

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 сверхтекущее состояние.

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

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

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

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

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

Определение 1. Пространство $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}^B$ 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 $\widehat{P}_{N_1, \dots, N_k}^B$:

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

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

$$\begin{aligned} \Psi = \{\Psi_{N_1, \dots, N_k}\}, \quad \Psi_{N_1, \dots, N_k} \in \mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}, \\ N_1, \dots, N_k = 0, 1, \dots, \\ \|\Psi\|^2 = \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_k=0}^{\infty} \|\Psi_{N_1, \dots, N_k}\|^2 < \infty. \end{aligned}$$

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 $\widehat{P}_{N_1, \dots, N_k}$:

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

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

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

$$\widehat{i}_{N_1, \dots, N_k} \varphi = \{\delta_{N_1 M_1} \dots \delta_{N_k M_k} \varphi\},$$

где δ_{NM} — символ Кронекера.

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

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

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]

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

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

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

Введем операторнозначный функционал

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = & \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_k=0}^{\infty} \frac{1}{N_1! \dots N_k!} \times \\ & \times \prod_{l=1}^k \left(\sum_{j^l=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1^l dy_1^l \dots dx_l^l dy_l^l \times \right. \\ & \times b_l(x_1^l, \dots, x_l^l, j^l) \hat{\psi}^+(x_1^l) \dots \\ & \dots \hat{\psi}^+(x_l^l) b_l^*(y_1^l, \dots, y_l^l, j^l) \hat{\psi}^-(y_1^l) \dots \hat{\psi}^-(y_l^l) \left. \right)^{N_l} \times \\ & \times \exp \left(- \int dz \hat{\psi}^+(z) \hat{\psi}^-(z) \right), \end{aligned} \quad (4)$$

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

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

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 $\hat{\rho}$ будем опускать. Введем далее функционал

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[b_1^*(x_1^1, j^1), b_1(x_1^1, j^1), \dots \\ \dots, b_k^*(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), b_k(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)] = \\ = \text{Sp} \left(\hat{\rho} \hat{H} \right) \times \exp \left(- \sum_{l=1}^k \sum_{j=0}^{\infty} \int \dots \int dy_1 \dots dy_l \times \right. \\ \left. \times b_l^*(y_1, \dots, y_l, j) b_l(y_1, \dots, y_l, j) \right). \end{aligned} \quad (5)$$

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

$$\begin{aligned} \overline{\hat{\mathcal{H}}} = & \mathcal{H}[\hat{b}_1^2(x_1^1, j^1), \hat{b}_1^1(x_1^1, j^1), \dots \\ & \dots, \hat{b}_k^2(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), \hat{b}_k^1(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)]. \end{aligned} \quad (6)$$

Имеет место следующая теорема.

Теорема 1. Проекция осредненного гамильтониана (6) на подпространство $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}^B$ 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 \hat{A} в пространстве \mathcal{H}_B сопоставляется оператор $\overline{\hat{A}}$ в пространстве \mathcal{F} , причем символ оператора [6] $\overline{\hat{A}}$, так же как и символ гамильтониана (3), выражается формулой

$$\begin{aligned} A[b_1^*(x_1^1, j^1), b_1(x_1^1, j^1), \dots \\ \dots, b_k^*(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), b_k(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)] = \\ = \text{Sp} \left(\hat{\rho} \hat{A} \right) \exp \left(- \sum_{l=1}^k \sum_{j=0}^{\infty} \int \dots \int dy_1 \dots dy_l \times \right. \\ \left. \times b_l^*(y_1, \dots, y_l, j) b_l(y_1, \dots, y_l, j) \right), \end{aligned} \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned} S[b_1^*(x_1^1, j^1), b_1(x_1^1, j^1), \dots \\ \dots, b_k^*(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), b_k(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)] = \\ = \text{Sp} \left(\hat{\rho} \ln \left(\frac{\hat{\rho}}{\text{Sp} \hat{\rho}} \right) \right) \exp \left(- \sum_{l=1}^k \sum_{j=0}^{\infty} \int \dots \int dy_1 \dots dy_l \times \right. \\ \left. \times b_l^*(y_1, \dots, y_l, j) b_l(y_1, \dots, y_l, j) \right) \end{aligned} \quad (8)$$

и отвечающий ему оператор

$$\begin{aligned} \overline{\hat{S}} = & S[\hat{b}_1^2(x_1^1, j^1), \hat{b}_1^1(x_1^1, j^1), \dots \\ & \dots, \hat{b}_k^2(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), \hat{b}_k^1(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)], \end{aligned}$$

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

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

Определение 2. Числа λ , для которых

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

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 $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}$, построенное из функций (1), для которых $x_{p_l}^l \in \mathbf{T}^3 \otimes \Sigma$. 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 $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}^F$.

