СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 8220

П.Цише, В.А.Загребнов

О КОРРЕЛЯЦИЯХ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯХ ЧИСЛА ЧАСТИЦ В ВЫДЕЛЕННЫХ ОБЪЕМАХ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 8220

П.Цише,* В.А.Загребнов

О КОРРЕЛЯЦИЯХ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯХ ЧИСЛА ЧАСТИЦ В ВЫДЕЛЕННЫХ ОБЪЕМАХ

* Постоянный адрес: Технический университет, Дрезден, ГДР.

Цише П., Загребнов В.А. P4 - 8220

О корреляциях и распределениях числа частиц в выделенных объемах

Рассмотрено, как из функции распределения системы многих частиц произвольной статистики следует распределение и корреляция числа частиц в выделенных объемах. Все полученные результаты применимы как для квантовой, так и для классической статистик.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1974

Ziesche P., Zagrebnov V.A. P4 - 8220

On Correlations and Distributions of the Number of Particle within Partial Volumes

It is considered, how distribution and correlations of the number particles within arbitistics partial volumes of many particle systems with any statistics follow from its reduced distribution functions. All results are valid for both quantum and classical systems.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

I. Введение

В работах Майера и Макмиллана впервые в рамках классической статистической механики рассматривалась проблема получения распределений числа частиц в выделенных объемах [I]. Там же в связи с вопросом многокомпонентных растворах и групповых разложениях решалась классическая задача о корреляции числа частиц в выделенных объемах. При этом естественным образом использовался формализм большого канонического распределения, число частиц в котором не фиксировано.

Настоящая работа посвящена исследованию квантового аналога проблем, рассмотренных впервые Майером и Макмилланом, и опирается на некоторые результаты, полученные ранее одним из авторов [2,3,4]. В работе [2] доказаны некоторые общие теоремы, связанные с задачей о нормальном упорядочении произведений операторов; затем было показано [3,4], что эти теоремы полезны в ряде задач теории многих тел. А именно, их можно использовать для построения функций распределения как для классических равновесных систем [4], так и для классических и квантовых неравновесных систем [3].

Целью настоящей работы является вывод общей формулы для распределения числа частиц (с произвольной статистикой) в выделенном объеме Ω и для их корреляций и рассмотрение некоторых простейших приложений этой формулы. Полученные соотношения могут быть полезны также для описания флуктуаций в лазерах, в теории критических явлений и флуктуационно-диссипационных явлений в неравновесных системах.

2. Операторы

Для описания квантовых систем тождественных частиц (Бозе или Ферми) воспользуемся формализмом чисел заполнения, построенном на операторах $\psi(x), \psi^{+}(x)$:

$$[\psi(x), \psi^{+}(x')]_{\mp} = \delta(x-x') \quad ; \qquad \text{(I)}$$

$$[\psi(x), \psi(x')]_{\mp} = [\psi^{+}(x), \psi^{+}(x')]_{\mp} = 0 \quad ,$$

где $x = (\vec{r}, s)$ - координата и спин частицы. Поскольку $\psi^{+}(x)$ и $\psi(x)$ являются операторами рождения и уничтожения частицы в точке $x = (\vec{r}, s)$, то оператор числа частиц в выделенном объеме $\Omega \subset \mathbb{R}^{d}$ имеет вид:

$$\mathcal{N}_{\Omega} = \int dx\ \psi^{+}(x) \chi_{\Omega} \psi(x) \quad ; \quad \chi_{\Omega}(x) = \begin{cases} 1 & \vec{r} \in \Omega \\ 0 & \vec{r} \,\overline{\in}\, \Omega \end{cases} \qquad (2)$$

Из (2) сразу следует, что оператор числа пар, троек и вообще комплексов из s частиц в объеме Ω записывается в виде:

$$\binom{\mathcal{N}_{\Omega}}{s} = N_{\psi^{+}\psi}\ \frac{\mathcal{N}_{\Omega}^{s}}{s!} \quad , \qquad (3)$$

где $N_{\psi^{+}\psi}$ - оператор нормального произведения. В [2] показано, что $N_{\psi^{+}\psi}$ является частным случаем более общих упорядочивающих операторов. Выражение (3) более подробно записывается следующим образом:

$$\binom{\mathcal{N}_{\Omega}}{s} = \frac{1}{s!} \int dx_{1} \chi_{\Omega}(x_{1}) \ldots \int dx_{s} \chi_{\Omega}(x_{s}) Z_{s}(x_{1} \ldots x_{s}) \equiv \qquad (4)$$

$$\equiv \frac{1}{s!} \chi_{\Omega}^{s} Z_{s} \quad ; \quad Z_{s}(x_{1} \ldots x_{s}) \equiv \psi^{+}(x_{1}) \ldots \psi^{+}(x_{s}) \psi(x_{s}) \ldots \psi(x_{1}) ,$$

где $Z_{s}(x_{1} \ldots x_{s})$ -оператор распределения комплексов из s - частиц в пространстве $\mathbb{R}^{d}$.

Так же, как и в работе Н.Н.Боголюбова [5], операторы $Z_{s}(x_{1} \ldots x_{s})$ порождаются производящим функционалом $Z[\sigma]$:

$$Z[\sigma] = \sum_{s \geq 0} \frac{1}{s!} \sigma^{s} Z_{s} \equiv N_{\psi^{+}\psi}\ e^{\psi^{+}\sigma\psi} \ ;$$

$$\sigma^{s} Z_{s} \equiv \int dx_{1} \ldots dx_{s}\, \sigma(x_{1}) \ldots \sigma(x_{s}) Z_{s}(x_{1} \ldots x_{s}) \ ; \qquad (5)$$

$$\psi^{+}\sigma\psi \equiv \int dx\ \psi^{+}(x) \sigma(x) \psi(x) \ ,$$

где $\sigma(x)$ – произвольная функция. Если выбрать в качестве $\sigma(x)$ функцию $\sigma(x) = \alpha \chi_{\Omega}(x)$, $Z[\sigma]$ является производящей функцией операторов (3): $\binom{\mathcal{N}_{\Omega}}{s} = \frac{\partial^{s}}{\partial \alpha^{s}} Z[\alpha \chi_{\Omega}] \Big|_{\alpha = 0}$.

