УДК 517.9+531.19+530.145

В. І. Герасименко, д-р фіз.-мат. наук, професор,
В. В. Кречко, аспірант
Інститут математики НАН України, м. Київ

ПРО ПОШИРЕННЯ КОРЕЛЯЦІЙ В КВАНТОВИХ СИСТЕМАХ В НАБЛИЖЕННІ САМОУЗГОДЖЕНОГО ПОЛЯ

Розглянуто проблему строгого опису процесу поширення кореляцій початкових станів квантових систем багатьох частинок, які взаємодіють через обмежений потенціал взаємодії та задовольняють статистику Максвелла-Больцмана, в скейлінговій границі самоузгодженого поля на основі асимптотичної поведінки непертурбативного розв'язку задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь ББҐКІ (Боголюбов – Борн - Ґрін - Кірквуд - Івон). А саме, досліджено розв'язок задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь Власова для послідовністі граничних маргінальних операторів густини, у випадку початкових станів, які описуються одночастинковим оператором густини з простору ядерних операторів та обмеженими операторами, якими характеризуються кореляції станів.

Побудовано явний вигляд послідовності граничних маргінальних операторів густини, якою описується стан системи в такому наближенні, а саме, встановлено, що стан системи описується за допомогою граничного одночастинкового оператора густини, який є розв'язком задачі Коші для квантового кінетичного рівняння Власова з початковими кореляціями немарковського типу. Для чистих станів сформульоване кінетичне рівняння еквівалентно кінетичному рівнянню Хартрі з початковими кореляціями, зокрема, якими характеризуються конденсовані стани квантових систем багатьох частинок. Для початкових станів системи статистично незалежних квантових частинок кінетичне рівняння Власова з початковими кореляціями є квантовим кінетичним рівнянням Власова, а послідовність граничних маргінальних операторів густини в цьому випадку описує процес поширення початкового хаосу.

Ключові слова: *ієрархія рівнянь Власова, квантове кінетичне рівняння, кореляційний оператор, границя самоузгодженого (середнього) поля.*

Вступ. Однією з відкритих проблем сучасної теорії еволюційних рівнянь залишається проблема математичного обґрунтування нелінійних кінетичних рівнянь для систем багатьох частинок в конденсованих станах. В останнє десятиліття спостерігається значний прогрес у дослідженні проблеми строгого виведення квантових кінетичних рівнянь [1–6], наприклад, нелінійного рівняння Шрьодінгера і рівняння Ґросса-

Пітаєвського, якими описується колективна поведінка квантових систем багатьох частинок, зокрема Бозе газу та його конденсату [7–10].

Загально прийнятий підхід до побудови таких кінетичних рівнянь ґрунтується на дослідженні скейлінгових асимптотичних властивостей розв'язку задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь ББҐКІ (Боголюбов-Борн-Ґрін-Кірквуд-Івон) для послідовності маргінальних операторів густини [11, 12]. Зауважимо, що традиційно в границі самоузгодженого (середнього) поля досліджується асимптотична поведінка розв'язку задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь ББҐКІ побудованого методами теорії збурень [11–13], зокрема, для неї встановлено властивість поширення початкового хаосу [5, 6], тобто описана еволюція граничних станів квантових систем за відсутності початкових кореляцій.

Мета роботи полягає в описі процесу поширення кореляцій початкового стану квантових систем багатьох частинок в скейлінговій границі самоузгодженого поля на основі відповідної асимптотики непертурбативного розв'язку задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь ББҐКІ [13–15], а саме, розв'язку задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь Власова у випадку початкових станів, які описуються одночастинковим оператором густини та кореляційними операторами, якими характеризуються конденсовані стани квантових систем багатьох частинок [11].

