

В. І. Герасименко, Ж. А. Цвір

Квантове узагальнене кінетичне рівняння*(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Л. Горбачуком)*

Для початкових станів квантових багаточастинкових систем, які визначаються одночастинковим оператором густини, в просторі послідовностей ядерних операторів встановлено еквівалентність задачі Коші для квантової ієрархії ББГКІ та задачі Коші для узагальненого квантового кінетичного рівняння і послідовності явно визначених функціоналів від розв'язку цього узагальненого кінетичного рівняння.

Одна з відкритих проблем сучасної кінетичної теорії полягає в строгому виводі квантових кінетичних рівнянь з динаміки багаточастинкових квантових систем [1–4]. Зокрема, актуальною проблемою є математичне обґрунтування кінетичних рівнянь квантових систем частинок в конденсованому стані, наприклад, нелінійного рівняння Шредінгера та рівняння Гроса–Пітаєвського [5, 6].

При кінетичному описі еволюції багаточастинкових квантових систем стан характеризується одночастинковим оператором густини (ядро цього оператора відоме як матриця густини) [7–9], який є розв'язком початкової задачі для нелінійного кінетичного рівняння. В загальному випадку всі можливі стани квантових систем частинок характеризуються послідовністю маргінальних операторів густини, яка є розв'язком початкової задачі для ієрархії рівнянь ББГКІ [9]. З цією обставиною пов'язана інтерпретація кінетичних рівнянь, як рівнянь, якими описуються асимптотики розв'язку ієрархії рівнянь ББГКІ, наприклад, в скейлінгових границях [3]. Такий підхід до строгого обґрунтування кінетичних рівнянь бере свої витоки на основі методів теорії збурень з праць М. М. Боголюбова, для квантових систем — з роботи [10], і пізніше для класичних систем — з робіт [11, 12].

Мета даної роботи полягає в дослідженні проблеми строгого опису еволюції стану багаточастинкових квантових систем в термінах одночастинкового оператора густини. На основі кінетичних кластерних розкладів кумулянтів груп операторів рівнянь Неймана для початкових станів систем частинок, які визначаються одночастинковим оператором густини, в просторі послідовностей ядерних операторів доведено еквівалентність задачі Коші для квантової ієрархії ББГКІ та задачі Коші для узагальненого квантового кінетичного рівняння і послідовності явно визначених функціоналів від розв'язку цього узагальненого кінетичного рівняння. Таким чином, у роботі встановлено, що всі можливі стани нескінченних квантових систем частинок у довільний момент часу можуть бути описані одночастинковим оператором густини без будь-якої апроксимації.

Розглянемо квантову систему не фіксованого, тобто довільного, але скінченного числа однакових (безспінових) частинок з одиничною масою $m = 1$ у просторі \mathbb{R}^ν , $\nu \geq 1$, які задовольняють статистику Максвелла–Больцмана. Гамільтоніаном $H = \bigoplus_{n=0}^{\infty} H_n$ такої системи є самоспряжений оператор ($H_0 = 0$) з областю визначення $\mathcal{D}(H) = \left\{ \psi = \bigoplus \psi_n \in \mathcal{F}_{\mathcal{H}} \mid \psi_n \in \mathcal{D}(H_n) \in \mathcal{H}_n, \sum_n \|H_n \psi_n\|^2 < \infty \right\} \subset \mathcal{F}_{\mathcal{H}}$, де $\mathcal{F}_{\mathcal{H}} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^{\otimes n}$ — фоківський простір, що визна-

чений над гільбертовим простором \mathcal{H} та $\mathcal{H}^{\otimes 0} = \mathbb{C}$. Нехай $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^\nu)$ (координатне зображення), тоді елемент з цього простору $\psi \in \mathcal{F}_{\mathcal{H}} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} L^2(\mathbb{R}^{\nu n})$ — це послідовність функцій, $\psi = (\psi_0, \psi_1(q_1), \dots, \psi_n(q_1, \dots, q_n), \dots)$ таких, що $\|\psi\|^2 = |\psi_0|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \int dq_1 \cdots dq_n |\psi_n(q_1, \dots, q_n)|^2 < +\infty$. На підпросторі нескінченно диференційовних функцій з компактними носіями $\psi_n \in L^2_0(\mathbb{R}^{\nu n}) \subset L^2(\mathbb{R}^{\nu n})$ оператор H_n , $n \geq 1$, діє за формулою

$$H_n \psi_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^n \Delta_{q_i} \psi_n + \sum_{i_1 < i_2=1}^n \Phi(q_{i_1}, q_{i_2}) \psi_n, \quad (1)$$

де функція Φ — парний потенціал взаємодії, що задовольняє умови Като [8], $\hbar = 2\pi\hbar$ — стала Планка.

