

М.Ю. Ковалевский
С.В. Пелетминский

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ
МЕХАНИКА
КВАНТОВЫХ ЖИДКОСТЕЙ
И КРИСТАЛЛОВ**

$$\hat{\rho}(t) \xrightarrow{t \gg \tau} \hat{W}(t) \equiv \lim_{v \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \hat{W}_v(t)$$

Ковалевский М.Ю.
Пелетминский С.В.

**Статистическая
механика квантовых
жидкостей и
кристаллов**



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ ®

УДК 536.7
ББК 22.317
К 56

Ковалевский М. Ю., Пелетминский С. В. **Статистическая механика квантовых жидкостей и кристаллов.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 368 с. — ISBN 5-9221-0698-8.

Монография посвящена последовательному изложению квантовой статистической теории конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией. Основой предложенного микроскопического подхода является концепция квазисредних и метод сокращенного описания. Рассмотрены как простейшая сверхтекучая жидкость со скалярным параметром порядка, так и наиболее сложный квантовый объект — сверхтекучий ^3He . Дано обобщение теории ферми-жидкости Ландау–Силина на сверхтекучие ферми-системы и бозе-жидкости. Построена теория пространственно-периодического бозе-конденсата, рассматриваемая нами в качестве модели квантового кристалла. Изучены двухвременные функции Грина для сверхтекучих систем и найдены их низкочастотные асимптотики.

Монография рассчитана на научных работников, аспирантов, студентов старших курсов, занимающихся проблемами теоретической и математической физики, физики низких температур.

Научное издание

КОВАЛЕВСКИЙ Михаил Юрьевич
ПЕЛЕТМИНСКИЙ Сергей Владимирович

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА КВАНТОВЫХ ЖИДКОСТЕЙ
И КРИСТАЛЛОВ**

Редактор *В.С. Ярунин*
Оригинал-макет: *Д.В. Горбачев*
Оформление переплета: *А.Ю. Алехина*

Подписано в печать 17.03.06. Формат 60×90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 23. Уч.-изд. л. 25.3. Тираж 200 экз. Заказ №

Издательская фирма «Физико-математическая литература»

МАИК «Наука/Интерпериодика»

117997, Москва, ул. Профсоюзная, 90

E-mail: fizmat@maik.ru, fmlsale@maik.ru;

http://www.fml.ru

Отпечатано с готовых диапозитивов
в ППП «Типография «Наука»
121099, г. Москва, Шубинский пер., 6

ISBN 5-9221-0698-8



9 785922 106986

ISBN 5-9221-0698-8

© ФИЗМАТЛИТ, 2006

© М. Ю. Ковалевский, С. В. Пелетминский,
2006

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
От авторов	7
Глава 1. Принципы статистической механики	10
§ 1. Основные положения квантовой механики	11
1.1. Вторичное квантование. Статистика Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака. Операторы физических величин (11). 1.2. Интегралы движения как генераторы преобразований симметрии гамильтониана. Дифференциальные законы сохранения (18).	
§ 2. Состояние равновесия конденсированных сред	30
2.1. Пространственное ослабление корреляций и эргодическое соотношение. Статистический оператор Гиббса. Теорема о связи потоков (30). 2.2. Вырождение состояния равновесия. Квазисредние. Параметры порядка и классификация состояний равновесия (38). 2.3. Примеры конденсированных сред с нарушенной симметрией (45).	
§ 3. Неравновесные процессы. Сокращенное описание	55
3.1. Пространственно-однородные состояния. Кинетический этап эволюции (55). 3.2. Пространственно-неоднородные состояния нормальной жидкости. Гидродинамический этап эволюции (57). 3.3. Пространственно-неоднородные вырожденные состояния. Параметры сокращенного описания как функционалы статистического оператора (71).	
Литература к главе 1	74
Глава 2. Ферми-жидкостный подход	77
§ 4. Теория сверхтекучести ферми-газа	80
4.1. Куперовское спаривание. Эффективный гамильтониан (80). 4.2. Уравнение для энергетического спектра (84). 4.3. Гамильтониан Бардина (89).	
§ 5. Нормальная ферми-жидкость	93
5.1. Функция распределения квазичастиц (93). 5.2. Уравнение самосогласования. Свойства симметрии функционала энергии. Термодинамика (95). 5.3. Кинетическое и гидродинамическое описание неравновесных процессов (98).	
§ 6. Сверхтекучая ферми-жидкость	104
6.1. Нормальные и аномальные функции распределения. Диагностика операторов физических величин (104). 6.2. Свойства симметрии функционала энергии (110). 6.3. Вариационный прин-	

цип и уравнение самосогласования (112). 6.4. Синглетное спаривание. Теория БКШ-Боголюбова (115). 6.5. Триплетное спаривание (122). 6.6. Кинетическое уравнение для квазичастиц (131).	
Литература к главе 2	137
Глава 3. Бозе-конденсация	140
§ 7. Теория сверхтекучести слабо неидеального бозе-газа	143
7.1. Модель с выделенным конденсатом (143). 7.2. Функция распределения и спектр квазичастиц (146). 7.3. Когерентные состояния бозе-конденсата (151). 7.4. Уравнение эволюции волновой функции конденсата (153).	
§ 8. Бозе-жидкостный подход	160
8.1. Четный и нечетный бозе-конденсаты (160). 8.2. Уравнения самосогласования (166). 8.3. Функционал энергии (172). 8.4. Решения уравнений самосогласования с четным и нечетным конденсатами (175).	
Литература к главе 3	183
Глава 4. Сверхтекучие жидкости. Скалярный параметр порядка	186
§ 9. Состояние равновесия. Термодинамика	187
9.1. Свойства симметрии сверхтекучих состояний равновесия с синглетным спариванием (187). 9.2. Эргодическое соотношение для сверхтекучей бозе-жидкости (191). 9.3. Термодинамика и плотности потоков сверхтекучей жидкости (193). 9.4. Инвариантность Галилея и Лоренца (197).	
§ 10. Пространственно-неоднородные состояния. Сокращенное описание	200
10.1. Сверхтекучая фаза как функционал статистического оператора. Функциональная гипотеза и уравнения идеальной гидродинамики (200). 10.2. Процессы диссипации. Формулы Кубо-Грина (207).	
§ 11. Растворы квантовых жидкостей	218
11.1. Термодинамика растворов сверхтекучих и нормальных жидкостей (218). 11.2. Гидродинамика растворов квантовых жидкостей (224).	
Литература к главе 4	228
Глава 5. Бозе-конденсация и квантовые кристаллы.	231
§ 12. Пространственно-периодический бозе-конденсат	232
12.1. Модель с выделенным конденсатом на векторах обратной решетки (232). 12.2. Термодинамика пространственно-периодического бозе-конденсата (236). 12.3. Однопериодические решения уравнения для волновой функции конденсата (239). 12.4. Термодинамика однопериодических состояний (242). 12.5. Термодинамика конденсата при $\zeta_1 \rightarrow 0$ (246). 12.6. Область существования однопериодических решений бозе-конденсата (252).	
§ 13. Динамика пространственно-периодического бозе-конденсата	255

13.1. Сокращенное описание пространственно-периодического бозе-конденсата (255).	
13.2. Звуковые волны в однопериодическом бозе-конденсате (261).	
Литература к главе 5	269
Глава 6. Сверхтекучие жидкости. Тензорный параметр порядка . .	271
§ 14. Классификация сверхтекучих состояний с триплетным спариванием	273
14.1. Трансляционно-инвариантные состояния равновесия сверхтекучих фаз ^3He (273).	
14.2. Неоднородные состояния равновесия сверхтекучих фаз ^3He (280).	
§ 15. Локально-равновесная термодинамика сверхтекучих фаз ферми-жидкости	284
15.1. Алгебра локальных унитарных преобразований. Трансформационные свойства операторов плотностей аддитивных интегралов движения и параметра порядка (284).	
15.2. Вариация локально-равновесного термодинамического потенциала в конденсированных средах со спонтанно нарушенной симметрией (292).	
15.3. Локально-равновесные плотности потоков аддитивных интегралов движения (295).	
15.4. Связь потоков аддитивных интегралов движения в состоянии локального равновесия (310).	
§ 16. Неравновесные процессы в пространственно-неоднородных состояниях. Сокращенное описание	313
16.1. Гидродинамика A -фазы ^3He (313).	
16.2. Гидродинамика B -фазы ^3He (322).	
Литература к главе 6	331
Глава 7. Двухвременные функции Грина	334
§ 17. Определение и свойства функций Грина. Нормальные состояния . .	335
17.1. Реакция системы на внешнее возмущение. Свойства функций Грина (335).	
17.2. Гидродинамика нормальных конденсированных сред во внешних полях (345).	
17.3. Низкочастотная асимптотика функций Грина нормальной жидкости (349).	
§ 18. Определение и свойства функций Грина. Квантовые жидкости . . .	351
18.1. Линейный отклик сверхтекучих систем на внешнее возмущение (351).	
18.2. Гидродинамика сверхтекучей жидкости во внешних полях (354).	
18.3. Низкочастотная асимптотика функций Грина сверхтекучей жидкости (361).	
Литература к главе 7	366

Предисловие

Проблема статистического описания конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией к настоящему времени еще не нашла своего полного воплощения в виде монографии. Одной из важных целей создания этой книги является построение последовательной микроскопической теории квантовых жидкостей и кристаллов в условиях, когда параметр порядка имеет достаточно сложную тензорную структуру, что существенно для микроскопического понимания явления сверхтекучести и сверхпроводимости. В частности, ниже приведены новые результаты, представленные в предложенной монографии: микроскопическое описание сверхтекучего ^3He , релятивистская сверхтекучесть для систем со скалярным и тензорным параметрами порядка, микроскопическое описание пространственно-периодических сверхтекучих систем, ферми- и бозе-жидкостный подход.

Материал этой книги в целом основывается на результатах исследований авторов. Предложенная авторами микроскопическая теория статистического описания квантовых жидкостей и кристаллов основана на предпосылках общего характера — принципе ослабления корреляций, эргодических соотношениях, функциональной гипотезе. Единство и последовательность развиваемого подхода заключается в тесной взаимосвязи концепции квазисредних и метода сокращенного описания. Принципиальное значение имеет идея введения в распределение Гиббса термодинамических параметров, связанных с нарушенной симметрией, что позволяет построить термодинамику и получить динамические уравнения для достаточно сложных конденсированных сред в рамках микроскопической теории. Развиваемый подход позволяет описывать физические системы со спонтанно нарушенной симметрией с той же полнотой, что и нормальные конденсированные среды.

Авторы внесли существенный вклад в развитие и обобщение ферми-жидкостного подхода на вырожденные состояния конденсированных сред и распространили его на случай бозе-статистики. Эта монография развивает направление исследований, отраженных в книге А. И. Ахиезера и С. В. Пелетминского «Методы статистической физики» с акцентом на более детальные исследования квантовых конденсированных сред.

Член-корреспондент РАН Боголюбов Н.Н. (мл.)

От авторов

Исследование конденсированных сред является важной проблемой статистической физики. При понижении температуры или изменении других термодинамических параметров нормальное состояние статистического равновесия, как правило, претерпевает существенные изменения и сопровождается возникновением новых явлений и физических эффектов. В качестве примеров таких сред отметим сверхтекучие жидкости, магнетики, кристаллы. Наличие полезных, нередко уникальных свойств этих систем, вызывает большой интерес к ним как с практической, так и с теоретической точки зрения. На таких системах создаются новые гипотезы и апробируются новые методы статистической механики.

Сильное взаимодействие в конденсированных средах создает значительные математические трудности при их описании. Поэтому теоретические исследования проводились, в основном, в феноменологическом подходе.

В последние десятилетия достигнут существенный прогресс в статистической физике. В значительной мере он связан с развитием представлений о сокращенном описании неравновесных процессов. Решение задачи динамики неравновесных состояний мы связываем с иерархией времен релаксации. Ввиду сильного взаимодействия частиц неравновесное и пространственно-неоднородное состояние переходит в локально-равновесное и дальнейшая эволюция системы к состоянию статистического равновесия происходит по «гидродинамическому» типу. Другая важная проблема в развитии микроскопической теории конденсированных сред — описание состояния равновесия. Концепция квазисредних и связанное с ней представление о спонтанном нарушении симметрии состояния равновесия являются эффективным математическим инструментом исследования таких систем.