Найдем далее вероятность того, что в объеме Ω находится в точности N частиц. Введем для этой цели оператор $\delta_{N, \mathcal{N}_{\Omega}}$. Запишем вначале представление для единичного оператора в фоковском пространстве состояний [x]

$$1 = \sum_{N_{1} N_{2} \ldots} \frac{(\psi_{1}^{+})^{N_{1}}}{\sqrt{N_{1}!}} \cdot \frac{(\psi_{2}^{+})^{N_{2}}}{\sqrt{N_{2}!}} \ldots |0\rangle\langle 0| \ldots \frac{(\psi_{2})^{N_{2}}}{\sqrt{N_{2}!}} \cdot \frac{(\psi_{1})^{N_{1}}}{\sqrt{N_{1}!}} =$$

$$= N_{\psi^{+}\psi} \sum_{N_{1} N_{2} \ldots} \frac{\mathcal{N}_{1}^{N_{1}}}{N_{1}!} \cdot \frac{\mathcal{N}_{2}^{N_{2}}}{N_{2}!} \ldots e^{-\mathcal{N}_{\infty}} \ , \qquad (6)$$

---

x) $\mathcal{N}_{\infty} \equiv \psi^{+}\psi = \int \psi^{+}(x) \psi(x) dx = \sum_{i} \mathcal{N}_{i} \quad ; \quad \mathcal{N}_{i} = \psi_{i}^{+} \psi_{i} \ ,$

$\psi_{i} \equiv \sqrt{dx_{i}}\ \psi(x_{i}) \quad ; \quad x_{i} = (\vec{r}_{i}, s) \ , \ \vec{r}_{i} \in \mathbb{R}^{d} \ .$

где используется доказанное в Приложении I представление для проекционного оператора вакуума (см.также [6]):

$$|0\rangle\langle 0| = N_{\psi^+\psi}\, e^{-\psi^+\psi} \equiv N_{\psi^+\psi}\, e^{-\mathcal{N}_\infty}, \tag{7}$$

где $\mathcal{N}_\infty$ - оператор числа частиц во всем пространстве $\mathbb{R}^d$. Действие оператора $\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega}$ на (6) определяется следующим образом:

$$\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega}\cdot 1 \overset{\text{def}}{=} \sum_{N_1 N_2 \ldots} \delta_{N,\,[\chi_\Omega(1)N_1+\ldots]} \frac{(\psi_1^+)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} \ldots |0\rangle\langle 0| \ldots \frac{(\psi_1)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} = \tag{8}$$

$$= N_{\psi^+\psi}\, \frac{\mathcal{N}_\Omega^N}{N!}\, e^{\mathcal{N}_{\infty-\Omega}} \cdot e^{-\mathcal{N}_\infty} .$$

Воспользовавшись тождеством $\mathcal{N}_\infty = \mathcal{N}_\Omega + \mathcal{N}_{\infty-\Omega}$, получаем, наконец, для оператора распределения числа частиц в выделенном объеме Ω следующее представление:

$$\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega} = N_{\psi^+\psi}\, \frac{\mathcal{N}_\Omega^N}{N!}\, e^{-\mathcal{N}_\Omega} \equiv \frac{\chi_\Omega^N}{N!} \sum_{S\geq 0} \frac{(-\chi_\Omega)^S}{S!} Z_{N+S} \; ; \tag{9}$$

$$\sum_N \delta_{N,\mathcal{N}_\Omega} = 1 .$$

При условии $N = 0$ и $\Omega \to \infty$ из выражения (9) получаем в качестве специального случая проекционный оператор вакуума (7). Заметим также, что (9) следует из следующего, применимого для натуральных чисел N и M представления символа Кронекнера:

$$\delta_{N,M} = \binom{M}{N} (1-\alpha)^{M-N}\Big|_{\alpha=1} = \frac{1}{N!}\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^N (1-\alpha)^M\Big|_{\alpha=1} = \tag{10}$$

$$= \sum_{S\geq 0} (-1)^S \binom{N+S}{N} \binom{M}{N+S} .$$

Используя (3) и (4), из (10) сразу получаем выражение (9).

Из выражения (9) нетрудно получить представление для распределения числа частиц в неперекрывающихся выделенных объемах $\Omega_1, \Omega_2 \ldots$

$$\delta_{N_1,\mathcal{N}_{\Omega_1}} \delta_{N_2,\mathcal{N}_{\Omega_2}} \ldots = N_{\psi^+\psi}\, \frac{\mathcal{N}_{\Omega_1}^{N_1}}{N_1!} \cdot \frac{\mathcal{N}_{\Omega_2}^{N_2}}{N_2!} \ldots e^{-(\mathcal{N}_{\Omega_1}+\mathcal{N}_{\Omega_2}+\ldots)} =$$

$$= \frac{\chi_{\Omega_1}^{N_1}}{N_1!} \cdot \frac{\chi_{\Omega_2}^{N_2}}{N_2!} \ldots \sum_{S\geq 0} \frac{1}{S!} (-\chi_{\Omega_1} - \chi_{\Omega_2} - \ldots)^S Z_{N_1+N_2+\ldots+S} . \tag{11}$$

