

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 517

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ И ПЕРЕХОД В КЛАССИКУ
ИЗ ПРОКВАНТОВАННОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

В.П. Маслов

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

E-mail: maslov@qs.phys.msu.su

Приводится более удобная, чем в предыдущей работе [1], регуляризация энтропии. Рассматривается предельный переход от проквантованной термодинамики к классической. Показывается, что квазиклассические методы, развитые автором для уравнения Шрёдингера, могут быть применены к уравнениям проквантованной термодинамики.

В работах [1–9] введен и исследован оператор свободной энергии, который при температуре, равной нулю, переходит в оператор Шрёдингера. Наиболее удобный способ регуляризации оператора энтропии вводится с помощью привлечения гиббсовского статистического ансамбля. В настоящей работе исследуется предельный переход при $\hbar \rightarrow 0$ ($\hbar$ — константа Планка) в классическую термодинамику. Предварительно делается переход при $k \rightarrow \infty$, где k — число элементов ансамбля.

На привычном для физиков языке эти результаты можно сформулировать следующим образом. Известно, что даже для уравнения Шрёдингера, т. е. оператора Гамильтона, лишь нижнее состояние (наименьшее собственное значение) является основным, т. е. равновесным, стационарным, «энергетически выгодным» состоянием, к которому стремится гиббсовское распределение при температуре, стремящейся к нулю. В этом смысле все остальные состояния можно называть квазистационарными. Это означает, что система не может находиться на них бесконечно долго (если нижние уровни не заняты).

Таким образом, квазистационарное, или метастабильное, или квазиравновесное состояние — это такое состояние, при котором время наблюдения много меньше времени релаксации.

Но наличие температуры, как правило, тесно связано с релаксацией. Поэтому удобнее ставить проблему за конечное или даже малое время, когда затуханием можно пренебречь. Будем говорить, что задача квазистационарна, если распределение вероятности не изменяется за это время. Значит, начальное распределение точно совпадает с конечным за малое время. Например, если $\Psi_n(x)$ — собственная функция оператора Гамильтона, то если ее поставить в качестве начального условия для уравнения Шрёдингера, то в момент времени t распределение равно $|\Psi_n(x)|^2$, а значит, не изменилось.

Чтобы пренебречь затуханием, мы можем использовать также следующий прием.

Пусть у нас имеется однородный случайный процесс с независимыми приращениями. Разбив его по времени на одинаковые отрезки Δt , проведем независимые испытания одновременно. Например, в игре «орел или решка» бросание монеты подряд n раз равносильно одновременному проведению n испытаний n разными людьми. Это означает, что мы рассматриваем гиббсовский ансамбль за единицу времени вместо временного процесса. Если у нас еще имеется затухание (бросающий устает), то пренебрежение этим затуханием более естественно в гиббсовском ансамбле.

Собственные значения оператора свободной энергии отвечают квазистационарным состояниям неравновесной термодинамики и квантовой статистики. Самое нижнее собственное значение оператора свободной энергии отвечает распределению Гиббса и, следовательно, равновесной термодинамике квантовых систем. Но и в этом случае ультравторичное квантование дает новый подход, например, в сверхпроводимости.

А именно, мы используем только тождества и правила Дирака–Боголюбова для бозонных операторов рождения–уничтожения: если число частиц велико, то их коммутатором можно пренебречь (и считать их «с-числами»). На математическом языке это означает переход к символу оператора.

Метод ВКБ применялся всегда к уравнению Шрёдингера и приводил к переходу в классическую механику. Но уравнение Шрёдингера описывает систему при температуре, равной нулю. Иногда закрывают на это глаза. Но асимптотика его решений, проведенная еще Н.Н. Боголюбовым [10] и БКШ, отвечает нулевой температуре и соответствует экспериментальным данным. Тем самым доказывалось, что никакой другой температуре, кроме нулевой, оно не отвечает.

Но в классической механике, например, колебания маятника мы наблюдаем при комнатной температуре. Поэтому предельный переход при $\hbar \rightarrow 0$ от квантового осциллятора к такому маятнику содер-

жит логическую ошибку. Оказывается, однако, что переход от квантового оператора свободной энергии, взятой при комнатной температуре, дает тот же классический маятник, и, следовательно, вообще более логично рассматривать предельный переход именно этих уравнений в классическую механику.

В действительности колебание маятника с некоторой фиксированной амплитудой отвечает микроканоническому распределению, и, следовательно, микроканоническое распределение является квазистационарным, если время наблюдения за ним много меньше времени его затухания.

Мы увидим, что в пределе при $\hbar \rightarrow 0$ появляются и еще более локальные квазистационарные распределения, которые мы назовем наноканоническими.

Метастабильные состояния в фазовых переходах также отвечают собственным значениям оператора свободной энергии, более высоким, чем нижнее.

Рассмотрим еще такой пример: потенциал состоит из двух несимметричных ям и конечной толщины барьер между ними уходит на бесконечность. По одной из них можно написать распределение Гиббса как в квантовом, так и в классическом случае. Ясно, что раз они разделены, то это будет равновесное состояние. Если же барьер очень высокий, а температура достаточно мала, то «распределение Гиббса» по одной впадине будет квазистационарным. Имеются в виду распределения лишь по тем собственным функциям, носитель которых в основном лежит в выбранной впадине. Этот очевидный пример не укладывается, однако, в теорию Гиббса, но тривиально следует (как в квантовом случае, так и в классическом пределе) из спектра оператора свободной энергии.

Кратко опишем результаты предыдущей статьи с точки зрения статистического ансамбля.