Цель монографии — построение микроскопической теории, позволяющей описывать как равновесные состояния систем со спонтанно нарушенной симметрией, так и эволюцию пространственно-неоднородных состояний таких систем с учетом диссипативных процессов. Основной упор делается на исследовании квантовых конденсированных сред с различным характером вырождения основного состояния. В рамках статистической теории решаются следующие задачи:

— описание состояния равновесия конденсированных сред с нарушенной симметрией, то есть введение в распределение Гиббса на

основе концепции квазисредних термодинамических величин, характеризующих исследуемую фазу конденсированной среды. Вывод термодинамических соотношений, включая выражения для плотностей потоков аддитивных интегралов движения в терминах термодинамического потенциала. Классификация состояний равновесия;

— построение динамических уравнений для параметров сокращенного описания исходя из уравнения фон-Неймана с привлечением гипотезы сокращенного описания.

Изложен общий подход классификации состояний равновесия для вырожденных конденсированных сред. В качестве частного случая исследованы термодинамика и гидродинамика релятивистских квантовых жидкостей и их растворов. Построена термодинамика потоков аддитивных интегралов движения на основе свойств симметрии равновесного состояния с использованием концепции квазисредних. Получено универсальное соотношение, выражающее связь средних значений плотностей потоков аддитивных интегралов движения в терминах термодинамического потенциала.

Дано обобщение теории нормальной ферми-жидкости Ландау–Силина на сверхтекучие ферми-системы, а также сверхтекучие жидкости со статистикой Бозе–Эйнштейна. Сформулированы и исследованы уравнения самосогласования квантовой жидкости с четным и нечетным конденсатами.

Построена теория пространственно-периодического бозе-конденсата, которая может служить моделью квантового кристалла, обладающего свойством сверхтекучести. Сформулированы динамические уравнения пространственно-периодических состояний бозе-конденсата в бездиссипативном приближении и изучены спектры звуковых колебаний. Найдены периодические решения для волновой функции конденсата в состоянии равновесия и рассмотрен вопрос об устойчивости таких состояний.

Изучено влияние слабого внешнего поля на эволюцию пространственно-неоднородных сверхтекучих систем. Получены уравнения гидродинамики с «источниками», обусловленными взаимодействием частиц системы с этим полем. На этой основе рассмотрены двухвременные функции Грина для сверхтекучих систем и найдены их низкочастотные асимптотики.

Мы приносим свою глубокую благодарность всем соавторам наших работ, использованных в монографии. Авторы благодарны коллегам университета г. Росток профессорам Г. Репке, Д. Кремпу, В. Крефту за гостеприимство, оказанное нам в Германии и стимулирующее обсуждение проблем, затронутых в монографии. Наша особая благодарность Российскому Фонду Фундаментальных Исследований за поддержку издания этой книги. Нам хочется выразить свою благодарность руководству издательства «Физико-математическая литература» в лице М.Н. Андреевой и Е.С. Артоблевской за пони-

мание и терпимость к нашей способности вовремя закончить работу. Мы благодарны А.С. Пелетминскому, взявшему на себя труд в написании главы 5, посвященной пространственно-периодическому бозе-конденсату. Мы признательны В.Т. Мацкевич за помощь при подготовке текста книги и А.Н. Тарасову за ценные критические замечания.

М. Ковалевский, С. Пелетминский
Харьков, Белгород
Октябрь 2005

Глава 1

ПРИНЦИПЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Первая глава посвящена обобщению некоторых методов статистической физики, развитых, в основном, для многочастичных систем в нормальном состоянии. В § 1 кратко изложены необходимые сведения о построении операторов физических величин в представлении второго квантования и установлены их трансформационные свойства при различных преобразованиях симметрии. Исследованы свойства симметрии гамильтониана, введены плотности и потоки аддитивных интегралов движения.

Состояние равновесия конденсированных сред изучено в § 2. Сформулированы принципы статистической механики, лежащие в основе описания состояния равновесия многочастичных систем — принцип пространственного ослабления корреляций и эргодические соотношения.

Дано современное описание состояния равновесия вырожденных конденсированных сред. Принципиальным моментом в развиваемой микроскопической теории является введение в концепцию квазисредних для распределения Гиббса дополнительных термодинамических параметров, необходимых для адекватного описания равновесия вырожденных конденсированных сред. Сформулированы общие трансформационные свойства оператора параметра порядка и описана процедура решения задачи классификации состояний равновесия в системах со спонтанным нарушением симметрии. Приведены примеры конденсированных сред со скалярным, векторным и тензорным параметрами порядка.

Сформулирована и доказана теорема о связи плотностей потоков аддитивных интегралов движения в состоянии равновесия. Эта теорема позволяет выразить плотность потока энергии через плотности потоков других аддитивных интегралов движения, связанных с внутренней и пространственной симметрией. Это в итоге облегчает получение динамических уравнений как нормальных, так и вырожденных конденсированных сред.

В § 3 представлено детальное изложение идеологии сокращенного описания. На примере нормальной жидкости дан вывод уравнений релаксационной гидродинамики. Кинетические коэффициенты представлены в виде формул Кубо–Грина. Рассмотрена общая схема сокращен-

ного описания для конденсированных сред со спонтанным нарушением симметрии.

При исследовании конденсированных сред обычно предполагается инвариантность гамильтониана системы по отношению к преобразованиям Галилея или Лоренца, что накладывает дополнительные ограничения на структуру гамильтониана. В настоящей главе гамильтониан обладает только трансляционной и фазовой инвариантностью и не имеет какой-либо специальной динамической симметрии. В этом случае развиваемый подход позволяет расширить класс исследуемых сред, а также в качестве частных случаев получить результаты, относящиеся к системам со специальной динамической симметрией.

§ 1. Основные положения квантовой механики

1.1. Вторичное квантование. Статистика Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака. Операторы физических величин. В квантовой механике вводятся понятия чистых состояний и смесей. Чистому состоянию сопоставляют вектор $\Phi \equiv |\Phi\rangle$ в гильбертовом пространстве со скалярным произведением $(\Phi_1, \Phi_2) \equiv \langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle$ [1]. Если система характеризуется вектором Φ (находится в состоянии Φ), то среднее значение некоторой физической величины R , которой сопоставляется оператор $\hat{R}$, определяется формулой

$$\langle \hat{R} \rangle = (\Phi, \hat{R}\Phi),$$

и предполагается выполненным условие нормировки вектора Φ : $(\Phi, \Phi) = 1$. Среднее $\langle \hat{R} \rangle$ можно представить в виде

$$\langle \hat{R} \rangle = \text{Sp } P_{[\Phi]} \hat{R},$$

где $P_{[\Phi]}$ — оператор проектирования на состояние Φ , определяемый с помощью соотношения

$$P_{[\Phi]}\varphi = \Phi(\Phi, \varphi).$$

Здесь φ — произвольный вектор в гильбертовом пространстве и $\text{Sp } \hat{A}$ обозначает шпур оператора $\hat{A}$, то есть сумму его диагональных матричных элементов в произвольном ортонормированном базисе. В соответствии с этим определением обычно используется следующее обозначение для оператора проектирования

$$P_{[\Phi]} = |\Phi\rangle \langle \Phi|.$$

С помощью операторов проектирования легко сформулировать условие полноты системы ортонормированных векторов Φ_n

$$\begin{aligned} (\Phi_n, \Phi_m) &= \delta_{nm}, \\ \sum_n P_{[\Phi_n]} &= \sum_n |n\rangle \langle n| = 1. \end{aligned}$$

Наряду с простейшим случаем, когда система характеризуется определенным вектором состояния, в квантовой механике возможна более общая ситуация, когда точно неизвестно, какой из векторов характеризует состояние, и можно лишь указать вероятности того, что система характеризуется тем или иным вектором в гильбертовом пространстве. Если W_n — вероятность того, что система находится в состоянии Φ_n (где $W_n \geq 0$, $\sum_n W_n = 1$), то среднее значение физической величины R будет определяться формулой

$$\langle \hat{R} \rangle = \sum_n W_n \langle \Phi_n | \hat{R} | \Phi_n \rangle,$$

которую можно также представить в виде

$$\langle \hat{R} \rangle = \text{Sp } \hat{\rho} \hat{R}, \quad (1.1.1)$$

где

$$\hat{\rho} = \sum_n |\Phi_n\rangle W_n \langle \Phi_n| = \sum_n W_n P_{[\Phi_n]}. \quad (1.1.2)$$

Оператор $\hat{\rho}$ носит название статистического оператора или матрицы плотности. Матрица плотности была впервые введена фон-Нейманом [2] и Ландау [3]. Оператор $\hat{\rho}$ является положительно определенным эрмитовым оператором, шпур которого равен единице $\text{Sp } \hat{\rho} = 1$. В квантовой механике физическая система, описываемая матрицей плотности, интерпретируется как смесь чистых состояний.

Если система находится в чистом состоянии $|\Phi\rangle$, то ее матрица плотности имеет, очевидно, вид

$$\hat{\rho} = |\Phi\rangle \langle \Phi| \quad (1.1.3)$$

и, как легко видеть, в этом случае $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Справедливо и обратное утверждение: если матрица плотности удовлетворяет соотношению $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, то она имеет вид (1.1.3) и состояние является чистым.

Подчеркнем принципиальное различие между смесью и суперпозицией чистых состояний: в случае суперпозиции состояний складываются векторы состояний и в результате снова получается чистое состояние. В смеси складываются матрицы плотности чистых состояний. При смешивании смесей всегда получается смесь, а не чистое состояние. Отметим, что если система находится в чистом состоянии, то какая-либо выделенная часть ее, взаимодействующая с остальными частями системы, будет уже описываться не вектором состояния, а матрицей плотности. Действительно, пусть система G , находящаяся в состоянии $|c\rangle$, состоит из двух подсистем a и b . Построим матрицу плотности $\hat{\rho}_a$ подсистемы a . Заметим для этого, что гильбертово пространство векторов состояний всей системы может быть представлено в виде прямого произведения гильбертовых пространств, соответствующих подсисте-

мам a и b . При этом прямые произведения базисных векторов $|n_a\rangle, |n_b\rangle$ этих пространств образуют базис векторов состояний системы G

$$|n_a n_b\rangle = |n_a\rangle |n_b\rangle.$$

Элемент матрицы плотности подсистемы a , $\langle n_a | \hat{\rho}_a | n'_a \rangle$, очевидно, равен

$$\langle n_a | \hat{\rho}_a | n'_a \rangle = \sum_{n_b} \langle n_a n_b | c \rangle \langle c | n'_a n_b \rangle,$$

откуда

$$\hat{\rho}_a = \sum_{n_a n'_a n_b} |n_a\rangle \langle n_a n_b | c \rangle \langle c | n'_a n_b \rangle \langle n'_a|.$$

Векторы состояний системы изменяются во времени по вполне определенному закону. Именно, если $\hat{\mathcal{H}}(t)$ — гамильтониан системы, то вектор состояния $\Phi(t)$ изменяется во времени согласно уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}(t) \Phi(t) \quad (1.1.4)$$

(здесь и в дальнейшем считается, что квантовая постоянная $\hbar$ равна единице). Решение этого уравнения в случае замкнутой системы, когда гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ не зависит от времени t , можно формально записать в виде

$$\Phi(t) = \exp(-i\hat{\mathcal{H}}t) \Phi(0).$$

Используя уравнение Шредингера, легко установить уравнение движения для матрицы плотности системы. Величины W_n , входящие в формулу (1.1.2), не зависят от времени. Зависимость от времени матрицы плотности $\hat{\rho}$ будет определяться только зависимостью от времени векторов состояния $|\Phi_n\rangle$, даваемой уравнением Шредингера. Поэтому матрица плотности $\hat{\rho}(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}(t)]. \quad (1.1.5)$$

В случае замкнутой системы формальное решение этого уравнения записывается в виде

$$\hat{\rho}(t) = \exp(-i\hat{\mathcal{H}}t) \hat{\rho}(0) \exp(i\hat{\mathcal{H}}t).$$

Уравнение (1.1.5) называется уравнением фон-Неймана. В классическом случае ему соответствует уравнение Лиувилля для функции распределения всей системы в фазовом пространстве.