Асимптотична поведінка маргінальних операторів густини в границі самоузгодженого поля. У границі самоузгодженого поля еволюція всіх можливих станів квантових систем нескінченної кількості частинок, які задовольняють статистику Максвелла-Больцмана, описується задачею Коші для ієрархії квантових рівнянь Власова (граничної ієрархії квантових рівнянь ББҐКІ)

$$\frac{\partial}{\partial t} f_s(t) = \sum_{j=1}^{s} \mathcal{N}^*(j) f_s(t) + \sum_{j=1}^{s} Tr_{s+1} \mathcal{N}^*_{\mathrm{int}}(j, s+1) f_{s+1}(t), \tag{1}$$

$$f_s(t)_{|t=0} = f_s^0, \quad s \geq 1, \tag{2}$$

де оператор $\sum_{j=1}^{s} \mathcal{N}^*(j)$ — генератор рівняння фон Неймана у випадку еволюції системи s невзаємодіючих частинок [12, 13], і, відповідно, оператор $\mathcal{N}^*_{\mathrm{int}}$ визначається через оператор парного потенціалу взаємодії Φ такою формулою: $\mathcal{N}^*_{\mathrm{int}}(j_1, j_2) f_n \doteq -i(\Phi(j_1, j_2) f_n - f_n \Phi(j_1, j_2))$, які визначені на підпросторі вироджених ядерних операторів із нескінченно диференційованими ядрами з компактними носіями і використано систему одиниць, де $h = 2\pi\hbar = 1$ — постійна Планка, $m = 1$ — маса частинок.

Розв'язок задачі Коші (1), (2) — послідовність маргінальних операторів густини $f(t) = (f_0, f_1(t), \ldots, f_n(t), \ldots) \subset \oplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}^{\otimes n})$, зображується такими розкладами в ряд:

$$f_s\left(t,1,...,s\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^t dt_1...\int_0^{t_{n-1}} dt_n Tr_{s+1,...,s+n}\prod_{j_1=1}^{s}\mathcal{G}_1^*\left(t-t_1,j_1\right)\sum_{i_1=1}^{s}\mathcal{N}_{\mathrm{int}}^*\left(i_1,s+1\right) \quad (3)$$

$$\prod_{l_1=1}^{s+1}\mathcal{G}_1^*\left(t_1-t_2,l_1\right)...\prod_{j_n=1}^{s+n-1}\mathcal{G}_1^*\left(t_{n-1}-t_n,j_n\right)\sum_{i_n=1}^{s+n-1}\mathcal{N}_{\mathrm{int}}^*\left(i_n,s+n\right)$$

$$\prod_{l_n=1}^{s+n}\mathcal{G}_1^*\left(t_n,l_n\right)f_{s+n}^0(1,...,s+n),\quad s\geq 1,$$

де однопараметрична сім'я відображень

$$\mathbb{R}^1 t\mapsto\mathcal{G}_1^*\left(t,j\right)f_1\doteq e^{-itK(j)}f_1 e^{itK(j)}, \qquad (4)$$

визначена на просторі ядерних операторів $\mathfrak{L}^1(\mathcal{H})$ та оператор $K(j)$ — оператор кінетичної енергії j частинки. Якщо $f^0\in\oplus_{n=0}^{\infty}\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}^{\otimes n})$ ряд (3) існує і збігається за нормою простору $\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_s)$ за умови: $t<t_0\equiv(const\left\|\Phi\right\|_{\mathfrak{L}(\mathcal{H}_2)})^{-1}$.

Для початкових станів $f_s^0\in\mathfrak{L}_0^1(\mathcal{H}^{\otimes s})\subset\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}^{\otimes s}),\ \ s\geq 1,$ послідовністю (3) зображується сильний розв'язок задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь Власова (1), (2) та для довільних початкових станів з простору $\oplus_{n=0}^{\infty}\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}^{\otimes n})$ — слабкий розв'язок [13].

Зауважимо, що для розв'язку задачі Коші для ієрархії квантових рівнянь Власова (1), (2) справедлива властивість поширення початкового хаосу [5], тобто в границі самоузгодженого поля кореляції станів в процесі еволюції системи не народжуються, якщо відсутні кореляції початкового стану.

