ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 530.19

КВАНТОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ

В. П. Маслов

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

Дается новое представление для оператора Гамильтона в бозонном и фермионном случаях, отвечающее рождению и уничтожению кластеров. Полученный принцип соответствия между символом и оператором позволяет проквантовать энтропию и свободную энергию. Минимальное значение квантовой свободной энергии в термодинамическом пределе отвечает классической свободной энергии. Дается оценка этого минимального значения для бозонной системы с сильным взаимодействием, в которой возможен фазовый переход в сверхтекучее состояние.

Введем, как и в статьях [1–4], специальные пространства для вторичного квантования системы бозонов с большим числом кластеров. Пусть целое число $k \geqslant 1$ — число типов кластеров, $N_1, \dots, N_k \geqslant 0$ — целые числа. Введем пространство $\mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}$. Его элементами являются функции вида

$$\begin{aligned}&\Psi(x_1^1, j_1^1; \dots; x_{N_1}^1, j_{N_1}^1; x_1^2, x_2^2, j_1^2; \dots\\ &\dots; x_{2N_2-1}^2, x_{2N_2}^2, j_{N_2}^2; \dots; x_1^k, \dots, x_k^k, j_1^k; \dots\\ &\dots; x_{kN_k-k+1}^k, \dots, x_{kN_k}^k, j_{N_k}^k),\end{aligned} \tag{1}$$

где $x_{p_l}^l \in \mathbf{T}^3$, $\mathbf{T}^3$ — трехмерный тор $L \times L \times L$, $j_{q_l}^l = 1, \dots, \infty$ для всех $l = 1, \dots, k$ и $p_l = 1, \dots, lN_l$, $q_l = 1, \dots, N_l$. Функции Ψ считаем симметричными относительно перестановок любых пар переменных $(x_{pl-l+1}^l, \dots, x_{pl}^l, j_p^l)$ и $(x_{ql-l+1}^l, \dots, x_{ql}^l, j_q^l)$ при $l = 1, \dots, k$ и $p, q = 1, \dots, N_l$.

Скалярное произведение в пространстве $\mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}$ имеет вид

$$\begin{aligned}(\Psi_1, \Psi_2) &\overset{\text{def}}{=} \sum_{j_1^1=1}^{\infty} \dots \sum_{j_{N_1}^1=1}^{\infty} \dots \sum_{j_1^k=1}^{\infty} \dots\\ &\dots \sum_{j_{N_k}^k=1}^{\infty} \int \dots \int dx_1^1 \dots dx_{N_1}^1 \dots dx_1^k \dots dx_{kN_k}^k \times\\ &\times \Psi_1^*(x_1^1, j_1^1; \dots; x_{N_1}^1, j_{N_1}^1; \dots\\ &\dots; x_1^k, \dots, x_k^k, j_1^k; \dots; x_{kN_k-k+1}^k, \dots, x_{kN_k}^k, j_{N_k}^k) \times\\ &\times \Psi_2(x_1^1, j_1^1; \dots; x_{N_1}^1, j_{N_1}^1; \dots\\ &\dots; x_1^k, \dots, x_k^k, j_1^k; \dots; x_{kN_k-k+1}^k, \dots, x_{kN_k}^k, j_{N_k}^k).\end{aligned}$$

Определим бозонное пространство $\mathcal{F}^B_{N_1,\dots,N_k}$.

Определение 1. Пространство $\mathcal{F}^B_{N_1,\dots,N_k}$ является подпространством пространства $\mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}$ и состоит из таких элементов $\mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}$, которые симметричны относительно перестановок любых x_p^l и x_q^m при $l, m = 1, \dots, k$ и $p = 1, \dots, lN_l$, $q = 1, \dots, mN_m$. Проектор на это подпространство будет обозначаться как $\widehat{P}^B_{N_1,\dots,N_k}$:

$$\widehat{P}^B_{N_1,\dots,N_k} : \mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k} \to \mathcal{F}^B_{N_1,\dots,N_k}.$$

Рассмотрим теперь гильбертово пространство $\mathcal{F}$, элементами которого являются бесконечные наборы:

$$\Psi = \{\Psi_{N_1,\dots,N_k}\}, \quad \Psi_{N_1,\dots,N_k} \in \mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k},$$

$$N_1, \dots, N_k = 0, 1, \dots,$$

$$\|\Psi\|^2 = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_k=0}^{\infty} \|\Psi_{N_1,\dots,N_k}\|^2 < \infty.$$

Это пространство является бесконечной прямой суммой пространств

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N_1,\dots,N_k} \mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}$$

и является специальным частным случаем пространств Фока [5]. В этом пространстве стандартным образом [5] вводятся операторы $\widehat{b}_l^+(x_1, \dots, x_l, j)$, $\widehat{b}_l^-(x_1, \dots, x_l, j)$ при $l = 1, \dots, k$ — операторы рождения и уничтожения кластеров соответственно.