В статистической механике одним из важных физических понятий является энтропия, являющаяся функционалом состояния физической системы. В квантовом случае математическое определение энтропии предложено фон-Нейманом

$$S = -\text{Sp } \hat{\rho} \ln \hat{\rho}. \quad (1.1.6)$$

Энтропия чистого состояния равна нулю, так как, если $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, то $\text{Sp } \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = 0$. Для смешанного состояния $S > 0$. Если матрица плотности подчиняется динамическому уравнению (1.1.5), то энтропия не изменяется со временем, так как

$$\frac{d}{dt} \text{Sp } \hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t) = 0.$$

Эффективным методом исследования многочастичных систем тождественных частиц является метод вторичного квантования. Как известно, основными математическими понятиями этого метода являются понятия операторов уничтожения $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ и рождения $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ частицы в точке $\mathbf{x}$ и понятие вектора состояния вакуума $|0\rangle = \Phi_0$

$$\hat{\psi}(\mathbf{x})\Phi_0 = 0, \quad \langle 0|0\rangle = (\Phi_0, \Phi_0) = 1. \quad (1.1.7)$$

Всюду в дальнейшем мы будем в основном использовать представление Шредингера квантовой механики, в котором операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ не зависят от времени, а вектор состояния $\Phi(t)$ подчиняется уравнению (1.1.4). Напомним, что в представлении Гейзенберга операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ и $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}, t)$ зависят от координат и времени, в то время как вектор состояния Φ от времени не зависит. Наконец, в представлении Дирака операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ и $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}, t)$ зависят от времени таким же образом, как и в случае свободных частиц, в то время как вектор состояния $\Phi(t)$ изменяется во времени благодаря взаимодействию.

В случае статистики Бозе-Эйнштейна (Б—Э) операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ удовлетворяют каноническим перестановочным соотношениям

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')] = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (1.1.8)$$

а в случае статистики Ферми-Дирака (Ф—Д) — каноническим перестановочным соотношениям

$$\{\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')\} = 0, \quad \{\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.1.9)$$

Если частицы имеют внутренние степени свободы, например спин, то операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ зависят от проекции спина σ , $\hat{\psi}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \equiv \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})$. В этом случае в перестановочных соотношениях (1.1.8) справа появляются символы Кронекера $\delta_{\sigma\sigma'}$ по спиновым индексам.

Из (1.1.7), (1.1.8) следует, что операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ являются обобщенными операторами, так как они переводят вектор Φ_0 гильбертова пространства, для которого $(\Phi_0, \Phi_0) < \infty$, в обобщенный вектор $\Phi_{\mathbf{x}} = \hat{\psi}^+(\mathbf{x})\Phi_0$ (частица находится в точке $\mathbf{x}$), для которого $(\Phi_{\mathbf{x}}, \Phi_{\mathbf{x}'}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, так что $(\Phi_{\mathbf{x}}, \Phi_{\mathbf{x}}) = \infty$.

Операторы рождения и уничтожения $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ могут быть разложены по плоским волнам

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}, \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}}, \quad (1.1.10)$$

($\mathbf{p}$ — импульс частицы). Тогда операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$, удовлетворяющие перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^+] &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} & (\text{Б—Э}), \\ \{\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^+\} &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} & (\text{Ф—Д}), \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

интерпретируются как операторы уничтожения и рождения частицы с импульсом $\mathbf{p}$. В соответствии с этой интерпретацией векторы состояния

$$|\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n\rangle = \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \dots \hat{a}_{\mathbf{p}_n}^+ \Phi_0 \quad (1.1.12)$$

представляют собой n -частичные состояния, в которых частицы обладают определенными импульсами $\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n$. Эти векторы образуют полную систему в гильбертовом пространстве и в силу (1.1.11), (1.1.12) удовлетворяют условиям ортонормировки

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n | \mathbf{p}'_1 \dots \mathbf{p}'_m \rangle &= \delta_{mn} \sum \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}'_1} \dots \delta_{\mathbf{p}_n \mathbf{p}'_n} & (\text{Б—Э}), \\ \langle \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n | \mathbf{p}'_1 \dots \mathbf{p}'_m \rangle &= \delta_{mn} \sum \delta \cdot \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}'_1} \dots \delta_{\mathbf{p}_n \mathbf{p}'_n} & (\text{Ф—Д}), \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

где суммирование ведется по всем перестановкам индексов $\mathbf{p}'_1 \dots \mathbf{p}'_m$. В случае статистики Ферми-Дирака $\delta = 1$ для четной перестановки индексов $\mathbf{p}'_1 \dots \mathbf{p}'_m$ относительно $\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n$ и $\delta = -1$ для нечетной перестановки соответствующих индексов. В случае статистики Бозе-Эйнштейна $\delta = 1$. Условие полноты системы векторов $|\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n\rangle$ имеет вид

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n} |\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_n\rangle \langle \mathbf{p}_n \dots \mathbf{p}_1| = 1. \quad (1.1.14)$$

Гильбертово пространство, построенное с помощью векторов (1.1.12), в основе которых лежит понятие вакуумного вектора состояния и понятие операторов рождения и уничтожения, называется пространством Фока. Более детальное изложение метода вторичного квантования можно найти в монографиях [4, 5].

Для построения операторов плотностей физических величин важным является понятие квантилокального оператора [6]. Оператор $\hat{a}(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \hat{a}(\mathbf{x}) \equiv \sum_{nm} \int d^3x_1 \dots d^3x_n d^3x'_1 \dots d^3x'_m \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_n) \times \\ \times A(\mathbf{x}; \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \mathbf{x}'_1 \dots \mathbf{x}'_m) \hat{\psi}(\mathbf{x}'_1) \dots \hat{\psi}(\mathbf{x}'_m) \end{aligned} \quad (1.1.15)$$

называется квантилокальным, если его ядро $A(\mathbf{x}; \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \mathbf{x}'_1 \dots \mathbf{x}'_m)$ отлично от нуля только в случае, когда все точки $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \mathbf{x}'_1 \dots \mathbf{x}'_m$

лежат вблизи точки $\mathbf{x}$. Пространственный интеграл от произвольного квазилокального оператора (1.1.15) мы будем называть аддитивным оператором. Если аддитивный оператор коммутирует с гамильтонианом системы, то он представляет собой аддитивный интеграл движения.

Операторы числа частиц $\hat{N}$ импульса $\hat{\mathcal{P}}_i$, спина $\hat{S}_i$ и орбитального момента $\hat{\mathcal{L}}_i$ определяются формулами

$$\begin{aligned}\hat{N} &= \int d^3x \hat{n}(\mathbf{x}), & \hat{\mathcal{P}}_i &= \int d^3x \hat{\pi}_i(\mathbf{x}), \\ \hat{S}_i &= \int d^3x \hat{s}_i(\mathbf{x}), & \hat{\mathcal{L}}_i &= \int d^3x \hat{l}_i(\mathbf{x}),\end{aligned}\tag{1.1.16}$$

где соответствующие плотности $\hat{n}(\mathbf{x})$, $\hat{\pi}_i(\mathbf{x})$, $\hat{s}_i(\mathbf{x})$, $\hat{l}_i(\mathbf{x})$ в терминах операторов рождения и уничтожения $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ имеют вид

$$\begin{aligned}\hat{n}(\mathbf{x}) &= \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \\ \hat{\pi}_i(\mathbf{x}) &= -\frac{i}{2} \left\{ \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})\nabla_i\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) - \nabla_i\hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) \right\}, \\ \hat{s}_i(\mathbf{x}) &= \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})(s_i)_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}), \\ \hat{l}_i(\mathbf{x}) &= \frac{i}{2} \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})\varepsilon_{ikl}(x_l\nabla_k - x_k\nabla_l)\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ikl}x_k\hat{\pi}_l(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{1.1.17}$$

Здесь s_i ($i = 1, 2, 3$) — спиновые матрицы $(s_i)_{\sigma\sigma'}$ и ε_{ikl} — полностью антисимметричный единичный тензор. Полный угловой момент $\hat{J}_i$ является суммой спинного $\hat{S}_i$ и орбитального $\hat{\mathcal{L}}_i$ моментов $\hat{J}_i = \hat{S}_i + \hat{\mathcal{L}}_i$.

Используя перестановочные соотношения (1.1.9), (1.1.8) для операторов $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, а также соотношения

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] = -\hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\} + \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C},$$

справедливые для произвольных операторов $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$, легко убедиться, что независимо от статистики частиц

$$\begin{aligned}[\hat{N}, \hat{\psi}(\mathbf{x})] &= -\hat{\psi}(\mathbf{x}), & [\hat{\mathcal{P}}_i, \hat{\psi}(\mathbf{x})] &= i\nabla_i\hat{\psi}(\mathbf{x}), \\ [\hat{J}_i, \hat{\psi}(\mathbf{x})] &= -\left\{ s_i + \frac{i}{2} \varepsilon_{ikl}(x_l\nabla_k - x_k\nabla_l) \right\} \hat{\psi}(\mathbf{x}), \\ [\hat{S}_i, \hat{\psi}(\mathbf{x})] &= -s_i\hat{\psi}(\mathbf{x}).\end{aligned}\tag{1.1.18}$$

Учитывая (1.1.18), (1.1.17), найдем набор коммутационных соотношений аддитивных операторов $\hat{N}$, $\hat{\mathcal{P}}_i$, $\hat{J}_i$

$$\begin{aligned}[\hat{N}, \hat{N}] &= 0, & [\hat{N}, \hat{\mathcal{P}}_i] &= 0, & [\hat{N}, \hat{J}_i] &= 0, \\ [\hat{\mathcal{P}}_k, \hat{\mathcal{P}}_i] &= 0, & i[\hat{J}_i, \hat{\mathcal{P}}_k] &= -\varepsilon_{ikl}\hat{\mathcal{P}}_l, & i[\hat{J}_i, \hat{J}_k] &= -\varepsilon_{ikl}\hat{J}_l.\end{aligned}\tag{1.1.19}$$

Из канонических перестановочных соотношений для полевых операторов и явного вида операторов плотности (1.1.17) вытекают равенства

$$\begin{aligned} i [\hat{\pi}_i(\mathbf{x}), \hat{\pi}_k(\mathbf{x}')] &= -\nabla_k (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\pi}_i(\mathbf{x})) - \nabla'_i (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\pi}_k(\mathbf{x})), \\ i [\hat{\pi}_i(\mathbf{x}), \hat{n}(\mathbf{x}')] &= -\hat{n}(\mathbf{x}) \nabla'_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ i [\hat{\pi}_i(\mathbf{x}), \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}')] &= -\hat{s}_\alpha(\mathbf{x}) \nabla'_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ i [\hat{s}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{s}_\beta(\mathbf{x}')] &= -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_\gamma(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (1.1.20)$$

Если ядро квазилокального оператора $\hat{a}(\mathbf{x})$ зависит от разностей $\mathbf{x} - \mathbf{x}_i$, $\mathbf{x} - \mathbf{x}'_j$, то в силу соотношений (1.1.15) и (1.1.18) имеем

$$i [\hat{\mathcal{P}}_k, \hat{a}(\mathbf{x})] = -\nabla_k \hat{a}(\mathbf{x}). \quad (1.1.21)$$

Операторы, удовлетворяющие этому соотношению, будем называть трансляционно-инвариантными. Операторы $\hat{n}(\mathbf{x})$, $\hat{\pi}_i(\mathbf{x})$, $\hat{s}_i(\mathbf{x})$ — трансляционно-инвариантны, оператор же $\hat{l}_i(\mathbf{x})$ не является трансляционно-инвариантным.