Дійсно, у випадку початкових даних (2) за відсутності кореляцій $f^{(c)}=(I,f_1^0(1),\prod_{i=1}^{2}f_1^0(i),...,\prod_{i=1}^{n}f_1^0(i),...),$ послідовність маргінальних операторів густини (3) зображується таким розкладом

$$f_s(t,1,...,s)=\prod_{i=1}^{s}f_1(t,i),\quad s\geq 1,$$

де одночастинковий оператор густини зображується розкладом в ряд

$$f_1\left(t,1\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\int_0^t dt_1...\int_0^{t_{n-1}} dt_n Tr_{2,...,n+1}\mathcal{G}_1^*\left(t-t_1,1\right)\mathcal{N}_{\mathrm{int}}^*\left(1,2\right)$$

$$\prod_{j_1=1}^{2}\mathcal{G}_1^*\left(t_1-t_2,j_1\right)...\prod_{i_n=1}^{n}\mathcal{G}_1^*\left(t_{n-1}-t_n,i_n\right)\sum_{k_n=1}^{n}\mathcal{N}_{\mathrm{int}}^*\left(k_n,n+1\right)$$

$$\prod_{j_n=1}^{n+1}\mathcal{G}_1^*\left(t_n,j_n\right)\prod_{i=1}^{n+1}f_1^0(i),$$

і задовольняє квантове кінетичне рівняння Власова

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1(t,1) = \mathcal{N}^*(1) f_1(t,1) + \mathrm{Tr}_2 \mathcal{N}^*_{\mathrm{int}}(1,2) f_1(t,1) f_1(t,2).$$

Зокрема, для чистих станів в термінах ядра такого оператора $f_1(t,q,q') = \psi(t,q)\psi^*(t,q')$ рівняння Власова зводиться до рівняння Хартрі

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,q) = -\frac{1}{2}\Delta_q \psi(t,q) + \int dq' \Phi(q-q') |\psi(q')|^2 \psi(t,q),$$

де функція Φ — парний потенціал взаємодії частинок, які задовольняють статистику Максвелла — Больцмана.

Основний результат: процес поширення початкових кореляцій. Розглянемо початкові стани квантових систем нескінченної кількості частинок, які визначаються одночастинковим (маргінальним) оператором густини та кореляційними операторами (статистика Максвелла-Больцмана)

$$f^{(cc)} = (I, f_1^0(1), g_2(1,2)\prod_{i=1}^{2} f_1^0(i), \ldots, g_n(1,\ldots,n)\prod_{i=1}^{n} f_1^0(i), \ldots), \tag{5}$$

де операторами $g_n(1,\ldots,n) \equiv g_n \in \mathfrak{L}_0^1(\mathcal{H}_n)$, $n \geq 2$, визначаються кореляції початкових станів. Підкреслимо, що зазначене припущення (5) стосовно початкового стану є типовим для кінетичного опису систем багатьох частинок в конденсованих станах, які характеризуються кореляціями [11].

Для таких початкових станів послідовність $f(t) = (f_1(t,1), \ldots, f_n(t,1,\ldots,n), \ldots)$ маргінальних операторів густини зображується розкладами в ряд (3), які для обмежених потенціалів взаємодії є збіжними за нормою простору $\mathfrak{L}^1(\mathcal{H})$ на скінченому проміжку часу: $t < t_0 \equiv (2\|\Phi\|_{\mathfrak{L}(\mathcal{H}_2)} \|f_1^0\|_{\mathfrak{L}^1(\mathcal{H})})^{-1}$.