Пусть гамильтониан системы есть оператор $\hat{H}$ в пространстве $L_2(\mathbf{T}^N)$, где $x \in \mathbf{T}^N$. Рассмотрим статистический ансамбль как квантовую систему k одинаковых, но различных частиц (т. е. не бозонов и не фермионов, роль «частицы» в данном случае играет термодинамическая система).

Пространство состояний такой системы есть $\underbrace{L_2(\mathbf{T}^N) \otimes \dots \otimes L_2(\mathbf{T}^N)}_{k \text{ раз}} = \mathcal{L}_k$, а гамильтониан, так

как нет взаимодействия между «частицами», есть сумма гамильтонианов:

$$H_k = \sum_{j=1}^k H(x_j, p_j). \quad (1)$$

Мы рассмотрим вторичное квантование этого оператора с номерами. Для этого рассмотрим пространство $\mathcal{G}_k$, элементами которого являются функции $\Phi(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k)$, где $x_j \in \mathbf{T}^N$, $j = 1, \dots, k$, $s_j = 1, \dots, J$ — дискретная переменная, называемая номером или статистическим спином, J — натуральное число или бесконечность, эти функции

симметричны относительно перестановок любых пар переменных x_j, s_j и x_i, s_i , и для них выполнено неравенство

$$\sum_{s_1=0}^J \dots \sum_{s_k=0}^J \int \dots \int dx_1 \dots dx_k \times \\ \times |\Phi(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k)|^2 < \infty.$$

Левая часть этого неравенства задает квадрат нормы вектора пространства $\mathcal{G}_k$. Введем теперь пространство $\mathcal{G} = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{G}_k$. Это пространство в силу симметрии функций, из которых состоят пространства $\mathcal{G}_k$, является бозонным фоковским пространством, в нем стандартным образом [11] вводятся операторы рождения $\hat{b}^+(x, s)$ и уничтожения $\hat{b}^-(x, s)$ пары частица–номер и существует вакуумный вектор Φ_0 , свойства этих операторов:

$$\begin{aligned} [\hat{b}^-(x, s), \hat{b}^+(x', s')] &= \delta_{ss'} \delta(x - x'), \\ [\hat{b}^\pm(x, s), \hat{b}^\pm(x', s')] &= 0, \\ \hat{b}^-(x, s) \Phi_0 &= 0, \quad (\Phi_0, \Phi_0) = 1, \end{aligned}$$

кроме того, любой вектор пространства $\mathcal{G}$ единственным образом представляется в виде

$$\Phi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{k!}} \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 \dots dx_k \times \\ \times \Phi_k(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k) \hat{b}^+(x_1, s_1) \dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \Phi_0,$$

где $\Phi_k \in \mathcal{G}^k$.

В представлении вторичного квантования оператору (1) соответствует следующий оператор в пространстве $\mathcal{G}$:

$$\bar{\hat{H}} = \sum_{s=0}^J \int dx \hat{b}^+(x, s) H(x) \hat{b}^-(x, s). \quad (2)$$

Среди собственных функций этого оператора есть функции с любыми симметричными свойствами, поэтому можно говорить, что он учитывает все парастатистики.

Пусть: $\{\varphi_\alpha(x)\}, \alpha = 1, 2, \dots$ — полная ортонормированная система собственных функций оператора $\hat{H}$ и соответствующие собственные значения $\{\varepsilon_\alpha\}$.

Полная ортонормированная система собственных функций оператора (1) в пространстве $\mathcal{L}_k$ имеет вид

$$\Phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}(x_1, \dots, x_k) = \prod_{j=1}^k \varphi_{\alpha_j}(x_j), \quad \alpha_j = 1, 2, \dots, \quad (3)$$

а соответствующие собственные значения:

$$E_{\alpha_1, \dots, \alpha_k} = \sum_{j=1}^k \varepsilon_{\alpha_j}.$$

Полная ортонормированная система собственных функций оператора (2) на подпространстве $\mathcal{G}_k$ пространства $\mathcal{G}$ имеет вид

$$\Phi_{\{n\}} = \left(\prod_{\alpha=1}^{\infty} \prod_{s=1}^J \left(\int dx \varphi_{\alpha}(x) \hat{b}^+(x, s) \right)^{n_{\alpha s}} \frac{1}{\sqrt{n_{\alpha s}!}} \right) \Phi_0,$$

где $\{n\}$ — обозначение для набора целых чисел

$$n_{\alpha s} \geq 0, \text{ таких, что } \sum_{\alpha=1}^{\infty} \sum_{s=1}^J n_{\alpha s} = k.$$

Соответствующие собственные значения оператора (2):

$$E_{\{n\}} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \varepsilon_{\alpha} \sum_{s=1}^J n_{\alpha s}.$$

До сих пор рассматривался статистический ансамбль без учета температуры. Возможно, однако, что в результате действия некоторых сил ансамбль стохастизировался, после чего каждое состояние ансамбля получило вероятность, с которой ансамбль может быть найден именно в этом состоянии. Естественно предположить, что в результате действия сил, которые приводят к стохастизации ансамбля, все состояния систем ансамбля являются равновероятными. Это предположение однозначно приводит к выражению для вероятности обнаружить ансамбль в каком-либо состоянии и соответственно позволяет определить операторы статистического веса и энтропии.

