УДК 530.1

КВАНТОВАЯ СИСТЕМА ПРОИЗВОЛЬНОГО ЧИСЛА УРОВНЕЙ НА РЕШЕТКЕ

Д. С. Голиков

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

E-mail: golikov@qs.phys.msu.ru

Построена асимптотика собственных значений гамильтониана системы взаимодействующих бозонов. Получен квазиклассический спектр энергетических собственных значений. Найдено условие, аналогичное условию Боголюбова в теории сверхтекучести.

Рассмотрим систему взаимодействующих бозонов, которые могут находиться в одном из M различных состояний. Пространством состояний этой системы является пространство Фока $\mathcal{F}_M$. Оно порождается вакуумным вектором $|0\rangle$ и операторами рождения $\hat{b}_i^+$ и уничтожения $\hat{b}_i$, подчиняющимися каноническим коммутационным соотношениям статистики Бозе

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^+] = \delta_{ij}, \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^+, \hat{b}_j^+] = 0.$$

Здесь δ_{ij} — символ Кронекера, индексы принимают целые значения от единицы до M.

В настоящей работе исследуется структура и частное решение уравнения Шрёдингера для гамильтониана

$$\widehat{H} = \sum_{i,j=1}^{M} T_{ij} b_i^+ b_j + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{M} V_{ij} b_i^+ b_j^+ b_j b_i,$$

описывающего систему с парным взаимодействием между частицами на произвольном (конечном) числе точек. Через N обозначено число частиц системы. В силу эрмитовости $\widehat{H}$ действительные матрицы T и V должны быть симметричны. Этот гамильтониан является частным случаем гамильтониана, рассмотренного в работе [1].

В представлении чисел заполнения [2] состояния системы задаются волновыми функциями $\Psi(n_1, \ldots, n_M) = \langle n_1, \ldots, n_M | \Psi \rangle$. Формально операторы рождения и уничтожения можно представить как псевдодифференциальные: $b_i = e^{\frac{\partial}{\partial n_i}} \sqrt{n_i}$, $b_i^+ = \sqrt{n_i}\, e^{-\frac{\partial}{\partial n_i}}$. Гамильтониан системы в представлении чисел заполнения примет вид

$$\widehat{H} = \sum_{i,j=1}^{M} T_{ij} \sqrt{n_i}\, e^{-\partial/\partial n_i} e^{\partial/\partial n_j} \sqrt{n_j} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{M} V_{ij} n_i n_j - \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{M} V_{ii} n_i.$$

Поскольку число частиц в системе фиксировано, то $\sum_{i=1}^{M} n_i = N$. Можно выразить одну из переменных чисел заполнения через остальные, например, $n_M = N - \sum_{i=1}^{M-1} n_i$, тогда волновая функция будет зависеть от $M-1$ независимых аргументов: $\psi(n_1, \ldots, n_{M-1}) = \Psi(n_1, \ldots, n_{M-1}, N - \sum_{i=1}^{M-1} n_i)$. Для перехода к относительным значениям чисел заполнения произведем замену переменных: $n_i = N x_i$, $i = 1, \ldots, M-1$. Оставим за волновой функцией прежнее обозначение $\psi(x_1, \ldots, x_{M-1})$. Очевидно, что допустимые значения x_i лежат в интервале от нуля до единицы.

Уравнения туннельной асимптотики

Решение стационарного уравнения Шрёдингера

$$\widehat{H} \psi(x_1, \ldots, x_{M-1}) = E \psi(x_1, \ldots, x_{M-1})$$

будем искать в туннельном виде

$$\psi(x_1, \ldots, x_{M-1}) = \varphi(x_1, \ldots, x_{M-1}) e^{N S(x_1, \ldots, x_{M-1})}.$$

Предэкспоненциальная функция $\varphi(x)$ (в общем случае зависящая от числа частиц в системе) и функция действия $S(x)$ подразумеваются гладкими.