Конкретный вид гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$ в представлении вторичного квантования определяется природой физической системы и условиями, в которых она находится. Гамильтониан является аддитивным оператором, то есть

$$\hat{\mathcal{H}} = \int d^3x \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}), \quad (1.1.22)$$

где $\hat{\varepsilon}(\mathbf{x})$ — квазилокальный трансляционно-инвариантный (если нет внешних полей) оператор, имеющий смысл оператора плотности энергии. Если потенциальная энергия взаимодействия двух частиц $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ не зависит от спина, то гамильтониан системы определяется формулой

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2m} \int d^3x \nabla_k \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x}) \nabla_k \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \quad (1.1.23)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \hat{\psi}_{\sigma_1}^+(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^+(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma_2}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1),$$

здесь m — масса частицы. Если потенциальная энергия взаимодействия двух частиц зависит от спина, например, как в случае магнитного дипольного взаимодействия V_d , то гамильтониан системы определяется формулой

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}_d, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2m} \int d^3x \nabla_k \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x}) \nabla_k \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \quad (1.1.24)$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_d = & -\frac{1}{2} \left(\frac{\mu}{s} \right)^2 \int d^3x_1 d^3x_2 \hat{\psi}_{\sigma_1}^+(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^+(\mathbf{x}_2) \times \\ & \times \left(3(\mathbf{s}_1 \mathbf{r})_{\sigma_1 \sigma'_1} (\mathbf{s}_2 \mathbf{r})_{\sigma_2 \sigma'_2} - r^2 (\mathbf{s}_1)_{\sigma_1 \sigma'_1} (\mathbf{s}_2)_{\sigma_2 \sigma'_2} \right) \frac{1}{r^5} \hat{\psi}_{\sigma'_2}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma'_1}(\mathbf{x}_1), \end{aligned}$$

($\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$; μ — магнитный момент и s — спин частицы). Плотность энергии в первом случае определяется формулой

$$\begin{aligned}\widehat{\varepsilon}(\mathbf{x}) &= \widehat{\varepsilon}_0(\mathbf{x}) + \widehat{v}(\mathbf{x}), \quad \widehat{\varepsilon}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{2m} \nabla_k \widehat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x}) \nabla_k \widehat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \\ \widehat{v}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} \int d^3 y \widehat{\psi}_{\sigma_1}^+ \left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{y}}{2} \right) \widehat{\psi}_{\sigma_2}^+ \left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right) V(\mathbf{y}) \widehat{\psi}_{\sigma_2} \left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{y}}{2} \right) \widehat{\psi}_{\sigma_1} \left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{y}}{2} \right).\end{aligned}\tag{1.1.25}$$

Аналогичной формулой определяется и плотность энергии во втором случае.

1.2. Интегралы движения как генераторы преобразований симметрии гамильтониана. Дифференциальные законы сохранения. Уравнения квантовой механики могут быть инвариантны относительно некоторых преобразований операторов и векторов состояний. Рассмотрим эти преобразования с точки зрения инвариантности уравнения движения для статистического оператора $\widehat{\rho}$. Известно, что свойства симметрии уравнений квантовой механики формулируются на языке унитарных преобразований. Так как мы рассматриваем представление Шредингера, то речь идет об унитарных преобразованиях U_t статистического оператора $\widehat{\rho}(t)$

$$\widehat{\rho}(t) \rightarrow \widehat{\rho}'(t) = U_t \widehat{\rho}(t) U_t^+.\tag{1.2.1}$$

Так как статистический оператор $\widehat{\rho}(t)$ удовлетворяет уравнению (1.1.5)

$$i\dot{\widehat{\rho}}(t) = [\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{\rho}(t)],$$

то статистический оператор $\widehat{\rho}'(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\dot{\widehat{\rho}}'(t) = [\widehat{\mathcal{H}}'(t), \widehat{\rho}'(t)], \quad \widehat{\mathcal{H}}'(t) \equiv U_t \widehat{\mathcal{H}} U_t^+ + i\dot{U}_t U_t^+.\tag{1.2.2}$$

Для того, чтобы уравнения (1.2.2) были инвариантны по отношению к преобразованию (1.2.1), должно выполняться соотношение

$$\widehat{\mathcal{H}}'(t) = U_t \widehat{\mathcal{H}} U_t^+ + i\dot{U}_t U_t^+ = \widehat{\mathcal{H}}.\tag{1.2.3}$$

Важным частным случаем является преобразование (1.2.1), в котором унитарный оператор $U_t = \exp i\widehat{A}(\widehat{A} = \widehat{A}^+)$ не зависит от времени. Согласно (1.2.3) эрмитов оператор $\widehat{A}$ является интегралом движения, если

$$[\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{A}] = 0.\tag{1.2.4}$$

Так как для произвольного оператора $\widehat{R}$

$$\text{Sp } \widehat{\rho}'(t) \widehat{R} = \text{Sp } \widehat{\rho}(t) U^+ \widehat{R} U,$$

то вместо преобразования (1.2.1) статистического оператора $\hat{\rho}'(t)$ мы можем рассматривать эквивалентное преобразование операторов физической величины R (при неизменном $\hat{\rho}(t)$):

$$\hat{R} \rightarrow \hat{R}' = U^+ \hat{R} U. \quad (1.2.5)$$

Поскольку все операторы строятся из операторов $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$, то вместо (1.2.5) можно рассматривать преобразования

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\psi}'(\mathbf{x}) = U^+ \hat{\psi}(\mathbf{x}) U, \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\psi}'^+(\mathbf{x}) = U^+ \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) U. \quad (1.2.6)$$

Правые части соотношений (1.2.6) могут быть как линейными, так и нелинейными по операторам $\hat{\psi}$. В дальнейшем мы рассмотрим только линейные по $\hat{\psi}$ преобразования (1.2.6) (при этом оператор $\hat{A}$ будет квадратичен по операторам $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$), зависящие от непрерывных параметров λ_α ($\alpha = 1, \dots, n$) и образующие некоторую группу G [7]. Это значит, что если последовательно совершаются два преобразования (1.2.6), которым соответствуют значения λ_1 и λ_2 параметров λ , то результирующему преобразованию соответствуют некоторые значения λ_3 параметров λ :

$$\lambda_3 = \lambda(\lambda_1, \lambda_2), \quad (1.2.7)$$

однозначно определяемые величинами λ_1 , λ_2 . При этом введенные нами унитарные операторы $U \equiv U(\lambda)$ образуют унитарное представление группы G , действующее в гильбертовом пространстве векторов состояний системы

$$U(\lambda_3) = U(\lambda_2)U(\lambda_1). \quad (1.2.8)$$

Пусть значению $\lambda = \lambda_0$ соответствует тождественное преобразование в группе G , так что $U(\lambda_0) = 1$. Преобразованиям, бесконечно близким к тождественному, соответствует значение $\lambda_0 + \delta\lambda$ параметров λ и унитарный оператор $U(\lambda_0 + \delta\lambda)$:

$$U(\lambda_0 + \delta\lambda) = 1 + i \sum_{\alpha=1}^n \delta\lambda^\alpha \hat{T}_\alpha.$$

Входящие сюда эрмитовы операторы $\hat{T}_\alpha$ называются генераторами группы G и, очевидно, являются интегралами движения. Так как $U(\lambda_2)U(\lambda_1)U^+(\lambda_2) = U(\lambda(\lambda_2, \lambda(\lambda_1, \lambda_2^{-1})))$, где λ^{-1} — значения параметров λ , соответствующие обратному преобразованию, то есть, $\lambda(\lambda, \lambda^{-1}) = \lambda_0$, то при $\lambda_1 = \lambda_0 + \delta\lambda$ параметры $\lambda(\lambda_2, \lambda(\lambda_1, \lambda_2^{-1}))$ будут близки к λ_0 . Поэтому

$$U(\lambda_2)\hat{T}_\beta U^+(\lambda_2) = \sum_{\gamma} u_{\beta}^{\gamma}(\lambda_2)\hat{T}_{\gamma},$$

где величины

$$u_{\beta}^{\gamma}(\lambda_2) = \left. \frac{\partial \lambda^{\gamma}(\lambda_2, \lambda(\lambda_1, \lambda_2^{-1}))}{\partial \lambda_1^{\beta}} \right|_{\lambda_1 = \lambda_0}$$

определяются только законом сложения (1.2.7) параметров λ в группе G . Отсюда легко заключить, что

$$i[\hat{T}_\alpha, \hat{T}_\beta] = \sum_\gamma f_{\alpha\beta}{}^\gamma \hat{T}_\gamma, \quad (1.2.9)$$

где $f_{\alpha\beta}{}^\gamma = -(\partial u_\beta{}^\gamma(\lambda)/\partial \lambda^\alpha)_{\lambda=\lambda_0}$. Эти величины, называемые структурными постоянными группы, не зависят, как видно из вывода, от представления группы, а определяются только групповым законом сложения. Структурные постоянные $f_{\alpha\beta}^\gamma$ в силу тождества Якоби

$$[\hat{T}_\alpha, [\hat{T}_\beta, \hat{T}_\gamma]] + [\hat{T}_\beta, [\hat{T}_\gamma, \hat{T}_\alpha]] + [\hat{T}_\gamma, [\hat{T}_\alpha, \hat{T}_\beta]] = 0$$

удовлетворяют соотношениям

$$f_{\alpha\beta}{}^\gamma f_{\gamma\rho}{}^\lambda + f_{\beta\rho}{}^\gamma f_{\gamma\alpha}{}^\lambda + f_{\rho\alpha}{}^\gamma f_{\gamma\beta}{}^\lambda = 0, \quad f_{\alpha\beta}{}^\gamma = -f_{\beta\alpha}{}^\gamma.$$

Непрерывными линейными преобразованиями являются пространственные трансляции и вращения, а также преобразования Галилея и фазовые преобразования.

При преобразованиях трансляции

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\psi}'_\sigma(\mathbf{x}) = \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{d}),$$

образующих непрерывную группу с непрерывным параметром смещения $\mathbf{d}$, перестановочные соотношения для операторов $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}'^+(\mathbf{x})$ остаются неизменными, поэтому

$$\hat{\psi}'_\sigma(\mathbf{x}) = \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{d}) = U_{\mathbf{d}} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) U_{\mathbf{d}}^+, \quad (1.2.10)$$

откуда, учитывая соотношения (1.1.18), получим следующее выражение для унитарного оператора $U_{\mathbf{d}}$:

$$U_{\mathbf{d}} = \exp i\hat{\mathcal{P}}_i d_i.$$

Для бесконечно малых трансляций $U_{\mathbf{d}} = 1 + i\hat{\mathcal{P}}_i d_i$. Поэтому оператор импульса $\hat{\mathcal{P}}_i$ является генератором группы трансляций. Легко видеть, что условие инвариантности уравнений движения (1.2.3) выполняется, если гамильтониан системы трансляционно-инвариантен.

Преобразования пространственных поворотов определяются формулами

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\psi}'_\sigma(\mathbf{x}) = R_{\sigma\sigma'}(a) \hat{\psi}_{\sigma'}(a^{-1}\mathbf{x}), \quad (1.2.11)$$

где a — ортогональная трехмерная матрица $a\tilde{a} = 1$ (знак $\sim$ служит для обозначения транспонированной матрицы), определяемая тремя независимыми непрерывными параметрами (например, углами Эйлера), и $R(a)$ — унитарная в спинном пространстве матрица, которая должна удовлетворять групповому соотношению

$$R(a)R(a') = R(aa').$$

Так как операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}'^+(\mathbf{x})$ удовлетворяют одинаковым перестановочным соотношениям, то

$$\hat{\psi}'(\mathbf{x}) = R(a)\hat{\psi}(a^{-1}\mathbf{x}) = U_a\hat{\psi}(\mathbf{x})U_a^+. \quad (1.2.12)$$

Если гамильтониан содержит спинные матрицы s_i в инвариантных комбинациях $(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\mathbf{s}, \mathbf{s}\mathbf{s}'$, как, например, гамильтониан магнитного дипольного взаимодействия (1.1.24), то условие инвариантности гамильтониана будет выполнено.

Бесконечно малым поворотам в спиновом и конфигурационном пространствах соответствует унитарный оператор

$$\hat{U}_a = 1 + \frac{i}{2}\varepsilon_{ik}\hat{J}_{ik}, \quad \hat{J}_{ik} = -\hat{J}_{ki},$$

где $\hat{J}_{ik}$ — генератор группы поворотов. Подставляя это выражение в (1.2.12) и ограничиваясь линейными по ε_{ik} членами, получим

$$[\hat{J}_{ik}, \hat{\psi}(\mathbf{x})] = -\{s_{ik} + i(x_k\nabla_i - x_i\nabla_k)\}\hat{\psi}(\mathbf{x}). \quad (1.2.13)$$

Сравнение этой формулы с (1.1.18) показывает, что

$$\hat{J}_{ik} = \varepsilon_{ikl}\hat{J}_l, \quad (1.2.14)$$

где $\hat{J}_l$ — оператор полного углового момента, и матрица s_{ik} связана со спинной матрицей s_l соотношением $s_{ik} = \varepsilon_{ikl}s_l$.

Если же гамильтониан инвариантен по отношению к поворотам спинов, то

$$\hat{\psi}'(\mathbf{x}) = R(a)\hat{\psi}(\mathbf{x}) = U_a\hat{\psi}(\mathbf{x})U_a^+ \quad (1.2.15)$$

причем для бесконечно малых поворотов

$$\hat{U}_a = 1 + \frac{i}{2}\varepsilon_{ik}\hat{S}_{ik}, \quad R_a = 1 + \frac{i}{2}\varepsilon_{ik}S_{ik}$$

и

$$[\hat{S}_{ik}, \hat{\psi}(\mathbf{x})] = -s_{ik}\hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad a_{ik} = \delta_{ik} + \varepsilon_{ik}, \quad (1.2.16)$$

Здесь $\hat{S}_{ik}$ — генераторы спинных поворотов, определяемые формулами

$$\hat{S}_{ik} = \varepsilon_{ikl}\hat{S}_l, \quad \hat{S}_i = \int d^3x \hat{s}_i(\mathbf{x}),$$

$\hat{s}_l(\mathbf{x})$ — оператор плотности спина (см. (1.1.17)).