В качестве вспомогательного примера для перехода к общему случаю рассмотрим квантование энтропии и вероятности для систем, состоящих из k не взаимодействующих подсистем, каждая из которых имеет M уровней. Пространство состояний квантовой системы в этом случае есть $\mathbf{C}^{kM}$, состояния системы описываются функциями $\Phi(j_1, \dots, j_k)$, где j_s принимает значения $1, \dots, M$. Гамильтониан системы задается формулой (1), в которой надо учесть, что дискретные переменные j_s изменяются от 1 до M , и $\lambda_1, \dots, \lambda_M$ — действительные числа, набор собственных функций этого гамильтониана задается следующей ниже формулой (7), в которой числа $n_1, n_2, \dots, n_k$ принимают значения $1, \dots, M$. Аналогом такой квантовой системы в теории вероятностей является серия из k независимых опытов, в каждом из которых возможны M исходов. Число разных исходов этой серии опытов равно M^k . Рассмотрим следующее событие: в серии из k независимых опытов первый исход встречается k_1 раз, второй — k_2 раз, ..., M -й — $k_M = k - \sum_{s=1}^{M-1} k_s$ раз, причем безразлично, в каком порядке следуют эти исходы. Число различных исходов серии испытаний, в которых реализуется рассматриваемое событие, равно

$$\Gamma(k_1, \dots, k_M) = \frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^M k_{\alpha}!}. \quad (4)$$

Используя (4), введем, аналогично тому, как это было сделано выше, следующий оператор статисти-

ческого веса $\hat{\Gamma}$ в пространстве состояний рассматриваемой квантовой системы:

$$(\hat{\Gamma}\Phi)(j_1, \dots, j_k) = \frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^M k_{\alpha}!} \Phi(j_1, \dots, j_k), \quad (5)$$

где $k_1, \dots, k_M$ зависят от переменных $j_1, \dots, j_k$:

$$k_{\alpha} = \sum_{s=1}^k \delta_{\alpha j_s}, \quad \alpha = 1, \dots, M,$$

эта зависимость в (5) опущена.

Очевидно, что в формулах для операторов энтропии и статистического веса число M формально может быть заменено на ∞ , и, таким образом, эти операторы определяются в пространстве l_2^k для ансамбля k не взаимодействующих подсистем, каждая из которых имеет бесконечное счетное число уровней. Кроме того, операторы могут быть введены в рассмотренном выше случае. Рассмотрим случай, когда пространство состояний квантовой системы k не взаимодействующих подсистем есть пространство $\mathcal{L}_k$, а пространство состояний подсистемы — соответственно $L_2(\mathbf{T}^N)$.

Выше каждой функции (3) сопоставлен набор чисел k_{β} по формуле (5). Сопоставим теперь каждой функции (3) число

$$\frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^{\infty} k_{\alpha}!}. \quad (6)$$

Выражение (6), очевидно, совпадает с числом функций (3), у которых наборы чисел (5) совпадают. Оператором статистического веса для рассматриваемой системы будем называть оператор $\hat{\Gamma}_k$ в пространстве $\mathcal{L}_k$, ядро которого имеет вид

$$\Gamma_k(x_1, \dots, x_k; y_1, \dots, y_k) = \sum_{\alpha_1=1}^{\infty} \dots \sum_{\alpha_k=1}^{\infty} \frac{k!}{\prod_{\alpha=1}^{\infty} k_{\alpha}!} \times \\ \times \Phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}(x_1, \dots, x_k) \Phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}^*(y_1, \dots, y_k). \quad (7)$$

Оператором энтропии будем называть оператор $\hat{S}$ в пространстве $\mathcal{L}_k$, который выражается через оператор статистического веса по формуле

$$\hat{S}_k = \ln(\hat{\Gamma}_k). \quad (8)$$

Вторично квантованными аналогами операторов (7) и (8) являются следующие операторы в пространстве $\mathcal{G}$:

$$\bar{\bar{\Gamma}} = \frac{\Gamma(\bar{\bar{k}} + 1)}{\prod_{\alpha=1}^{\infty} \Gamma(\bar{\bar{k}}_{\alpha} + 1)}, \quad (9)$$

$$\bar{\bar{S}} = \ln(\bar{\bar{\Gamma}}), \quad (10)$$

где $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция, а $\widehat{k}, \widehat{k}_\alpha$ — следующие операторы в пространстве $\mathcal{G}$:

$$\widehat{k}_\alpha = \sum_{s=0}^J \iint dx dy \widehat{b}^+(x, s) \widehat{b}^-(y, s) \varphi_\alpha(x) \varphi_\alpha^*(y),$$

$$\widehat{k} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \widehat{k}_\alpha.$$

Операторы (9) и (10) отличны от нуля на всем пространстве $\mathcal{G}$. Это связано с тем, что здесь рассматривается квантование по всем парастатистикам, а не только симметричный или антисимметричный случай.

Далее, аналогично предыдущей работе [1], рассмотрим оператор

$$\widehat{F}_\theta = \widehat{H} - \theta \widehat{S}, \quad (11)$$

который будем называть вторично квантованным оператором свободной энергии статистического ансамбля при температуре θ . Будем называть собственными значениями свободной энергии термодинамической системы N частиц на торе $\mathbf{T}$ при температуре θ такие числа λ , для которых существует последовательность векторов $\Phi_k \in \mathcal{G}$, $\Phi_k \neq 0$, таких, что

$$\widehat{F}_\theta \Phi_k = \omega_k \Phi_k, \quad \widehat{k} \Phi_k = k \Phi_k, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\omega_k}{k} = \lambda. \quad (12)$$