Собственные значения гамильтониана будем искать в рамках теории возмущений в виде [3]

$$E = N E_0 + E_1 + O\left(\frac{1}{N}\right).$$

Производя разложение по степеням числа частиц и приравнивая в уравнении Шрёдингера коэффициенты при соответствующих степенях N, получим уравнение для действия

$$\sum_{i=1}^{M-1} T_{ii} x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{M-1} T_{ij} \sqrt{x_i x_i}\, e^{-S_i + S_j} + 2 \sum_{i=1}^{M-1} T_{iM} \sqrt{x_i} \sqrt{1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k} \operatorname{ch} S_i + T_{MM} \left(1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k\right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{M-1} V_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{M-1} V_{iM} x_i \left(1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k\right) + \frac{1}{2} V_{MM} \left(1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k\right)^2 = E_0 \tag{1}$$

и уравнение для предэкспоненциальной функции

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\i\neq j}}^{M-1} T_{ij}\sqrt{\frac{x_i}{x_j}}\,e^{-S_i+S_j} + \sum_{\substack{i,j=1\\i\neq j}}^{M-1} T_{ij}\sqrt{x_i x_j}\,e^{-S_i+S_j}\times$$

$$\times\left(-\ln\varphi_i+\ln\varphi_j+\frac{S_{ii}+S_{jj}}{2}-S_{ij}\right)+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M-1} T_{iM}\left(\sqrt{\frac{x_i}{1-\sum\limits_{k=1}^{M-1}x_k}}\,e^{-S_i}+\sqrt{\frac{1-\sum\limits_{k=1}^{M-1}x_k}{x_i}}\,e^{S_i}\right)+$$

$$+\sum_{i=1}^{M-1} T_{iM}\sqrt{x_i}\sqrt{1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k}\,(S_{ii}\operatorname{ch}S_i+2\ln\varphi_i\operatorname{sh}S_i)-$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M-1}V_{ii}x_i-\frac{1}{2}V_{MM}\left(1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k\right)=E_1. \quad (2)$$

Индекс у функции указывает аргумент, по которому она дифференцируется, т. е.

$$\varphi_i\equiv\frac{\partial\varphi}{\partial x_i},\quad S_i\equiv\frac{\partial S}{\partial x_i}.$$

Спектр туннельной асимптотики

Пусть действительная часть действия — функция $\operatorname{Re}S(x)$ — имеет максимум в точке $x_0 = \{x_1^0,\dots,x_{M-1}^0\}$. Согласно необходимому условию максимума должно выполняться $\operatorname{Re}S_i(x)=0$ для всех $i=1,\dots,M-1$.

Если импульс определить как градиент действия [4], то можно ввести функцию классического гамильтониана

$$f(x,p)=\sum_{i=1}^{M-1}T_{ii}x_i+\sum_{\substack{i,j=1\\i\neq j}}^{M-1}T_{ij}\sqrt{x_i x_i}\,e^{-p_i+p_j}+$$

$$+2\sum_{i=1}^{M-1}T_{iM}\sqrt{x_i}\sqrt{1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k}\operatorname{ch}p_i+$$

$$+T_{MM}\left(1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k\right)+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{M-1}V_{ij}x_ix_j+$$

$$+\sum_{i=1}^{M-1}V_{iM}x_i\left(1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k\right)+\frac{1}{2}V_{MM}\left(1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k\right)^2.$$

Тогда уравнение (1) запишется в виде туннельного уравнения Гамильтона–Якоби

$$f(x,\partial.S(x))=E_0. \quad (3)$$

Исследуем это уравнение для нахождения возможных значений x_0, соотношений на параметры гамильтониана, обеспечивающих их существование, и соответствующего спектра энергии.