Обозначим оператор проектирования на соответствующее слагаемое прямой суммы как $\widehat{P}_{N_1,\dots,N_k}$:

$$\widehat{P}_{N_1,\dots,N_k} : \mathcal{F} \to \mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}, \quad \widehat{P}_{N_1,\dots,N_k}\Psi = \Psi_{N_1,\dots,N_k},$$

а оператор вложения $\mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k}$ в $\mathcal{F}$ как $\widehat{i}_{N_1,\dots,N_k}$:

$$\widehat{i}_{N_1,\dots,N_k} : \mathcal{F}_{N_1,\dots,N_k} \to \mathcal{F},$$

$$\widehat{i}_{N_1,\dots,N_k}\varphi = \{\delta_{N_1M_1} \cdot \ldots \cdot \delta_{N_kM_k}\varphi\},$$

где δ_{NM} — символ Кронекера.

Рассмотрим далее на торе $\mathbf{T}^3$ систему N тождественных бозонов, гамильтониан которой имеет вид

$$\widehat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\Delta_j + U_0 \sum_{1\leqslant j<k\leqslant N} v\left(\frac{x_j - x_k}{a}\right), \tag{2}$$

где $x_j \in \mathbf{T}^3$, Δ — оператор Лапласа, m — масса частиц, $\hbar$ — постоянная Планка, U_0, a — заданные постоянные, $v(x)$ — непрерывная четная функция на торе. Гамильтониану (2) отвечает вторично квантованный оператор [5]

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int dx \widehat{\psi}^+(x)\Delta\widehat{\psi}^-(x) + \tag{3}$$

$$+U_0 \iint dx dy v\left(\frac{x-y}{a}\right)\widehat{\psi}^+(x)\widehat{\psi}^+(y)\widehat{\psi}^-(y)\widehat{\psi}^-(x),$$

где операторы $\widehat{\psi}^{\pm}(x)$ являются операторами рождения и уничтожения в бозонном $\mathcal{H}_B$ пространстве Фока [5], элементы которого представляют собой последовательности симметричных функций $\{\phi_n(x_1,\ldots,x_n)\}$, $n=0,1,\ldots$, $\phi_n \in L_2(\mathbf{T}^{3n})$.

Введем операторнозначный функционал

$$\widehat{\rho} = \sum_{N_1=0}^{\infty}\ldots\sum_{N_k=0}^{\infty}\frac{1}{N_1!\ldots N_k!}\times$$
$$\times\prod_{l=1}^{k}\left(\sum_{j^l=0}^{\infty}\int\ldots\int dx_1^l dy_1^l \ldots dx_l^l dy_l^l \times\right.$$
$$\times b_l(x_1^l,\ldots,x_l^l,j^l)\overset{2}{\widehat{\psi}^+}(x_1^l)\ldots$$
$$\left.\ldots\overset{2}{\widehat{\psi}^+}(x_l^l) b_l^*(y_1^l,\ldots,y_l^l,j^l)\overset{1}{\widehat{\psi}^-}(y_1^l)\ldots\overset{1}{\widehat{\psi}^-}(y_l^l)\right)^{N_l}\times$$
$$\times\exp\left(-\int dz \overset{2}{\widehat{\psi}^+}(z)\overset{1}{\widehat{\psi}^-}(z)\right), \tag{4}$$

который зависит от наборов из k функций $b_l(x_1^l,\ldots,x_l^l,j)$, $l=1,\ldots,k$, таких, что

$$\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dx_1\ldots dx_l |b_l(x_1^l,\ldots,x_l^l,j)|^2 < \infty,$$

и принимает значения в множестве операторов в пространстве $\mathcal{H}_B$. (Здесь звездочка означает комплексное сопряжение.) Числа над операторами в (4) обозначают порядок их действия [6]. Функциональные аргументы у $\widehat{\rho}$ будем опускать. Введем далее функционал

$$\mathcal{H}[b_1^*(x_1^1,j^1), b_1(x_1^1,j^1),\ldots$$
$$\ldots, b_k^*(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k), b_k(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k)] =$$
$$= \mathrm{Sp}\left(\widehat{\rho}\widehat{H}\right)\times\exp\left(-\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dy_1\ldots dy_l\times\right.$$
$$\left.\times b_l^*(y_1,\ldots,y_l,j) b_l(y_1,\ldots,y_l,j)\right). \tag{5}$$

В пространстве $\mathcal{F}$ вводится так же, как и в работах [1–4], следующий оператор — осредненный гамильтониан:

$$\overline{\overline{\mathcal{H}}} = \mathcal{H}[\overset{2}{\widehat{b}_1^+}(x_1^1,j^1),\overset{1}{\widehat{b}_1^-}(x_1^1,j^1),\ldots$$
$$\ldots,\overset{2}{\widehat{b}_k^+}(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k),\overset{1}{\widehat{b}_k^-}(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k)]. \tag{6}$$

Имеет место следующая теорема.