Из явного вида операторов $\widehat{H}$ (2) и $\widehat{S}$ (10) следует, что для нахождения асимптотики собственных значений оператора $\widehat{F}_\theta$ (11) в пределе при $k \rightarrow \infty$ (k — собственное значение оператора $\widehat{k}$) применимы методы, развитые в [12–14], поскольку при операторах $\widehat{b}^\pm(x, s)$ стоит малый параметр $1/\sqrt{k}$. Оператору $\widehat{F}_\theta$ в пределе при $k \rightarrow \infty$ соответствует следующий символ (см. определение символа в [14]):

$$F_\theta[b^*(\cdot), b(\cdot)] = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \varepsilon_\alpha k_\alpha - \theta \sum_{\alpha=1}^{\infty} k_\alpha \ln \left(\frac{k_\alpha}{k} \right), \quad (13)$$

где k_α, k — функционалы вида

$$k_\alpha = \sum_{s=0}^J \iint dx dy b^*(x, s) b(y, s) \varphi_\alpha(x) \varphi_\alpha^*(y),$$

$$k = \sum_{\alpha=1}^{\infty} k_\alpha;$$

кроме того, при получении (13) использовано, что $\{\varphi_\alpha\}$, $\alpha = 1, 2, \dots$, — полный ортонормированный набор собственных функций оператора $H(x, \partial/\partial x)$ в пространстве $L_2(\mathbf{T}^N)$, а $\{\varepsilon_\alpha\}$ — набор соответствующих собственных значений. Согласно [12–14], собственные значения свободной энергии (12) являются решениями следующего уравнения:

$$\frac{\delta F_\theta}{\delta b^*(x, s)} = \lambda b(x, s). \quad (14)$$

Для функционала F_θ (13) уравнение (14) может быть записано в виде системы

$$\left(\varepsilon_\alpha - \theta \ln \left(\frac{k_\alpha}{k} \right) - \lambda \right) \int dy b(y, s) \varphi_\alpha^*(y) = 0,$$

$$\alpha = 1, 2, \dots, \quad s = 0, 1, \dots, J.$$

Эта система уравнений эквивалентна следующей:

$$\widehat{H}(x) \Psi_\alpha(x) + \theta \ln \left(\frac{\|\Psi_\alpha\|^2}{\sum_{\beta=1}^{\infty} \|\Psi_\beta\|^2} \right) \Psi_\alpha(x) = \lambda \Psi_\alpha(x), \quad (15)$$

$$\Psi_\alpha \in L_2(\mathbf{T}^N), \quad (\Psi_\alpha, \Psi_\beta) = 0 \quad \text{при} \quad \alpha \neq \beta.$$

Исследуем решения уравнения (15). Это уравнение является так называемым уравнением с унитарной нелинейностью. Поскольку система N частиц находится на трехмерном торе $\mathbf{T}$, то $x = (x_1, \dots, x_N)$, $x_j = (x_{j1}, x_{j2}, x_{j3})$, $0 \leq x_{jn} \leq L$. Будем далее для определенности считать, что гамильтониан этой системы имеет вид

$$\widehat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j + \sum_{j=1}^N \sum_{i=j+1}^N V(x_j - x_i), \quad (16)$$

где $\Delta_j = \sum_{n=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_{jn}^2}$ — оператор Лапласа на торе $\mathbf{T}$, $V(x)$ — гладкая функция на торе. Теперь уравнение (15) может быть записано в виде

$$\lambda \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \widehat{H}_N \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) + \theta \ln \left(\frac{\|\Psi_\alpha\|^2}{\sum_{\beta=1}^{\infty} \|\Psi_\beta\|^2} \right) \Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N), \quad (17)$$

$$(\Psi_\alpha, \Psi_\beta) = 0 \quad \text{при} \quad \alpha \neq \beta.$$

Все решения системы (17) могут быть предельно выявлены. Например, уравнения (17) имеют решения вида $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \delta_{\alpha n} \varphi_n(x_1, \dots, x_N)$, $\lambda = \varepsilon_n$, где $\varphi_n(x_1, \dots, x_N)$ и ε_n , $n = 1, 2, \dots$, — полный ортонормированный набор собственных функций оператора (16) и соответствующий набор собственных значений (мы учитываем, что $a \ln a = 0$ при $a = 0$). Легко также убедиться, что существуют решения вида

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) =$$

$$= a_1 \delta_{\alpha n_1} \varphi_{n_1}(x_1, \dots, x_N) + a_2 \delta_{\alpha n_2} \varphi_{n_2}(x_1, \dots, x_N),$$

$$\lambda = -\theta \ln \left(e^{-\varepsilon_{n_1}/\theta} + e^{-\varepsilon_{n_2}/\theta} \right), \quad (18)$$

где

$$a_{1,2} = \sqrt{e^{-\varepsilon_{n_1, n_2}/\theta} / (e^{-\varepsilon_{n_1}/\theta} + e^{-\varepsilon_{n_2}/\theta})}.$$

Формулы (18) очевидным образом обобщаются на случай вообще любого $l \geq 1$: функции

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^l a_j \delta_{\alpha n_j} \varphi_{n_j}(x_1, \dots, x_N), \quad (19)$$

где n_j — произвольный набор чисел $n_1 \neq n_2 \neq \dots \neq n_l$, являются решениями системы (17) с собственным значением

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{j=1}^l e^{-\varepsilon_{n_j}/\theta} \right) \quad (20)$$

при условии, что

$$a_j = \sqrt{e^{-\varepsilon_{n_j}/\theta} / \sum_{r=1}^l e^{-\varepsilon_{n_r}/\theta}}.$$

Формулы (19) и (20) распространяются и на случай бесконечного числа l . Вообще справедливо следующее утверждение: набор функций $\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N)$ является решением системы уравнений (17) тогда и только тогда, когда этот набор имеет вид

$$\Psi_\alpha(x_1, \dots, x_N) = a_\alpha \varphi_{n_\alpha}(x_1, \dots, x_N) b_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots,$$