Дифференцируя уравнение (3) в точке x_0, получим

$$\frac{\partial f}{\partial x_l}(x_0,\partial.S(x_0))+\sum_{k=1}^{M-1}\frac{\partial f}{\partial p_k}(x_0,\partial.S(x_0))S_{kl}(x_0)=0.$$

Частная производная

$$\frac{\partial f(x,p)}{\partial p_l}=2\sum_{\substack{i=1\\i\neq l}}^{M-1}T_{il}\sqrt{x_ix_l}\operatorname{sh}(p_l-p_i)+$$

$$+2T_{lM}\sqrt{x_l}\sqrt{1-\sum_{k=1}^{M-1}x_k}\operatorname{sh}p_l$$

обращается в нуль при всех $l=1,\dots,M-1$, если $p_l=i\pi n_l$, $n_l\in\mathbb{Z}$. Поэтому функцию $S(x)$ можно выбрать в виде

$$S(x)=K(x)+i\pi\sum_{l=1}^{M-1}n_lx_l, \quad (4)$$

где n_l — произвольные целые коэффициенты, i — мнимая единица, а функция $K(x)$ достигает максимума в точке x_0.

Следовательно, уравнения для нахождения экстремума можно записать в виде

$$\frac{\partial f}{\partial x_l}(x_0,\partial.S(x_0))=0. \quad (5)$$

Дифференцируя дважды уравнение (3) в точке x_0, получим

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_m\partial x_l}(x_0,\partial.S(x_0))+$$

$$+\sum_{k=1}^{M-1}\frac{\partial^2 f}{\partial x_l\partial p_k}(x_0,\partial.S(x_0))S_{km}(x_0)+$$

$$+\sum_{k=1}^{M-1}\frac{\partial^2 f}{\partial p_k\partial x_m}(x_0,\partial.S(x_0))S_{kl}(x_0)+$$

$$+\sum_{n,k=1}^{M-1}\frac{\partial^2 f}{\partial p_k\partial p_n}(x_0,\partial.S(x_0))S_{kl}(x_0)S_{nm}(x_0)+$$

$$+\sum_{k=1}^{M-1}\frac{\partial f}{\partial p_k}(x_0,\partial.S(x_0))S_{klm}(x_0)=0.$$

Второе, третье и последнее слагаемые в левой части при выборе $S(x)$ в виде (4) обращаются в нуль. Поэтому уравнения для $S_{kl}(x_0)$ могут быть записаны как

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_m\partial x_l}(x_0,\partial.S(x_0))+$$

$$+\sum_{n,k=1}^{M-1} \frac{\partial^2 f}{\partial p_k \partial p_n}(x_0, \partial.S(x_0)) S_{kl}(x_0) S_{nm}(x_0) = 0.$$

Введем квадратные матрицы X, P, S порядка $M-1$ с элементами

$$X_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x_0, \partial.S(x_0)),$$
$$P_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial p_i \partial p_j}(x_0, \partial.S(x_0)),$$
$$S_{ij} = S_{ij}(x_0).$$

Тогда уравнение для $S_{kl}(x_0)$ можно записать в более удобном матричном виде

$$X + SPS = 0. \tag{6}$$

Так как функция $\varphi(x)$ гладкая, то все ее производные должны быть конечными. Поэтому при $x \to x_0$ она представима в виде

$$\varphi(x) = \mathrm{const} \prod_{i=1}^{M-1} \left(x_i - x_i^0\right)^{m_i} + o\left(\left(x_i - x_i^0\right)^{m_i}\right),$$

где $m_i = 0, 1, 2, \ldots$. После некоторых преобразований в (2) в пределе при $x \to x_0$ получим выражение для первой поправки энергии

$$E_1 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{M-1} T_{ij} \sqrt{\frac{x_i}{x_j}}\, e^{-S_i + S_j} +$$
$$+ \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{M-1} (1 + 2m_i) T_{ij} \sqrt{x_i x_j} (S_{ii} - S_{ji}) \operatorname{ch}(S_i - S_j) +$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{M-1} T_{iM} \left(\sqrt{\frac{x_i}{1 - \sum\limits_{k=1}^{M-1} x_k}}\, e^{-S_i} + \sqrt{\frac{1 - \sum\limits_{k=1}^{M-1} x_k}{x_i}}\, e^{S_i} \right) +$$
$$+ \sum_{i=1}^{M-1} (1 + 2m_i) T_{iM} \sqrt{x_i} \sqrt{1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k} S_{ii} \operatorname{ch} S_i -$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{M-1} V_{ii} x_i - \frac{1}{2} V_{MM} \left(1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k\right) \Bigg|_{x=x_0}. \tag{7}$$

