А.Д. СУХАНОВ,[1] О.Н. ГОЛУБЕВА,[2] В.Г. БАРЬЯХТАР[3]

[1] ЛТФ, ОИЯИ
(Дубна, Россия; e-mail: ogol@oldi.ru)
[2] Russian Peoples Friendship University
(Moscow, Russia; e-mail: ogol@mail.ru)
[3] Институт магнетизма НАНУ
(Киев, Украина; e-mail: victor.baryakhtar@gmail.com)

УДК 539

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ АНАЛОГ НУЛЕВОГО НАЧАЛА ТЕРМОДИНАМИКИ (К ПРОБЛЕМЕ ИНКОРПОРАЦИИ ТЕРМОДИНАМИКИ В КВАНТОВУЮ ТЕОРИЮ)[1]

В основе данного подхода к инкорпорации стохастической термодинамики в квантовую теорию лежит концепция последовательного учета целостного стохастического воздействия окружения, описываемого волновыми функциями произвольных вакуумов, предложенная нами ранее. В настоящем исследовании мы реализуем возможность явной инкорпорации в квантовую теорию нулевого начала стохастической термодинамики в форме насыщенного соотношения неопределенностей Шредингера. Это позволяет провести сравнительный анализ совокупностей состояний произвольных вакуумов – сжатых когерентных (СКС) и коррелированных когерентных (ККС) состояний. Кроме того, мы обсуждаем возможность сопоставить СКС и ККС тепловым состояниям.

Ключевые слова: соотношение неопределенностей, тепловое равновесие, нулевое начало, инвариантность, сжатые когерентные состояния, коррелированные когерентные состояния.

1. Введение

Традиционно понятие теплового равновесия в *термодинамике* ассоциируется с нулевым началом, т.е. с равенством (хотя бы в среднем) кельвиновых температур объекта T и окружения T_0, которому сопоставляется модель классического термостата. При *нулевой* температуре понятие теплового равновесия, разумеется, не вводится, так как термостат в традиционном понимании (как теплое окружение) не подразумевается. В этих условиях тепловое стохастическое воздействие окружения не учитывается. Естественно, что в термодинамике не рассматривается квантовое стохастическое воздействие окружения.

Между тем, при достаточно низких температурах, когда тепловое воздействие уже следует принимать во внимание, квантовое стохастическое воздействие продолжает быть значимым фактором. Таким образом, одновременно возникают тепловые и квантовые флуктуации, которые оказываются неаддитивными. Для описания подобной ситуации при низких температурах в качестве модели окружения (на квантовом языке – произвольного вакуума) нами было введено [1] понятие кванто-термостата. Чтобы распространить понятие теплового равновесия на случай контакта с

[1] Статья печатается как дискуссионная.

кванто-термостатом, нами ранее там же из эмпирических соображений была введена эффективная температура

$$\mathbb{T} = \frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}, \tag{1}$$

где k_B – постоянная Больцмана, а T – кельвинова температура, и предложено обобщенное нулевое начало в форме

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}_0 \pm \Delta\mathbb{T}, \tag{2}$$

где $\mathbb{T}_0$ – эффективная температура квантового термостата, а $\Delta\mathbb{T}$ – стандартное отклонение эффективной температуры объекта. В пределе, когда кельвинова температура $T \to 0$, оно сохраняет смысл условия равновесия с холодным вакуумом, принимая форму

$$\mathbb{T}^{\min} = \mathbb{T}_0^{\min} \pm \Delta\mathbb{T}^{\min}, \tag{3}$$

где $\mathbb{T}_0^{\min} \equiv \frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}} \neq 0$ – минимальная эффективная температура для нормальной моды вакуума частоты ω.

Теперь мы рассмотрим возможность дать выражению (2) фундаментальное истолкование на микроуровне. С этой целью обратимся к введенному нами в работе [1] гамильтониану произвольного вакуума:

$$\hat{\mathfrak{H}}_{\tau,\varphi} = \hat{\mathcal{H}}_{\tau,\varphi} - \hat{\mathfrak{H}}^{\inf}_{\tau,\varphi}. \tag{4}$$

В этом выражении $\hat{\mathcal{H}}_{\tau,\varphi}$ – гамильтониан *системы*, моделируемой квантовым осциллятором частоты ω_0, и $\hat{\mathfrak{H}}^{\inf}_{\tau,\varphi}$ – *оператор энергии* целостного, т.е. квантового и теплового стохастического *воздействия* окружения на осциллятор при произвольном значении кельвиновой температуры. Напомним, что индексы τ и φ – это параметры (u, v) преобразования Боголюбова, позволяющие перейти от *исходного* (холодного) вакуума к *произвольному* (в том числе и теплому):

$$u = \cosh\tau \cdot e^{i\varphi}; \quad v = \sinh\tau \cdot e^{-i\varphi}. \tag{5}$$

Через эти параметры гамильтониан системы $\hat{\mathcal{H}}_{\tau,\varphi}$, входящий в (4), выражается следующим образом:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\tau,\varphi} \equiv (\cosh 2\tau - \sinh 2\tau \cdot \cos 2\varphi)\hat{K}_{\tau,\varphi} +$$

$$+ (\cosh 2\tau + \sinh 2\tau \cdot \cos 2\varphi)\hat{\Pi}_{\tau,\varphi}, \tag{6}$$

где $\hat{K}_{\tau,\varphi}$ и $\hat{\Pi}_{\tau,\varphi}$ – операторы кинетической и потенциальной энергии соответственно.