Определение 3. Пространство $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}^F$ является подпространством пространства $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}$ и состоит из таких элементов $\mathcal{F}_{N_1, \dots, N_k}$, которые антисимметричны 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 $\widehat{P}_{N_1, \dots, N_k}^F$:

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

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

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

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 :

$$\begin{aligned} \widehat{\rho}' = & \sum_{N_1=0}^{\infty} \dots \sum_{N_k=0}^{\infty} \frac{1}{N_1! \dots N_k!} \sum_{j_1^1=0}^{\infty} \dots \sum_{j_{N_1}^1=0}^{\infty} \dots \\ & \dots \sum_{j_1^k=0}^{\infty} \dots \sum_{j_{N_k}^k=0}^{\infty} \int \dots \int dx_1^1 dy_1^1 \dots dx_{N_1}^1 dy_{N_1}^1 \dots \\ & \times \widehat{\psi}^+(x_1^1) \dots \widehat{\psi}^+(x_{N_1}^1) \dots \widehat{\psi}^+(x_1^k) \dots \widehat{\psi}^+(x_{N_k}^k) \widehat{P}_0 \times \\ & \times b_1(x_1^1, j_1^1) \dots b_1(x_{N_1}^1, j_{N_1}^1) \dots b_k(x_1^k, \dots, x_{N_k}^k, j_1^k) \dots \\ & \dots b_k(x_{kN_k-k+1}^k, \dots, x_{kN_k}^k, j_{N_k}^k) b_1^*(y_1^1, j_1^1) \dots \\ & \dots b_1^*(y_{N_1}^1, j_{N_1}^1) \dots b_k^*(y_1^k, \dots, y_{N_k}^k, j_1^k) \dots \\ & \dots b_k^*(y_{kN_k-k+1}^k, \dots, y_{kN_k}^k, j_{N_k}^k) \times \\ & \times \widehat{\psi}^-(y_{N_k}^k) \dots \widehat{\psi}^-(y_1^k) \dots \widehat{\psi}^-(y_{N_1}^1) \dots \widehat{\psi}^-(x_1^1), \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[b_1^*(x_1^1, j_1^1), b_1(x_1^1, j_1^1), \dots \\ \dots, b_k^*(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), b_k(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)] = \\ = \text{Sp} \left(\widehat{\rho}' \widehat{H} \right) \exp \left(-\sum_{l=1}^k \sum_{j=0}^{\infty} \int \dots \int dy_1 \dots dy_l \times \right. \\ \left. \times b_l^*(y_1, \dots, y_l, j) b_l(y_1, \dots, y_l, j) \right). \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \overline{\widehat{H}} = \mathcal{H} \left[\widehat{b}_1^+(x_1^1, j_1^1), \widehat{b}_1^-(x_1^1, j_1^1), \dots \right. \\ \left. \dots, \widehat{b}_k^+(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), \widehat{b}_k^-(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k) \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

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 $\overline{\widehat{A}}$ в пространстве \mathcal{F} , символ которого, так же как и символ гамильтониана, выражается формулой