где n_α — взаимно однозначное отображение множества натуральных чисел на себя, b_α — коэффициенты, принимающие значения 0 и 1, a_α имеют вид

$$a_\alpha = \sqrt{e^{-\varepsilon_{n_\alpha}/\theta} / \sum_{\beta=1}^{\infty} b_\beta e^{-\varepsilon_{n_\beta}/\theta}},$$

соответствующее собственное значение есть

$$\lambda = -\theta \ln \left(\sum_{\alpha=1}^{\infty} b_\alpha e^{-\varepsilon_{n_\alpha}/\theta} \right). \quad (21)$$

Рассмотрим подробно множество собственных значений свободной энергии (21). Так как $b_\alpha = 0$ или 1, $\theta > 0$, то выражение (21) тем меньше, чем больше слагаемых в сумме отлично от нуля. Очевидно, что минимальное из всех значений (21) есть $\lambda = -\theta \ln(\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/\theta})$ и оно совпадает со свободной энергией системы N частиц на торе $\mathbf{T}$ с гамильтонианом $\hat{H}_N$ при температуре θ [15]. Будем считать, что $\varepsilon_n \leq \varepsilon_{n+1}$. В этом случае ближайшее к самому нижнему значению λ будет $-\theta \ln \left(\sum_{n=2}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/\theta} \right)$ и так далее.

Напомним формулы ультравторичного квантования, подробно описанные в предыдущей статье.

Пространством ультравторичного квантования является $\mathcal{F}$ — бозонное пространство Фока [11], $\hat{b}^+(x, s)$ — оператор рождения частиц с номером s , $\hat{b}^-(x, s)$ — оператор уничтожения частиц с номером s в пространстве $\mathcal{F}$ [11], $\hat{B}^+(x, x')$ — оператор рождения пары частиц, $\hat{B}^-(x, x')$ — оператор уничтожения пары частиц в этом пространстве. Эти операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям:

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

$$[\hat{B}^\pm(x_1, x_2), \hat{B}^\pm(x'_1, x'_2)] = 0,$$

$$[\hat{b}^\pm(x, s), \hat{B}^\pm(x'_1, x'_2)] = [\hat{b}^\pm(x, s), \hat{b}^\mp(x'_1, x'_2)] = 0.$$

Далее, Φ_0 — вакуумный вектор в пространстве $\mathcal{F}$, обладающий следующими свойствами:

$$\hat{b}^-(x, s) \Phi_0 = 0, \quad \hat{B}^-(x_1, x_2) \Phi_0 = 0.$$

Переменная x лежит на трехмерном торе $L \times L \times L$, который обозначается $\mathbf{T}$. Переменная статистического спина s — дискретная, $s = 0, 1, \dots$. Любой вектор Φ пространства $\mathcal{F}$ единственным образом представляется в виде

$$\begin{aligned} \Phi &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k!M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \\ &\dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \times \\ &\times \Phi_{k,M}(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M}) \cdot \\ &\cdot \hat{b}^+(x_1, s_1) \cdot \dots \cdot \hat{b}^+(x_k, s_k) \times \\ &\times \hat{B}^+(y_1, y_2) \cdot \dots \cdot \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \Phi_0, \end{aligned}$$

где функция $\Phi_{k,M}(x_1, s_1; \dots; x_k, s_k; y_1, y_2; \dots; y_{2M-1}, y_{2M})$ симметрична относительно перестановок пар переменных (x_j, s_j) и (x_i, s_i) и симметрична относительно перестановок пар переменных (y_{2j-1}, y_{2j}) и (y_{2i-1}, y_{2i}) . В бозонном случае вводится подпространство $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Symm}}$, состоящее из векторов Φ , у которых $\Phi_{k',M'} = 0$ при $(k', M') \neq (k, M)$, а $\Phi_{k,M}$ является симметричной функцией переменных $x_1, x_2, \dots, x_k, y_1, y_2, \dots, y_{2M}$. В фермионном случае аналогично вводится подпространство $\mathcal{F}_{k,M}^{\text{Asymm}}$, состоящее из векторов Φ таких, что $\Phi_{k',M'} = 0$ при $(k', M') \neq (k, M)$ и $\Phi_{k,M}$ — антисимметричная функция переменных $x_1, x_2, \dots, x_k, y_1, y_2, \dots, y_{2M}$.

В предыдущей статье рассматривалась система N тождественных частиц на торе $\mathbf{T}$, гамильтониан которой имеет вид

$$\hat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j + \sum_{j=1}^N \sum_{l=j+1}^N V(x_j - x_l). \quad (22)$$

Этому оператору в бозонном случае отвечает ультравторично квантованный гамильтониан следующего вида:

$$\begin{aligned} \bar{H}_B &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k!M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \\ &\dots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \hat{b}^+(x_1, s_1) \cdot \dots \\ &\dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \hat{B}^+(y_1, y_2) \cdot \dots \cdot \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \hat{H}_{k+2M} \cdot \\ &\cdot \text{Symm}_{x_1 \dots x_k y_1 \dots y_{2M}} \left(\hat{b}^-(x_1, s_1) \cdot \dots \cdot \hat{b}^-(x_k, s_k) \times \right. \\ &\quad \left. \times \hat{B}^-(y_1, y_2) \cdot \dots \cdot \hat{B}^-(y_{2M-1}, y_{2M}) \right) \times \end{aligned} \quad (23)$$

$$\times \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \hat{B}^+(y, y') \hat{B}^-(y, y') \right),$$