Аналогично можно рассмотреть повороты только в конфигурационном пространстве, для генераторов которых справедлива формула

$$[\hat{\mathcal{L}}_{ik}, \hat{\psi}(\mathbf{x})] = -\{i(x_k\nabla_i - x_i\nabla_k)\}\hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad (1.2.17)$$

где $\hat{\mathcal{P}}_{ik} = \varepsilon_{ikl} \hat{\mathcal{P}}_l$ и $\hat{\mathcal{P}}_l$ — оператор орбитального момента количества движения (см. (1.1.16)). Очевидно имеют место соотношения

$$\begin{aligned} i[\hat{J}_i, \hat{J}_k] &= -\varepsilon_{ikl} \hat{J}_l, & i[\hat{S}_i, \hat{S}_k] &= -\varepsilon_{ikl} \hat{S}_l, \\ i[\hat{\mathcal{P}}_i, \hat{\mathcal{P}}_k] &= -\varepsilon_{ikl} \hat{\mathcal{P}}_l. \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

К числу непрерывных преобразований, оставляющих инвариантными уравнения квантовой механики, относятся также фазовые преобразования

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\psi}'(\mathbf{x}) = e^{-i\alpha} \hat{\psi}(\mathbf{x}),$$

где α — произвольное вещественное число. Операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}'^+(\mathbf{x})$ удовлетворяют одинаковым перестановочным соотношениям и одинаковым уравнениям движения, если предположить, что гамильтониан содержит одинаковое число операторов $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ и $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$. Поэтому операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}'^+(\mathbf{x})$ связаны между собой унитарным преобразованием U_α , действующим в гильбертовом пространстве и не зависящим от времени:

$$\hat{\psi}'(\mathbf{x}) = e^{-i\alpha} \hat{\psi}(\mathbf{x}) = U_\alpha \hat{\psi}(\mathbf{x}) U_\alpha^+. \quad (1.2.19)$$

Отсюда, учитывая перестановочные соотношения для операторов $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$, получим

$$U_\alpha = \exp i\alpha \hat{N}. \quad (1.2.20)$$

Для бесконечно малого фазового преобразования $U_\alpha = 1 + i\alpha \hat{N}$. Поэтому оператор числа частиц $\hat{N}$ представляет собой генератор группы фазовых преобразований.

Перейдем теперь к изучению преобразований Галилея. Рассмотрим с этой целью унитарное преобразование $U_{\mathbf{u}}(t)$, явно зависящее от времени

$$U_{\mathbf{u}}(t) = \exp \left\{ -iu_i \int d^3x x_i \hat{n}(\mathbf{x}) + iu_i \hat{\mathcal{P}}_i t \right\}. \quad (1.2.21)$$

Используя известное соотношение Бейкера–Хаусдорфа

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right), \quad (1.2.22)$$

справедливое, если $[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}] = [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] = 0$, и учитывая, что оператор

$$\left[\int d^3x x_i m \hat{n}(\mathbf{x}), \hat{\mathcal{P}}_k \right] = im \delta_{ik} \hat{N}$$

коммутирует как с оператором импульса $\hat{\mathcal{P}}_i$, так и с оператором $\int d^3x x_k m \hat{n}(\mathbf{x})$, унитарный оператор $U_{\mathbf{u}}(t)$ перепишем в виде

$$U_{\mathbf{u}}(t) = \exp\left(u_i \hat{\mathcal{P}}_i t + \frac{u^2}{2} m \hat{N} t\right) \exp\left\{-i u_i \int d^3x x_i m \hat{n}(\mathbf{x})\right\}. \quad (1.2.23)$$

Следовательно, согласно (1.2.3), уравнения движения для статистического оператора $\hat{\rho}(t)$ будут инвариантны по отношению к унитарному преобразованию $U_{\mathbf{u}}(t)$, если гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ удовлетворяет соотношению

$$U_{\mathbf{u}}(t) \hat{\mathcal{H}} U_{\mathbf{u}}^+(t) = \hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{P}}_i u_i + \frac{u^2}{2} m \hat{N}. \quad (1.2.24)$$

Наряду с этой формулой, очевидно, имеют место соотношения

$$U_{\mathbf{u}}(t) \hat{\mathcal{P}}_i U_{\mathbf{u}}^+(t) = \hat{\mathcal{P}}_i + u_i \hat{N}, \quad U_{\mathbf{u}}(t) \hat{N} U_{\mathbf{u}}^+(t) = \hat{N}, \quad U_{\mathbf{u}}(t) \hat{S}_i U_{\mathbf{u}}^+(t) = \hat{S}_i. \quad (1.2.25)$$

Гамильтонианы, удовлетворяющие соотношению (1.2.23), называются галилеево-инвариантными. Гамильтонианы (1.1.23), (1.1.24) являются галилеево-инвариантными. Связь унитарных преобразований $U_{\mathbf{u}}(t)$ с преобразованиями Галилея проясняет формула

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{\psi}'_t(\mathbf{x}) \equiv U_{\mathbf{u}}^+(t) \hat{\psi}(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}(t) = \hat{\psi}(\mathbf{x} + \mathbf{u}t) \exp\left\{-i\left(m\mathbf{u}\mathbf{x} - \frac{m\mathbf{u}^2}{2}t\right)\right\}, \quad (1.2.26)$$

показывающая, что если $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ — оператор уничтожения частицы в точке $\mathbf{x}$, то $\hat{\psi}'_t(\mathbf{x})$ — оператор уничтожения частицы в точке $\mathbf{x} + \mathbf{u}t$. Дифференцируя соотношение (1.2.23) по $\mathbf{u}$ и полагая затем $\mathbf{u} = 0$, приходим к равенству

$$i\left[\hat{\mathcal{H}}, \int d^3x x_k m \hat{n}(\mathbf{x})\right] - \hat{\mathcal{P}}_k = 0,$$

описывающему равномерное движение центра инерции системы.

Определим теперь операторы плотностей потоков физических величин. С этой целью предварительно покажем, что оператор производной по времени произвольного квазилокального оператора $\hat{a}(\mathbf{x})$ в представлении Шредингера $\hat{a}(\mathbf{x}) \equiv i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}(\mathbf{x})]$ может быть представлен в виде [8]:

$$\dot{\hat{a}}(\mathbf{x}) = -i[\hat{A}, \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})] - \nabla_k \hat{a}_k(\mathbf{x}), \quad (1.2.27)$$

где $\hat{\varepsilon}(\mathbf{x})$ — оператор плотности энергии, $\hat{A} \equiv \int d^3x \hat{a}(\mathbf{x})$ и

$$\hat{a}_k(\mathbf{x}) = i \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{a}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')]. \quad (1.2.28)$$

Для доказательства убедимся сначала в справедливости соотношений

$$i[\hat{A}, \hat{a}(\mathbf{x})] = -\nabla_k \hat{a}'_k(\mathbf{x}), \quad (1.2.29)$$

$$i[\hat{A}, \hat{b}(\mathbf{x})] = -i[\hat{B}, \hat{a}(\mathbf{x})] - \nabla_k \hat{b}_k(\mathbf{x}), \quad (1.2.30)$$

где $\hat{a}(\mathbf{x})$, $\hat{b}(\mathbf{x})$ — произвольные квазилокальные операторы ($\hat{A} \equiv \int d^3x \hat{a}(\mathbf{x})$, $\hat{B} \equiv \int d^3x \hat{b}(\mathbf{x})$) и

$$\hat{a}'_k(\mathbf{x}) = i \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{a}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{a}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')],$$

$$\hat{b}_k(\mathbf{x}) = i \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{a}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{b}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')].$$

Представим для этого оператор $i[\hat{A}, \hat{a}(\mathbf{x})]$ в виде

$$i[\hat{A}, \hat{a}(\mathbf{x})] = \frac{i}{2} \int d^3x' \{[\hat{a}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \hat{a}(\mathbf{x})] - [\hat{a}(\mathbf{x}), \hat{a}(\mathbf{x} + \mathbf{x}')]\},$$

или

$$i[\hat{A}, \hat{a}(\mathbf{x})] = \frac{i}{2} \int d^3x' \int_0^1 d\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} [\hat{a}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}'), \hat{a}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}')].$$

Замечая, что величина λ входит в коммутатор только в комбинации $\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}'$, можно переписать эту формулу в виде

$$i[\hat{A}, \hat{a}(\mathbf{x})] = \nabla_k \frac{i}{2} \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{a}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}'), \hat{a}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}')],$$

откуда и следует (1.2.28). Чтобы убедиться в справедливости (1.2.29), заменим в (1.2.28) оператор $\hat{a}(\mathbf{x})$ на $\hat{a}(\mathbf{x}) + \hat{b}(\mathbf{x})$ и выделим члены типа ab . В результате получим (1.2.29).

Отметим, что если операторы $\hat{a}(\mathbf{x})$, $\hat{b}(\mathbf{x})$ — эрмитовы, то и операторы $\hat{a}_k(\mathbf{x})$, $\hat{b}_k(\mathbf{x})$ будут эрмитовыми. Кроме того, они являются квазилокальными, так как в силу перестановочных соотношений (1.1.8), (1.1.9) операторы $\hat{a}_k(\mathbf{x})$, $\hat{b}_k(\mathbf{x})$ содержат операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x}')$, $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}')$, аргументы которых близки к точке $\mathbf{x}$. Из (1.2.29) сразу следует формула (1.2.26).

Формула (1.2.26) вместе с требованиями симметрии гамильтониана позволяет выразить операторы плотностей потоков аддитивных интегралов движения в терминах операторов плотностей физических величин.

Полагая в формуле (1.2.26) $\hat{a}(\mathbf{x}) = \hat{n}(\mathbf{x})$ и учитывая требование фазовой инвариантности

$$i[\hat{N}, \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})] = 0, \quad \hat{N} \equiv \int d^3x \hat{n}(\mathbf{x}),$$

получим

$$\dot{\hat{n}}(\mathbf{x}) = -\nabla_k \hat{j}_k(\mathbf{x}), \quad (1.2.31)$$

где, согласно (1.2.27),

$$\hat{j}_k(\mathbf{x}) = i \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{n}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')] \quad (1.2.32)$$

— оператор плотности потока числа частиц.

Полагая далее в (1.2.26) $\hat{a}(\mathbf{x}) = \hat{\pi}_i(\mathbf{x})$ и замечая, что

$$i[\hat{\mathcal{P}}_i, \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})] = -\nabla_i \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}),$$

(требование трансляционной инвариантности гамильтониана), получим

$$\dot{\hat{\pi}}_i(\mathbf{x}) = -\nabla_k \hat{t}_{ik}(\mathbf{x}), \quad (1.2.33)$$

где, согласно (1.2.27),

$$\hat{t}_{ik}(\mathbf{x}) = -\hat{\varepsilon}(\mathbf{x})\delta_{ik} + i \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{\pi}_i(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')]. \quad (1.2.34)$$

Эта величина представляет собой оператор плотности потока импульса (тензор натяжений).

Полагая теперь в формуле (1.2.26) $\hat{a}(\mathbf{x}) = \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})$ и замечая, что

$$i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})] = \dot{\hat{\varepsilon}}(\mathbf{x}),$$

получим

$$\dot{\hat{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = -\nabla_k \hat{q}_k(\mathbf{x}), \quad (1.2.35)$$

где, согласно (1.2.27),

$$\hat{q}_k(\mathbf{x}) = \frac{i}{2} \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{\varepsilon}(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')]. \quad (1.2.36)$$

Эта величина представляет собой оператор плотности потока энергии.