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[b_1^*(x_1^1, j_1^1), b_1(x_1^1, j_1^1), \dots \\ \dots, b_k^*(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), b_k(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)] = \\ = \text{Sp} \left(\widehat{\rho}' \overline{\widehat{A}} \right) \exp \left(-\sum_{l=1}^k \sum_{j=0}^{\infty} \int \dots \int dy_1 \dots dy_l \times \right. \\ \left. \times b_l^*(y_1, \dots, y_l, j) b_l(y_1, \dots, y_l, j) \right), \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} S[b_1^*(x_1^1, j_1^1), b_1(x_1^1, j_1^1), \dots \\ \dots, b_k^*(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), b_k(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k)] = \\ = \text{Sp} \left(\widehat{\rho}' \ln \left(\frac{\widehat{\rho}'}{\text{Sp} \widehat{\rho}'} \right) \right) \exp \left(-\sum_{l=1}^k \sum_{j=0}^{\infty} \int \dots \int dy_1 \dots dy_l \times \right. \\ \left. \times b_l^*(y_1, \dots, y_l, j) b_l(y_1, \dots, y_l, j) \right) \end{aligned} \quad (11)$$

и отвечающий ему оператор

$$\begin{aligned} \overline{\widehat{S}} = S \left[\widehat{b}_1^+(x_1^1, j_1^1), \widehat{b}_1^-(x_1^1, j_1^1), \dots \right. \\ \left. \dots, \widehat{b}_k^+(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k), \widehat{b}_k^-(x_1^k, \dots, x_k^k, j^k) \right], \end{aligned} \quad (12)$$

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

Определение 4. Числа λ , для которых

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

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:

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

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}_{ps}^\pm — операторы рождения и уничтожения фермиона с импульсом p и спином s :

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

ε_p , V_{pqrts} — заданные коэффициенты, причем $V_{pqrts} = 0$ 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 $\widehat{\bar{H}}$ и \widehat{S} коммутируют с операторами числа частиц данного типа кластеров

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

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

$$\begin{aligned} \Phi_{\{p\sigma\}M} &= \\ &= \left(\sum_s \sum_{s'} \iint d\xi d\xi' \Phi(\xi, s, \xi', s') \widehat{b}_2^+(\xi, s, \xi', s', 0) \right)^M \times \\ &\quad \times \prod_{j=0} \left(\int d\zeta u_{pj}(x) \widehat{b}_1^+(\zeta, \sigma_j, j) \right) \Psi_0, \end{aligned} \quad (14)$$

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) , $j = 0, 1, \dots$, 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 $\widehat{\bar{A}}$ на векторах (14) сводятся с помощью методов [3, 5] к следующим матричным элементам вторично квантованного оператора \widehat{A} :

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

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 :

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

где Y_0 — вакуумный вектор пространства \mathcal{H}_F . Матричные элементы (15) легко находятся в термодинамическом пределе, когда $L \rightarrow \infty$, $N, M \rightarrow \infty$ 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

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

имеют предел, равный

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

то имеет место следующая асимптотика для скалярного произведения:

$$\begin{aligned} (\phi_{\{n'\}}, \phi_{\{n\}}) &= \frac{(f^* f)^M (M!)^2}{\sqrt{2\pi S_2}} \exp(S_0) \times \\ &\times \prod_p \delta_{n_{p1} - n'_{p1} + n_{-p2} - n'_{-p2}} \times \\ &\times \left[(1 - \delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \delta_{n'_{-p2}1} \delta_{n'_{p1}1} - \delta_{n_{p1}1} \delta_{n_{-p2}1} \delta_{n'_{-p2}0} \delta_{n'_{p1}0}) + \right. \\ &\left. + (\delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \delta_{n'_{-p2}1} \delta_{n'_{p1}1} \tilde{\varphi}_p + \delta_{n_{p1}1} \delta_{n_{-p2}1} \delta_{n'_{-p2}0} \delta_{n'_{p1}0}) \tilde{\varphi}_p^* \right], \end{aligned} \quad (17)$$

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

$$\begin{aligned} M &= \sum_p \frac{\tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p}{1 + \tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p} \delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \delta_{n'_{-p2}0} \delta_{n'_{p1}0} - \\ &- \sum_p \delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \delta_{n'_{-p2}1} \delta_{n'_{p1}1}, \end{aligned} \quad (18)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} G_{p1} &= \delta_{n_{p1}1} + \delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \frac{\tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p}{1 + \tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p}, \\ G_{p2} &= \delta_{n_{-p2}1} + \delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \frac{\tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p}{1 + \tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p}, \\ R_p &= \delta_{n_{p1}0} \delta_{n_{-p2}0} \frac{\tilde{\varphi}_p}{1 + \tilde{\varphi}_p^* \tilde{\varphi}_p}, \end{aligned} \quad (19)$$

