Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Н. Н. Боголюбов (мл.), М. Ю. Расулова, У. А. Авазов,
Об эволюции квантовой системы многих частиц, вза-
имодействующих посредством обобщенного потенциала
Юкавы, *ТМФ*, 2016, том 189, номер 3, 446–452

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9172>

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

Параметры загрузки:

IP: 54.196.121.252

26 апреля 2023 г., 10:56:40

© 2016 г. Н. Н. Боголюбов (мл.)*, М. Ю. Расулова[†],
У. А. Авазов[†]

ОБ ЭВОЛЮЦИИ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ МНОГИХ ЧАСТИЦ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОСРЕДСТВОМ ОБОБЩЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА ЮКАВЫ

Исследована эволюция помещенной в ограниченную область системы N тождественных по массе и по заряду частиц, взаимодействующих посредством обобщенного потенциала Юкавы. Эволюция такой системы описывается цепочкой квантовых кинетических уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивана (ББГКИ). С помощью теории полугрупп доказано существование единственного решения цепочки квантовых кинетических уравнений ББГКИ с обобщенным потенциалом Юкавы.

Ключевые слова: обобщенный потенциал Юкавы, экранированный потенциал Кулона, потенциал Дебая–Хюккеля, потенциал Юкавы, цепочка квантовых кинетических уравнений ББГКИ.

DOI: 10.4213/tmf9172

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена исследованию динамики систем многих частиц, взаимодействующих посредством экранированного потенциала. Как известно, такие системы активно используются в физической химии, в физике твердого тела, в физике полупроводников, в физике плазмы, в физике ядра, а в последние годы и в биологии.

Задача о взаимодействии ионов в разбавленных растворах электролитов была решена Дебаем и Хюккелем в 1923 году с помощью экранированного потенциала

Исследование М. Ю. Расуловой и У. А. Авазова выполнено при поддержке ККРНТ РУз (грант № Ф2-ФА-Ф116) в Институте ядерной физики Академии наук Узбекистана.

*Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук, Москва, Россия. E-mail: bogolubv@mi.ras.ru

[†]Институт ядерной физики АН Республики Узбекистан, пос. Улугбек, Ташкент, Узбекистан. E-mail: rasulova@live.com

взаимодействия, который в литературе также называется потенциалом взаимодействия Дебая–Хюккеля [1],

$$\phi_{i,j} = \frac{(Ze)^2 e^{-r/r_D}}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r},$$

где Z – атомный номер, e – элементарная единица заряда, r – расстояние между частицами, r_D – так называемый дебаевский радиус экранирования (радиус ионной атмосферы [2]), ϵ – диэлектрическая проницаемость растворителя, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. В качестве потенциала Дебая–Хюккеля рассматривается взаимодействие так называемого центрального иона с ионами, входящими в ионную сферу вокруг него. С помощью этого взаимодействия определен ионный коэффициент активности. Закономерности Дебая–Хюккеля справедливы в условиях термодинамического равновесия, когда параметры системы постоянны во времени.

Дальнейшее развитие теории Дебая–Хюккеля происходило в физике плазмы. Как известно, плазма – частично или полностью ионизированный газ, состоящий из нейтральных атомов и заряженных частиц (ионов и электронов). При описании процессов в плазме большое значение имеет эффект экранирования кулоновского поля заряда на расстояниях, определяемых дебаевским радиусом экранирования [3],

$$\phi_{i,j} = \frac{(Ze)^2 e^{-|\lambda|r}}{4\pi r},$$

где λ – параметр экранирования.

В качестве модифицированного экранированного кулоновского потенциала в ядерной физике рассматривается потенциал Юкавы [4]

$$\phi(r) = -g^2 \frac{e^{-\mu r}}{r},$$

с помощью которого объясняется взаимодействие между протоном и нейтроном. Здесь g – константа, задающая интенсивность ядерного взаимодействия, μ – постоянная размерности обратной длины, задающая радиус взаимодействия. Знак минус говорит о притяжении.

С помощью потенциала Дебая–Хюккеля можно объяснить также конденсацию противоионов [5].