С помощью (11) получаем, что для произвольного разбиения объема Ω :

$$\sum_{N_1 N_2 \ldots} \delta_{N,(N_1+N_2+\ldots)} \delta_{N_1,\mathcal{N}_{\Omega_1}} \cdot \delta_{N_2,\mathcal{N}_{\Omega_2}} \ldots = \delta_{N,\mathcal{N}_\Omega} \; ;$$

$$\Omega = \bigcup_{i=1} \Omega_i .$$

Из (11) для оператора $\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega}$ следует представление, напоминающее закон Пуассона, а именно, для оператора вероятности найти N частиц в объеме Ω и одновременно S частиц в оставшемся объеме $\infty - \Omega$ имеем

$$\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega} \delta_{S,\mathcal{N}_{\infty-\Omega}} = N_{\psi^+\psi}\, \frac{\mathcal{N}_\Omega^N}{N!}\, \frac{\mathcal{N}_{\infty-\Omega}^S}{S!}\, e^{-\mathcal{N}_\infty} . \tag{12}$$

Если нас интересует вероятность найти N частиц в объеме Ω и какое-нибудь числа частиц в $\infty - \Omega$, необходимо (12) просуммировать по S, в этом случае мы получаем в точности (9).

Из сравнения (9) или (11) с (5) ясно, что производящий функционал $Z[\sigma]$ для $\sigma(x) = (\alpha - 1)\chi_\Omega(x)$ и, соответственно, $\sigma(x) = (\alpha_1 - 1)\chi_{\Omega_1}(x) + \ldots$ содержит также производящие функции для операторов числа частиц (9) и (11). Кроме того, операторы корреляций числа частиц опять-таки появляются из производящей функции по α или $\alpha_1, \alpha_2 \ldots$, в которую превращается функционал $Z[\sigma]$ при $\sigma(x) = (e^{\alpha} - 1)\chi_{\Omega}(x)$:

$$Z[(e^{\alpha}-1)\chi_{\Omega}] = N_{\psi^+\psi}\, e^{\psi^+(e^{\alpha\chi_{\Omega}}-1)\psi} = e^{\alpha n_{\Omega}} ;$$
$$Z[(e^{\alpha_1}-1)\chi_{\Omega_1}+\ldots] = N_{\psi^+\psi}\, e^{\psi^+(e^{\alpha_1\chi_{\Omega_1}+\alpha_2\chi_{\Omega_2}+\ldots}-1)\psi} = \tag{13}$$
$$= e^{\alpha_1 n_{\Omega_1}+\alpha_2 n_{\Omega_2}+\ldots} .$$

При этом для получения последних равенств мы воспользовались свойствами оператора $N_{\psi^+\psi}$ [2] и характеристической функции: $(\chi_{\Omega}(x))^s = \chi_{\Omega}(x)$; $\chi_{\Omega_1}(x)\chi_{\Omega_2}(x) = 0$, если $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$.

3. Средние

Из вышеизложенного следует, что вся интересующая нас информация о распределениях в произвольных выделенных объемах содержится в производящем функционале плотностей $n[\sigma]$ (ср.(5)):

$$n_s(x_1 \ldots x_s) = \overline{Z_s(x_1 \ldots x_s)} ;$$
$$n[\sigma] = \sum_{s \geq 0} \frac{1}{s!}\sigma^s n_s = \sum_{s \geq 0} \frac{1}{s!}\sigma^s \overline{Z_s} \equiv \overline{Z[\sigma]} , \tag{14}$$

где $\overline{A} = Sp\rho A$, ρ – статистический оператор: $Sp\,\rho = 1$.
Оператор ρ можно представить в виде разложения по фоковским состояниям:

$$\rho(\psi^+,\psi) = \sum_N{}' \frac{1}{N!}\int dx_1 \int dx_1' \ldots \int dx_N \int dx_N'\, \psi^+(x_1)\ldots\psi^+(x_N)|0\rangle \times$$
$$\times\, \rho(x_1 \ldots x_N, x_N' \ldots x_1')\langle 0|\psi(x_N')\ldots\psi(x_1') \equiv \tag{15}$$
$$\equiv \sum_N{}' \frac{1}{N!}(\psi^+)^N|0\rangle \rho_N \langle 0|(\psi)^N .$$

Здесь для простоты предполагается, что гамильтониан системы сохраняет число частиц, поэтому статистическая матрица плотности в представлении чисел заполнения диагональна.

С помощью (7) $Z[\sigma]$ из (5) можно представить в таком же виде, как и ρ :

$$Z[\sigma] = N_{\psi^+\psi}\, e^{\psi^+(1+\sigma)\psi}\, e^{-\psi^+\psi} = \sum_N \frac{1}{N!}(\psi^+)^N|0\rangle(1+\sigma)^N\langle 0|(\psi)^N \tag{16}$$

Из этого следует, что для функционала $n[\sigma]$ соответствующее выражение имеет вид:

$$n[\sigma] = \sum_{N,M}\frac{1}{N!M!}(1+\sigma)^N \langle\psi^N \psi^{+M}\rangle \rho_M \langle\psi^M \psi^{+N}\rangle = \tag{17}$$
$$= \sum_N \frac{1}{N!}(1+\sigma)^N \rho_N \langle\psi^N \psi^{+N}\rangle .$$