Второй оператор $\hat{\mathfrak{H}}^{\inf}_{\tau,\varphi}$ в (4) состоит из двух членов, отражающих вклады как чисто квантового воздействия $\hat{j}_0 = \frac{\hbar}{2}\hat{I}$ *холодного вакуума*, так и дополнительного воздействия $\hat{\sigma}_{\tau,\varphi}$, которое возникает при переходе от *исходного* холодного вакуума (т.е. при температуре окружения $T = 0$) к *произвольному*, допускающему ситуации с ненулевой кельвиновой температурой окружения. При этом:

$$\hat{\mathfrak{H}}^{\inf}_{\tau,\varphi} = \omega\hat{j}_0 + \omega\hat{\sigma}_{\tau,\varphi}. \tag{7}$$

Здесь

$$\hat{\sigma}_{\tau,\varphi} \equiv (\sinh 2\tau \cdot \sin 2\varphi)\frac{1}{2}(\hat{p}\,\hat{q} + \hat{q}\hat{p}). \tag{8}$$

При $\tau = 0, \varphi = 0$ оператор (7), разумеется, переходит в оператор энергии исходного холодного вакуума.

Для вычисления среднего значения оператора (4) нами в дальнейшем используется комплексная волновая функция произвольного вакуума $\psi_{\tau,\varphi}$. В координатном представлении она имеет вид

$$\psi_{\tau,\varphi}(q,\omega) = \left[2\pi(\,\Delta q_{\tau,\varphi})^2\right]^{-1/4} \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{q^2}{4(\Delta q_{\tau,\varphi})^2}(1 - i\beta_{\tau,\varphi})\right\}, \tag{9}$$

где $(\Delta q_{\tau,\varphi})^2$ – дисперсия координаты для произвольного вакуума, $\beta_{\tau,\varphi}$ – существенный параметр, определяющий фазу волновой функции. Функция (9) является собственной функцией гамильтониана произвольного вакуума $\hat{\mathfrak{H}}_{\tau,\varphi}$ (4) с нулевым собственным значением [1]:

$$\hat{\mathfrak{H}}_{\tau,\varphi}\psi_{\tau,\varphi}(q,\omega) = 0 \cdot \psi_{\tau,\varphi}(q,\omega) = 0.$$

Величины $(\Delta q_{\tau,\varphi})^2$ и $\beta_{\tau,\varphi}$, входящие в (9), выражаются через параметры τ и φ следующим образом:

$$(\Delta q_{\tau,\varphi})^2 = (\Delta q_0)^2(\cosh 2\tau - \sinh 2\tau \cdot \cos 2\varphi);$$

$$(\Delta q_0)^2 = \frac{\hbar}{2\omega_0}; \tag{10}$$

$$\beta_{\tau,\varphi} = \sinh 2\tau \cdot \sin 2\varphi.$$

Дисперсия импульса в состоянии $|\psi_{\tau,\varphi}(q,\omega)\rangle$ имеет вид

$$(\Delta p_{\tau,\varphi})^2 = (\Delta p_0)^2(\cosh 2\tau + \sinh 2\tau \cdot \cos 2\varphi), \qquad (11)$$

где $(\Delta p_0)^2 = \dfrac{\hbar\omega_0}{2}$.

В данной работе мы возвращаемся к исследованию критериев, позволяющих из множества состояний $\psi_{\tau,\varphi}(q,\omega)$, порождаемых (u,v) преобразованием Боголюбова, выделить состояния, отвечающие тепловому равновесию с произвольным вакуумом. Претендентами на эту роль выступают сжатые когерентные состояния (СКС) и коррелированно-когерентные состояния (ККС) ввиду того, что выражения для внутренней энергии квантового осциллятора в этих состояниях могут быть приведены к виду, совпадающему с равновесной формулой Планка $\mathbb{U}_T = \frac{\hbar\omega}{2}\coth\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}$, где k_B – постоянная Больцмана, T – кельвинова температура. Для этого можно формально соотнести параметр τ с температурой в соответствии с соотношениями

$$\cosh 2\tau \equiv \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right); \quad \sinh 2\tau \equiv \left(\sinh\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)^{-1} \qquad (12)$$

и убедиться во внешнем сходстве полученных результатов с планковскими. Однако фундаментальное понятие температуры не имеет прообраза в микромире и сопряжено с представлением о тепловом равновесии. Таким образом, формальная процедура введения вместо τ иного параметра, зависящего от температуры, еще не позволяет сделать окончательного вывода относительно равновесного характера данных состояний и возможности интерпретировать их в качестве аналогов тепловых. Таким образом, требуется на квантовом языке сформулировать условие, аналогичное принятому в термодинамике условию теплового равновесия с термостатом при температуре T, и проверить выполнение этого условия в случаях СКС и ККС.

2. Анализ сжатых когерентных состояний произвольного вакуума

В работе [2] мы уже предварительно указывали на тот факт, что СКС могут быть рассмотрены как тепловые лишь условно, имея в виду, что в термодинамике им могли бы быть сопоставлены только ситуации контакта с холодным вакуумом (т.е. при кельвиновой температуре $T=0$). Теперь мы приведем дополнительные аргументы в пользу этого утверждения, основываясь на исследовании вида СН Шредингера для этих состояний.