Рассмотрим, наконец, требование вращательной инвариантности гамильтониана и сформулируем получающиеся при этом дифференциальные законы сохранения. Полагая в (1.2.26) $\hat{a}(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{g}}_i(\mathbf{x})$ ($\hat{\mathbf{g}}_i(\mathbf{x}) = \hat{s}_i(\mathbf{x}) + \hat{l}_i(\mathbf{x})$ — оператор плотности полного углового момента) и учитывая вращательную инвариантность оператора плотности энергии $\hat{\varepsilon}(\mathbf{x})$

$$i[\hat{J}_i, \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})] = -\varepsilon_{ikl} x_k \nabla_l \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}), \quad (1.2.37)$$

получим

$$\dot{\hat{g}}_i(\mathbf{x}) = -\nabla_k \hat{j}_{ik}(\mathbf{x}), \quad (1.2.38)$$

где

$$\hat{j}_{ik}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ikl} x_l \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}) + i \int d^3 x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{j}_i(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')]. \quad (1.2.39)$$

Оператор плотности момента $\hat{g}_i(\mathbf{x})$ содержит как трансляционно-инвариантную часть — оператор плотности спина $\hat{s}_i(\mathbf{x})$, так и оператор орбитального момента $\hat{l}_i(\mathbf{x})$, не обладающий этой инвариантностью. В связи с этим заметим, что как левая, так и правая части уравнения (1.2.37) содержат члены, не зависящие явно от координаты $\mathbf{x}$ и члены, линейные по явной зависимости от координаты $\mathbf{x}$. Последние в силу уравнения баланса для импульса (1.2.32) сокращаются. В результате в уравнении (1.2.37) остаются только члены, не зависящие явно от $\mathbf{x}$. Таким образом, уравнение (1.2.37) с использованием определения тензора натяжений (1.2.33) легко преобразовать к виду

$$\dot{\hat{s}}_i(\mathbf{x}) = \varepsilon_{ikl} \hat{t}_{kl}(\mathbf{x}) - \nabla_k \hat{g}_{ik}(\mathbf{x}), \quad (1.2.40)$$

где

$$\hat{g}_{ik}(\mathbf{x}) \equiv \hat{s}_{ik}(\mathbf{x}) + \hat{s}'_{ik}(\mathbf{x}). \quad (1.2.41)$$

Здесь $\hat{s}_{ik}(\mathbf{x})$ — оператор плотности потока спина (смотри далее)

$$\hat{s}_{ik}(\mathbf{x}) = i \int d^3 x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{s}_i(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')] \quad (1.2.42)$$

и

$$\hat{s}'_{ik}(\mathbf{x}) = i \varepsilon_{isp} \int d^3 x' x'_k x'_s \int_0^1 d\lambda \lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}'), \hat{\pi}_p(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')]. \quad (1.2.43)$$

В силу (1.1.18), (1.1.21) оператор $\hat{s}'_{ik}(\mathbf{x})$ трансляционно-инвариантен.

До сих пор мы считали, что гамильтониан обладает симметрией относительно совместных спиновых и пространственных поворотов. Рассмотрим теперь гамильтониан, инвариантный по отношению к поворотам отдельно в спиновом $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}_\alpha] = 0$ и конфигурационном $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}_i] = 0$ пространствах. В этом случае удобно записывать спиновый индекс оператора спина греческими буквами, для того чтобы подчеркнуть различие в трансформационных свойствах этого оператора и оператора орбитального момента.

Уравнение движения для оператора плотности спина $\hat{s}_i(\mathbf{x})$ имеет согласно (1.2.39) вид

$$\dot{\hat{s}}_\alpha(\mathbf{x}) = -\nabla_k \hat{s}_{\alpha k}(\mathbf{x}), \quad (1.2.44)$$

где оператор $\hat{s}_{\alpha k}(\mathbf{x})$ определяется формулой (1.2.41). При получении этого соотношения из (1.2.39) необходимо учесть, что в силу (1.2.33)

$$\begin{aligned} \nabla_k \hat{s}'_{ik}(\mathbf{x}) &= i\varepsilon_{isp} \int d^3 x' x'_s \int_0^1 d\lambda \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1 - \lambda)\mathbf{x}'), \hat{\pi}_p(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')] = \\ &= \varepsilon_{ikl} \hat{t}_{kl}(\mathbf{x}) + i\varepsilon_{isp} \int d^3 x' x'_s [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}), \hat{\pi}_p(\mathbf{x} + \mathbf{x}')], \end{aligned}$$

причем последнее слагаемое в правой части обращается в нуль в силу инвариантности гамильтониана относительно пространственных поворотов:

$$i[\hat{\mathcal{L}}_i, \hat{\varepsilon}(\mathbf{x})] = -\varepsilon_{ikl} x_k \nabla_l \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}).$$

В общем случае законы сохранения, связанные с инвариантностью гамильтониана относительно преобразований внутренней симметрии, могут характеризоваться набором генераторов $\hat{T}_\alpha$ ($\alpha = 1, \dots, n$) (аддитивных интегралов движения):

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{T}_\alpha] = 0, \quad \hat{T}_\alpha = \int d^3 x \hat{t}_\alpha(\mathbf{x}). \quad (1.2.45)$$

Плотности интегралов движения $\hat{t}_\alpha(\mathbf{x})$ удовлетворяют соотношениям (см. (1.2.9)):

$$i[\hat{t}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{t}_\beta(\mathbf{x}')] = f_{\alpha\beta}{}^\gamma \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{t}_\gamma(\mathbf{x}), \quad (1.2.46)$$

где $f_{\alpha\beta}{}^\gamma$ — структурные постоянные группы внутренней симметрии. В дифференциальной форме законы сохранения, связанные с внутренними симметриями, записываются в виде

$$\begin{aligned} i[\hat{\mathcal{H}}, \hat{t}_\alpha(\mathbf{x})] &= -\nabla_k \hat{t}_{\alpha k}(\mathbf{x}), \\ \hat{t}_{\alpha k}(\mathbf{x}) &= i \int d^3 x' x'_k \int_0^1 d\lambda [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x} - (1 - \lambda)\mathbf{x}'), \hat{t}_\alpha(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}')]. \end{aligned} \quad (1.2.47)$$

Найдем теперь законы преобразования плотностей физических величин при преобразовании Галилея, задаваемым унитарным преобразованием (1.2.22). Оператор $U_{\mathbf{u}}(t)$ при $t = 0$ будем обозначать в дальнейшем через $U_{\mathbf{u}}$

$$U_{\mathbf{u}} = \exp \left\{ -i\mathbf{u} \int d^3 x \mathbf{x} m \hat{n}(\mathbf{x}) \right\}. \quad (1.2.48)$$

Заметим, что шредингеровский оператор $\hat{\psi}(\mathbf{x})$, согласно (1.2.25), при унитарном преобразовании $U_{\mathbf{u}}$ преобразуется по формуле

$$U_{\mathbf{u}} \hat{\psi}(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ = \hat{\psi}(\mathbf{x}) \exp i(m\mathbf{u}\mathbf{x}). \quad (1.2.49)$$

Используя выражения (1.1.17), (1.1.25) для операторов $\hat{\varepsilon}(\mathbf{x})$, $\hat{\pi}_k(\mathbf{x})$, $\hat{n}(\mathbf{x})$, $\hat{s}_\alpha(\mathbf{x}) \equiv \hat{\zeta}_a(\mathbf{x})$ ($a \equiv 0, k, 4, \alpha$), получим

$$\begin{aligned} U_{\mathbf{u}} \hat{n}(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ &= \hat{n}(\mathbf{x}), \quad U_{\mathbf{u}} \hat{\pi}_i(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ = \hat{\pi}_i(\mathbf{x}) + u_i m \hat{n}(\mathbf{x}), \\ U_{\mathbf{u}} \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ &= \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}), \quad U_{\mathbf{u}} \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ = \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}) + u_i \hat{\pi}_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} m u^2 \hat{n}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.2.50)$$

Таким образом, преобразованные операторы $U_{\mathbf{u}} \hat{\zeta}_a(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+$ являются линейной комбинацией исходных операторов $\hat{\zeta}_a(\mathbf{x})$ с коэффициентами, зависящими от параметра преобразования $\mathbf{u}$. Из формулы (1.2.31) и явного вида гамильтонианов (1.1.23), (1.1.24) следует совпадение операторов плотности потока массы с оператором плотности импульса

$$m \hat{j}_k(\mathbf{x}) = \hat{\pi}_k(\mathbf{x}). \quad (1.2.51)$$

Чтобы установить трансформационные свойства плотностей потоков при преобразовании Галилея, воспользуемся явным видом этих операторов и учтем формулы (1.2.49). В результате получим

$$\begin{aligned} U_{\mathbf{u}} \hat{j}_i(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ &= \hat{j}_i(\mathbf{x}) + u_i \hat{n}(\mathbf{x}), \quad U_{\mathbf{u}} \hat{j}_{\alpha i}(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ = \hat{j}_{\alpha i}(\mathbf{x}) + u_i \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}), \\ U_{\mathbf{u}} \hat{t}_{kl}(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ &= \hat{t}_{kl}(\mathbf{x}) + u_k \hat{\pi}_l(\mathbf{x}) + u_l \hat{\pi}_k(\mathbf{x}) + u_i u_k m \hat{n}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.2.52)$$

$$\begin{aligned} U_{\mathbf{u}} \hat{q}_l(\mathbf{x}) U_{\mathbf{u}}^+ &= \hat{q}_l(\mathbf{x}) + u_k \hat{t}_{kl}(\mathbf{x}) + u_l \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}) + u_k u_l \hat{\pi}_k(\mathbf{x}) + \\ &+ \frac{1}{2} u^2 (\hat{\pi}_l(\mathbf{x}) + u_l m \hat{n}(\mathbf{x})). \end{aligned}$$

Эти формулы будут использованы нами в дальнейшем при выводе уравнений гидродинамики квантовых жидкостей.

В заключение раздела рассмотрим инвариантность уравнений квантовой механики относительно пространственного отражения и обращения времени:

$$\begin{aligned} 1) \quad x_i &\rightarrow x'_i = -x_i, \quad t \rightarrow t' = t, \\ 2) \quad x_i &\rightarrow x'_i = x_i, \quad t \rightarrow t' = -t. \end{aligned} \quad (1.2.53)$$

Рассмотрим сначала преобразование пространственного отражения. Операторы уничтожения в представлении Гейзенберга $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \equiv \exp(i\hat{\mathcal{H}}t) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \exp(-i\hat{\mathcal{H}}t)$ преобразуются согласно формуле

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}'(\mathbf{x}', t) = \hat{\psi}(\mathbf{x}, t). \quad (1.2.54)$$

Так как операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяют одинаковым перестановочным соотношениям и одинаковым уравнениям движения (предполагается, что оператор $\hat{V}(\mathbf{x})$, входящий в гамильтониан (1.1.23), является четным, $\hat{V}(\mathbf{x}) = \hat{V}(-\mathbf{x})$), то они связаны между собой унитарным преобразованием $\hat{P}$, не зависящим от времени:

$$\hat{\psi}'(\mathbf{x}, t) = \hat{\psi}(-\mathbf{x}, t) = \hat{P} \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \hat{P}^+. \quad (1.2.55)$$

Отсюда следует, что $[\hat{P}^2, \hat{\psi}(\mathbf{x}, t)] = 0$. Учитывая, что оператор $\hat{P}$ определен с точностью до фазового множителя и замечая, что произвольный оператор, коммутирующий с операторами $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ и $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}, t)$ кратен единичному, можно считать, что $\hat{P}^2 = 1$ и, следовательно, собственные значения оператора $\hat{P}$ равны ± 1 . Оператор $\hat{P}$ называется оператором пространственной четности. В соответствии с выражениями плотностей аддитивных интегралов движения $\hat{\zeta}_a(\mathbf{x}) \equiv (\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}), \hat{\pi}_k(\mathbf{x}), \hat{n}(\mathbf{x}), \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}))$ ($a = 0, k, 4, \alpha$) в терминах полевых операторов (1.1.17), (1.1.22), (1.1.25) и соотношением (1.2.54), получим трансформационные соотношения

$$\hat{P}\hat{\zeta}_a(\mathbf{x})\hat{P}^+ = \varepsilon_a\hat{\zeta}_a(-\mathbf{x}), \quad (1.2.56)$$

где множитель

$$\varepsilon_a \equiv \delta_{a0} + \delta_{a4} + \delta_{a\alpha} - \delta_{ak}. \quad (1.2.57)$$

называется пространственной сигнатурой оператора $\hat{\zeta}_a(\mathbf{x})$. Принимая во внимание вид операторов плотностей потоков (1.2.31), (1.2.33), (1.2.35), (1.2.41) и формулу (1.2.55), найдем

$$\hat{P}\hat{\zeta}_{ak}(\mathbf{x})\hat{P}^+ = -\varepsilon_a\hat{\zeta}_{ak}(-\mathbf{x}). \quad (1.2.58)$$