Возникающий при вычислении $\langle\psi^N\psi^{+N}\rangle = \langle\psi_N \ldots \psi_1, \psi_1^+ \ldots \psi_N^+\rangle$ перманент или детерминант симметризует правую часть множества переменных в $\rho_N(x_1 \ldots x_N ; x_N' \ldots x_1')$:

$$\rho_N^{\pm}(x_1 \ldots x_N ; x_N' \ldots x_1') = \sum_P (\pm 1)^P \rho_N(x_1 \ldots x_N ; x_{P_1}' \ldots x_{P_N}') . \tag{18}$$

Таким образом, в правой части (17) получаем следующий производящий функционал:

$$\rho^{\pm}[\tau] = \sum_N \frac{1}{N!}\int dx_1 \tau(x_1)\ldots\int dx_N \tau(x_N)\rho_N^{\pm}(x_1 \ldots x_N ; x_N' \ldots x_1') \equiv \tag{19}$$
$$\equiv \sum_N \frac{1}{N!}\tau^N \rho_N^{\pm} .$$

Это означает, что статистический функционал $\rho^{\pm}[\tau]$ и функционал плотностей $n[\sigma]$ отличаются друг от друга только выбором функций τ, σ :

$$n[\sigma] = \rho^{\pm}[1+\sigma]\,. \tag{20}$$

Для коэффициентов в разложении $n[\sigma]$ по σ это приводит к

$$n_s(x_1 \ldots x_s) = \sum_{N \geq s} \frac{1}{(N-s)!} \int dx_{s+1} \ldots \int dx_N\, \rho_N^{\pm}(x_1 \ldots x_N; x_N \ldots x_1)\,. \tag{21}$$

Из (4) и (14) сразу следует выражение для плотности среднего числа комплексов из s частиц, поскольку интегрирование по области Ω, согласно (4), дает среднее число комплексов из s частиц в объеме Ω:

$$\overline{\binom{\mathfrak{N}_\Omega}{s}} = \frac{1}{s!} \chi_\Omega^s n_s\,. \tag{22}$$

Из этого выражения следует также, согласно (9) и (10), распределение числа частиц в объеме Ω или объемах $\Omega_1, \Omega_2 \ldots$ x)

$$W_\Omega(N) = \overline{\delta_{N,\mathfrak{N}_\Omega}} = \frac{\chi_\Omega^N}{N!} \sum_s \frac{(-\chi_\Omega)^s}{s!} n_{N+s}\,; \tag{23}$$

$$W\binom{N_1\, N_2}{\Omega_1\, \Omega_2 \ldots} = \overline{\delta_{N_1,\mathfrak{N}_{\Omega_1}} \delta_{N_2,\mathfrak{N}_{\Omega_2}} \ldots} = \frac{\chi_{\Omega_1}^{N_1}}{N_1!} \cdot \frac{\chi_{\Omega_2}^{N_2}}{N_2!} \ldots \times$$

$$\times \sum_{s \geq 0} \frac{1}{s!} (-\chi_{\Omega_1} - \chi_{\Omega_2} - \ldots)^s\, n_{N_1+N_2+\ldots+s}\,;$$

Для $N = 0, 1, 2$ первое из соотношений (23) записывается следующим образом:

x) Здесь $W_\Omega(N)$ означает вероятность найти в объеме Ω <u>точно</u> N частиц.

$$W_\Omega(0) = 1 - \tfrac{1}{1!} \int dx\, \chi_\Omega(x) n_1(x) + \tfrac{1}{2!} \int dx_1 \chi_\Omega(x_1) \int dx_2 \chi_\Omega(x_2) n_2(x_1 x_2) + \ldots$$

$$W_\Omega(1) = \tfrac{1}{1!} \int dx_1 \chi_\Omega(x_1) \left[n_1(x_1) - \tfrac{1}{1!} \int dx_2 \chi_\Omega(x_2) n_2(x_1 x_2) + \ldots \right]; \tag{24}$$

$$W_\Omega(2) = \tfrac{1}{2!} \int dx_1 \chi_\Omega(x_1) \int dx_2 \chi_\Omega(x_2) \left[n_2(x_1 x_2) - \tfrac{1}{1!} \int dx_3 \chi_\Omega(x_3) n_3(x_1 x_2 x_3) + \ldots \right].$$

В общем случае

$$W_\Omega(N) = \frac{1}{N!} \int dx_1 \chi_\Omega(x_1) \ldots \int dx_N \chi_\Omega(x_N) \times$$

$$\times \sum_{s \geq 0} \frac{(-1)^s}{s!} \int dx_{N+1} \chi_\Omega(x_{N+1}) \ldots \int dx_{N+s} \chi_\Omega(x_{N+s})\, n_{N+s}(x_1 \ldots x_{N+s})\,. \tag{25}$$

Поэтому для определения вероятности в объеме Ω найти N частиц надо знать N- частичную плотность $n_N(x_1 \ldots x_N)$, $(N+1)$- частичную плотность $n_{N+1}(x_1 \ldots x_{N+1})$ и т.д. Первая строка в (24) совпадает по существу с результатом, полученным Ленком [7] другим образом.