В последние годы существенно возрос интерес к задаче о квантовых неравновесных системах многих частиц, взаимодействующих посредством экранированного потенциала Кулона. Исследование таких потенциалов остается до сих пор актуальным и важным для изучения динамических свойств неравновесных систем многих тел, на это указано в недавних работах [6], [7].

До сих пор рассмотрение динамики систем частиц, взаимодействующих посредством экранированного потенциала, ограничивалось системами частиц, состоящими из двух или трех частиц. В настоящей работе рассматривается динамика систем, состоящих из произвольного ограниченного числа частиц. Для изучения динамики таких систем частиц, взаимодействующих с помощью экранированного потенциала, используется цепочка квантовых кинетических уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ) [8]–[10]. Для решения этой цепочки используется метод полугрупп [11]–[14]. При этом существенным является использование теоремы о самосопряженности оператора, представляющего экранированный потенциал [15].

Работа имеет следующую структуру. В разделе 1 дается краткая информация о цели и методе решения. В разделе 2 формулируется задача. В разделе 3 цепочка квантовых кинетических уравнений БГКИ рассматривается в пространстве последовательностей ядерных операторов и с помощью полугрупп доказывается существование единственного решения этой цепочки. В разделе 4 формулируется полученный результат.

2. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Настоящая работа посвящена решению цепочки квантовых кинетических уравнений БГКИ, описывающей эволюцию систем тождественных частиц с массой m , взаимодействующих посредством зависящего от расстояния между частицами $r \equiv |x_i - x_j| = ((x_i^1 - x_j^1)^2 + (x_i^2 - x_j^2)^2 + (x_i^3 - x_j^3)^2)^{1/2}$ обобщенного потенциала Юкавы

$$\phi(r) = \sum_{k=0}^M r^{k-1} \int_{\mu_0}^{\infty} e^{-\mu r} dw_k(\mu),$$

где $\mu_0 > 0$, M – целое число, $w_0, \dots, w_M$ – вещественные (но не обязательно положительные) меры с конечной полной вариацией. Эти потенциалы являются суперпозициями основных потенциалов Юкавы $-r^{-1}e^{-\mu r}$ [15]. Предполагается, что заряды имеют реальные постоянные значения. Задача рассматривается в рамках нерелятивистской квантовой теории, когда скорость частиц является малой. Эволюция таких систем частиц описывается цепочкой квантовых кинетических уравнений БГКИ [8]–[10]

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \rho_s(t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)}{\partial t} &= [H_s, \rho_s](t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) + \\ &+ \frac{1}{v} \text{Tr}_{x_{s+1}} \sum_{1 \leq i \leq s} (\phi_{i,s+1}(|x_i - x_{s+1}|) - \phi_{i,s+1}(|x'_i - x_{s+1}|)) \times \\ &\times \rho_{s+1}(t, x_1, \dots, x_s, x_{s+1}; x'_1, \dots, x'_s, x_{s+1}), \end{aligned} \quad (1)$$

где $v = V/N$ при $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, с начальным условием

$$\rho_s(t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)|_{t=0} = \rho_s(0, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s). \quad (2)$$

В задаче (1), (2) вектор x_i обозначает положение i -й частицы в трехмерном евклидовом пространстве $\mathbb{R}^3$, $x_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3)$, $i = 1, 2, \dots, s$, и x_i^α , $\alpha = 1, 2, 3$, являются координатами вектора x_i . Длина вектора x_i обозначается как

$$|x_i| = ((x_i^1)^2 + (x_i^2)^2 + (x_i^3)^2)^{1/2}.$$

Приведенный статистический оператор s частиц $\rho_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)$ связан с положительной симметричной матрицей плотности $D(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}, \dots, x_N; x'_1, \dots, x'_s, x'_{s+1}, \dots, x'_N)$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) &= \\ &= V^s \text{Tr}_{x_{s+1}, \dots, x_N} D(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}, \dots, x_N; x'_1, \dots, x'_s, x_{s+1}, \dots, x_N), \end{aligned}$$

где $s \in \mathbb{N}$, N – число частиц, V – объем системы частиц. След Tr определяется формулой

$$\text{Tr}_x \rho = \int \rho(x, x) dx.$$

В уравнении (1) принято, что постоянная Планка $\hbar = 1$, а $[\cdot, \cdot]$ обозначает скобку Пуассона.