Рассмотрим теперь дискретное преобразование обращения времени

$$x_i \rightarrow x'_i = x_i, \quad t \rightarrow t' = -t. \quad (1.2.59)$$

Обращению времени соответствует следующее преобразование $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}'(\mathbf{x}', t') = T\hat{\psi}^*(\mathbf{x}, t), \quad (1.2.60)$$

где T — унитарная матрица, $TT^+ = 1$, действующая на спинорные индексы $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$, и знак $*$ служит для обозначения операции комплексного сопряжения. Легко видеть, что $[T^2, \hat{\psi}(\mathbf{x}, t)] = 0$. Эта операция зависит от выбора базиса в гильбертовом пространстве. Именно, если выбран определенный базис в гильбертовом пространстве, то в нем операция комплексного сопряжения определяется формулой

$$\langle n|\psi^*|n'\rangle = \langle n|\psi|n'\rangle^*. \quad (1.2.61)$$

Так как операторы $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяют одинаковым перестановочным соотношениям, то они связаны унитарным оператором $\hat{T}$, действующим в гильбертовом пространстве:

$$\hat{\psi}'(\mathbf{x}, t) = \hat{T}\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)\hat{T}^+ = T\hat{\psi}^*(\mathbf{x}, -t). \quad (1.2.62)$$

Зная выражения для операторов аддитивных интегралов движения (1.1.17), (1.1.25) и используя соотношение (1.2.61), легко установить справедливость соотношений

$$\hat{T}\hat{\zeta}_a(\mathbf{x})\hat{T}^+ = \varepsilon_a\hat{\zeta}_a^*(\mathbf{x}). \quad (1.2.63)$$

Здесь величина

$$\varepsilon_a \equiv \delta_{a0} + \delta_{a4} - \delta_{a\alpha} - \delta_{ak} \quad (1.2.64)$$

представляет собой временную сигнатуру оператора $\hat{\zeta}_a(\mathbf{x})$. Используя далее выражения для операторов плотностей потоков в терминах операторов плотностей, получим

$$\hat{T}\hat{\zeta}_{ak}(\mathbf{x})\hat{T}^+ = -\varepsilon_a\hat{\zeta}_{ak}^*(\mathbf{x}). \quad (1.2.65)$$

§ 2. Состояние равновесия конденсированных сред

2.1. Пространственное ослабление корреляций и эргодическое соотношение. Статистический оператор Гиббса. Теорема о связи потоков. Для изучения свойств макроскопических систем — систем, состоящих из очень большого числа взаимодействующих частиц, находящихся внутри некоторого объема V , целесообразно осуществить предельный переход, при котором число частиц N и линейные размеры области V стремятся к бесконечности, так что $N/V < \infty$ (термодинамический предельный переход). Этот переход осуществляется в средних значениях локальных физических величин. Именно, если среднее значение $\langle \hat{a}(\mathbf{x}) \rangle_V \equiv \text{Sp } \hat{\rho}(V) \hat{a}(\mathbf{x})$ ($\hat{\rho}(V)$ — статистический оператор, относящийся к объему V и $\hat{a}(\mathbf{x})$ — оператор физической величины в точке $\mathbf{x}$), то термодинамическому предельному переходу соответствует вычисление $\lim_{V \rightarrow \infty} \langle \hat{a}(\mathbf{x}) \rangle_V$. Всюду далее мы полагаем, что операция Sp включает термодинамический предельный переход:

$$\text{Sp } \hat{\rho} \hat{a}(\mathbf{x}) \equiv \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Sp } \hat{\rho}(V) \hat{a}(\mathbf{x}).$$

Основным принципом статистической физики является принцип пространственного ослабления корреляций [9, 10], отражающий общую закономерность реальных физических систем. Статистический оператор $\hat{\rho}$ удовлетворяет принципу пространственного ослабления корреляций, если для любых квазилокальных операторов $\hat{a}(\mathbf{x}), \hat{b}(\mathbf{y})$ имеет место соотношение

$$\text{Sp } \hat{\rho} \hat{a}(\mathbf{x}) \hat{b}(\mathbf{y}) \xrightarrow{|\mathbf{x}-\mathbf{y}| \rightarrow \infty} \text{Sp } \hat{\rho} \hat{a}(\mathbf{x}) \text{Sp } \hat{\rho} \hat{b}(\mathbf{y}). \quad (2.1.1)$$

Соотношение (2.1.1) выполняется при $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq r_c$, где r_c — радиус корреляций в состоянии $\hat{\rho}$ и, предельный переход $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ в этой формуле совершается после термодинамического предельного перехода. В силу канонических перестановочных соотношений для полевых операторов $\hat{\psi}, \hat{\psi}^+$ при унитарном преобразовании

$$\hat{a}(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{a}'(\mathbf{x}) = \exp(i\hat{B})\hat{a}(\mathbf{x})\exp(-i\hat{B}), \quad \hat{B} = \int d^3x \hat{b}(\mathbf{x}), \quad (2.1.2)$$

сохраняется свойство квазилокальности операторов. Отсюда и из (1.1.5) следует, что если начальный статистический оператор $\hat{\rho}$ удовле-

творяет принципу пространственного ослабления корреляций (2.1.1), то этот принцип имеет место и во все последующие моменты времени. В отличие от линейного уравнения Лиувилля — фон Неймана (1.1.5), соотношение (2.1.1) является нелинейным, что приводит к нелинейности уравнений макроскопической физики. Если $\hat{a}(\mathbf{x})$ — некоторый квазилокальный оператор, то можно доказать, по крайней мере в теории возмущений (см. [10]), что статистический оператор

$$\hat{\rho}(\hat{a}, V) = \exp\left(\Omega - \int_V d^3x \hat{a}(\mathbf{x})\right), \quad (2.1.3)$$

удовлетворяет принципу пространственного ослабления корреляций. Величина Ω находится из условия нормировки $\text{Sp } \hat{\rho} = 1$. Мы будем считать, что справедливо и обратное утверждение: если статистический оператор $\hat{\rho}$ удовлетворяет принципу пространственного ослабления корреляций, то он имеет структуру (2.1.3). Отметим, что в этой формуле $\hat{\rho}(V)$ соответствует большому неравновесному статистическому ансамблю.

Принцип ослабления корреляций определяет асимптотическое поведение средних при пространственном «раздвижении» аргументов. Статистическая механика нуждается еще в другом принципе, касающемся асимптотического поведения средних в области больших времен. Он формулируется в виде эргодического соотношения [11–13]. Будем полагать, что для произвольного неравновесного статистического оператора $\hat{\rho}$, удовлетворяющего принципу пространственного ослабления корреляций, справедливо эргодическое соотношение

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{Sp } e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{\rho} e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{a}(\mathbf{x}) = \text{Sp } \hat{w} \hat{a}(\mathbf{x}). \quad (2.1.4)$$

Это соотношение математически отражает факт перехода неравновесного состояния в процессе эволюции в состояние статистического равновесия. В символической записи это соотношение записывается в виде

$$\hat{\rho}(t) \equiv e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{\rho} e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \hat{w} = \exp(\Omega - Y_a \hat{\gamma}_a), \quad (2.1.5)$$

где $\hat{w}$ — равновесный статистический оператор Гиббса. В этой формуле Y_a — термодинамические силы, сопряженные аддитивным интегралам движения $\hat{\gamma}_a \equiv (\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{P}}_k, \hat{N}, \hat{S}_\alpha)$. Здесь и далее нам достаточно рассматривать ситуацию, когда набор генераторов группы внутренних симметрий состоит только из операторов числа частиц и спина. Поэтому $a = 0, k, 4, \alpha$. Термодинамический потенциал Ω определяется из условия нормировки $\text{Sp } \hat{w} = 1$. Набор термодинамических сил включает в себя $Y_0^{-1} \equiv T$ — температуру, $-Y_k/Y_0 \equiv v_k$ — скорость системы, $-Y_4/Y_0 \equiv \mu$ — химический потенциал, $-Y_\alpha/Y_0 \equiv h_\alpha$ — эффективное магнитное поле.

Соотношение (2.1.5) становится справедливым, когда время t превосходит некоторое значение τ_r , которое называется временем ре-

лаксации. Для пространственно-однородных состояний, неравновесный статистический оператор которых удовлетворяет соотношению

$$[\hat{\rho}, \hat{\mathcal{P}}_k] = 0, \quad (2.1.6)$$

время релаксации τ_r обычно определяется быстрыми микроскопическими процессами, приводящими к установлению статистического равновесия, которое описывается оператором Гиббса. В случае пространственно-неоднородных состояний время τ_r значительно больше, так как в основном оно определяется медленными процессами переноса.

Установим связь начального пространственно-однородного неравновесного статистического оператора с термодинамическими параметрами. С этой целью введем в рассмотрение плотность термодинамического потенциала

$$\omega(Y) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\Omega}{V} = - \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \text{Sp} \exp(-Y_a \hat{\gamma}_a). \quad (2.1.7)$$

Если начальный статистический оператор $\hat{\rho}$ удовлетворяет условию (2.1.6), то следствием соотношений (2.1.4), (2.1.7) является равенство

$$\zeta_a = \text{Sp} \hat{w}(Y) \hat{\zeta}_a(\mathbf{x}) = \text{Sp} \hat{\rho} \hat{\zeta}_a(0) = \frac{\partial \omega(Y)}{\partial Y_a}, \quad (2.1.8)$$

связывающее термодинамические силы Y_a с начальным статистическим оператором $\hat{\rho}$. Из соотношения (2.1.7) следует равенство

$$d\omega = \zeta_a dY_a, \quad (2.1.9)$$

имеющее физический смысл второго начала термодинамики для обратимых процессов нормальной конденсированной среды. Формулы (2.1.5)–(2.1.9) определяют эргодическое соотношение для нормальных конденсированных сред. Состояние статистического равновесия в этом случае характеризуется только термодинамическими силами, связанными с аддитивными интегралами движения. Для нормальных конденсированных сред эта ситуация является общей.

Существует другой важный класс равновесных состояний, для которых выписанное эргодическое соотношение не справедливо. Такие состояния называются вырожденными или состояниями со спонтанно нарушенной симметрией [14–21]. Физика явлений сверхтекучести и сверхпроводимости, кристаллическое и жидкокристаллическое упорядочение, разнообразные магнитные системы являются примерами такого рода состояний. Качественно физические свойства таких систем связывают с понятием параметра порядка [22]. Эта величина является существенной при описании фазовых переходов из одного состояния равновесия в другое состояние, обладающее иными свойствами симметрии. Проблеме описания таких состояний равновесия посвящен раздел 2.2.

Возвращаясь к нормальным состояниям равновесия, отметим, что условие пространственной однородности (2.1.6) выполняется при всех

временах, если оно выполняется для начального момента времени и если $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{P}}_k] = 0$. Поэтому

$$[\hat{w}, \hat{\mathcal{P}}_k] = 0, \quad (2.1.10)$$

что находится в соответствии с явным видом статистического оператора $\hat{w}$ (2.1.5). Свойства симметрии равновесного статистического оператора следует дополнить равенствами

$$[\hat{w}, \hat{\mathcal{H}}] = 0, \quad [\hat{w}, \hat{N}] = 0, \quad (2.1.11)$$

которые вместе с (2.1.10) отражают трансляционную, временную и фазовую инвариантность состояния равновесия нормальных систем. Наличие интегралов движения — операторов орбитального и спинового момента $\hat{\mathcal{L}}_i$, $\hat{S}_\alpha$ — позволяет сформулировать соответствующие свойства симметрии равновесного статистического оператора. С этой целью введем в рассмотрение обобщенные операторы орбитального и спинового момента:

$$\begin{aligned} \hat{L}_i^{\mathbf{Y}} &\equiv \hat{\mathcal{L}}_i + \hat{\mathcal{L}}_i^{\mathbf{Y}}, \quad \hat{\mathcal{L}}_i^{\mathbf{Y}} \equiv -i\varepsilon_{ikl}Y_k \frac{\partial}{\partial Y_l}, \\ \hat{\Sigma}_\alpha^{\mathbf{Y}} &\equiv \hat{S}_\alpha + \hat{S}_\alpha^{\mathbf{Y}}, \quad \hat{S}_\alpha^{\mathbf{Y}} \equiv -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}Y_\beta \frac{\partial}{\partial Y_\gamma}, \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

действующие как в гильбертовом пространстве, так и в пространстве термодинамических функций. Справедливы соотношения $i[\hat{\mathcal{L}}_i^{\mathbf{Y}}, Y_j] = \varepsilon_{ikj}Y_k$, $i[\hat{S}_\alpha^{\mathbf{Y}}, Y_\rho] = \varepsilon_{\alpha\beta\rho}Y_\beta$. В силу коммутационных соотношений (1.1.19) и явного вида операторов (2.1.12) имеем

$$i[\hat{L}_i^{\mathbf{Y}}, \hat{L}_k^{\mathbf{Y}}] = -\varepsilon_{ikl}\hat{L}_l^{\mathbf{Y}}, \quad i[\hat{\Sigma}_\alpha^{\mathbf{Y}}, \hat{\Sigma}_\beta^{\mathbf{Y}}] = -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\Sigma}_\gamma^{\mathbf{Y}}. \quad (2.1.13)$$

Свойства симметрии равновесного статистического оператора $\hat{w}$ относительно пространственных и спиновых поворотов в терминах введенных операторов (2.1.12) имеют вид

$$[\hat{w}, \hat{L}_k^{\mathbf{Y}}] = 0, \quad [\hat{w}, \hat{\Sigma}_\alpha^{\mathbf{Y}}] = 0. \quad (2.1.14)$$

Условия симметрии относительно поворотов в спиновом и конфигурационном пространствах означают пренебрежение слабыми дипольными и спин-орбитальными взаимодействиями при характеристике состояния равновесия.