Флуктуации и корреляции чисел частиц определяются средними от операторов моментов распределения частиц. В духе обобщенной теории комулентных разложений [8] рассмотрим следующие производящие функции:

$$\exp[\alpha N_\Omega + \Delta_\Omega(\alpha)] \stackrel{def}{=} \exp(\overline{\alpha \mathfrak{N}_\Omega}) = n[(e^\alpha - 1)\chi_\Omega]\,;$$

$$\exp\left[\alpha_1 N_{\Omega_1} + \Delta_{\Omega_1}(\alpha_1) + \alpha_2 N_{\Omega_2} + \Delta_{\Omega_2}(\alpha_2) + \ldots + K\binom{\alpha_1\, \alpha_2}{\Omega_1\, \Omega_2 \ldots}\right] \stackrel{def}{=} \tag{26}$$

$$\stackrel{def}{=} \exp\left(\overline{\alpha_1 \mathfrak{N}_{\Omega_1} + \alpha_2 \mathfrak{N}_{\Omega_2} + \ldots}\right) = n[(e^{\alpha_1} - 1)\chi_{\Omega_1} + (e^{\alpha_2} - 1)\chi_{\Omega_2} + \ldots]\,;$$

$$N_\Omega = \overline{\mathfrak{N}}_\Omega\,; \quad \Delta_\Omega(\alpha) = \sum_{s \geq 2} \frac{\alpha^s}{s!} \Delta_\Omega^s N \quad {}^{*)}$$

*) $\Delta_\Omega^s N = \overline{(\mathfrak{N}_\Omega - \overline{\mathfrak{N}}_\Omega)^2}\,; \ldots\ \Delta_\Omega^4 N = \overline{(\mathfrak{N}_\Omega - \overline{\mathfrak{N}}_\Omega)^4} - 3\left[\overline{(\mathfrak{N}_\Omega - \overline{\mathfrak{N}}_\Omega)^2}\right]^2, \ldots$

$K\binom{1\;\; 1}{\Omega_1\, \Omega_2} = \overline{(\mathfrak{N}_{\Omega_1} - \overline{\mathfrak{N}}_{\Omega_1})(\mathfrak{N}_{\Omega_2} - \overline{\mathfrak{N}}_{\Omega_2})}\,, \ldots$

$$K\begin{pmatrix}\alpha_1 & \alpha_2 \\ \Omega_1 & \Omega_2\end{pmatrix}\ldots = \sum_{\substack{s_1, s_2 \ldots \\ (s_i \geq 0,\ s_1+s_2+\ldots \geq 2)}} \frac{\alpha_1^{s_1}}{s_1!} \cdot \frac{\alpha_2^{s_2}}{s_2!} \ldots K\begin{pmatrix} s_1 & s_2 \\ \Omega_1 & \Omega_2\end{pmatrix}\ldots \ .$$

Из сравнения коэффициентов в разложениях по α и $\alpha_1, \alpha_2 \ldots$ следует представление для флуктуации $\Delta^s_{\Omega} N$ корреляции $K\binom{s_1}{\Omega_1}\ldots$ через интегралы по функции распределения $n_s(x_1 \ldots x_s)$.

Согласованность полученных формул подтверждается следующим. Полученные из операторных соотношений (4) и (I3) выражения (22) и (26) для распределения чисел частиц можно получить непосредственно. Получим, например, выражение для среднего числа комплексов из s частиц

$$\overline{\binom{\mathcal{N}_\Omega}{s}} = \sum_N \binom{N}{s} W_\Omega(N) = \sum_{N,r} \binom{N}{s} \frac{\chi_\Omega^N}{N!} \frac{(-\chi_\Omega)^r}{r!} n_{N+r} = \tag{27}$$

$$= \frac{\chi_\Omega^s}{s!} \sum_{N,r} (-1)^r \binom{N}{r} \frac{\chi_\Omega^N}{N!} n_{s+N} = \frac{\chi_\Omega^s}{s!} n_s \ ,$$

которое совпадает с (22). Более того, (27) представляет из себя разложение n_s по $W_\Omega(N)$, обратное разложению (23).

С помощью соотношения (2I) распределение частиц можно выразить непосредственно через $\rho^\pm_N$:

$$W_\Omega(N) = \frac{\chi_\Omega^N}{N!} \sum_{s \geq 0} \frac{(-\chi_\Omega)^s}{s!} \sum_{M=N+s}^{\infty} \frac{\chi_\infty^{M-N-s}}{(M-N-s)!} \rho^\pm_M = \tag{28}$$

$$= \frac{\chi_\Omega^N}{N!} \sum_{M=N}^{\infty} \frac{\chi_{\infty-\Omega}^{M-N}}{(M-N)!} \rho^\pm_M \ .$$

Для случая $\Omega \to \infty$ получаем:

$$W_\infty(N) \doteq \frac{\chi_\infty^N}{N!} \rho^\pm_N \quad ; \tag{29}$$

это означает, что нормировка $\rho^\pm_N$ определяет распределение частиц во всем объеме.

Сравнение (22) и (23) показывает, что одночастичная функция $n_1(x)$ не является плотностью вероятности в том смысле, что интегрирование $n_1(x)$ по области Ω не дает вероятность найти в Ω одну частицу:

$$W_\Omega(1) = \chi_\Omega(x) n_1(x) - 1/1!\, \chi_\Omega^2 n_2 + 1/2!\, \chi_\Omega^3 n_3 + \ldots \neq \chi_\Omega(x) n_1(x) = N_\Omega \ , \tag{30}$$

хотя для бесконечного малых объемов $\Omega \to dx$ применимо соотношение

$$\frac{W_{dx}(1)}{dx} = n_1(x) + o(dx) = \frac{N_{dx}}{dx} + o(dx) \ . \tag{31}$$

Качественно для $W_\Omega(x)$ и N_Ω следует ожидать картину, изображенную на рис.I

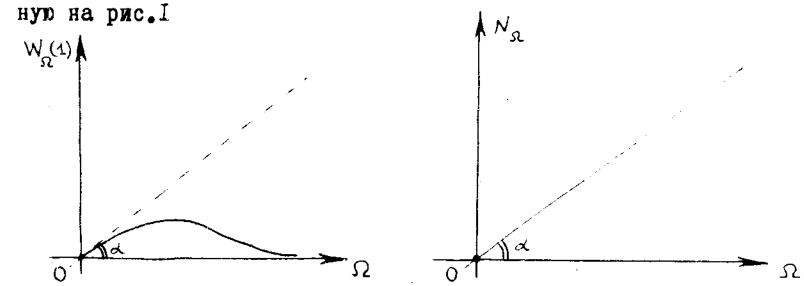

Рис.I

Интегрирование $n_1(x)$ по объему Ω дает только среднее число частиц в Ω, поэтому $n_1(x)$ означает лишь плотность среднего числа частиц.