Т е о р е м а 1. *Проекция осредненного гамильтониана (6) на подпространство $\mathcal{F}^B_{N_1,\ldots,N_k}$ действует на дискретные переменные функции (1) как единичный оператор, а на непрерывные — как гамильтониан (2).*

Доказательство теоремы легко получается с помощью методов, развитых в работах [3, 5].

Введем принцип соответствия, согласно которому любому вторично квантованному оператору $\widehat{A}$ в пространстве $\mathcal{H}_B$ сопоставляется оператор $\overline{\overline{A}}$ в пространстве $\mathcal{F}$, причем символ оператора [6] $\overline{\overline{A}}$, так же как и символ гамильтониана (3), выражается формулой

$$A[b_1^*(x_1^1,j^1), b_1(x_1^1,j^1),\ldots$$
$$\ldots, b_k^*(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k), b_k(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k)] =$$
$$= \mathrm{Sp}\left(\widehat{\rho}\widehat{A}\right)\exp\left(-\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dy_1\ldots dy_l\times\right. \tag{7}$$
$$\left.\times b_l^*(y_1,\ldots,y_l,j) b_l(y_1,\ldots,y_l,j)\right),$$

аналогичной формуле (5). Заметим теперь, что вторично квантованный оператор $\widehat{\rho}$ при переходе от оператора к символу в формулах (5), (7) можно интерпретировать как матрицу плотности. А поскольку энтропия, отвечающая матрице плотности $\widehat{\rho}$, есть $\ln(\widehat{\rho}/\,\mathrm{Sp}(\widehat{\rho}))$, то естественно рассмотреть теперь функционал

$$S[b_1^*(x_1^1,j^1), b_1(x_1^1,j^1),\ldots$$
$$\ldots, b_k^*(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k), b_k(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k)] =$$
$$= \mathrm{Sp}\left(\widehat{\rho}\ln\left(\frac{\widehat{\rho}}{\mathrm{Sp}\,\widehat{\rho}}\right)\right)\exp\left(-\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dy_1\ldots dy_l\times\right.$$
$$\left.\times b_l^*(y_1,\ldots,y_l,j) b_l(y_1,\ldots,y_l,j)\right) \tag{8}$$

и отвечающий ему оператор

$$\overline{\overline{S}} = S[\overset{2}{\widehat{b}_1^+}(x_1^1,j^1),\overset{1}{\widehat{b}_1^-}(x_1^1,j^1),\ldots$$
$$\ldots,\overset{2}{\widehat{b}_k^+}(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k),\overset{1}{\widehat{b}_k^-}(x_1^k,\ldots,x_k^k,j^k)],$$

который был определен в работах [1–4]. Оператор $\overline{\overline{S}}$ называется оператором энтропии системы бозонов.

Введем также в $\mathcal{F}$ осредненный единичный оператор, символ которого определяется выражением (8) при $\widehat{A}=1$. Будем обозначать этот оператор $\overline{\overline{E}}$.

Определение 2. Числа λ, для которых

$$\left(\overline{\overline{\mathcal{H}}} + \Theta\overline{\overline{S}}\right)\Phi = \lambda\overline{\overline{E}}\Phi, \quad \Phi \in \mathcal{F},\ \Phi \neq 0,$$

называются квантовыми значениями свободной энергии системы бозонов при температуре Θ.

Теперь аналогично введем осреднение операторов и квантовую свободную энергию для фермионов. Будем считать, что фермионы могут иметь спиновую переменную s, которая принимает значения в дискретном конечном множестве Σ. Рассмотрим гильбертово пространство $\mathcal{F}_{N_1,\ldots,N_k}$, построенное из функций (1), для которых $x^l_{p_l} \in \mathbf{T}^3 \otimes \Sigma$. Далее в фермионном случае везде будем использовать обозначение

$$\int dx = \sum_{s\in\Sigma}\int d\xi,$$

где $x = (\xi, s)$, $\xi \in \mathbf{T}^3$, $s \in \Sigma$. Определим фермионное пространство $\mathcal{F}^F_{N_1,\ldots,N_k}$.

Определение 3. Пространство $\mathcal{F}^F_{N_1,\ldots,N_k}$ является подпространством пространства $\mathcal{F}_{N_1,\ldots,N_k}$ и состоит из таких элементов $\mathcal{F}_{N_1,\ldots,N_k}$, которые антисимметричны относительно перестановок любых x^l_p и x^m_q при $l, m = 1, \ldots, k$ и $p = 1, \ldots, lN_l$, $q = 1, \ldots, mN_m$. Проектор на это подпространство будет обозначаться как $\widehat{P}^F_{N_1,\ldots,N_k}$:

$$\widehat{P}^F_{N_1,\ldots,N_k} : \ \mathcal{F}_{N_1,\ldots,N_k} \to \mathcal{F}^B_{N_1,\ldots,N_k}.$$

Аналогично бозонному случаю рассмотрим систему фермионов, гамильтониан которой в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\begin{aligned}\widehat{H}' = &-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{s\in\Sigma}\int dx\widehat{\psi}^+(x,s)\Delta\widehat{\psi}^-(x,s) + \\ &+U_0\sum_{s,s'\in\Sigma}\iint dx dy\, v\left(\frac{x-y}{a}\right)\times \\ &\times\widehat{\psi}^+(x,s)\widehat{\psi}^+(y,s')\widehat{\psi}^-(y,s')\widehat{\psi}^-(x,s),\end{aligned} \tag{9}$$

где операторы $\widehat{\psi}^\pm(x,s)$ являются операторами рождения и уничтожения в фермионном пространстве Фока [5] $\mathcal{H}_F$.