Справедливе таке твердження. Для початкових станів (5) послідовність $f(t) = (I, f_1(t,1), \ldots, f_n(t,1,\ldots,n), \ldots)$ маргінальних операторів густини, яка зображується розкладами в ряд (3), еквівалентна послідовності функціоналів $f(t \mid f_1(t)) = (I, f_1(t), f_2(t,1,2 \mid f_1(t)), \ldots, f_n(t,1,\ldots,n \mid f_1(t)), \ldots)$, де одночастинковий оператор густини зображується розкладом в ряд

$$f_1(t,1) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t dt_1 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \mathrm{Tr}_{2,\ldots,n+1} \mathcal{G}_1^*(t-t_1,1) \mathcal{N}^*_{\mathrm{int}}(1,2) \tag{6}$$

$$\prod_{j_1=1}^{2} \mathcal{G}_1^*(t_1-t_2, j_1) \ldots \prod_{i_n=1}^{n} \mathcal{G}_1^*(t_{n-1}-t_n, i_n) \sum_{k_n=1}^{n} \mathcal{N}^*_{\mathrm{int}}(k_n, n+1)$$

$$\prod_{j_n=1}^{n+1}\mathcal{G}_1^*\left(t_n, j_n\right)\mathrm{g}_{n+1}(1,\ldots,n+1)\prod_{i=1}^{n+1} f_1^0(i),$$

та в першому наближенні за густиною функціонали $f_n(t\,|\,f_1(t)),\quad n\geq 2,$ визначаються такою формулою:

$$f_n(t,1,\ldots,n\,|\,f_1(t)) = \prod_{i_1=1}^{n}\mathcal{G}_1^*\left(t,i_1\right)g_n(1,\ldots,n)\prod_{i_2=1}^{n}(\mathcal{G}_1^*)^{-1}\left(t,i_2\right)\prod_{j=1}^{n} f_1(t,j), n\geq 2, \quad (7)$$

де одночастинковий оператор густини $f_1(t)$ зображується розкладом в ряд (6).

У випадку початкових даних (5) рівності $f_n(t) = f_n(t\,|\,f_1(t)),\quad n\geq 2,$ справедливі внаслідок почленної рівності для розкладу в ряд маргінальних операторів густини (3) та зображення розкладу в ряд для добутку розкладів в ряд для одночастинкового оператора густини (6).

Таким чином, в наближенні самоузгодженого поля встановлено явний вигляд граничних маргінальних операторів густини (7), а саме, встановлено, що стан системи описується за допомогою граничного одночастинкового оператора густини (6), який є розв'язком певного кінетичного рівняння, яке сформульовано в наступному розділі.

Зазначимо, що внаслідок справедливості в наближенні самоузгодженого поля для станів зображення (7), при еволюції системи нові кореляції не народжуються за виключенням тих, які породжуються початковими кореляціями.

Квантове кінетичне рівняння Власова з початковими кореляціями. Одночастинковий оператор густини (6) є слабким розв'язком задачі Коші для квантового кінетичного рівняння з початковими кореляціями:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1(t,1) = \mathcal{N}^*(1) f_1(t,1) +$$

$$+Tr_2\mathcal{N}_{\mathrm{int}}^*(1,2)\prod_{i_1=1}^{2}\mathcal{G}_1^*\left(t,i_1\right)g_2(1,2)\prod_{i_2=1}^{2}(\mathcal{G}_1^*)^{-1}\left(t,i_2\right)f_1(t,1)f_1(t,2), \quad (8)$$

$$f_1(t)_{|t=0} = f_1^0, \quad (9)$$

де оператори $\mathcal{N}^*(1)$ та $\mathcal{N}_{\mathrm{int}}^*(1,2)$ визначені як і в ієрархії рівнянь (1) та групою операторів $(\mathcal{G}_1^*)^{-1}\left(t\right)$ позначено обернену групу операторів до групи (4).

Рівняння (8) виводиться внаслідок диференціювання в сенсі поточкової збіжності в просторі ядерних операторів $\mathfrak{L}^1(\mathcal{H})$ розкладу в ряд (6) та зображенні розкладу в ряд для двохчастинкового маргінального оператора густини у вигляді відповідного функціоналу (7). В результаті отриману тотожність в першому наближенні за густиною трактуємо, як еволюційне рівняння для одночастинкового оператора густини, тобто квантового кінетичного рівняння з початковими кореляціями типу кінетичного рівняння Власова.