4. Корреляции

Характерным для рассматриваемых здесь систем многих частиц является наличие корреляций в том смысле, что $n_2(x_1 x_2) \neq n_1(x_1) n_1(x_2)$ и т.д., т.е. из-за статистики и взаимодействия между частицами последние равенства выполняется не строго, а лишь приближенно $n_2(x_1 x_2) \simeq n_1(x_1) n_2(x_2)$. Назовем нефакторизующиеся разности $u_r(x_1 \ldots x_r) = n_r(x_1 \ldots x_r) - n_1(x_1) n_{r-1}(x_2 \ldots x_r) - \ldots - n_1(x_1) \ldots n_1(x_r)$ корреляциями плотности и запишем соответствующее разложение Урселла-Майера в виде функционала (при этом $n_1(x) \equiv u_1(x)$)

$$n[\sigma] = \sum_{s \geq 0} \frac{1}{s!} \sigma^s n_s = \exp\left(\sum_r \frac{1}{r!} \sigma^r u_r\right) = e^{u[\sigma]}. \quad (32)$$

Для среднего числа комплексов из s частиц получаем поэтому следующее соотношение:

$$\sum_s \alpha^s \overline{\binom{n_\Omega}{s}} = \sum_s \frac{\alpha^s}{s!} \chi_\Omega^s n_s = n[\alpha \chi_\Omega] = e^{u[\alpha \chi_\Omega]} = \\ = \exp\left(\chi_\Omega u_1 + {}^1\!/_{2!}\, \alpha^2 \chi_\Omega^2 u_2 + \ldots\right). \quad (33)$$

С помощью тождества

$$f(\alpha)\, e^{\alpha N_\Omega} = f\left(\frac{\partial}{\partial N_\Omega}\right) e^{\alpha N_\Omega} \quad (34)$$

(33) записывается в виде:

$$\sum_{s \geq 0} \alpha^s \overline{\binom{n_\Omega}{s}} = \exp\left[{}^1\!/_2\, \chi_\Omega^2 u_2 \left(\frac{\partial}{\partial N_\Omega}\right)^2 + \ldots\right] \exp(\alpha N_\Omega). \quad (35)$$

Поэтому для среднего числа комплексов из s частиц получаем следующее:

$$\overline{\binom{n_\Omega}{s}} = \exp\left[{}^1\!/_{2!}\, \chi_\Omega^2 u_2 \left(\frac{\partial}{\partial N_\Omega}\right)^2 + \ldots\right] \frac{N_\Omega^s}{s!} = \\ = \frac{N_\Omega^s}{s!} + \frac{\chi_\Omega^s u_2}{2!} \cdot \frac{N_\Omega^{s-2}}{(s-2)!} + \ldots \quad (36)$$

Аналогичные выражения получаем для распределений числа частиц:

$$W_\Omega(N) = \exp\left[{}^1\!/_{2!}\, \chi_\Omega^2 u_2 \left(\frac{\partial}{\partial N_\Omega}\right)^2 + \ldots\right] \frac{(N_\Omega)^N}{N!} e^{-N_\Omega};$$

$$W\begin{pmatrix} N_1 & N_2 & \\ \Omega_1 & \Omega_2 & \ldots \end{pmatrix} = \exp\left[{}^1\!/_{2!}\left(\frac{\partial}{\partial N_{\Omega_1}} \chi_{\Omega_1} + \frac{\partial}{\partial N_{\Omega_2}} \chi_{\Omega_2} + \ldots\right)^2 u_2 + \ldots\right] \times \\ \times \frac{(N_{\Omega_1})^{N_1}}{N_1!} e^{-N_{\Omega_1}} \frac{(N_{\Omega_2})^{N_2}}{N_2!} e^{-N_{\Omega_2}} \ldots \quad (37)$$

Таким образом, видно, как корреляции плотности $u_2, u_3, \ldots$ приводят к систематическим отклонениям от тех выражений, которые соответствуют невзаимодействующим больцмановским частицам, а именно: $N_\Omega^s/s!$ для среднего числа комплексов из s частиц и закону Пуассона в распределении числа частиц. Можно, наконец, выразить распределение чисел частиц в различных выделенных объемах через распределения в этих объемах:

$$W\begin{pmatrix} N_1 & N_2 & \\ \Omega_1 & \Omega_2 & \ldots \end{pmatrix} = \exp\left[\frac{\partial^2}{\partial N_{\Omega_1} \partial N_{\Omega_2}} \chi_{\Omega_1} \chi_{\Omega_2} u_2 + \ldots\right] W_{\Omega_1}(N_1)\, W_{\Omega_2}(N_2) \ldots \quad (38)$$

Отклонение от простого произведения $\prod_i w_{\Omega_i}(N_i)$
опять выражается через корреляции u_2, u_3 и т.д.