Гамильтониан рассматриваемой системы определяется как

$$H_s = \sum_{1 \leq i \leq s} T_i + \sum_{1 \leq i < j \leq s} \phi_{i,j},$$

где

$$T_i = -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m}, \quad \phi_{i,j} = \sum_{k=0}^M r^{k-1} \int_{\mu_0}^{\infty} e^{-\mu r} dw_k(\mu),$$

а лапласиан

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial (x_i^1)^2} + \frac{\partial^2}{\partial (x_i^2)^2} + \frac{\partial^2}{\partial (x_i^3)^2}.$$

Оператор

$$(\phi \rho_s)(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) = \sum_{1 \leq i < j \leq s} \phi_{i,j}(|x_i - x_j|) \rho_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)$$

является симметричным.

В настоящей работе задача Коши (1), (2) решена для квантовой системы ограниченного числа частиц, содержащихся в ограниченной области (в сосуде) с объемом $V = |\Lambda|$.

В этом случае состояние системы определяется матрицей плотности $\rho_s^\Lambda(t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)$, которая удовлетворяет задаче Коши

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \rho_s^\Lambda(t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)}{\partial t} &= [H_s^\Lambda, \rho_s^\Lambda](t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) + \\ &+ \frac{N}{V} \left(1 - \frac{s}{N}\right) \text{Tr}_{x_{s+1}} \sum_{1 \leq i \leq s} (\phi_{i,s+1}(|x_i - x_{s+1}|) - \phi_{i,s+1}(|x'_i - x_{s+1}|)) \times \\ &\times \rho_{s+1}^\Lambda(t, x_1, \dots, x_s, x_{s+1}; x'_1, \dots, x'_s, x_{s+1}) \end{aligned} \quad (3)$$

с начальным условием

$$\rho_s^\Lambda(t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)|_{t=0} = \rho_s^\Lambda(0, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s). \quad (4)$$

В уравнении (3) гамильтониан системы определяется как

$$H_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s) = \sum_{1 \leq i \leq s} \left(-\frac{1}{2m} \Delta_{x_i} + u^\Lambda(x_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq s} \phi_{i,j}(|x_i - x_j|),$$

где $u^\Lambda(x)$ – внешнее поле, которое сохраняет систему в области Λ ($u^\Lambda(x) = 0$, если $x \in \Lambda$, и $u^\Lambda(x) = +\infty$, если $x \notin \Lambda$). След в ограниченной области определяется формулой

$$\text{Tr}_x \rho^\Lambda = \int_{\Lambda} \rho^\Lambda(x, x) dx.$$

3. РЕШЕНИЕ ЦЕПОЧКИ КВАНТОВЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ БГКИ С ОБОБЩЕННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ЮКАВЫ

Для решения задачи Коши (3), (4) используем метод полугрупп [11]–[16].

Пусть $L_2^s(\Lambda)$ является гильбертовым пространством функций $\psi_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s)$, $x_i \in \mathbb{R}^3(\Lambda)$, и B_s^Λ – банахово пространство положительно определенных, самосопряженных операторов $\rho_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)$ на $L_2^s(\Lambda)$,

$$(\rho_s^\Lambda \psi_s^\Lambda)(x_1, \dots, x_s) = \int_\Lambda \rho_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) \psi_s^\Lambda(x'_1, \dots, x'_s) dx'_1 \dots dx'_s$$

с нормой

$$|\rho_s^\Lambda|_1 = \sup \sum_{1 \leq i \leq \infty} |(\rho_s^\Lambda \psi_i^s, \varphi_i^s)|,$$

где верхняя грань берется по всем ортонормированным системам финитных, дважды дифференцируемых функций с компактным носителем $\{\psi_i^s\}$ и $\{\varphi_i^s\}$ в $L_2^s(\Lambda)$, $s \geq 1$, и $|\rho_0^\Lambda|_1 = |\rho_0^\Lambda|$.

