X(\beta)) \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} \right) - \\
 & - i \int d\mu_\beta \tilde{c}(X(\beta)) \sum_{a=1}^n \left(\frac{\partial \ln J}{\partial x_a} (X(\alpha)) \frac{\partial H_1}{\partial p_a^x} + \frac{\partial \ln J}{\partial x_a} (X(\beta)) \frac{\partial H_1}{\partial p_a^x} \right) + \\
 & + i \int d\mu_\beta \sum_{a=1}^n \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a} (X(\beta)) \frac{\partial H_1}{\partial p_a^y} + \\
 & + i \int d\mu_\beta \tilde{c}(X(\beta)) \sum_{a,b=1}^n \left(\frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_a \partial x_b} (X(\alpha)) + \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} \frac{\partial^2 S}{\partial y_a \partial y_b} (X(\beta)) \right) +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{h}{2} \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a}(X(\alpha)) \frac{\partial^3 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x \partial p_c^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_b \partial x_c}(X(\alpha)) - \\
& - \frac{h}{2} \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a}(X(\alpha)) \frac{\partial^2 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial \ln J}{\partial x_b}(X(\alpha)) + \frac{h}{2} \sum_{a,b=1}^n \frac{\partial^2 H}{\partial p_a^x \partial p_b^x} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x_a \partial x_b}(X(\alpha)) + \\
& + \frac{h}{2} \int d\mu_\beta \sum_{a,b,c=1}^n \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a}(X(\beta)) \left(\frac{\partial^3 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^x \partial p_c^x} \frac{\partial^2 S}{\partial x_b \partial x_c}(X(\alpha)) + \right. \\
& + \left. \frac{\partial^3 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y \partial p_c^y} \frac{\partial^2 S}{\partial x_b \partial x_c}(X(\beta)) \right) + \\
& + \frac{h}{2} \int d\mu_\beta \sum_{a,b=1}^n \left[\frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^y} \left(\frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x_a \partial x_b}(X(\beta)) - \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a}(X(\beta)) \frac{\partial \ln J}{\partial x_b}(X(\beta)) \right) - \right. \\
& - \left. \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_a}(X(\beta)) \frac{\partial \ln J}{\partial x_b}(X(\alpha)) \frac{\partial^2 H_1}{\partial p_a^y \partial p_b^x} \right] = 0. \tag{63}
\end{aligned}$$

Наконец, от этих общих уравнений мы перейдем к интересующему нас случаю. Пусть

$$x = x_1, x_2, x_3, x_4, \quad y = y_1, y_2, y_3, y_4$$

и задано внешнее поле потенциалом $U(x_1, x_2, x_3)$. Тогда уравнения (60) и (63) существенно упрощаются и принимают вид

$$\begin{aligned}
(i\nabla S \nabla - \tilde{\beta})\tilde{g} + \int V(x, X(\alpha')) \tilde{c}(X(\alpha')) d\mu_{\alpha'} + \frac{h}{2}(-\Delta \tilde{g} + \nabla \ln J \nabla \tilde{g}) &= 0, \\
(i\nabla S \nabla - \tilde{\beta})\tilde{c} - \Delta \tilde{g} + \nabla \ln J \nabla \tilde{g} - \frac{h}{2}(-\Delta \tilde{c} + \nabla \ln J \nabla \tilde{c}) &= 0.
\end{aligned} \tag{64}$$

Из уравнений (64) можно приближенно найти функции F и G , которые важны для построения приближенных волновых функций в N -частичной задаче при $N \rightarrow \infty$ [45].