Сравнение (26) и (32) показывает, что имеют место следующие соотношения между флуктуациями и корреляциями:

$$\alpha N_\Omega + \Delta_\Omega(\alpha) = u\left[(e^\alpha - 1)\chi_\Omega\right] ;$$
$$\alpha_1 N_{\Omega_1} + \Delta_{\Omega_1}(\alpha_1) + \alpha_2 N_{\Omega_2} + \Delta_{\Omega_2}(\alpha_2) + \ldots + K\begin{pmatrix}\alpha_1 \alpha_2 \\ \Omega_1 \Omega_2 \ldots\end{pmatrix} = \tag{39}$$
$$= u\left[(e^{\alpha_1} - 1)\chi_{\Omega_1} + (e^{\alpha_2} - 1)\chi_{\Omega_2} + \ldots\right] .$$

Из этого для флуктуаций с помощью введенных в [2] S-частичных разложений получаем:

$$\Delta^S_\Omega N = \sum_{r(\leq S)} \left\{ {r \atop S} \right\} \chi^r_\Omega u_r . \tag{40}$$

Более подробно:

$$\begin{aligned} \Delta^2_\Omega N &= \chi_\Omega u_1 + \chi^2_\Omega u_2 ; \\ \Delta^3_\Omega N &= \chi_\Omega u_1 + 3\chi^2_\Omega u_2 + \chi^3_\Omega u_3 ; \\ \Delta^4_\Omega N &= \chi_\Omega u_1 + 7\chi^2_\Omega u_2 + 6\chi^3_\Omega u_3 + \chi^4_\Omega u_4 ; \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{41}$$

При исчезающих корреляциях плотности $u_2 = u_3 = \ldots = 0$
все флуктуации становятся равными среднему числу частиц $N_\Omega = \chi_\Omega u_1$, что соответствует распределению по закону Пуассона. Ненулевые u_r приводят к отклонению флуктуаций от соответствующих закону Пуассона. И з (39) далее получаются выражения для простейших корреляций числа частиц:

$$\begin{aligned} K\begin{pmatrix}1 & 1 \\ \Omega_1 & \Omega_2\end{pmatrix} &= \chi_{\Omega_1}\chi_{\Omega_2} u_2 ; \\ K\begin{pmatrix}2 & 1 \\ \Omega_1 & \Omega_2\end{pmatrix} &= \chi_{\Omega_1}\chi_{\Omega_2} u_2 + \chi^2_{\Omega_1}\chi_{\Omega_2} u_3 ; \\ K\begin{pmatrix}2 & 2 \\ \Omega_1 & \Omega_2\end{pmatrix} &= \chi_{\Omega_1}\chi_{\Omega_2} u_2 + (\chi^2_{\Omega_1}\chi_{\Omega_2} + \chi_{\Omega_1}\chi^2_{\Omega_2}) u_3 + \\ &+ \chi^2_{\Omega_1}\chi^2_{\Omega_2} u_4 , \end{aligned} \tag{42}$$

из которых видно, что корреляции чисел частиц в различных выделенных объемах имеют место лишь в при $u_r \neq 0$.

5. Классические системы

Все соотношения, полученные в(2-4), применимы также к классическим системам. Воспользуемся для этого классическим формализмом чисел заполнения, предложенном в работе [4,9] :

$$[\psi(x), \psi^+(x')]_\mp = \delta(x,x') ; \quad [\psi(x); \psi(x')]_\mp = [\psi^+(x), \psi^+(x')]_\mp = 0 ;$$
$$\psi|0\rangle = \langle 0|\psi^+ = 0 \quad ; \quad \langle 0|0\rangle = 1 . \tag{43}$$

Здесь $\psi^+(x)$ и $\psi(x)$ описывают рождение и уничтожение частицы в малой ячейке $\Delta x_i = \Delta x$ μ - пространства:

$$x \equiv (\vec{r}, \vec{p}) \; ; \; \delta(x,x') \equiv \begin{cases} 1/\Delta x & x = x' \\ 0 & x \neq x' \end{cases} ; \; \int \Delta x \ldots \equiv \sum_i \Delta x_i \ldots \tag{44}$$

Оператор числа частиц в произвольном объеме ω μ - пространства поэтому имеет вид (ср. 2):

$$\mathcal{N}_\omega = \int \Delta x \; \psi^+(x)\chi_\omega(x)\psi(x) . \tag{45}$$

Сравнение (2) и (44) показывает, что все результаты из (2,3) можно перенести на классический случай с заменой $\Omega \to \omega$ и $\int dx \to \int \Delta x$.

При построении средних необходимо учитывать, что статистические распределения в классических системах всегда диагональны, поэтому ψ - представление для функции распределения имеет вид:

$$\rho(\psi^+\psi) = \sum_N \frac{1}{N!} \int \Delta x_1 \dots \int \Delta x_N \; \psi_1^+ \dots \psi_N^+ |0\rangle \rho_N(x_1 \dots x_N) \langle 0| \times$$

$$\times \psi_N \dots \psi_1 \equiv \sum_N \frac{1}{N!} (\psi^+)^N |0\rangle \rho_N \langle 0| (\psi)^N . \qquad (46)$$

Поэтому в формулах для средних, с учетом классических предельных соотношений $\int \Delta x \simeq \int dx$ и $\Delta x = (2\pi\hbar)^3$, имеем, как показано в [4], вместо (I8) следующее:

$$\rho_N^{\pm}(x_1 \dots x_N) \simeq \frac{1}{(\Delta x)^N} \rho_N(x_1 \dots x_N) \quad ; \; \Delta x = (2\pi\hbar)^3 . \qquad (47)$$

Таким образом, статистический функционал $\rho^{\pm}[\tau]$:

$$\rho^{\pm}[\tau] = \sum_N \frac{1}{N!} \int dx_1 \tau(x_1) \dots \int dx_N \tau(x_N) \rho^{\pm}(x_1 \dots x_N) \equiv \qquad (48)$$

$$\equiv \sum_N \frac{1}{N!} \tau^N \rho_N^{\pm} \simeq \sum_N \frac{1}{N!} \left(\frac{\tau}{\Delta x}\right)^N \rho_N \equiv \rho_N\left[\tau/_{\Delta x}\right] ,$$