Положим, что операторы $\rho_s^\Lambda(t)$ и H_s^Λ действуют в пространстве $L_2^s(\Lambda)$ с нулевым граничным условием. Пусть B^Λ является банаховым пространством последовательностей ядерных операторов

$$\rho^\Lambda = \{\rho_0^\Lambda, \rho_1^\Lambda(x_1; x'_1), \dots, \rho_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s), \dots\},$$

где ρ_0^Λ является комплексным числом, $\rho_s^\Lambda \subset B_s^\Lambda$,

$$\rho_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) = 0, \quad s > s_0,$$

s_0 – ограниченное число. Норма в B^Λ имеет вид

$$|\rho^\Lambda|_1 = \sum_{s=0}^{\infty} |\rho_s^\Lambda|_1.$$

Гамильтониан $-\Delta + \phi$ с обобщенным потенциалом Юкавы

$$\phi(r) = \sum_{k=0}^M r^{k-1} \int_{\mu_0}^{\infty} e^{-\mu r} dw_k(\mu) \quad (5)$$

является самосопряженным оператором в области $D(-\Delta)$ [15].

Пусть $\tilde{B}_s^\Lambda$ является плотной системой “хороших” элементов B_s^Λ типа $B_s^\Lambda \cap D(H_s^\Lambda) \otimes D(H_s^\Lambda)$, где $D(H_s^\Lambda)$ – область определения операторов H_s^Λ [16], а $\otimes$ обозначает алгебраическое тензорное произведение.

Рассмотрим операторы

$$\begin{aligned}
 (\Omega(\Lambda)\rho^\Lambda)_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) &= \frac{N}{V} \left(1 - \frac{s}{N}\right) \times \\
 &\times \int_\Lambda \sum_i \rho_{s+1}^\Lambda(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}; x'_1, \dots, x'_s, x_{s+1}) g_i^1(x_{s+1}) \bar{g}_i^1(x_{s+1}) dx_{s+1}, \\
 (U^\Lambda(t)\rho^\Lambda)_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) &= \\
 &= (e^{\Omega(\Lambda)} e^{-iH^\Lambda t} e^{-\Omega(\Lambda)} \rho^\Lambda e^{iH^\Lambda t})_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s), \\
 (\mathcal{H}^\Lambda \rho^\Lambda)_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) &= \\
 &= [H_s^\Lambda, \rho_s^\Lambda](x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) + \frac{N}{V} \left(1 - \frac{s}{N}\right) \times \\
 &\times \text{Tr}_{x_{s+1}} \sum_{1 \leq i \leq s} (\phi_{i,s+1}(|x_i - x_{s+1}|) - \\
 &- \phi_{i,s+1}(|x'_i - x_{s+1}|)) \rho_{s+1}^\Lambda(x_1, \dots, x_{s+1}; x'_1, \dots, x'_{s+1}),
 \end{aligned} \tag{6}$$

где $g_i^1(x_{s+1})$ является полной системой ортогональных векторов в одночастичном пространстве $L_2(\Lambda)$.

ТЕОРЕМА 1. Пусть потенциал между частицами системы N частиц имеет вид обобщенного потенциала Юкавы (5). Тогда операторы $U^\Lambda(t)$ определяют сильно непрерывную полугруппу ограниченных операторов на B^Λ , инфинитезимальный генератор которой совпадает с $-i\mathcal{H}^\Lambda$ на пространстве $\tilde{B}^\Lambda$, всюду плотном в B^Λ .

Доказательство этой теоремы можно провести по аналогии с доказательствами в работах [11]–[14].

Следовательно, единственное решение задачи Коши (3), (4) имеет вид

$$\begin{aligned}
 \rho_s^\Lambda(t, x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) &= (U^\Lambda(t)\rho^\Lambda)_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) = \\
 &= (e^{\Omega(\Lambda)} e^{-iH^\Lambda t} e^{-\Omega(\Lambda)} \rho^\Lambda e^{iH^\Lambda t})_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s)
 \end{aligned}$$

для $\rho_s^\Lambda(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) \in \tilde{B}_s^\Lambda$.