Для чистих станів рівняння (8) зводиться до кінетичного рівняння Хартрі з початковими кореляціями. Зазначимо, що виведене кінетичне рівняння є немарковським кінетичним рівнянням.

Зауважимо також, що послідовність маргінальних операторів густини (6), (7) є розв'язком ієрархії квантових рівнянь Власова (1), (2), якою в границі самоузгодженого поля описується послідовність маргінальних операторів густини (3) у випадку довільних початкових станів.

Для початкових станів системи статистично незалежних частинок кінетичне рівняння (8) є квантовим рівнянням Власова, а функціонали (7) описують процес поширення початкового хаосу.

Висновки. Таким чином, для початкових станів, які описуються послідовністю маргінальних операторів густини (5), в роботі встановлено еквівалентність опису еволюції квантових систем в термінах маргінальних операторів густини (3) та за допомогою послідовності маргінальних функціоналів (6), (7), які визначаються розв’язком квантового кінетичного рівняння Власова з початковими кореляціями (8). Іншими словами, альтернативний метод опису еволюції станів квантових систем багатьох частинок в наближенні самоузгодженого поля ґрунтується на немарковському кінетичному рівнянні Власова з початковими кореляціями (8).

Аналогічно до роботи [13] отримані вище результати можуть бути поширені на системи багатьох бозонів або ферміонів.

Зазначимо також, що в роботах [16–18] було розвинуто інші підходи до опису процесу поширення початкових кореляцій в скейлінговій границі самоузгодженого поля. У роботі [16] така властивість доведена в інший спосіб, а саме, в термінах одночастинкового оператора густини, який визначався розв’язком узагальненого квантового кінетичного рівняння з початковими кореляціями, в роботі [17] властивість поширення початкових кореляцій було встановлено за допомогою опису еволюції квантової системи багатьох частинок в термінах маргінальних спостережуваних. У роботі [18] розвинуто підхід до побудови асимптотичної поведінки самоузгодженого поля непертурбативного розв'язку задачі Коші для ієрархії нелінійних квантових рівнянь ББҐКІ для послідовності маргінальних кореляційних операторів.

Список використаних джерел:

1. Pezzotti F. Mean-field limit and semiclassical expansion of quantum particle system / F. Pezzotti, M. Pulvirenti // Ann. Henri Poincaré. — 2009. — Vol. 10. — P. 145–187.