Пусть $\hat{\rho}$ – проекция на функцию ψ , значение $\tilde{\rho}(x, y) = \psi(x)\psi^*(y)$ – ядро проекции, а $\rho(x, p) = \psi(x)\tilde{\psi}^*(p)e^{(i/\hbar)px}$ – символ проекции. Оператор $\hat{\rho}$ удовлетворяет уравнению Вигнера, которое принимает вид уравнения Власова при $\hbar \rightarrow 0$. Оператор $\hat{\sigma}$ с ядром $F(x)\psi^*(y) + \psi(x)G(y)$ равен

$$\hat{\sigma} = \tilde{f}\hat{\rho} + \hat{\rho}\tilde{g} \tag{65}$$

и удовлетворяет уравнению в вариациях для уравнения Вигнера, которое принимает вид уравнения в вариациях для уравнения Власова (43). В операторе (65) $\tilde{f}$ и $\tilde{g}$ являются операторами умножения на функции $\tilde{f}$ и $\tilde{g}$. Очевидно, что в квазиклассическом приближении символ σ имеет порядок $O(\hbar)$, так как

$$\hat{\sigma} = [\hat{\rho}; \tilde{g}] + \hbar \tilde{c} \hat{\rho}$$

и

$$\sigma(x, p) \simeq \hbar \left(-i \sum_{a=1}^n \frac{\partial \rho}{\partial p_a}(x, p) \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_a} + \tilde{c} \rho \right).$$

Поскольку ρ является δ_Λ -функцией в квазиклассическом приближении [44], функция σ фактически есть сумма δ_Λ -функции и ее производной. Если $U(x_1, x_2, x_3) = 0$, то мы получаем результат работы Боголюбова [25] для гамильтониана (19) при $B < r < a$.

ЗАМЕЧАНИЕ 12. Если $U(x_1, x_2, x_3) \neq 0$, то нетрудно убедиться, что имеет место классический предел при $\hbar \rightarrow 0$ (ср. с замечанием 11). Однако лагранжево многообразие имеет особенность [48].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная работа является продолжением работы [2] и заключение относится к обеим работам.

Старая термодинамика, помимо постулируемых “начал”, опиралась на распределение Максвелла–Больцмана. Однако Гиббс построил к ней контрпример – так называемый парадокс Гиббса. При попытке решения этого парадокса были предложены варианты исправления энтропии Больцмана. Но они содержали математические ошибки (см. [49], [50]). Как это ни удивительно, правильное число вариантов разложения одинаковых шариков по ячейкам-ящикам подсчитано в учебнике Ландау и Лившица [29] в примечании к § 54. Логарифм от этого числа вариантов есть правильная энтропия. Для этой энтропии парадокс Гиббса не имеет места. Априори ясно, что раз энтропия для квантовых частиц и для классических одинаковых шариков оказывается одной и той же, то именно эта последняя будет квазиклассическим пределом из квантовой статистики Бозе–Эйнштейна. Удивительно, что ни авторы [29], ни кто-либо из замечательной школы Ландау не воспользовались этим примечанием. Это привело к тому, что потребовалось построить новую концепцию всей классической термодинамики, тем более что современные эксперименты требовали объяснения вновь открытых эффектов, таких, например, как jamming-эффект, закон предпочтения образования кластеров перед переходом в жидкость и другие эффекты современной термодинамики.

Автор провел последовательное строго математическое построение, которое объяснило как парадокс Гиббса, который поставил в тупик таких великих математиков, как Пуанкаре и фон Нейман, а также многих знаменитых физиков, так и некоторые необъясненные ранее эффекты.

Вместо законов (“начал”) старой термодинамики выведены (а не постулированы) новые законы: закон постоянства дробного числа степеней свободы для постоянной температуры и закон максимального числа частиц $K(T)$, находящихся на данном уровне энергии.

Нетрудно убедиться, что все рассуждения, проведенные для потенциала Леннарда–Джонса, применимы для произвольного потенциала того же типа, т. е. содержащего притягивающую и отталкивающую части.

Гамильтониан (13), (14) распадается на две ветви, разделенные бесконечным барьером: притягивающую, которая привела к образованию “кластерной трубки”, и отталкивающую, которая привела к “сверхтекучей” компоненте в классическом пределе, т. е. проходящей через “губку” без столкновений с мономерным газом.