Введем функционал, принимающий значения в пространстве $\mathcal{H}_F$:

$$\begin{aligned}\widehat{\rho}' = &\sum_{N_1=0}^{\infty}\cdots\sum_{N_k=0}^{\infty}\frac{1}{N_1!\ldots N_k!}\sum_{j^1_1=0}^{\infty}\cdots\sum_{j^1_{N_1}=0}^{\infty}\cdots \\ &\cdots\sum_{j^k_1=0}^{\infty}\cdots\sum_{j^k_{N_k}=0}^{\infty}\int\cdots\int dx^1_1dy^1_1\ldots dx^1_{N_1}dy^1_{N_1}\ldots \\ &\qquad\ldots dx^k_1dy^k_1\ldots dx^k_{kN_k}dy^k_{kN_k}\times \\ &\times\widehat{\psi}^+(x^1_1)\ldots\widehat{\psi}^+(x^1_{N_1})\ldots\widehat{\psi}^+(x^k_1)\ldots\widehat{\psi}^+(x^k_{kN_k})\widehat{P}_0\times \\ &\times b_1(x^1_1,j^1_1)\ldots b_1(x^1_{N_1},j^1_{N_1})\ldots b_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k_1)\ldots \\ &\ldots b_k(x^k_{kN_k-k+1},\ldots,x^k_{kN_k},j^k_{N_k})b^*_1(y^1_1,j^1_1)\ldots \\ &\ldots b^*_1(y^1_{N_1},j^1_{N_1})\ldots b^*_k(y^k_1,\ldots,y^k_k,j^k_1)\ldots \\ &\ldots b^*_k(y^k_{kN_k-k+1},\ldots,y^k_{kN_k},j^k_{N_k})\times \\ &\times\widehat{\psi}^-(y^k_{kN_k})\ldots\widehat{\psi}^-(y^k_1)\ldots\widehat{\psi}^-(y^1_{N_1})\ldots\widehat{\psi}^-(x^1_1),\end{aligned}$$

где $\widehat{P}_0$ — оператор проектирования на вакуумный вектор [5] пространства $\mathcal{H}_F$. Функциональные аргументы у $\widehat{\rho}'$ будем опускать. Введем, как и в бозонном случае, функционал

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}[b^*_1(x^1_1,j^1), b_1(x^1_1,j^1),\ldots \\ &\quad\ldots, b^*_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k), b_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k)] = \\ &\quad= \mathrm{Sp}\left(\widehat{\rho}'\widehat{H}\right)\exp\left(-\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dy_1\ldots dy_l\times\right. \\ &\qquad\qquad\left.\times\, b^*_l(y_1,\ldots,y_l,j)b_l(y_1,\ldots,y_l,j)\right).\end{aligned}$$

Так же как и в бозонном случае, в $\mathcal{F}$ вводится осредненный гамильтониан

$$\begin{aligned}\overline{\overline{\mathcal{H}}} = \mathcal{H}[&\overset{2}{\widehat{b}^+_1}(x^1_1,j^1), \overset{1}{\widehat{b}^-_1}(x^1_1,j^1),\ldots \\ &\ldots,\overset{2}{\widehat{b}^+_k}(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k), \overset{1}{\widehat{b}^-_k}(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k)].\end{aligned} \tag{10}$$

Имеет место теорема, аналогичная теореме 1 для бозонного случая.

Следуя упомянутому выше принципу соответствия, любому вторично квантованному оператору $\widehat{A}$ в пространстве $\mathcal{H}_F$ сопоставим оператор $\overline{\overline{\widehat{A}}}$ в пространстве $\mathcal{F}$, символ которого, так же как и символ гамильтониана, выражается формулой

$$\begin{aligned}&A[b^*_1(x^1_1,j^1), b_1(x^1_1,j^1),\ldots \\ &\quad\ldots, b^*_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k), b_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k)] = \\ &\quad= \mathrm{Sp}\left(\widehat{\rho}'\widehat{A}\right)\exp\left(-\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dy_1\ldots dy_l\times\right. \\ &\qquad\qquad\left.\times\, b^*_l(y_1,\ldots,y_l,j)b_l(y_1,\ldots,y_l,j)\right),\end{aligned}$$