В СКС, где $\varphi = 0$, волновая функция (9) становится вещественной из-за обращения в нуль $\beta_{\tau,\varphi}$ и обозначается нами как $\psi_{\tau,0} \equiv \psi_0$. Подставляя соотношения (12) в формулу (6), мы формально изменяем параметризацию гамильтониана системы. Однако, как будет показано ниже, несмотря на то, что мы вводим для него иное обозначение $\hat{\mathcal{H}}_T \equiv \hat{\mathcal{H}}_{\tau,0}$ вместо $\hat{\mathcal{H}}_{\tau,\varphi}$, данная операция оказывается лишенной физического смысла. Действительно, полагая массу осциллятора $m=1$, в этом случае получаем

$$\hat{\mathcal{H}}_T = \left[\coth\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T} - \left(\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)^{-1}\right]\frac{1}{2}\hat{p}^2 +$$

$$+\left[\coth\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T} + \left(\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)^{-1}\right]\frac{1}{2}\omega^2\hat{q}^2. \qquad (13)$$

Теперь в формуле (7) оператор $\hat{\sigma}_{\tau,0} \equiv (\sinh\, 2\tau)\times \times\sin 2\varphi)\frac{1}{2}(\hat{p}\,\hat{q} + \hat{q}\hat{p})\Big|_{\varphi=0}$, отвечающий за корреляцию флуктуаций координаты и импульса, обращается в нуль из-за того, что $\sin 2\varphi = 0$. В итоге стохастическое воздействие характеризуется только оператором $\hat{j}_0$, типичным для исходного холодного вакуума, так что выражение (7) упрощается: $\mathfrak{H}^{\mathrm{inf}}_{\tau,\varphi} = \omega\hat{j}_0$.

Принимая во внимание, что среднее значение вакуумного гамильтониана $\hat{\mathfrak{H}}_{\tau,\varphi}$ обращается в нуль, из формулы (4) можно придти к равенству

$$\langle\psi_T|\hat{\mathcal{H}}_T|\psi_T\rangle = \langle\psi_T|\omega\hat{j}_0|\psi_T\rangle. \qquad (14)$$

Обращаем внимание на то, что левая и правая части (14) содержит физически различные величины: $\hat{\mathcal{H}}_T$ характеризует систему, моделируемую квантовым осциллятором, а $\hat{j}_0$ – ее окружение. Таким образом, равенство (14) означает, что средняя энергия системы (осциллятора) совпадает со средней энергией квантового воздействия окружения. Это утверждение, сформулированное на квантовом языке, фактически эквивалентно нулевому началу термодинамики, но для предельного случая контакта системы с холодным вакуумом.

Из формул (14) и (13) следует

$$\left[\cosh^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right) - \left(\sinh^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)\right)^{-1}\right]\mathbb{U}_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (15)$$

Однако отметим, что квадратная скобка в (15) *тождественно* равна единице. При этом $\mathbb{U}_0 = = \langle\psi_0|\hat{\mathcal{H}}_0|\psi_0\rangle = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ – средняя энергия осциллятора в холодном вакууме. Так что данное выражение не зависит от параметра T. В силу этого аргумента данный параметр T не может быть истолкован как температура. Иными словами, целесообразность изменения параметризации в форме (12), как и ожидалось, оказывается весьма сомнительной. Вместе с тем, эта операция позволяет из (15) получить некоторую полезную информацию. Так, с учетом комментариев к формулам (10) и (11) можно утверждать, что

$$\frac{\mathbb{U}_0}{\omega} = \Delta q_0 \cdot \Delta p_0 = (\mathcal{UP})_0,$$

где для произведения неопределенностей $\Delta p_0 \cdot \Delta q_0$ введено обозначение $(\mathcal{UP})_0$. Тогда (15) фактически представляет собой частную реализацию СН Шредингера – насыщенное СН Гейзенберга:

$$(\mathcal{UP})_0 = \frac{\hbar}{2},$$

не имеющее никакого отношения к тепловым эффектам.

Тем самым, совокупность СКС описывает специфический случай равновесия системы лишь с холодным вакуумом, т.е. при $T = 0$, что соответствует “максимально” изолированной (с неклассической точки зрения) системе, т.е. системе, испытывающей только стохастическое квантовое воздействие. Иными словами, для СКС при какой-либо *ненулевой* кельвиновой температуре, имеющей стандартный физический смысл, неправомерно ставить вопрос о равновесии в том смысле, который подразумевается нулевым началом термодинамики. В данном случае отсутствует “теплый” термостат, обеспечивающий тепловой контакт. Этим подтверждается заключение о том, что, по-видимому, неслучайно Умэдзава называл сжатые состояния не истинно тепловыми, а лишь термоподобными (thermal-like states).

Итак, мы приходим к выводу, согласно которому насыщенность СН в форме Гейзенберга на квантовом языке еще не является достаточным условием для описания теплового равновесия при $T \neq 0$. Ниже мы покажем, что в этом качестве выступает насыщенное СН Шредингера.

3. Анализ коррелированно-когерентных состояний произвольного вакуума на основе СН Шредингера

Для ККС возникает иная ситуация в силу того, что параметр $\varphi = \pi/4$. В этом случае при нулевом среднем значении вакуумного гамильтониана (4) мы получаем соотношение

$$\langle\psi_{\tau,\varphi}|\mathcal{H}|\psi_{\tau,\varphi}\rangle = \langle\psi_{\tau,\varphi}|\mathfrak{H}^\mathrm{inf}|\psi_{\tau,\varphi}\rangle. \quad (16)$$

В нем оператор $\mathfrak{H}^\mathrm{inf}$ согласно (7) и (8) содержит два отличных от нуля члена.