Аналогичные рассуждения привели автора к математическому объяснению двухжидкостной модели Тисса–Ландау [11], [12] для He^4 . Эта модель экспериментально подтверждена. Жидкий гелий помещается во вращающийся цилиндр. Нормальная компонента увлекается цилиндром и вращается вместе с ним, а сверхтекучая компонента остается в покое, проходя без сопротивления сквозь нормальную. *Чтобы подтвердить математические выводы этой работы, нужно поставить аналогичный эксперимент для флюида при $\rho > \rho_c$.*

Если обратить внимание на поведение изотерм в статистике Джентилия, то вполне можно отнести ее к газовой компоненте двухфлюидной концепции надкритических состояний. Действительно, в надкритической области $Z = \text{const}$ для изотерм, что соответствует идеальному газу $P = \alpha(T)\rho$. Идеальный газ, как легко проверить экспериментально на примере воздуха при комнатной температуре и атмосферном давлении при вращении цилиндра, не будет увлекаться цилиндром, в отличие от воды.

Если натянуть тонкие нити с узелками, вращающиеся вместе с цилиндром, то легко убедиться, что воздух все равно не будет увлечен вращением этой конструкции, а будет оставаться в покое, т. е. течь “сверхтекучим” образом через эту конструкцию. Можно сказать, что вязкость воздуха в этом смысле равна нулю. Таким образом, двухфлюидную концепцию надкритических явлений легко себе представить, в отличие от двухжидкостной модели Тисса–Ландау, когда одна “сверхтекучая” жидкость не увлекается другой – нормальной.

Таким образом, надкритическая область равновесной термодинамики распадается на две: флюид-газ и флюид-жидкость. На изотерме флюид-газ ведет себя подобно идеальному газу Больцмана–Максвелла: его плотность ρ пропорциональна давлению. Флюид-жидкость при увеличении давления на малом интервале подчиняется закону Гука, а далее при увеличении давления плотность становится постоянной: $\rho = \text{const}$. То есть при увеличении давления значение Z становится пропорциональным P на критической изотерме T_c , которая при ее прямолинейном продолжении проходит через точку $P = 0$, $Z = 0$. Этот факт, подтвержденный jamming-эффектом для флюидов, позволяет понять математику перехода к отрицательным давлениям [2].

Благодарности. Автор выражает глубокую благодарность В. В. Бражкину, В. С. Воробьеву, А. Е. Гехману, И. В. Мелихову и В. А. Рыжову за постоянные дискуссии, а также Д. С. Широкову за помощь в вычислениях и в построении графиков. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-01-00886_a).

Список литературы

- [1] В. П. Маслов, *ТМФ*, **175**:1 (2013), 93–131.
- [2] V. P. Maslov, *Math. Notes*, **94**:5–6 (2013), 722–813.
- [3] V. P. Maslov, *Russ. J. Math. Phys.*, **19**:4 (2012), 486–498.
- [4] Г. Л. Литвинов, В. П. Маслов, А. Н. Соболевский, *Вычислительные технологии*, **6**:6 (2001), 47–70.