определенные на решетке $(2\pi/L)\mathbf{Z}^3$ и зависящие от набора $\{n_{ps}\}$. Пусть при стремлении шага решетки $(2\pi/L) \rightarrow 0$ 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 $L \rightarrow \infty$

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

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

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 \tilde{G}_{ps} и \tilde{R}_p следующим образом:

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

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

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

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:

$$E_{\{n\}} = \left(\sum_p \sum_{s=1}^2 \varepsilon_p G_{ps} + \sum_{p,q} \sum_{s=1}^2 (V_{pqqp} - V_{pqpq}) G_{ps} G_{qs} + \right.$$

$$+ \sum_{p,q} (V_{pqqp} + V_{qppq}) G_{p1} G_{q2} + \quad (21)$$

$$+ \sum_{p,q} (V_{p-p-qq} + V_{-ppq-q}) R_p^* R_q \Big) (1 + O(1/N)).$$

Пусть коэффициенты $V_{pqr t}$ 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 $L \rightarrow \infty$ для любой непрерывной функции $f(p)$ имеют место равенства

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

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

В этом случае, очевидно, справедливо равенство

$$\begin{aligned} &\left[\frac{(\phi_{\{n\}}, \hat{H}\phi_{\{n\}})}{(\phi_{\{n\}}, \phi_{\{n\}})} - \left(\sum_p \sum_{s=1}^2 \varepsilon_p \tilde{G}_{ps} + \right. \right. \\ &+ \sum_{p,q} \sum_{s=1}^2 (V_{pqqp} - V_{pqpq}) \tilde{G}_{ps} \tilde{G}_{qs} + \\ &+ \sum_{p,q} (V_{pqqp} + V_{qppq}) \tilde{G}_{p1} \tilde{G}_{q2} + \\ &+ \left. \left. \sum_{p,q} (V_{p-p-qq} + V_{-ppq-q}) \tilde{R}_p^* \tilde{R}_q \right) \right] L^{-3} = O(1/N). \end{aligned}$$

Таким образом, при замене функций G_{ps} и R_p в (21) на пуантилистические функции \tilde{G}_{ps} и \tilde{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]

$$\begin{aligned} S_{\{n\}} &= \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int dp \left[\tilde{n}_1(p) \ln(\tilde{n}_1(p)) + \right. \\ &+ (1 - \tilde{n}_1(p)) \ln(1 - \tilde{n}_1(p)) + \tilde{n}_2(p) \ln(\tilde{n}_2(p)) + \\ &+ (1 - \tilde{n}_2(p)) \ln(1 - \tilde{n}_2(p)) \Big], \end{aligned}$$

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

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

Заметим, что

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

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 бессpinовых 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

$$F_{\{n\}} = \sum_p \varepsilon_p \tilde{n}_p + \frac{U_0 a^3}{2L^3} \sum_{pq} \left(\tilde{v}(0) + \tilde{v}(p-q) \right) \tilde{n}_p \tilde{n}_q - \delta_{p0} \frac{U_0 a^3}{2L^3} \tilde{n}_0^2 + \Theta \left(\tilde{n}_p \ln \tilde{n}_p - (1 + \tilde{n}_p) \ln(1 + \tilde{n}_p) \right), \quad (23)$$

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

решением системы уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon_p + \frac{U_0 a^3 n_0}{L^3} \sum_{p'} (\tilde{v}(0) + \tilde{v}(p-p')) \tilde{n}_{p'} + \Theta \ln \left(\frac{\tilde{n}_p}{1 + \tilde{n}_p} \right) - \\ - \mu - \delta_{p0} \left(\frac{U_0 a^3 \tilde{n}_0}{L^3} \tilde{v}(0) + \Theta \ln \left(\frac{\tilde{n}_0}{1 + \tilde{n}_0} \right) \right) = 0, \quad (24) \\ N = \sum_p \tilde{n}_p. \end{aligned}$$

Если при температуре Θ решение системы (24) таково, что $\tilde{n}_0 \sim N$, 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.

Найдение 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

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

потенциалом парного взаимодействия

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

и потенциалом внешнего поля

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