отличается от функционала плотности $n[\sigma]$ только выбором функции:

$$n[\sigma] = \rho_N^{\pm}(1+\sigma) \simeq \rho_N\left(\frac{1+\sigma}{\Delta x}\right) . \qquad (49)$$

Так же, как в (2I), нетрудно установить связь между классической функцией плотности $n_s(x_1 \dots x_s)$ и статистической функцией распределения $\rho_N(x_1 \dots x_N)$:

$$n_s(x_1 \dots x_s) = \sum_{N \geq s} \frac{1}{(N-s)!} \frac{1}{(\Delta x)^s} \int \frac{dx_{s+1}}{\Delta x} \dots \int \frac{dx_1}{\Delta x} \rho_N(x_1 \dots x_N) . \qquad (50)$$

Это позволяет переформулировать все выводы относительно функций распределения, корреляций и т.д. на классический случай, соответствующий (50).

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Проекционный оператор вакуума

То, что проекционный оператор вакуума можно действитльно записать в виде (7), следует из равенств:

$$|0\rangle\langle 0| \psi^+ = \left(N_{\psi^+\psi} e^{-\psi^+\psi}\right)\psi^+ = e^{-\psi^+\frac{\delta}{\delta\varphi}} \varphi \Big|_{\varphi=\psi^+} = 0 \qquad (A.I)$$

и

$$\left[|0\rangle\langle 0|\right]^2 = \left(N_{\psi^+\psi} e^{-\psi^+\psi}\right)^2 = N_{\psi^+\psi} e^{-\psi^+\frac{\delta}{\delta\varphi}} e^{-\varphi\psi} \Big|_{\varphi=\psi^+} = \qquad (A.2)$$

$$= N_{\psi^+\psi} e^{-\psi^+\frac{\delta}{\delta\varphi}} \Big|_{\varphi=\psi^+} = |0\rangle\langle 0| .$$

Кроме того, из представления единичного оператора следует, что $|0\rangle\langle 0| = N_{\psi^+\psi} f(\psi^+\psi) \equiv N_{\psi^+\psi} e^{-\eta_\infty}$ действительно:

$$1 = \sum_{N_1 N_2 \dots} \frac{(\psi_1^+)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} \dots |0\rangle\langle 0| \dots \frac{(\psi_1)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} = N_{\psi^+\psi} \sum_{N_1 N_2 \dots} \frac{\eta^{N_1}}{N_1!} \dots f(\psi^+\psi) = \qquad (A.3)$$

$$= N_{\psi^+\psi} e^{\eta_\infty} f(\psi^+\psi) .$$

Более того, как показано в [4], $|0\rangle\langle 0|$ можно представить еще и в следующем обобщенном смысле: $|0\rangle\langle 0| = \lim\limits_{\delta\to +0} \delta^{\psi^+\psi}$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Некоторое другое представление оператора числа частиц

Если для описания числа частиц использовать вместо ψ^+, ψ N, M ... и переменные $x_1 x_2 \dots y_1 y_2 \dots$, тогда оператор числа частиц в объеме Ω имеет вид

$$\mathcal{N}_\Omega = \sum_{i=1}^{M} \chi_\Omega(y_i) . \tag{A.4}$$

Из этого следует, что

$$\begin{pmatrix} \mathcal{N}_\Omega \\ s \end{pmatrix} = N_{\neq} \frac{[\mathcal{N}_\Omega]^s}{s!} = 1/s!\, \chi_\Omega^s Z_s ;$$
$$Z_s(x_1 \dots x_s) = N_{\neq} \sum_{j_1}^{M} \delta(x_1 - y_{j_1}) \dots \sum_{j_s}^{M} \delta(x_s - y_{j_s}) . \tag{A.5}$$

При этом оператор $N_{\neq}$ вычеркивает в многократных суммах по однородным переменным все диагональные члены. Оператор распределения числа частиц $\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega}$ в этом случае имеет вид:

$$\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega} = \sum_{j_1<\dots<j_M} \chi_{\infty-\Omega}(y_1)\chi_{\infty-\Omega}(y_2)\dots\chi_\Omega(y_{j_1})\dots\chi_\Omega(y_{j_M})\dots\chi_{\infty-\Omega}(y_M) \tag{A.6}$$

Используя тождество $\chi_{\infty-\Omega}(y) = 1 - \chi_\Omega(y)$, опять получаем выражение, совпадающее с (9):

$$\delta_{N,\mathcal{N}_\Omega} = \frac{\chi_\Omega^N}{N!} \sum_{s\geq 0} 1/s!\, (-\chi_\Omega)^s Z_{N+s} . \tag{A.7}$$

Литература:

1. Т.Хилл. Статистическая механика, ИЛ, 1960.
2. P.Ziesche, Comm.Math.Phys. 5, 301 (1967).
3. P.Ziesche, Acta Phys.Polonica, 34, 25 (1968).
4. P.Ziesche, Comm.Math.Phys. 5, 191 (1967).
5. Н.Н.Боголюбов, Избранные труды, т.2, Киев, Наукова думка, 1970.
6. Ф.А.Березин, Метод вторичного квантования. М., Физматгиз, 1965.
7. R.Lenk, Ann.der Physik, 19, 88 (1967).
8. K.Kubo, Journ.Phys.Soc. Japan, 17, 1100 (1962).
9. M.Schonberg, Nuovo Cimento 9, 1139 (1952) and 10,419 and 697 (1953).

Рукопись поступила в издательский отдел
20 августа 1974 г.