а в фермионном случае соответствующий оператор $\widehat{H}_F$ выражается аналогичной формулой, в которой Symm заменяется на Asymm . По аналогии с (22) и (23) ультравторично квантованный оператор $\widehat{A}$ сопоставляется любому N -частичному оператору

$$\widehat{A}_N \left(x_1^2, \dots, x_N^2; -i \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, -i \frac{\partial}{\partial x_N} \right).$$

Например, единичному оператору сопоставляется в бозонном случае ультравторично квантованный единичный оператор вида

$$\begin{aligned} \widehat{E}_B = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k!M!} \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \\ & \dots \int dx_1 \dots dx_k dy_1 \dots dy_{2M} \hat{b}^+(x_1, s_1) \cdot \dots \\ & \dots \cdot \hat{b}^+(x_k, s_k) \hat{B}^+(y_1, y_2) \cdot \dots \cdot \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \times \\ & \times \text{Symm}_{x_1 \dots x_k y_1 \dots y_{2M}} \left(\hat{b}^-(x_1, s_1) \cdot \dots \cdot \hat{b}^-(x_k, s_k) \times \right. \\ & \times \hat{B}^-(y_1, y_2) \cdot \dots \cdot \hat{B}^-(y_{2M-1}, y_{2M}) \left. \right) \cdot \\ & \cdot \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(x, s) - \iint dy dy' \hat{B}^+(y, y') \hat{B}^-(y, y') \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Аналогично ультравторично квантованный единичный оператор в фермионном случае получается, если в формуле (24) Symm заменяется на Asymm . Стационарное уравнение Шрёдингера эквивалентно следующей задаче на собственные значения:

$$\widehat{H}_{B,F} \Phi = \lambda \widehat{E}_B \Phi, \quad \widehat{E}_B \Phi \neq 0.$$

В бозонном случае, как показано в предыдущей статье [1], имеет место следующее тождество:

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

где $\widehat{H}$, $\widehat{\rho}_B$ — вторично квантованные операторы, причем $\widehat{\rho}_B$ зависит от функций $b(x, s)$, $B(y, y')$:

$$\begin{aligned} \widehat{H} = & \int dx \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}^-(x) + \\ & + \frac{1}{2} \iint dx dy V(x, y) \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^-(y) \hat{\psi}^-(x), \end{aligned}$$

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

где $\hat{\psi}^+(x)$, $\hat{\psi}^-(x)$ — бозевские операторы рождения и уничтожения, упорядоченные по Вику [11]. В ферми-случае имеет место аналогичное тождество

$$\mathcal{H}_F[b^*(\cdot), b(\cdot), B^*(\cdot), B(\cdot)] = \frac{\text{Sp}(\widehat{\rho}_F \widehat{H})}{\text{Sp}(\widehat{\rho}_F)},$$

где $\widehat{H}$, $\widehat{\rho}_F$ — следующие вторично квантованные операторы:

$$\begin{aligned} \widehat{H} = & \int dx \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}^-(x) + \\ & + \frac{1}{2} \iint dx dy V(x, y) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}^-(y) \hat{\psi}^-(x), \\ \widehat{\rho}_F = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k!M!(k+2M)!} \times \\ & \times \left(\iint dy_1 dy_2 B(y_1, y_2) \hat{\psi}^+(y_1) \hat{\psi}^+(y_2) \right)^M \times \\ & \times \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 dx'_1 \dots dx_k dx'_k \times \\ & \times b(x_1, s_1) b^*(x'_1, s_1) \cdot \dots \cdot b(x_k, s_k) b^*(x'_k, s_k) \times \\ & \times \hat{\psi}^+(x_1) \cdot \dots \cdot \hat{\psi}^+(x_k) \hat{P}_0 \hat{\psi}^-(x'_k) \cdot \dots \cdot \hat{\psi}^-(x'_1) \times \\ & \times \left(\iint dy'_1 dy'_2 B(y'_1, y'_2) \hat{\psi}^-(y'_2) \hat{\psi}^-(y'_1) \right)^M, \end{aligned}$$

и в данном случае $\hat{\psi}^+(x)$, $\hat{\psi}^-(x)$ — фермиевские операторы рождения и уничтожения, $\hat{P}_0$ — проектор на вакуумный вектор фермионного фоковского пространства.

Функционал энтропии на пространстве $\mathcal{F}$ имеет вид

$$S_{B,F} = -\text{Sp}(\widehat{R}_{B,F}(\Phi) \ln \widehat{R}_{B,F}(\Phi)),$$

где $\widehat{R}_{B,F}(\Phi)$ — бозонный или фермионный вторично квантованный оператор,

$$\begin{aligned} \widehat{R}_{B,F}(\Phi) = & \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{k!M!(k+2M)!} \times \right. \\ & \times \sum_{s_1=0}^{\infty} \dots \sum_{s_k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1 dx'_1 \dots dx_k dx'_k \times \\ & \times dy_1 dy'_1 \dots dy_{2M} dy'_{2M} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \hat{\psi}^+(y_1) \dots \hat{\psi}^+(y_{2M}) \hat{\psi}^+(x_1) \dots \hat{\psi}^+(x_k) \cdot \\
& \cdot \hat{\mathcal{P}}_0 \hat{\psi}^-(x'_k) \dots \hat{\psi}^-(x'_1) \hat{\psi}^-(y'_{2M}) \dots \hat{\psi}^-(y'_1) \cdot \\
& \cdot \left(\Phi, \hat{b}^+(x_1, s_1) \dots \hat{b}^+(x_k, s_k) \hat{B}^+(y_1, y_2) \dots \right. \\
& \cdot \hat{B}^+(y_{2M-1}, y_{2M}) \exp \left(- \sum_{s=0}^{\infty} \int dx \hat{b}^+(x, s) \hat{b}^-(x, s) - \right. \\
& \quad \left. - \iint dy dy' \hat{B}^+(y, y') \hat{B}^-(y, y') \right) \cdot \\
& \cdot \hat{B}^-(y'_{2M-1}, y'_{2M}) \dots \hat{B}^-(y'_1, y'_2) \hat{b}^-(x'_k, s_k) \dots \\
& \quad \left. \dots \hat{b}^-(x'_1, s_1) \Phi \right) \Big\} \left(\Phi, \hat{E}_{B,F} \Phi \right)^{-1}.
\end{aligned}$$