аналогичной формуле (7). Согласно тому же принципу соответствия, введем функционал

$$\begin{aligned}&S[b^*_1(x^1_1,j^1), b_1(x^1_1,j^1),\ldots \\ &\quad\ldots, b^*_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k), b_k(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k)] = \\ &= \mathrm{Sp}\left(\widehat{\rho}'\ln\left(\frac{\widehat{\rho}'}{\mathrm{Sp}\,\widehat{\rho}'}\right)\right)\exp\left(-\sum_{l=1}^{k}\sum_{j=0}^{\infty}\int\ldots\int dy_1\ldots dy_l\times\right. \\ &\qquad\qquad\left.\times\, b^*_l(y_1,\ldots,y_l,j)b_l(y_1,\ldots,y_l,j)\right)\end{aligned} \tag{11}$$

и отвечающий ему оператор

$$\begin{aligned}\overline{\overline{S}} = S[&\overset{2}{\widehat{b}^+_1}(x^1_1,j^1), \overset{1}{\widehat{b}^-_1}(x^1_1,j^1),\ldots \\ &\ldots,\overset{2}{\widehat{b}^+_k}(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k), \overset{1}{\widehat{b}^-_k}(x^k_1,\ldots,x^k_k,j^k)],\end{aligned} \tag{12}$$

который называется оператором энтропии системы фермионов. Осредненный единичный оператор будем обозначать, как и в бозонном случае, $\overline{\widehat{E}}$.

Определение 4. Числа λ, для которых

$$\left(\overline{\widehat{\mathcal{H}}}+\Theta\overline{\widehat{S}}\right)\Phi=\overline{\widehat{E}}\lambda\Phi,\quad \Phi\in\mathcal{F},\,\Phi\neq 0,$$

называются квантовыми значениями свободной энергии системы фермионов при температуре Θ.

Рассмотрим теперь оценку сверху для минимального квантового значения свободной энергии в бозонном и фермионном случаях. Заметим сначала, что определяемые формулами (8), (11) функционалы не являются аналитическими, и для того чтобы эти функционалы определяли операторы в $\mathcal{F}$, требуется их регуляризовать. В работе [3] была предложена пуантилистическая регуляризация. Проиллюстрируем эту регуляризацию на примере системы из N фермионов со спином $1/2$. Будем считать, что число типов кластеров $k=2$. Пусть вторично квантованный гамильтониан фермионов в пространстве $\mathcal{H}_F$ имеет более общий, чем (9), вид:

$$\widehat{H}=\sum_p\sum_{s=1}^{2}\varepsilon_p\widehat{c}^{\,+}_{ps}\widehat{c}^{\,-}_{ps}+\sum_{p,q,r,t}\sum_{s,s'=1}^{2}V_{pqrt}\widehat{c}^{\,+}_{ps}\widehat{c}^{\,+}_{qs'}\widehat{c}^{\,+}_{rs'}\widehat{c}^{\,-}_{ts},\tag{13}$$

где $s=1,2$ — спиновая переменная, p,q,r,t — трехмерные векторы вида $2\pi(n_1,n_2,n_3)/L$, $n_1,n_2,n_3\in\mathbf{Z}$, $\widehat{c}^{\,\pm}_{ps}$ — операторы рождения и уничтожения фермиона с импульсом p и спином s:

$$\widehat{c}^{\,\pm}_{ps}=\frac{1}{L^{3/2}}\int d\xi\exp(\pm ip\xi)\widehat{\psi}^{\pm}(\xi,s),$$

ε_p, V_{pqrt} — заданные коэффициенты, причем $V_{pqrt}=0$ при $p+q-r-t\neq 0$, а кроме того, использовано следующее обозначение:

$$\sum_p=\sum_{n_1=-\infty}^{\infty}\sum_{n_2=-\infty}^{\infty}\sum_{n_3=-\infty}^{\infty}.$$

Поскольку операторы $\overline{\widehat{\mathcal{H}}}$ и $\overline{\widehat{S}}$ коммутируют с операторами числа частиц данного типа кластеров

$$\int\ldots\int dx_1\ldots dx_l\widehat{b}^{+}_l(x_1,\ldots,x_l,j)\widehat{b}^{-}_l(x_1,\ldots,x_l,j)$$

при всех $l=1,\ldots,k$ и $j=0,1,\ldots$, рассмотрим в пространстве $\mathcal{F}$ систему векторов вида

$$\Phi_{\{p\sigma\}M}=$$

$$=\left(\sum_s\sum_{s'}\iint d\xi d\xi'\Phi(\xi,s,\xi',s')\widehat{b}^{+}_2(\xi,s,\xi',s',0)\right)^M\times$$

$$\times\prod_{j=0}\left(\int d\zeta u_{p_j}(x)\widehat{b}^{+}_1(\zeta,\sigma_j,j)\right)\Psi_0,\tag{14}$$