Если теперь изменить параметризацию и ввести температуру согласно формуле (12), то выражения для дисперсий (10) и (11) принимают вид

$$(\Delta q_T)^2 = (\Delta q_0)^2 \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right) = \frac{\hbar\omega_0}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right);$$
$$(\Delta p_T)^2 = (\Delta p_0)^2 \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right) = \frac{\hbar}{2\omega_0}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right). \quad (17)$$

Соответственно после подобной операции можно вычислить произведение дисперсий $(\mathcal{UP})_T$

$$(\mathcal{UP})_T = (\Delta q_T)(\Delta p_T) = \frac{\hbar}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right) = \frac{\mathbb{U}_\mathrm{Pl}}{\omega}, \quad (18)$$

где $\mathbb{U}_\mathrm{Pl} = \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar}{2k_\mathrm{B}}\frac{\omega}{T}\right)$ – планкова энергия осциллятора.

Таким образом, левая часть выражения (16) принимает вид:

$$\langle\psi_{\tau,\varphi}|\hat{\mathcal{H}}|\psi_{\tau,\varphi}\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\coth 2\tau = \omega(\mathcal{UP})_T. \quad (19)$$

Оператор дополнительного воздействия $\hat{\sigma}_{\tau,\varphi}$ (8), входящий в правую часть (16) и отвечающий за корреляцию флуктуаций координаты и импульса, преобразуется (при $\varphi = \frac{\pi}{4}$) к виду

$$\hat{\sigma}_T \equiv (\sinh 2\tau \cdot \sin 2\varphi)\frac{1}{2}(\hat{p}\,\hat{q} + \hat{q}\hat{p}) =$$

$$= \left[\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sinh}\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}\right]\frac{1}{2}(\hat{p}\,\hat{q}+\hat{q}\hat{p}). \quad (20)$$

Тогда с учетом (7) и (20) получим модуль комплексной величины, стоящей в правой части (16)

$$\mathbb{J}_T^2 = \left|\langle\psi_{\tau,\varphi}\big|\hat{\mathfrak{H}}^{inf}\big|\psi_{\tau,\varphi}\rangle\right|^2 = \sigma_T^2 + \mathbb{J}_{\rm qu}^2 =$$

$$+\left[\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}}\right]^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = \left[\frac{\hbar}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}\right)\right]^2. \quad (21)$$

Здесь величина $\mathbb{J}_T = \dfrac{\hbar}{2}\,{\rm cth}\,\dfrac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}$ является макропараметром и имеет смысл целостного (т.е. теплового и квантового) эффективного стохастического воздействия окружения. На микроуровне им соответствует произвольный вакуум и эрмитовы операторы $\hat{\sigma}_T$ и $\hat{j}_0$.

Теперь для левой части равенства (16) с учетом формул (17) и (19) и вновь используя для произведения дисперсий обозначение $(\Delta p_T)(\Delta q_T) \equiv \equiv (\mathcal{UP})_T$, можно получить следующее выражение в виде:

$$\langle\psi_{\tau,\varphi}\big|\hat{\mathcal{H}}\big|\psi_{\tau,\varphi}\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}\right) = \omega(\mathcal{UP})_T. \quad (22)$$

Тем самым, сравнивая формулы (21) и (22), можно сделать заключение о том, что равенство (16), характерное для произвольного вакуума с волновой функцией ψ_T, представляет собой не что иное как насыщенное соотношение неопределенностей Шредингера (СНШ):

$$\omega^2(\mathcal{UP})_T^2 = \left|\langle\psi_T\big|\mathfrak{H}^{\rm inf}\big|\psi_T\rangle\right|^2. \quad (23)$$

В то же время прямое сравнение правых частей формул (20) и (21) позволяет ту же формулу (16) представить в виде

$$(\mathcal{UP})_T = \mathbb{J}_T. \quad (24)$$

При этом подчеркнем, что левая и правая части формулы (24), определенные выражениями (21) и (22), несмотря на совпадение размерностей, имеют разный физический смысл. Выражение $(\mathcal{UP})_T$ можно интерпретировать как реакцию системы $\mathbb{J}_{\rm syst}$ на стохастическое воздействие окружения $\mathbb{J}_T$, так что в итоге имеет место равенство между воздействием на систему и ее ответной реакцией:

$$\mathbb{J}_{\rm syst} = \mathbb{J}_T. \quad (25)$$

Отметим, что данное соотношение можно интерпретировать как термодинамический аналог третьего закона Ньютона.

Применив к (25) слева (для системы) и справа (для квантотермостата) общую формулу Больцмана для эффективного стохастического воздействия $\mathbb{J} = \frac{k_{\rm B}}{\omega}\cdot\mathbb{T}$, мы придем к соотношению $\mathbb{T}_{\rm syst} = \mathbb{T}_T$, которое есть нулевое начало стохастической термодинамики, записанное для *эффективных* температур окружения и объекта.

Тем самым насыщенное СНШ (23) для тепловых ККС, будучи тесно связанным с фундаментальным описанием на микроуровне, приобретает статус *квантового аналога нулевого начала стохастической термодинамики.* Поэтому равенство (23) – это существенное требование модифицированной теории.