Аналогично можно показать, что инфинитезимальный генератор группы $U(t)$ совпадает с оператором

$$\begin{aligned}
 (-i\mathcal{H}\rho)_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) &= -i\{[H_s, \rho_s](x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s) + \\
 &+ \frac{1}{v} \text{Tr}_{x_{s+1}} \sum_{1 \leq i \leq s} (\phi_{i,s+1}(|x_i - x_{s+1}|) - \phi_{i,s+1}(|x'_i - x_{s+1}|)) \times \\
 &\times \rho_{s+1}(x_1, \dots, x_s, x_{s+1}; x'_1, \dots, x'_s, x_{s+1})\}
 \end{aligned}$$

цепочки ББГКИ в термодинамическом пределе (1), всюду плотном подмножестве пространства B финитных последовательностей

$$\rho = \{\rho_0, \rho_1(x_1; x'_1), \dots, \rho_s(x_1, \dots, x_s; x'_1, \dots, x'_s), \dots\}, \quad \rho_s = 0, \quad s > s_0,$$

таких, что $[H_s, \rho_s] \in B_s$ когда $\rho_s \in B_s$ [12].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе исследована эволюция помещенной в ограниченную область квантовой системы N тождественных по массе и по заряду частиц, взаимодействующих посредством обобщенного потенциала Юкавы. Эволюция такой системы описывается цепочкой квантовых кинетических уравнений ББГКИ. В работе с помощью теории полугрупп доказано существование единственного решения цепочки квантовых кинетических уравнений ББГКИ с обобщенным потенциалом Юкавы.

Список литературы

- [1] P. Debye, E. Hückel, *Phys. Zschr.*, **24** (1923), 185–206.
- [2] Б. Б. Дамаскин, О. А. Петрий, Г. А. Цирлина, *Электрохимия*, Химия, М., 2001.
- [3] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1976.
- [4] H. Yukawa, *Proc. Phys. Math. Soc. Japan*, **17** (1935), 48–56.
- [5] G. S. Manning, *J. Chem. Phys.*, **51**:3 (1969), 924–933.
- [6] F. R. Graziani, V. S. Batista, L. X. Benedict et al., *High Energy Density Phys.*, **8**:1 (2012), 105–131.
- [7] S. P. Hau-Riege, J. Weisheit, J. I. Castor, R. A. London, H. Scott, D. F. Richards, *New J. Phys.*, **15**:1 (2013), 015011, 39 pp.
- [8] N. N. Bogolyubov, *Lectures on Quantum Statistics*, Gordon and Breach, New York, 1970; Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды в трех томах*, т. 2, Наукова думка, Киев, 1970.
- [9] Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.), *Введение в квантовую статистическую механику*, Наука, М., 1984.
- [10] Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.), “Обобщенное кинетическое уравнение для динамической системы, взаимодействующей с фононным полем”, *Проблемы современной статистической физики*, Наукова думка, Киев, 1985, 5–18.
- [11] Д. Я. Петрина, А. К. Видьбида, “Задача Коши для кинетических уравнений Боголюбова”, *Международная конференция по математическим проблемам квантовой теории поля и квантовой статистики. Часть II. Поля и частицы. Математические вопросы квантовой статистики*, Сборник докладов (Москва, 12–17 декабря 1972), Тр. МИАН СССР.
- [12] D. Ya. Petrina, *Mathematical Foundation of Quantum Statistical Mechanics. Continuous Systems*, Mathematical Physics Studies, **17**, Kluwer, Dordrecht, 1995.
- [13] М. Ю. Расулова, *Докл. АН УзССР*, **2** (1976), 6–9.
- [14] M. Brokate, M. Yu. Rasulova, *Phys. Part. Nucl.*, **41**:7 (2010), 1014–1016.
- [15] М. Рид, Б. Саймон, *Методы математической физики*, т. 3: *Теория рассеяния*, Мир, М., 1982.
- [16] Т. Като, *Теория возмущений линейных операторов*, Мир, М., 1972.

Поступила в редакцию 26.02.2016,
после доработки 24.03.2016