Последнее соотношение можно представить в виде квазиклассического спектра энергии $E_1^{(m)} = E_1^{(0)} + \sum_{i=1}^{M-1} \omega_i m_i$, $m_i = 0, 1, 2, \ldots$. Этот факт совпадает с результатами, полученными квазиклассическими методами [5].

Однородное решение

Рассмотрим случай, когда все целые числа из набора n_l в выражении (4) — четные.

Матрицы T и V выберем в виде

$$T_{ij} = \begin{cases} T_1, & \text{если } i = j, \\ T_2, & \text{если } i \neq j, \end{cases} \qquad V_{ij} = \begin{cases} V_1, & \text{если } i = j, \\ V_2, & \text{если } i \neq j. \end{cases}$$

Уравнение (5) в этом случае будет иметь вид

$$\frac{\sum\limits_{i=1}^{M-1} \sqrt{x_i} + \sqrt{1 - \sum\limits_{k=1}^{M-1} x_k}}{\sqrt{x_l}} - \frac{\sum\limits_{i=1}^{M-1} \sqrt{x_i}}{\sqrt{1 - \sum\limits_{k=1}^{M-1} x_k}} +$$
$$+ \frac{V_2 - V_1}{T_2} \left(1 - \sum_{k=1}^{M-1} x_k - x_l\right) - 1 = 0.$$

Как несложно убедиться, частным решением этого уравнения является точка $x_0 = \{1/M, \ldots, 1/M\}$. Оно пространственно однородно и представляет собой аналог безвихревого решения в теории сверхтекучести [6].

Значения вторых производных функции классического гамильтониана в точке x_0 есть

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_l^2}(x_0, \partial.S(x_0)) = -M^2 T_2 + 2(V_1 - V_2),$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_l \partial x_m}(x_0, \partial.S(x_0)) = -\frac{M^2}{2} T_2 + V_1 - V_2, \quad l \neq m,$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial p_l^2}(x_0, \partial.S(x_0)) = -\frac{2}{M} T_2 (1 - M),$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial p_l \partial p_m}(x_0, \partial.S(x_0)) = -\frac{2}{M} T_2, \quad l \neq m.$$

Следовательно, элементы матриц X, P, входящих в уравнение (6), будут равны

$$X_{ij} = \left(-\frac{M^2}{2} T_2 + V_1 - V_2\right) a_{ij},$$
$$P_{ij} = \left(-\frac{2}{M} T_2\right) b_{ij},$$

где введены коэффициенты

$$a_{ij} = \begin{cases} 2 & \text{при } i = j, \\ 1 & \text{при } i \neq j, \end{cases} \qquad b_{ij} = \begin{cases} 1 - M & \text{при } i = j, \\ 1 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Предположим, что решение уравнения (6) имеет тот же вид, что и матрицы X, P, т. е.

$$S_{ij} = \begin{cases} s_1 & \text{при } i = j, \\ s_2 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Собственными значениями матриц n-го порядка такого типа являются числа $\lambda_1 = s_1 - s_2$, $\lambda_2 = s_1 + (n-1) s_2$. Первое собственное значение $(n-1)$-кратно вырождено. Отвечающие им собственные векторы $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ линейно независимы.