В связи с нулевым началом в форме (24) хотелось бы отметить следующее обстоятельство, подчеркивающее существенную роль фазы волновой функции. Действительно, справа в нем стоит вклад воздействия кванто-термостата:

$$(\mathbb{J}_T) = \sqrt{\left(\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2}. \quad (26)$$

В нем первое слагаемое определяется средним значением оператора $\hat{\sigma}_T$, зависящим от фазы волновой функции. Нетрудно видеть, что кроме случая $T\to 0$ правая часть (26), в основном, определяется именно фазой волновой функции. Особенно велика ее роль при высоких температурах, когда соответствующее слагаемое принимает вид

$$\left(\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T}}\right)^2 \to \left(\frac{k_{\rm B}T}{\omega}\right)^2 \gg \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2.$$

В этом случае само нулевое начало (24) сводится к условию равенства *кельвиновых* температур $T = T_0$, которое принимается в качестве определения теплового равновесия в классической термодинамике и в КСМ (при этом символом T_0 обозначается температура термостата). Важно однако подчеркнуть, что даже в тех случаях, когда флуктуациями температуры системы (например, состоящей из многих частиц) можно в нулевом приближении пренебречь, само ее определение, адекватное этому понятию на асимптотике, имеет вид

$$T \to \frac{\omega}{k_{\mathrm{B}}}(\mathcal{UP})_T. \tag{27}$$

Тем самым, эта величина зависит от неопределенностей импульса и координаты, что указывает на ее исходно *случайный* характер.

В тех случаях, когда фаза отсутствует, например, при использовании вещественных волновых функций типа СКС, формула (24) принимает вид

$$\mathbb{J}_{\mathrm{syst}} = \mathbb{J}_{\mathrm{qu}}, \tag{28}$$

где $\mathbb{J}_{\mathrm{qu}} = \dfrac{\hbar}{2}$ – квантовое воздействие. В этом случае нулевое начало не зависит от параметра T, что и позволяет, как указывалось выше, фиксировать "тепловое" равновесие только с холодным вакуумом, т.е. трактовать его в "пиквикском" смысле.

Итак, для описания теплового равновесия с произвольным вакуумом двух требований – определения вакуума и совпадения выражения для внутренней энергии квантового осциллятора, формально записанной через параметр T, с формулой Планка – оказывается недостаточно. Этим требованиям удовлетворяют обе совокупности состояний – СКС и ККС. Однако учету теплового воздействия на микроуровне соответствует лишь насыщенное СН Шредингера. Поэтому физический смысл величине T, адекватный понятию температуры, удается придать только в случае ККС типа $|\psi_{\tau,\varphi}\rangle = |\psi_{\tau,\frac{\pi}{4}}\rangle \equiv |\psi_T\rangle$, которые можно считать "*тепловыми*" ККС.

Иначе говоря, для выделения из всех состояний, порождаемых (u, v)-преобразованиями Боголюбова, тех состояний, что характеризуют тепловое равновесие с произвольным вакуумом (при $T \neq 0$), необходимо ввести еще одно обязательное требование. Оно состоит в том, что в аппарат квантовой теории включается эквивалент нулевого начала термодинамики в форме насыщенного СНШ:

$$\Delta p \cdot \Delta q = \left|\langle\psi|\hat{p}\cdot\hat{q}|\psi\rangle\right|.$$

В состоянии "теплого" вакуума $|\psi_T(q)\rangle$ оно сводится к следующему условию:

$$(\mathcal{UP})_T = \frac{\hbar}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T_0}\right),$$

где мы въявь отметили T_0 – кельвинову температуру термостата. Подчеркнем, что в этом соотношении левая часть равенства выражается через характеристики объекта, а правая часть – через характеристики окружения.

4. Инвариантность нулевого начала стохастической термодинамики

Проанализируем теперь полученную выше фундаментальную формулировку нулевого начала с точки зрения ее инвариантности относительно (u, v)-преобразований Боголюбова. Еще раз обращаем внимание на то, что слева и справа в соответствующих равенствах стоят качественно разные физические величины, совпадающие, однако, по размерности.

В частности, формула (24) означает, что при нулевой температуре

$$(\mathcal{UP})_0 \equiv \Delta p_0 \cdot \Delta q_0 = \frac{\hbar}{2} = \mathbb{J}_{\mathrm{qu}}, \tag{29}$$

где $(\mathcal{UP})_0$ рассматривается как целостная величина, характеризующая исследуемую систему.

Напомним, что (u, v)-преобразования, сохраняющие канонические перестановочные соотношения, имеют смысл преобразований одновременно для двух групп симметрии – группы $SU(1, 1)$ и локально изоморфной ей группы Лоренца $O(2, 1)$, общим инвариантом которых является $\hbar^2/4$. Обсудим, как сказывается наличие соответствующей инвариантности на величинах, входящих в левую и правую части формулы (29).

Как следует из предыдущего, при преобразованиях с вещественными параметрами u и v (т.е. при $\varphi = 0$ в формуле (5)) выражение в правой части (29) не меняется, так как в этом случае среднее значение оператора квантово-теплового стохастического воздействия $\hat{\sigma}$ остается равным нулю при любых значениях параметра τ. В то же время выражение в левой части (29), оставаясь инвариантным, может иметь различный вид в зависимости от выбора параметра $\tau \neq 0$. Иными словами, выражение $(\mathcal{UP})^2$ в общем случае может иметь вид

$$(\mathcal{UP})^2\Big|_T = (\mathcal{UP})^2\Big|_{T=0}(\cosh^2 2\tau - \sinh^2 2\tau) = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2, \tag{30}$$

что соответствует разным способам реализации СКС.