2. Erdös L. Quantum dynamics with mean field interactions: a new approach / L. Erdös, B. Schlein // J. Stat. Phys. — 2009. — Vol. 134 (5). — P. 859–870.
3. Mean field evolution of fermions with Coulomb interaction / M. Porta, S. Rademacher, C. Saffirio, B. Schlein // J. Stat. Phys. — 2017. — Vol. 166 (6). — P. 1345–1364.
4. Golse F. The Schrödinger equation in the mean-field and semiclassical regime / F. Golse, T. Paul // Arch. Rational Mech. Anal. — 2017. — Vol. 223. — P. 57–94.
5. Golse F. On the dynamics of large particle systems in the mean field limit / F. Golse // Lect. Notes Appl. Math. Mech. — Vol. 3. — P. 1–144 In: Macroscopic and large scale phenomena: coarse graining, mean field limits and ergodicity. Springer. — 2016.
6. Benedikter N. Effective Evolution Equations from Quantum Dynamics / N. Benedikter, M. Porta, B. Schlein // Springer Briefs in Mathematical Physics. Springer. — 2016. — 125 p.
7. Erdös L. Derivation of the cubic nonlinear Schrödinger equation from quantum dynamics of many-body systems / L. Erdös, B. Schlein, H.-T. Yau // Invent. Math. — 2007. — Vol. 167. — P. 515–614.
8. Erdös L. Derivation of the Gross–Pitaevskii equation for the dynamics of Bose–Einstein condensate / L. Erdös, B. Schlein, H.-T. Yau // Ann. of Math. — 2010. — Vol. 172. — P. 291–370.
9. Benedikter N. Quantitative derivation of the Gross–Pitaevskii equation / N. Benedikter, G. Oliveira, B. Schlein // Comm. Pure. Appl. Math. — 2015. — Vol. 68. — P. 1399–1482.
10. Boccato C. Quantum many-body fluctuations around nonlinear Schrödinger dynamics / C. Boccato, S. Cenatiempo, B. Schlein // Ann. Henri Poincaré. — 2017. — Vol. 18 (1). — P. 113–191.
11. Боголюбов М. М. Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем / М. М. Боголюбов. — К. : Рад. школа, 1949. — 228 с.
12. Petrina D. Ya. Mathematical Foundations of Quantum Statistical Mechanics. Continuous Systems / D. Ya. Petrina. — Kluwer Acad. Publ., 1995. — 457 p.
13. Gerasimenko V. I. Hierarchies of quantum evolution equations and dynamics of many-particle correlations / V. I. Gerasimenko // Statistical Mechanics and Random Walks: Principles, Processes and Applications. — N.Y. : Nova Science Publ., Inc., 2013. — P. 233–288.
14. Gerasimenko V. I. Initial-value problem of the Bogolyubov hierarchy for quantum systems of particles / V. I. Gerasimenko, V. O. Shtyk // Ukrain. Math. J. — 2006. — Vol. 58 (9). — P. 1175–1191.
15. Gerasimenko V. I. On non-perturbative solution of quantum BBGKY hierarchy / V. I. Gerasimenko, V. V. Krechko // Proc. Inst. Math. NASU. — 2016. — Vol. 13 (2). — P. 7–26.
16. Gerasimenko V. I. On quantum kinetic equations of many-particle systems in condensed states / V. I. Gerasimenko, Zh. A. Tsvir // Physica A: Stat. Mech. Appl. — 2012. — Vol. 391 (24). — P. 6362–6366.
17. Gerasimenko V. I. New approach to derivation of quantum kinetic equations with initial correlations / V. I. Gerasimenko // Carpathian Math. Publ. — 2015. — Vol. 7 (1). — P. 38–48.

18. Gerasimenko V. I. The evolution of correlation operators of large particle quantum systems / V. I. Gerasimenko // Methods Funct. Anal. Topology. — 2017. — Vol. 23 (2). — P. 123–132.

ON THE PROPAGATION OF CORRELATIONS IN QUANTUM SYSTEMS IN A MEAN FIELD APPROXIMATION

The problem of the rigorous description of a process of the propagation of initial correlations of quantum many-particle systems, interacting by means of bounded interaction potential and obeying the Maxwell-Boltzmann statistics, in mean field scaling limit is considered within the framework of the corresponding asymptotic behavior of a nonperturbative solution of the Cauchy problem of the quantum BBGKY (Bogolyubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon) hierarchy. Namely, we consider a solution of the Cauchy problem of the quantum Vlasov hierarchy for a sequence of the limit marginal density operators in case of initial states are specified in terms of a one-particle density operator from the space of trace class operators and bounded operators characterized the correlations of states.

The explicit form of a sequence of the limit marginal density operators, that describes the state of a system in a such approximation, is constructed. Namely, we establish that the state of a system is described by means of the limit one-particle density operator governed by the non-Markovian quantum Vlasov kinetic equation with initial correlations. For pure states the constructed kinetic equation is equivalent to the Hartree equation with initial correlations, in particular, that characterize the condensed states of quantum many-particle systems. In case of initial states of statistically independent particles the Vlasov kinetic equation with initial correlations is the quantum Vlasov kinetic equation and a sequence of the limit marginal density operators is described a process of the propagation of initial chaos.

Key words: *Vlasov hierarchy, quantum kinetic equation, correlation operator, mean field limit.*

Отримано: 15.05.2018