Собственные значения матриц X, P, отвечающие собственным векторам $\mathbf{v}_i$, обозначим соответственно через μ_i, ν_i. Тогда, учитывая (6), для собственных значений можно записать уравнения $\mu_i + \lambda_i^2 \nu_i = 0$, $i = 1, 2$. Обозначим диагональные элементы матриц X, P через x_1, p_1, недиагональные — через x_2, p_2 соответственно. Следовательно, последние уравнения запишутся в виде

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + (s_1 - s_2)^2 (p_1 - p_2) = 0, \\ x_1 + (n-1)x_2 + (s_1 + (n-1)s_2)^2 (p_1 + (n-1)p_2) = 0. \end{cases}$$

Согласно достаточному условию максимума квадратичная форма вторых производных должна быть отрицательно определенной. Из критерия Сильвестра следует, что для отрицательной определенности квадратичной формы необходимо и достаточно, чтобы главные миноры матрицы квадратичной формы были знакопеременными начиная со знака минус:

$$(-1)^n \det S^{(n\times n)} > 0, \quad n = 1, \ldots, M-1.$$

Определитель $\det S^{(n\times n)} = (s_1 - s_2)^{n-1}(s_1 + (n-1)s_2)$, поэтому приведенное неравенство примет вид $(s_2 - s_1)^{n-1}(s_1 + (n-1)s_2) < 0$. Учитывая этот факт, для элементов матрицы S порядка $n = M - 1$ получим

$$s_1 = 2s_2 = -2\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{M^2}{2} - \frac{V_1 - V_2}{T_2}\right)}.$$

Для существования этого решения, а также определителя

$$\det S^{(n\times n)} = (-1)^n M \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{M^2}{2} - \frac{V_1 - V_2}{T_2}\right)^n}, \quad n = 1, \ldots, M-1,$$

должно выполняться неравенство

$$\frac{V_1 - V_2}{T_2} < \frac{M^2}{2}. \tag{8}$$

Энергия в главном порядке (3) в этом случае будет равна

$$E_0 = T_1 + (M-1)\,T_2 + \frac{V_1 + (M-1)\,V_2}{2M}.$$

Известный вид матрицы S позволяет также написать выражение для первой энергетической поправки. Как следует из (7),

$$E_1 = \frac{M(M-1)}{2}T_2 - \sum_{i=1}^{M-1}(1 + 2m_i)T_2\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{M^2}{2} - \frac{V_1 - V_2}{T_2}\right)} - \frac{V_1}{2},$$

где $m_i = 0, 1, 2, \ldots$.

Таким образом, проведено исследование туннельной асимптотики волновой функции основного состояния. Найдено условие на параметры, аналогичное условию Боголюбова существования сверхтекучести [2, 6, 8]. Основное состояние в этом случае является пространственно однородным и аналогично пространственно однородному решению в теории сверхтекучести. Полученные соотношения для энергии, неравенство (8) совпадают в частном случае $M = 2$ с результатами, полученными в [9].

Автор благодарен О. Ю. Шведову за полезные обсуждения.

Литература

1. *Маслов В.П., Шведов О.Ю.* // Мат. заметки. 1995. **57**, № 1. С. 132.
2. *Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н.(мл.)* Введение в квантовую статистическую механику. М., 1984.
3. *Маслов В.П.* Асимптотические методы и теория возмущений. М., 1988.
4. *Арнольд В.И.* Математические методы классической механики. М., 1974.
5. *Белов В.В., Маслов В.П., Шведов О.Ю.* // Мат. заметки. 1993. **53**, № 5. С. 14.
6. *Боголюбов Н.Н.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1947. **11**, № 1. С. 77.
7. *Bogolyubov N.N.* // J. Phys. 1947. **9**. P. 23.
8. *Маслов В.П., Шведов О.Ю.* // ТМФ. 1994. **98**, № 2. С. 266.
9. *Голиков Д.С.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2003. № 4. С. 12 (Moscow University Phys. Bull. 2003. N 4. P. 16).

Поступила в редакцию
18.05.06