где Ψ_0 — вакуумный вектор в пространстве $\mathcal{F}$, $u_p(x)=\exp(ipx)/L^{3/2}$, $\{p\sigma\}$ — последовательности пар (p_j,σ_j), $j=0,1,\ldots$, причем $(p_j,\sigma_j)\neq(p_{j'},\sigma_{j'})$ при $j\neq j'$, $2M<N$, а кроме того,

$$\Phi(\xi,1,\xi',2)=\sum_p\varphi_p u_p(\xi)u_{-p}(\xi')=-\Phi(\xi',2,\xi,1),$$

$$\Phi(\xi,1,\xi',1)=\Phi(\xi,2,\xi',2)=0.$$

Матричные элементы осредненного оператора $\overline{\widehat{A}}$ на векторах (14) сводятся с помощью методов [3, 5] к следующим матричным элементам вторично квантованного оператора $\widehat{A}$:

$$(\phi_{\{n\}},\widehat{A}\phi_{\{n'\}}),\tag{15}$$

где $\{n\}$ — набор чисел n_{ps}, которые могут принимать значения 0 и 1 и при этом $\sum_p\sum_s n_{ps}=N-2M$, $\phi_{\{n\}}$ — элементы пространства Фока $\mathcal{H}_F$:

$$\phi_{\{n\}}=(\sum_q\varphi_q\widehat{c}^{\,+}_{q1}\widehat{c}^{\,+}_{-q2})^M\prod_p\prod_{s=1}^{2}(\widehat{c}^{\,+}_{p1})^{n_{p1}}(\widehat{c}^{\,+}_{-p2})^{n_{-p2}}Y_0,\tag{16}$$

где Y_0 — вакуумный вектор пространства $\mathcal{H}_F$. Матричные элементы (15) легко находятся в термодинамическом пределе, когда $L\to\infty$, $N,M\to\infty$ и при этом N/L^3 и M/L^3 стремятся к постоянным значениям. А именно, если при этом наборы $\{n\}$ и $\{n'\}$ так зависят от L, что для любой непрерывной функции $f(p)$ суммы

$$\frac{1}{L^3}\sum_p f(p)n_{ps},\, s=1,2,$$

имеют предел, равный

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int dpf(p)n_s(p),$$

то имеет место следующая асимптотика для скалярного произведения:

$$(\phi_{\{n'\}},\phi_{\{n\}})=\frac{(f^*f)^M(M!)^2}{\sqrt{2\pi S_2}}\exp(S_0)\times$$

$$\times\prod\nolimits_p\delta_{n_{p1}-n'_{p1}+n_{-p2}-n'_{-p2}}\times$$

$$\times\Big[(1-\delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\delta_{n'_{-p2}1}\delta_{n'_{p1}1}-\delta_{n_{p1}1}\delta_{n_{-p2}1}\delta_{n'_{-p2}0}\delta_{n'_{p1}0})+$$

$$+(\delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\delta_{n'_{-p2}1}\delta_{n'_{p1}1}\widetilde{\varphi}_p+\delta_{n_{p1}1}\delta_{n_{-p2}1}\delta_{n'_{-p2}0}\delta_{n'_{p1}0})\widetilde{\varphi}^*_p\Big],\tag{17}$$

где $\widetilde{\varphi}_p=\varphi_p/D$, D определяется из уравнения

$$M=\sum_p\frac{\widetilde{\varphi}^*_p\widetilde{\varphi}_p}{1+\widetilde{\varphi}^*_p\widetilde{\varphi}_p}\delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\delta_{n'_{-p2}0}\delta_{n'_{p1}0}-$$

$$-\sum_p\delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\delta_{n'_{-p2}1}\delta_{n'_{p1}1},\tag{18}$$

$$S_0 = \sum_p \ln(1+\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p)\delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\delta_{n'_{-p2}0}\delta_{n'_{p1}0},$$

$$S_2 = \sum_p \frac{\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p}{(1+\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p)^2}\delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\delta_{n'_{-p2}0}\delta_{n'_{p1}0}.$$

Если уравнение (18) не имеет решений, то матричный элемент (17) равен нулю. Введем теперь функции

$$G_{p1} = \delta_{n_{p1}1} + \delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\frac{\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p}{1+\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p},$$
$$G_{p2} = \delta_{n_{-p2}1} + \delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\frac{\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p}{1+\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p}, \tag{19}$$
$$R_p = \delta_{n_{p1}0}\delta_{n_{-p2}0}\frac{\widetilde{\varphi}_p}{1+\widetilde{\varphi}_p^*\widetilde{\varphi}_p},$$

определенные на решетке $(2\pi/L)\mathbf{Z}^3$ и зависящие от набора $\{n_{ps}\}$. Пусть при стремлении шага решетки $(2\pi/L)\to 0$ набор $\{n_{ps}\}$ так зависит от p, L, что функции (19) имеют пределы $G_1(p), G_2(p), R(p)$, т. е. для любой непрерывной функции $f(p)$ при $L\to\infty$

$$\frac{1}{L^3}\sum_p f(p)G_{ps} \quad\to\quad \frac{1}{(2\pi)^3}\int dp f(p)G_s(p),$$
$$(s=1,2) \qquad\qquad (s=1,2)$$

$$\frac{1}{L^3}\sum_p f(p)R_p \quad\to\quad \frac{1}{(2\pi)^3}\int dp f(p)R(p).$$