- [5] А. Г. Витушкин, *Оценка сложности задач табулирования*, Физматгиз, М., 1959.
- [6] В. В. Бражкин, А. Г. Ляпин, В. Н. Рыжов, К. Траченко, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *УФН*, **182**:11 (2012), 1137–1156.
- [7] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 3: *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М., 2002.
- [8] В. Е. Панин, В. Е. Егорушкин, *Физическая мезомеханика*, **16**:3 (2013), 7–26.
- [9] В. Е. Панин, В. Е. Егорушкин, *ФММ*, **110**:5 (2010), 486–496.
- [10] V. P. Maslov, S. A. Molchanov, A. Ya. Gordon, *Russ. J. Math. Phys.*, **1**:1 (1993), 71–104.
- [11] V. P. Maslov, *Russ. J. Math. Phys.*, **16**:2 (2009), 146–165.
- [12] В. П. Маслов, *ТМФ*, **159**:1 (2009), 174–176.
- [13] V. P. Maslov, P. P. Mosolov, *Nonlinear Wave Equations Perturbed by Viscous Terms*, Gruyter Expositions in Mathematics, **31**, Walter de Gruyter, Berlin, 2000.
- [14] W.-S. Dai, M. Xie, *Ann. Phys.*, **309**:2 (2004), 295–305.
- [15] В. П. Маслов, *Докл. АН СССР*, **151**:2 (1963), 306–309.
- [16] В. П. Маслов, *ТМФ*, **161**:3 (2009), 420–458.
- [17] В. П. Маслов, *Теория возмущений и асимптотические методы*, Изд-во МГУ, М., 1965.
- [18] J. Mozer, *Commun. Pure Appl. Math.*, **23** (1970), 609–636.
- [19] А. П. Веселов, *Нелинейная динам.*, **5**:1 (2009), 39–51.
- [20] А. П. Веселов, *УМН*, **46**:5(281) (1991), 3–45.
- [21] В. В. Козлов, *Докл. АН СССР*, **249**:6 (1979), 1299–1302.
- [22] A. V. Bolsinov, I. A. Taimanov, *Invent. Math.*, **140**:3 (2000), 639–650.
- [23] T. Ishihara, T. Gotoh, Y. Kaneda, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **41**:1 (2009), 165–180.
- [24] С. Т. Беляев, *ЖЭТФ*, **34**:2 (1958), 417–432; 433–446.
- [25] Н. Н. Боголюбов, “К теории сверхтекучести”, *Избранные труды в трех томах*, т. 2, Наукова думка, Киев, 1970, 210–224.
- [26] A. Weinstein, *Lett. Math. Phys.*, **69**:1–3 (2004), 3–9.
- [27] В. П. Маслов, *Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях*, Наука, М., 1977.
- [28] В. П. Маслов, О. Ю. Шведов, *Метод комплексного роста*, Эдиториал УРСС, М., 2000.
- [29] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М., 1964.
- [30] P. Erdős, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **52** (1946), 185–188.
- [31] *Математический энциклопедический словарь*, Советская энциклопедия, М., 1988.
- [32] *Математический энциклопедический словарь*, **4**, Советская энциклопедия, М., 1984.
- [33] В. П. Маслов, *Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана*, Наука, М., 1976.
- [34] Ph. Blanchard, M. Sirugue, *Commun. Math. Phys.*, **101**:2 (1985), 173–185.
- [35] V. P. Maslov, O. Yu. Shvedov, *Russ. J. Math. Phys.*, **2**:2 (1994), 217–234.
- [36] А. А. Власов, *ЖЭТФ*, **8**:3 (1938), 291–238.
- [37] В. П. Маслов, *Квантование термодинамики и ультравторичное квантование*, ИКИ, М., 2001.
- [38] В. П. Маслов, *Матем. заметки*, **82**:5 (2007), 690–708.
- [39] Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*, Наука, М., 1987.
- [40] С. Ю. Доброхотов, В. Е. Назайкинский, Б. Тироцци, *Алгебра и анализ*, **22**:6 (2010), 67–90.
- [41] S. Yu. Dobrikhotov, V. E. Nazaikinskii, B. Tirozzi, *Russ. J. Math. Phys.*, **17**:4 (2010), 434–447.
- [42] S. Yu. Dobrokhotoov, V. E. Nazaikinskii, B. Tirozzi, *Russ. J. Math. Phys.*, **20**:4 (2013), 389–401.
- [43] Д. С. Миненков, *Матем. заметки*, **92**:5 (2012), 721–730.

- [44] V. P. Maslov, *Russ. J. Math. Phys.*, **3**:1 (1995), 123–132.
- [45] В. П. Маслов, О. Ю. Шведов, *ТМФ*, **98**:2 (1994), 266–288.
- [46] В. П. Маслов, О. Ю. Шведов, *Докл. РАН*, **340**:1 (1995), 42–47.
- [47] В. П. Маслов, О. Ю. Шведов, *Матем. заметки*, **57**:1 (1995), 133–137.
- [48] В. П. Маслов, “Уравнение Власова”, *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*. Серия Б, т. VII-1: *Математическое моделирование в низкотемпературной плазме*, ред. В. Е. Фортов, Янус-К, М., 2008, 209–242.
- [49] V. P. Maslov, *Math. Notes*, **93**:5 (2013), 732–739.
- [50] V. P. Maslov, *Russ. J. Math. Phys.*, **20**:2 (2013), 214–229.

Поступила в редакцию 18.02.2014