Здесь, в зависимости от рассматриваемого случая, $\hat{\psi}^{\pm}(x)$ — бозонные или фермионные фоковские операторы, $\hat{\mathcal{P}}_0$ — оператор ортогонального проектирования на вакуумный вектор фоковского пространства.

Согласно правилу Дирака–Боголюбова для $N \gg 0$ положим в функционалах $\mathcal{E}_{B,F}$, $N_{B,F}$ и $S_{B,F}$ операторы $\hat{b}^+(x, s)$ и $\hat{b}^-(x, s)$ «с-числами» $b^*(x, s)$ и $b(x, s)$ соответственно, а операторы $\hat{B}^+(x, y)$ и $\hat{B}^-(x, y)$ — $B^*(x, y)$ и $B(x, y)$. Получим из $\mathcal{E}_{B,F}$ и $N_{B,F}$ символы $\mathcal{H}_B$ и N_B или $\mathcal{H}_F$ и N_F в соответствующем бозонном или фермионном случае. Из $S_{B,F}$ получим символы энтропии:

$$S_{B,F} = -\text{Sp} \left(\frac{\hat{\rho}_{B,F}}{\text{Sp} \hat{\rho}_{B,F}} \ln \left(\frac{\hat{\rho}_{B,F}}{\text{Sp} \hat{\rho}_{B,F}} \right) \right).$$

Минимум символа $\mathcal{H}_F$ при дополнительных условиях $S_F = S$, $N_F = N$ достигается при таких $B(x, y)$, $b(x, s)$, что

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \mathcal{H}_F}{\delta b^*(x, s)} - \mu \frac{\delta N_F}{\delta b^*(x, s)} - \theta \frac{\delta S_F}{\delta b^*(x, s)} &= 0, \\
\frac{\delta \mathcal{H}_F}{\delta B^*(x, y)} - \mu \frac{\delta N_F}{\delta B^*(x, y)} - \theta \frac{\delta S_F}{\delta B^*(x, y)} &= 0. \quad (25)
\end{aligned}$$

Эти уравнения заменой переменных приводятся к хорошо известным уравнениям БКШ [16] теории сверхпроводимости. Уравнения БКШ имеют вид

$$\begin{pmatrix} \hat{G} - \frac{1}{2} & \hat{R}^+ \\ \hat{R} & -\hat{G}^* + \frac{1}{2} \end{pmatrix} = f_{\theta} \begin{pmatrix} \hat{T} & \hat{V}^+ \\ \hat{V} & -\hat{T}^* \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где $\hat{G}$, $\hat{R}$, $\hat{T}$, $\hat{V}$ — операторы в пространстве $L_2(\mathbf{T})$, причем $\hat{T}$ и $\hat{V}$ выражаются через $\hat{G}$ и $\hat{R}$:

$$(\hat{G}u)(x) = \int dy G(x, y)u(y),$$

$$(\hat{R}u)(x) = \int dy R(x, y)u(y),$$

$$(\hat{T}u)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(x) - \mu u(x) +$$

$$+ \int dy V(x - y) (G(y, y)u(x) + G(y, x)u(y)),$$

$$(\hat{V}u)(x) = \int dy V(x - y)R(y, x)u(y),$$

знак * в (26) обозначает комплексное сопряжение оператора, а знак + — эрмитово, кроме того, функция $f_{\theta}(t)$, $t \in \mathbf{R}$, имеет вид

$$f_{\theta}(t) = \frac{1}{2} \text{th} \left(\frac{t}{2\theta} \right),$$

а μ выражается из условия

$$N = \sum_{s=1}^2 \int dx G(x, s, x, s).$$

Уравнения (26) получаются из уравнений (25) следующей заменой переменных:

$$\begin{aligned}
\hat{G} &= (1 + \hat{A}^{\text{tr}})^{-1} \left(\hat{A}^{\text{tr}} - \hat{B}^*(1 + \hat{A})^{-1} \hat{B} (1 + \hat{A}^{\text{tr}})^{-1} \times \right. \\
&\quad \left. \times (1 - \hat{B}^*(1 + \hat{A})^{-1} \hat{B} (1 + \hat{A}^{\text{tr}})^{-1})^{-1} \right), \\
\hat{R} &= -(1 + \hat{A})^{-1} \hat{B} (1 + \hat{A}^{\text{tr}})^{-1} \times \\
&\quad \times (1 - \hat{B}^*(1 + \hat{A})^{-1} \hat{B} (1 + \hat{A}^{\text{tr}})^{-1})^{-1},
\end{aligned}$$

где $\hat{A}$, $\hat{B}$ — операторы в $L_2(\mathbf{T})$, ядра которых выражаются через функции $b(x, s)$ и $B(x, y)$ следующим образом:

$$(\hat{A}u)(x) = \int dy \sum_{s=1}^{\infty} b(x, s) b^*(y, s) u(y),$$

$$(\hat{B}u)(x, s) = \int dy B(x, y) u(y),$$

а символ tr обозначает транспонирование.