Продемонстрируем теперь пуантилистическую регуляризацию для гамильтониана и покажем на этом примере, что для операторов, отвечающих аналитическому символу, такая регуляризация не изменяет матричных элементов. Пусть $0<\sigma<1$. Введем пуантилистические функции $\widetilde{G}_{ps}$ и $\widetilde{R}_p$ следующим образом:

$$\widetilde{G}_{ps} = \frac{1}{N^\sigma}\sum_q G_{qs}\theta((6\pi^2N^\sigma)^{1/3}/L - |p-q|),$$
$$\widetilde{R}_p = \frac{1}{N^\sigma}\sum_q R_q\theta((6\pi^2N^\sigma)^{1/3}/L - |p-q|), \tag{20}$$

где $\theta(\cdot)$ — тета-функция Хевисайда. Рассмотрим средние значения

$$\frac{(\phi_{\{n\}},\widehat{H}\phi_{\{n\}})}{(\phi_{\{n\}},\phi_{\{n\}})} = E_{\{n\}}$$

гамильтониана (13) на векторах (16), которые совпадают со средними значениями осредненного гамильтониана (10) на векторах (14). Воспользуемся формулой (17) и получим для $E_{\{n\}}$ следующее выражение:

$$E_{\{n\}} = \Bigg(\sum_p\sum_{s=1}^2 \varepsilon_p G_{ps} + \sum_{\substack{p,q\\p\neq q}}\sum_{s=1}^2 (V_{pqqp}-V_{pqpq})G_{ps}G_{qs} +$$
$$+\sum_{\substack{p,q\\p\neq -q}}(V_{pqqp}+V_{qppq})G_{p1}G_{q2} + \tag{21}$$
$$+\sum_{\substack{p,q\\p\neq q}}(V_{p-p-qq}+V_{-ppq-q})R_p^*R_q\Bigg)(1+O(1/N)).$$

Пусть коэффициенты V_{pqrt} в (13) такие, что

$$V_{pqqp}-V_{pqpq} = V_1(p,q),\quad V_{pqqp}+V_{qppq} = V_2(p,q),$$
$$V_{p-p-qq}+V_{-ppq-q} = V_3(p,q),$$

где $V_1(p,q)$, $V_2(p,q)$, $V_3(p,q)$ — непрерывные функции. Предположим, что функции на решетке G_{ps} и R_p такие, что в пределе при $L\to\infty$ для любой непрерывной функции $f(p)$ имеют место равенства

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L^3}\sum_p f(p)G_{ps} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int dp f(p)G_s(p),$$

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L^3}\sum_p f(p)R_p = \frac{1}{(2\pi)^3}\int dp f(p)R(p).$$

В этом случае, очевидно, справедливо равенство

$$\Bigg[\frac{(\phi_{\{n\}},\widehat{H}\phi_{\{n\}})}{(\phi_{\{n\}},\phi_{\{n\}})} - \Bigg(\sum_p\sum_{s=1}^2\varepsilon_p\widetilde{G}_{ps} +$$
$$+\sum_{\substack{p,q\\p\neq q}}\sum_{s=1}^2(V_{pqqp}-V_{pqpq})\widetilde{G}_{ps}\widetilde{G}_{qs} +$$
$$+\sum_{\substack{p,q\\p\neq -q}}(V_{pqqp}+V_{qppq})\widetilde{G}_{p1}\widetilde{G}_{q2}+$$
$$+\sum_{\substack{p,q\\p\neq q}}(V_{p-p-qq}+V_{-ppq-q})\widetilde{R}_p^*\widetilde{R}_q\Bigg)\Bigg]L^{-3} = O(1/N).$$

Таким образом, при замене функций G_{ps} и R_p в (21) на пуантилистические функции $\widetilde{G}_{ps}$ и $\widetilde{R}_p$ асимптотика матричных элементов гамильтониана не изменяется. Такая пуантилистическая регуляризация приводит к тому, что в термодинамическом пределе средние значения оператора энтропии (12) на векторах (14) диагональны и имеют вид [3]

$$S_{\{n\}} = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\int dp\Big[\widetilde{n}_1(p)\ln(\widetilde{n}_1(p)) +$$
$$+(1-\widetilde{n}_1(p))\ln(1-\widetilde{n}_1(p)) + \widetilde{n}_2(p)\ln(\widetilde{n}_2(p))+$$
$$+(1-\widetilde{n}_2(p))\ln(1-\widetilde{n}_2(p))\Big],$$

$$\widetilde{n}_s(p) = G_s(p) + \frac{1}{2}\Big(1 - G_1(p) - G_2(p) - Z(p)\Big),$$

$$Z(p) = \sqrt{\Big(1-G_1(p)-G_2(p)\Big)^2 + 4R^*(p)R(p)}.$$

Заметим, что

$$\Theta S_{\{n\}} + E_{\{n\}} = \frac{(\Phi_{\{p\sigma\}M}, (\Theta\widehat{\widehat{S}} + \widehat{\widehat{E}})\Phi_{\{p\sigma\}M})}{(\Phi_{\{p\sigma\}M}, \Phi_{\{p\sigma\}M})} \quad (22)$$