Учитывая формулы (12), выражение (30) можно записать как детерминант вида

$$(\mathcal{UP})^2\Big|_T = (\mathcal{UP})^2\Big|_{T=0}\times$$

$$\times\begin{vmatrix} \left(\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}+\frac{1}{\sinh\frac{\hbar\omega}{2kT}}\right) & 0 \\ 0 & \left(\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}-\frac{1}{\sinh\frac{\hbar\omega}{2kT}}\right)\end{vmatrix} =$$

$$= \begin{vmatrix} (\Delta p_\tau)^2 & 0 \\ 0 & (\Delta q_\tau)^2 \end{vmatrix} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2. \qquad (31)$$

Если при этом вычисление дисперсий импульса и координаты производить путем усреднения с вещественной волновой функцией, которая следует из формулы (9) при $\beta_{\tau,\varphi}=0$, называемой термоподобной, то (по терминологии Умэдзавы) мы имеем дело с *одномодовыми* сжатыми состояниями [3].

Стремясь обобщить формулу (31), Умэдзава ввел два независимых набора квантов – *обычные* кванты, связанные со стандартными операторами уничтожения $\hat{a}$ и рождения $\hat{a}^+$, и так называемые *тепловые* кванты, связанные с тильдованными операторами $\hat{\tilde{a}}$ и $\hat{\tilde{a}}^+$. За счет этого он удвоил гильбертово пространство, что позволило ему ввести *двухмодовые* сжатые состояния. Они получаются на основе операторов рождения, образованных с помощью (u,v)-преобразований Боголюбова, перепутывающих между собой операторы из двух введенных им наборов. В результате выражение (30) приняло вид

$$(\mathcal{UP})^2 = \begin{vmatrix} (\Delta\hat{p})^2_\tau & (\Delta\hat{p}\ \Delta\hat{\tilde{p}})_\tau \\ (\Delta\hat{q}\ \Delta\hat{\tilde{q}})_\tau & (\Delta\hat{q})^2_\tau \end{vmatrix} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2, \qquad (32)$$

где усреднение так же, как и в (31) проводится по термоподобным состояниям.

Подчеркнем, что члены вне главной диагонали в детерминанте (32) имеют вид корреляторов однородных величин – $(\hat{p},\hat{\tilde{p}})$ или $(\hat{q},\hat{\tilde{q}})$, но при этом корреляторы разнородных величин типа $(\hat{p},\hat{q})$ и т.п. остаются равными нулю. Тем самым, правая часть равенства (29) не меняется, что соответствует свойству сжатости введенных состояний.

Отметим, что усреднение величин, входящих в формулы (31) и (32), производится с помощью вещественных волновых функций. Вместе с тем, по мнению Умэдзава, аналогичные результаты могут быть получены и с помощью вещественной матрицы плотности. Недавно успешная попытка подобного рода для квантового осциллятора в тепловом равновесии была предпринята Парком [4].

Он предложил способ вычисления элементов детерминанта, входящего в (32), с помощью усреднения с оператором плотности Гиббса–фон Неймана:

$$\hat{\rho}_\tau = Z^{-1}\exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\left(\hat{N}_a+\frac{1}{2}\hat{I}\right)\right], \qquad (33)$$

где $Z = \mathrm{Sp}\exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\left(\hat{N}_a+\frac{1}{2}\hat{I}\right)\right]$, $\hat{I}$ – единичный оператор.

Полученный Парком результат позволяет записать детерминант (32) в виде

$$(\mathcal{UP})^2 = \begin{vmatrix} \mathrm{Sp}[(\Delta\hat{p})^2\hat{\rho}_\tau] & \mathrm{Sp}[\Delta\hat{p}\Delta\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}\Delta\hat{p}\Delta\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}] \\ \mathrm{Sp}[\Delta\hat{q}\Delta\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}\Delta\hat{q}\Delta\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}] & \mathrm{Sp}[(\Delta\hat{q})^2\hat{\rho}_\tau] \end{vmatrix}. \qquad (34)$$

Обращаем внимание на то, что для обеспечения инвариантности $\mathcal{UP}$ здесь вне главной диагонали Парком добавлены члены, отсутствующие в традиционных подходах к вычислению $\mathcal{UP}$.

С математической точки зрения, необходимость подобного обобщения обусловлена тем, что в данном случае входящие под знаком шпура операторы $(\Delta\hat{p})^2$ и $\hat{\rho_\tau}$ или $(\Delta\hat{q})^2$ и $\hat{\rho_\tau}$ не коммутируют между собой. Поэтому способ вычисления дисперсий, принятый в классической теории вероятностей или в квантовой механике при использовании чистых состояний, требует обобщения, на что было убедительно указано еще в работе Вигнера и Яназе [5].

Недиагональные члены в детерминанте (34) можно согласно Парку преобразовать, используя формулу (33) и правила коммутации

$$\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}\ \hat{a} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)\hat{a}\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}};\quad \hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}\ \hat{a}^+ = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)\hat{a}^+\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}. \qquad (35)$$

Для этого надо учесть, что в данном случае $\overline{(\Delta\hat{p})^2} = \overline{(\hat{p})^2}$, $\overline{(\Delta\hat{q})^2} = \overline{(\hat{q})^2}$ и выразить $\hat{p}$ и $\hat{q}$ через $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

В итоге получим

$$\mathrm{Sp}[\hat{p}\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}\hat{p}\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}] = \mathrm{Sp}[\hat{p}\hat{p}_\tau\hat{\rho}_\tau], \qquad (36)$$

где

$$\hat{p}_T = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(e^{\frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}}\hat{a} - e^{-\frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}}\hat{a}^+\right) \tag{37}$$

и аналогично

$$\mathrm{Sp}[\hat{q}\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}\hat{q}\hat{\rho}_T^{\frac{1}{2}}] = \mathrm{Sp}[\hat{q}\hat{q}_T\hat{\rho}_T], \tag{38}$$