Переход в классический случай достаточно очевидно следует из формул (18)–(21), так как он выражается через квазиклассическую асимптотику решений уравнений Шрёдингера. Если потенциал представляет собой яму с двумя глубокими впадинами, разделенными высоким барьером, то, как видно из (20), собственной функцией уравнения (17) будет функция с собственным значением (20), где ε_{n_j} отвечает собственным функциям с носителем, лежащим (в основном) внутри одной из впадин Ω . И если наивысшее среди них собственное значение ε_k таково, что величина $\exp \frac{-\varepsilon_k}{\theta}$ является пренебрежимо малой, то частичный шпур, стоящий под знаком логарифма (20), будет сходиться при $\hbar \rightarrow 0$ к интегралу по p и x , лежащему внутри впадины от

$$\iint_{p, x \in \Omega} \exp \left\{ -\frac{p^2}{2m\theta} - \frac{u(x)}{\theta} \right\} dp dx.$$

Эта формула описывает «квазистационарное состояние» в классической термодинамике, т.е. это рас-

пределение «будет жить» (если $-\varepsilon_k/\theta$ велико) достаточно долго.

Пример с маятником также прост. При $\hbar \rightarrow 0$ большой пакет собственных значений сходится к энергии E . Соответственно сумма (20), отвечающая этому пакету, будет стремиться к E , а функция Вагнера собственных функций будет сходиться к микроканоническому распределению. Рассмотрим теперь многомерный случай.

Предположим, что Λ — инвариантное лагранжево многообразие с инвариантной мерой, отвечающее классическому гамильтониану $H(p, x)$ на уровне энергии E . Асимптотика собственных функций соответствующего уравнения Шрёдингера дается каноническим оператором на этом лагранжевом многообразии. Тогда распределение всего набора их вагнеровских функций будет стремиться при $\hbar \rightarrow 0$ в обобщенном смысле к δ_Λ -функции на этом лагранжевом многообразии [17]. Такое распределение мы называем неканоническим. Оно также является квазистационарным.

Литература

1. Маслов В.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 6. С. 3 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 6. P. 1).
2. Маслов В.П. // Функцион. анализ и приложения. 2000. 34, № 4. С. 35.

3. Маслов В.П. // ТМФ. 2000. 125, № 2. С. 297.
4. Маслов В.П. // ТМФ. 2000. 129, № 3. С. 464.
5. Маслов В.П. // Матем. заметки. 2000. 68, № 6. С. 945.
6. Maslov V.P. // Russ. J. Mathem. Phys. 2000. 7, No. 4. P. 488.
7. Maslov V.P. // Russ. J. Mathem. Phys. 2002. 9, No. 1. P. 112.
8. Маслов В.П. // ТМФ. 2002. 131, № 2.
9. Маслов В.П. // Матем. заметки. 2002. 71, № 4. С. 558.
10. Боголюбов Н.Н. Избранные труды: В 3 т. Т. 2, 3. Киев: Наукова думка, 1970, 1971.
11. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1987.
12. Маслов В.П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М.: Наука, 1977.
13. Маслов В.П. Теория возмущений и асимптотические методы. М.: Наука, 1978.
14. Маслов В.П., Шведов О.Ю. Метод комплексного роста в многочастичных задачах и задачах квантовой теории поля. М.: УРСС, 2000.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
16. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. М.: Наука, 1979.
17. Maslov V.P. // Russ. J. Mathem. Phys. 1995. 2, No. 4. P. 527.

Поступила в редакцию
13.03.02

УДК 514.752.4; 517.95

ДВУХСОЛИТОННЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ sin-ГОРДОНА И СВЯЗАННЫЕ С НИМИ ПСЕВДОСФЕРИЧЕСКИЕ ПОВЕРХНОСТИ

Е.В. Маевский

(кафедра математики)

Проведена классификация поверхностей постоянной отрицательной кривизны $K = -1$, соответствующих двухсолитонным решениям уравнения sin-Гордона, по геометрическим характеристикам их особенностей.

Уравнение sin-Гордона

$$z_{uv} = \sin z,$$

встречающееся в ряде задач математической физики [1–3], имеет наглядную геометрическую интерпретацию [4]. Это уравнение представляет собой уравнение Гаусса для чебышевской метрики

$$ds^2 = du^2 + 2 \cos z(u, v) du dv + dv^2$$

гауссовой кривизны $K \equiv -1$. В пространстве E^3 по заданному решению $z(u, v)$ можно построить псевдосферическую поверхность (ПП) — поверхность постоянной гауссовой кривизны $K \equiv -1$. На каждой ПП можно ввести асимптотическую сеть, одновременно являющуюся чебышевской. Если та-

ковой является сеть координатных линий (u, v) , то соответствие (решение z) $\mapsto$ (псевдосферическая поверхность $\Phi[z]$) взаимно однозначно. Известно, что в E^3 не существует геодезически полной псевдосферической поверхности, любая $\Phi[z]$ имеет особенности — ребра возврата и острия, — они соответствуют линиям уровня функции $z(u, v) = \pi n$. По заданному в E^3 ребру $\Phi[z]$ можно однозначно построить фрагмент содержащий его поверхности, поэтому становится возможным классифицировать ПП по их особенностям.

Особую роль в физике играют решения уравнения sin-Гордона в виде уединенных волн (односолитонные)

$$z = 4 \operatorname{arctg} e^{pu+v/p}$$