и поэтому является оценкой сверху для минимального квантового значения свободной энергии системы фермионов. Естественно, наилучшей оценкой такого рода является минимум выражения $\Theta S_{\{n\}} + E_{\{n\}}$ по всем наборам $\{n\}$. Продемонстрируем нахождение этого минимума теперь на примере бесспиновых бозонов с гамильтонианом (3) для случая $k = 1$. Пуантилистическая регуляризация для бозонов производится так же, как и в фермионном случае, и оценка сверху для минимального квантового значения энтропии в этом случае имеет вид

$$F_{\{n\}} = \sum_p \varepsilon_p \widetilde{n}_p + \frac{U_0 a^3}{2L^3} \sum_{pq} \Big(\widetilde{v}(0) + \widetilde{v}(p-q)\Big)\widetilde{n}_p \widetilde{n}_q -$$

$$-\delta_{p0}\frac{U_0 a^3}{2L^3}\widetilde{n}_0^2 + \Theta\Big(\widetilde{n}_p \ln \widetilde{n}_p - (1+\widetilde{n}_p)\ln(1+\widetilde{n}_p)\Big), \quad (23)$$

где $\widetilde{v}(p) = \int dx v(x) \exp(ipx)$, $\varepsilon_p = \hbar^2 p^2/2ma^2$, $\widetilde{n}_p$ — пуантилистические числа заполнения, связанные с обычными числами заполнения n_p соотношением типа (20). Минимум выражения (23) по $\widetilde{n}_p$ определяется решением системы уравнений

$$\varepsilon_p + \frac{U_0 a^3 n_0}{L^3} \sum_{p'} \big(\widetilde{v}(0) + \widetilde{v}(p-p')\big)\widetilde{n}_{p'} + \Theta \ln\left(\frac{\widetilde{n}_p}{1+\widetilde{n}_p}\right) -$$

$$-\mu - \delta_{p0}\left(\frac{U_0 a^3 \widetilde{n}_0}{L^3}\widetilde{v}(0) + \Theta \ln\left(\frac{\widetilde{n}_0}{1+\widetilde{n}_0}\right)\right) = 0, \quad (24)$$

$$N = \sum_p \widetilde{n}_p.$$

Если при температуре Θ решение системы (24) таково, что $\widetilde{n}_0 \sim N$, то в бозонной системе при этой температуре существует конденсат.

Литература

1. *Маслов В.П.* // ТМФ. 2000. **125**, № 3. С. 453.
2. *Маслов В.П.* // Функц. анализ и его приложения. 1999. **33**, № 4. С. 50.
3. *Маслов В.П.* // Функц. анализ и его приложения. 2000. **34**, № 4. С. 35.
4. *Маслов В.П.* // ТМФ. 1999. **121**, № 3. С. 492.
5. *Березин Ф.А.* Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986.
6. *Маслов В.П.* Операторные методы. М.: Наука, 1973.

Поступила в редакцию
13.10.00

УДК 539.12.01

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА ИНТЕГРИРУЕМЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ N ЧАСТИЦ В ПОТЕНЦИАЛЕ ПЕШЛЯ–ТЕЛЛЕРА

Д. В. Мещеряков, В. Б. Тверской

(*кафедра квантовой теории и физики высоких энергий*)

Рассмотрена задача нахождения волновых функций возбужденных состояний дискретного спектра квантовых систем, обладающих в классическом пределе дополнительными интегралами движения. Для некоторого интервала значений параметров потенциалов взаимодействия получены рекуррентные соотношения, определяющие волновые функции с точностью до нормировочного множителя.

Нахождение явных решений классических и квантовых систем, обладающих свойством полной интегрируемости, по-прежнему вызывает интерес [1–5].

К настоящему времени известно значительное число квантовых систем с N степенями свободы, обладающих дополнительными интегралами движения [3–5]. Однако лишь в ограниченном числе случаев с их помощью удается упростить задачу об определении спектра и собственных функций соответствующих гамильтонианов.

В работе [6] был предложен способ нахождения энергетических уровней и волновых функций дискретного спектра, не использующий явного вида дополнительных сохраняющихся величин. В работе [7] этим способом были исследованы состояния дискретного спектра квантовых систем с гамильтонианами вида

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2}{2} + W(x_i)\right) + \\ +\alpha(\alpha+1)\sum_{i>j}^{N}[V(x_i - x_j) + V(x_i + x_j)], \quad (1)$$

потенциалом парного взаимодействия

$$V(x) = \frac{1}{\operatorname{sh}^2 x}$$

и потенциалом внешнего поля

$$W(x) = \frac{\mu(\mu-1)}{2}\frac{1}{\operatorname{sh}^2 x} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2}\frac{1}{\operatorname{ch}^2 x}, \quad \lambda > 0. \quad (2)$$