где

$$\hat{q}_T = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{\frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}}\hat{a} + e^{-\frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}}\hat{a}^+\right). \tag{39}$$

Выражения (37) и (39) можно рассматривать как перенормированные операторы импульса и координаты, учитывающие воздействие термостата. Через них выражение $(\mathcal{UP})^2$ в левой части (34) можно записать как детерминант

$$(\mathcal{UP})^2 = \begin{vmatrix} (\Delta\hat{p})^2_\rho & (\Delta\hat{p}\;\Delta\hat{\tilde{p}})_\rho \\ (\Delta\hat{p}\;\Delta\hat{\tilde{p}})_\rho & (\Delta\hat{q})^2_\rho \end{vmatrix}, \tag{40}$$

в котором вычисление всех средних с матрицей плотности $\hat{\rho}_T$ приводит к левой части (34).

Сравнение (40) с левой частью выражения (32) показывает, что результат вычисления Парком $(\mathcal{UP})^2$ с помощью вещественной матрицы плотности $\hat{\rho}_T$ по существу не отличается от аналогичного результата, полученного Умэдзавой с помощью вещественных двухмодовых сжатых состояний. Важно, однако, подчеркнуть, что оба результата (32) и (40) относятся к случаю равновесия системы с холодным вакуумом, поскольку правая часть нулевого начала (29) при усреднении по вещественным как чистым, так и смешанным состояниям не изменяется. Тем самым, формальное использование вещественных состояний или вещественных элементов матрицы плотности не позволяет описать равновесие системы с теплым вакуумом не только в случае простых сжатых состояний, но и в случаях термополевой динамики Умэдзавы или термодинамики, основанной на КСМ, даже после обобщения последней в духе Вигнера и Яназе.

Обсудим теперь инвариантность нулевого начала по отношению к переходам между равновесными тепловыми ККС при ненулевых температурах. Воспользуемся для этого инвариантностью нулевого начала относительно группы Лоренца O(2,1). Ее проще всего продемонстрировать, используя равенство $\mathbb{J}_T^2 = \sigma_T^2 + \mathbb{J}_\mathrm{qu}^2$, содержащееся в (21). Из него видно, что

$$\mathbb{J}_T^2 - \sigma_T^2 = \mathbb{J}_\mathrm{qu}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2. \tag{41}$$

Отсюда следует, что в тепловых ККС совокупность величин $(\mathbb{J}_T, \sigma_T)$ можно рассматривать как двумерный времени-подобный вектор в псевдоэвклидовом пространстве состояний, а величину $\hbar/2$ – как длину этого вектора или инвариант группы Лоренца $O(1,1)$. Он аналогичен собственному времени в стандартной СТО в мире событий (размерность группы уменьшилась, поскольку в тепловых ККС среднее значение лагранжиана равно 0). Роль традиционных лоренцевых множителей β_L и γ_L в данном случае выполняют величины

$$\beta_\mathrm{term} = \left[\coth\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right]^{-1}; \quad \gamma_\mathrm{term} = \left[\cosh\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right]. \tag{42}$$

При этом пределы параметра β_term при $T \to \infty$ и $T = 0$ в пространстве состояний отвечают предельным значениям $\beta_L = 0$ и $\beta_L \to 1$ в пространстве событий. В итоге состояние холодного вакуума в группе преобразований Боголюбова соответствует *собственной* инерциальной системе отсчета (ИСО) в СТО для группы $O(1,1)$ в пространстве состояний.

Различным состояниям произвольного вакуума при конечных температурах соответствуют другие ИСО, эквивалентные собственной ИСО. С этой точки зрения, нулевое начало стохастической термодинамики вида (20) при $T \neq 0$ имеет смысл равенства

$$(\mathbb{J}_T)^2 \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \coth^2\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}, \tag{43}$$

где левую и правую части (43) необходимо вычислять независимо с помощью усреднения по тепловым ККС. Отметим, что нулевые значения членов вне главной диагонали детерминанта в формуле (43) обусловлены тем, что усреднение производится по чистым комплексным состояниям. С этим же связано появление справа в формуле (43) ненулевого члена σ_T^2, непосредственно выражающегося через фазу волновой функции и ответственного за квантово-тепловое стохастическое воздействие окружения.

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2013. Т. 58, № 8

Таким образом, мы еще раз убедились в том, что из существующих сегодня теоретических подходов только $(\hbar, k)$-динамика [2] с комплексными волновыми функциями, зависящими от температуры, обеспечивает выполнение нулевого начала при ненулевых температурах. Разумеется, возможность построения адекватной теории с помощью комплексной матрицы плотности остается открытой.

Отметим кстати, что авторы подходов к описанию тепловых явлений, основанных на вещественных волновых функциях или вещественных элементах матрицы плотности, интуитивно понимали важность условия теплового равновесия в виде (24) при $T \neq 0$. Однако в соответствующих теориях это условие всегда имеет один и тот же тривиальный вид (31), (32) или (34):

$$\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \left[\coth^2 \frac{1}{2}(\beta\hbar\omega) - \sinh^{-2} \frac{1}{2}(\beta\hbar\omega)\right]\mathcal{E}_0 =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2, \qquad (44)$$

где параметру β в обеих гиперболических функциях произвольно приписывается одинаковое значение $\frac{1}{kT}$. Затем, чтобы добиться нужного результата позволяющего истолковать параметр T в формуле (44) как температуру, и придать ему форму СН, авторы этих работ просто тождественно переписывали равенство (44), перенося одно из слагаемых слева направо. С математической точки зрения, подобное действие, конечно, допустимо. Однако с физической точки зрения, оно некорректно, так как означает априорное исключение различий в поведении температур термостата и объекта.