Полная группа симметрии нормального состояния равновесия среды имеет вид

$$G = [SO(3)]_S \times [SO(3)]_{\mathcal{G}} \times [U(1)]_\varphi \times [T(3)] \times [T(1)]. \quad (2.1.15)$$

Здесь $[SO(3)]_S$, $[SO(3)]_{\mathcal{G}}$ — группы симметрии относительно поворотов в спиновом и конфигурационном пространствах, $[T(3)]$, $[T(1)]$ — трансляционные группы в пространстве и времени, $[U(1)]_\varphi$ — группа фазовой симметрии. Каждый элемент группы представляет собой

унитарный оператор $U \equiv \exp i\hat{G}g$ (g — действительные параметры преобразования), оставляющий инвариантным распределение Гиббса

$$U\hat{w}U^+ = \hat{w}. \quad (2.1.16)$$

Генераторами преобразований (2.1.16) являются линейные комбинации операторов $\hat{G} \in \{\hat{\Sigma}_\alpha^Y, \hat{L}_i^Y, \hat{N}, \hat{\mathcal{P}}_i, \hat{\mathcal{H}}\}$. Обратим внимание, что свойство инвариантности (2.1.16) имеет место для произвольных параметров преобразования, сопряженных к интегралам движения в силу соотношений симметрии (2.1.10), (2.1.11), (2.1.14). Поэтому средние $\text{Sp } \hat{w}[\hat{G}, \hat{b}(\mathbf{x})]$ обращаются в нуль при произвольном квазилокальном операторе $\hat{b}(\mathbf{x})$. Это, в частности, справедливо и для операторов $\hat{b}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\Delta}_a(\mathbf{x})$, имеющих смысл операторов параметра порядка, не коммутирующих с интегралами движения $\hat{G}$. Индекс a отражает тензорную размерность параметра порядка. Коммутаторы $[\hat{G}, \hat{\Delta}_a(\mathbf{x})]$ линейны и однородны по операторам параметра порядка $\hat{\Delta}_a(\mathbf{x})$, что приводит к обращению в нуль равновесных средних (2.1.4) параметров порядка

$$\text{Sp } \hat{w}\hat{\Delta}_a(\mathbf{x}) = 0$$

в нормальном состоянии, то есть в состоянии, описываемым статистическим оператором Гиббса (2.1.5). В следующем разделе мы покажем, как понятие статистического оператора Гиббса может быть обобщено на вырожденные состояния.

Для нормальных состояний равновесия средние значения плотностей потоков аддитивных интегралов движения можно выразить в терминах термодинамического потенциала. Действительно, усредняя формулы (1.2.31), (1.2.33), (1.2.35), (1.2.41) по этому равновесному состоянию и учитывая (2.1.10), получим равенства

$$\begin{aligned} j_k &= \text{Sp } \hat{w} \hat{j}_k(\mathbf{x}) = -i \int d^3x' x'_k \text{Sp } \hat{w} [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}'), \hat{n}(0)], \\ t_{ik} &= \text{Sp } \hat{w} \hat{t}_{ik}(\mathbf{x}) = -\delta_{ik} \text{Sp } \hat{w} \hat{\varepsilon}(0) - i \int d^3x' x'_k \text{Sp } \hat{w} [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}') \hat{\pi}_i(0)], \\ q_k &= \text{Sp } \hat{w} \hat{q}_k(\mathbf{x}) = -\frac{i}{2} \int d^3x' x'_k \text{Sp } \hat{w} [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}'), \hat{\varepsilon}(0)], \\ s_{\alpha k} &= \text{Sp } \hat{w} \hat{s}_{\alpha k}(\mathbf{x}) = -i \int d^3x' x'_k \text{Sp } \hat{w} [\hat{\varepsilon}(\mathbf{x}'), \hat{s}_\alpha(0)]. \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Начнем с вычисления плотности потока числа частиц j_k . С этой целью рассмотрим унитарный оператор

$$U_{\mathbf{p}} = \exp \left(-ip_i \int d^3x x_i \hat{n}(\mathbf{x}) \right).$$

В силу формул (2.1.5) и (1.2.24) справедливо равенство

$$U_{\mathbf{p}} \hat{w} U_{\mathbf{p}}^+ = e^{\Omega(Y) - U_{\mathbf{p}} \hat{\mathcal{H}} U_{\mathbf{p}}^+ - Y_k (\hat{\mathcal{T}}_k + p_k \hat{N}) - Y_4 \hat{N}}.$$

Дифференцируя равенство $\text{Sp } U_{\mathbf{p}} \hat{w} U_{\mathbf{p}}^+ = 1$ по вектору $\mathbf{p}$ и полагая затем $\mathbf{p} = 0$, получим, согласно формуле (2.1.17) и последнему соотношению,

$$Y_0 j_k + Y_k n = 0. \quad (2.1.18)$$

Отсюда найдем

$$j_k = -\frac{Y_k}{Y_0} n = -\frac{Y_k}{Y_0} \frac{\partial \omega}{\partial Y_4}. \quad (2.1.19)$$

Поэтому вектор $v_k = -Y_k/Y_0$ интерпретируется как скорость системы.

Перейдем к нахождению плотности потока спина. Среднее значение спина в состоянии равновесия можно представить в соответствии с (2.1.8) в виде

$$s_\alpha = \frac{\partial \omega}{\partial Y_\alpha}. \quad (2.1.20)$$

Так как мы рассматриваем конденсированную среду в нормальном состоянии, то $(\partial \omega / \partial Y_\alpha) \xrightarrow{Y_\alpha \rightarrow 0} 0$. В случае вырожденных систем это условие, вообще говоря, не справедливо. Для нахождения потока спина рассмотрим унитарный оператор

$$U_\omega = \exp \left(-i \omega_{\alpha k} \int d^3 x x_k \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}) \right).$$

Дифференцируя равенство $\text{Sp } U_\omega \hat{w} U_\omega^+ = 1$ по величине $\omega_{\alpha k}$ и полагая затем $\omega_{\alpha k} = 0$, получим, учитывая (2.1.17),

$$\int d^3 x \{ Y_0 \text{Sp } \hat{w} \hat{s}_{\alpha k}(0) + Y_k \text{Sp } \hat{w} \hat{s}_\alpha(0) + \varepsilon_{\alpha \beta \gamma} Y_\beta x_k \text{Sp } \hat{w} \hat{s}_\gamma(0) \} = 0. \quad (2.1.21)$$

Из этого равенства следует, что

$$s_{\alpha k} = -\frac{Y_k}{Y_0} s_\alpha = -\frac{\partial}{\partial Y_\alpha} \frac{Y_k \omega}{Y_0}, \quad \varepsilon_{\alpha \beta \gamma} Y_\beta s_\gamma = 0. \quad (2.1.22)$$

Последнее соотношение выполняется в силу (2.1.20) и того факта, что термодинамический потенциал зависит от термодинамического параметра Y_α только в комбинации Y_α^2 .

Перейдем к нахождению тензора натяжений t_{ik} , который, согласно (2.1.17), можно представить в виде

$$t_{ik} = -\delta_{ik} \langle \hat{\varepsilon} \rangle - i \langle [\hat{\Gamma}_{ki}, \hat{\varepsilon}(0)] \rangle, \quad (2.1.23)$$

где введено обозначение $\langle \dots \rangle \equiv \text{Sp } \hat{w} \dots$ и

$$\hat{\Gamma}_{ik} \equiv \int d^3 x x_i \hat{\pi}_k(\mathbf{x})$$

— генератор группы произвольных линейных преобразований $x_i \rightarrow x'_i = a_{ik} x_k$. Последнее утверждение следует из того, что операторы

$\hat{\psi}(\mathbf{x})$ и $\hat{\psi}'(\mathbf{x}) = \hat{\psi}(a\mathbf{x})|\det a|^{1/2}$ удовлетворяют одинаковым перестановочным соотношениям и, следовательно, связаны между собой унитарным преобразованием

$$U_a \hat{\psi}(\mathbf{x}) U_a^+ = \hat{\psi}'(\mathbf{x}) = |\det a|^{1/2} \hat{\psi}(a\mathbf{x}).$$

Рассматривая бесконечно малые преобразования $a_{ik} = \delta_{ik} + \xi_{ik}$ ($\xi \ll 1$) и полагая $U_a = 1 - i\xi_{ki}\hat{\Gamma}_{ik}$, найдем

$$[\hat{\Gamma}_{ik}, \hat{\psi}(\mathbf{x})] = ix_i \nabla_k \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \delta_{ik} \hat{\psi}(\mathbf{x}),$$

откуда и следует вид генератора $\hat{\Gamma}_{ik}$. Термодинамический потенциал Ω , согласно (2.1.5), определяется формулой

$$e^{-\Omega} = \text{Sp} \exp \left\{ - \int_V d^3x \hat{h}(\mathbf{x}) \right\},$$

$$\hat{h}(\mathbf{x}) \equiv Y_0 \hat{\varepsilon}(\mathbf{x}) + Y_k \hat{\pi}_k(\mathbf{x}) + Y_4 \hat{n}(\mathbf{x}) + Y_\alpha \hat{s}_\alpha(\mathbf{x}).$$

Чтобы вычислить t_{ik} , рассмотрим унитарное преобразование оператора $\hat{h}(\mathbf{x})$

$$U_a \hat{h}(\mathbf{x}) U_a^+ \equiv \hat{h}_a(a\mathbf{x}) |\det a|.$$

Эта формула служит определением оператора $\hat{h}_a(\mathbf{x})$. Ясно, что

$$e^{-\Omega} = \text{Sp} U_a \exp \left\{ - \int_V d^3x \hat{h}(\mathbf{x}) \right\} U_a^+ = \text{Sp} \exp \left\{ - \int_{V_a} d^3x \hat{h}_a(\mathbf{x}) \right\},$$

где $V_a = V |\det a|$. Так как Ω пропорционально V , то

$$\exp(-\Omega/|\det a|) = \text{Sp} \exp \left\{ - \int_V d^3x \hat{h}_a(\mathbf{x}) \right\}.$$

Считая, что $a_{ik} = \delta_{ik} + \xi_{ik}$ ($\xi \ll 1$), получим отсюда

$$\left\langle \frac{\partial \hat{h}_a(0)}{\partial \xi_{kl}} \right\rangle_{\xi=0} = \omega \delta_{kl}, \quad \omega = \lim_{V \rightarrow \infty} \Omega/V.$$

С другой стороны, так как для малых ξ_{kl} , $U_a = 1 - i\xi_{ki}\hat{\Gamma}_{ik}$, то, согласно определению оператора $\hat{h}_a(\mathbf{x})$, найдем

$$i [\hat{\Gamma}_{lk}, \hat{h}(0)] = \left(\frac{\partial \hat{h}_a(0)}{\partial \xi_{kl}} \right)_{\xi=0} - \delta_{kl} \hat{h}(0).$$

Поэтому

$$\omega \delta_{ik} = \delta_{ik} \langle \hat{h}(0) \rangle + i \langle [\hat{\Gamma}_{ik}, \hat{h}(0)] \rangle. \quad (2.1.24)$$