Мы видим принципиальное несходство между формулой (44) и полученной нами формулой

$$\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \coth^2 \frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \sinh^{-2}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T_0}\right). \qquad (45)$$

Очень важно отметить, что левая и правая части равенства (45) относятся к разным физическим сущностям: слева стоит характеристика системы с температурой T, способной флуктуировать, а справа – характеристика стохастического окружения с жесткой температурой T_0, которая не флуктуирует из-за бесконечно большого числа степеней свободы кванто-термостата. Недопустимость упомянутой формальной процедуры переноса членов в (44) “слева направо” становится особенно очевидной в пределе высоких температур, когда формула (44) вырождается в тождество

$$\coth^2 \frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T} \to \left(\sinh^2 \frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)^{-1}. \qquad (46)$$

В этом отношении предлагаемый нами подход к получению формулы (45), основанный на раздельном вычислении характеристик объекта и термостата, свободен от указанного произвола и позволяет использовать нулевое начало термодинамики в виде “мягкого” условия, допускающего флуктуации температуры.

5. Выводы

1. Продемонстрировано, что физически значимые подгруппы группы (u, v)-преобразований Боголюбова порождают два типа состояний: *вещественные сжатые* когерентные состояния, обеспечивающие насыщение СН Гейзенберга “координата-импульс” при нулевой температуре, и *комплексные коррелированно-когерентные* состояния, обеспечивающие насыщение СН Шредингера “координата–импульс” при конечных температурах.

2. На микроуровне сформулирован квантовый аналог нулевого начала стохастической термодинамики в форме насыщенного СН Шредингера.

3. Обоснована инвариантность насыщенного СН Шредингера относительно u, v-преобразований Боголюбова

4. Предложено рассматривать насыщенное СН Шредингера как исходное положение модифицированной квантовой теории при конечных температурах.

5. Показано, что в теориях, использующих вещественные волновые функции или вещественные элементы матрицы плотности, корреляция флуктуаций координаты и импульса отсутствует. Поэтому введение понятия теплового равновесия, возникающего в результате корреляции флуктуаций координаты и импульса, в этом случае возможно только условно – в состояниях при нулевой температуре, т.е. в отсутствие теплового воздействия окружения.

6. Установлено, что в теории, оперирующей с комплексными волновыми функциями вакуума (адекватными тепловым ККС), возможна корректная инкорпорация термодинамики в квантовую теорию при любых температурах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 12-01-90423) и УФФИ (проект 12-01-23512).

1. А.Д. Суханов, О.Н. Голубева, Письма в ЭЧАЯ **9**, 3(173), 495 (2012).
2. A.D. Sukhanov, O.N. Golubeva, and V.G. Bar'yakhtar, arXiv: quant-ph/1211.3017v1.
3. H. Umezawa, *Advanced Field Theory. Micro-, Macro-, and Thermal Physics* (American Institute of Physics, New York, 1993).
4. J.M. Park, arXiv: math-phys/0409008v1.
5. E. Wigner and M.M. Yanase, Proc. Nat. Acad. Sci. USA **49**, 910 (1963).

Получено 13.01.13

$\boxed{\textit{А.Д. Суханов}}$, *О.Н. Голубева, В.Г. Бар'яхтар*

КВАНТОВОМЕХАНИЧНИЙ
АНАЛОГ НУЛЬОВОГО ПОЧАТКУ ТЕРМОДИНАМІКИ
(ДО ПРОБЛЕМИ ІНКОРПОРАЦІЇ
ТЕРМОДИНАМІКИ В КВАНТОВІЙ ТЕОРІЇ)

Р е з ю м е

В основі даного підходу до інкорпорації стохастичної термодинаміки в квантову теорію лежить концепція послідовного обліку цілісного стохастичного впливу оточення, що описується хвильовими функціями довільних вакуумів, запропонована нами раніше. У цьому дослідженні ми реалізуємо можливість явної інкорпорації в квантову теорію нульового початку стохастичної термодинаміки в формі насиченого співвідношення невизначеностей Шредінгера. Це дозволяє провести порівняльний аналіз сукупностей станів довільних вакуумів – стислих когерентних (СКС) і корельованих когерентних (ККС) станів. Крім того, ми обговорюємо можливість зіставити СКС і ККС тепловим станам.

$\boxed{\textit{A.D. Sukhanov}}$, *O.N. Golubeva, V.G. Bar'yakhtar*

QUANTUM-MECHANICAL ANALOG
OF THE ZEROTH LAW OF THERMODYNAMICS
(TO THE PROBLEM OF INCORPORATING
THERMODYNAMICS INTO THE
QUANTUM-MECHANICAL THEORY)

S u m m a r y

The presented approach to incorporate the stochastic thermodynamics into the quantum-mechanical theory is based on the idea, proposed earlier by the authors, to consistently consider the stochastic influence by the environment considered as the whole and described by the wave functions of arbitrary vacua. In this research, a possibility of the explicit incorporation of the zeroth law of stochastic thermodynamics into the quantum-mechanical theory in the form of the saturated Schrödinger uncertainty relation is realized. This allows a comparative analysis between the sets of arbitrary vacuum states, namely, squeezed coherent (SCSs) and correlated coherent (CCSs) states, to be carried out. A possibility to establish a relation between SCSs and CCSs, on the one hand, and thermal states, on the other hand, is discussed.