Стани системи частинок, які задовольняють статистику Максвелла–Больцмана, належать простору $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n)$ послідовностей $f = (f_0, f_1, \dots, f_n, \dots)$ ядерних операторів $f_n \equiv f_n(1, \dots, n) \in \mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n)$ та $f_0 \in \mathbb{C}$, що задовольняють умову симетрії: $f_n(1, \dots, n) = f_n(i_1, \dots, i_n)$ для довільних $(i_1, \dots, i_n) \in (1, \dots, n)$, з нормою

$$\|f\|_{\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}})} = \sum_{n=0}^{\infty} \|f_n\|_{\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_n)} = \sum_{n=0}^{\infty} \text{Tr}_{1, \dots, n} |f_n(1, \dots, n)|,$$

де $\text{Tr}_{1, \dots, n}$ — частинні сліди [8]. Позначимо $\mathfrak{L}^1_0(\mathcal{F}_{\mathcal{H}}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathfrak{L}^1_0(\mathcal{H}_n) \subset \mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}})$ — підпростір фінітних послідовностей вироджених операторів з нескінченно диференційовними ядрами з компактними носіями.

Еволюція станів описується послідовністю $F(t) = (F_1(t, 1), \dots, F_s(t, 1, \dots, s), \dots)$ маргінальних операторів густини, що задовольняють квантову ієрархію ББГКІ (ланцюжок квантових рівнянь Боголюбова [7])

$$\frac{d}{dt} F_s(t, Y) = -\mathcal{N}_s(Y) F_s(t, Y) + \sum_{i=1}^s \text{Tr}_{s+1} (-\mathcal{N}_{\text{int}}(i, s+1)) F_{s+1}(t, Y, s+1), \quad (2)$$

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

де $Y \equiv (1, \dots, s)$, та оператори \mathcal{N}_s , \mathcal{N}_{int} визначаються в підпросторі $\mathfrak{L}^1_0(\mathcal{H}_s)$ такими формулами:

$$\mathcal{N}_s f_s \doteq -\frac{i}{\hbar} (f_s H_s - H_s f_s),$$

$$\mathcal{N}_{\text{int}}(i, j) f_s \doteq -\frac{i}{\hbar} (f_s \Phi(i, j) - \Phi(i, j) f_s).$$

Надалі будемо розглядати початковий стан системи, який описується одночастинковим оператором густини, а саме початкові дані, що задовольняють умову “хаосу”, тобто стан без кореляцій між частинками. Для системи тотожних частинок, що задовольняють статистику Максвелла–Больцмана, маємо

$$F(t)|_{t=0} = F^{(c)} \equiv \left(I, F_1^0(1), \dots, \prod_{i=1}^s F_1^0(i), \dots \right). \quad (3)$$

Початкові дані (3) — типовий приклад стану багаточастинкових систем при кінетичному описі квантових газів, оскільки в цьому випадку стан характеризується одночастинковим оператором густини. Зазначимо, що для початкових даних з простору $\mathcal{L}^1(\mathcal{H})$ середнє число частинок є скінченною величиною. Для опису еволюції нескінченночастинкових систем [9] необхідно будувати розв'язки в більш загальних банахових просторах.

Розв'язок задачі Коші для квантової ієрархії ББГКІ (2) з початковими даними (3) визначається такими розкладами [13]:

$$F_s(t, Y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \mathfrak{A}_{1+n}(t, \{Y\}, X \setminus Y) \prod_{i=1}^{s+n} F_1^0(i), \quad s \geq 1, \quad (4)$$

де еволюційний оператор $\mathfrak{A}_{1+n}(t)$ — кумулянт $(1+n)$ -порядку, $n \geq 0$,

$$\mathfrak{A}_{1+n}(t, \{Y\}, X \setminus Y) \doteq \sum_{P: (\{Y\}, X \setminus Y) = \bigcup_i X_i} (-1)^{|P|-1} (|P|-1)! \prod_{X_i \subset P} \mathcal{G}_{|X_i|}(-t, X_i), \quad (5)$$

груп операторів $\mathcal{G}_n(-t)$, $n \geq 1$, якими визначається розв'язок рівнянь Неймана [8],

$$\mathcal{G}_n(-t) f_n \doteq e^{-\frac{i}{\hbar} t H_n} f_n e^{\frac{i}{\hbar} t H_n}, \quad f_n \in \mathcal{L}^1(\mathcal{H}_n), \quad (6)$$

і використано такі позначення: $X \setminus Y \equiv (s+1, \dots, s+n)$, $\{Y\}$ — множина, що складається з одного елемента, яким є множина $Y = (1, \dots, s)$, тобто $|\{Y\}| = 1$, та $\sum_{P: (\{Y\}, X \setminus Y) = \bigcup_i X_i} -$

сума за всіма можливими розбиттями P множини $(\{Y\}, X \setminus Y)$ на $|P| > 1$ непорожніх підмножин $X_i \subset (\{Y\}, X \setminus Y)$, що взаємно не перетинаються [4]. Для $F_1^0 \in \mathcal{L}^1(\mathcal{H}_1)$ ряд (4) збігається за нормою простору $\mathcal{L}^1(\mathcal{H}_s)$ для довільного $t \in \mathbb{R}^1$, якщо $\|F_1^0\|_{\mathcal{L}^1(\mathcal{H}_1)} < e^{-1}$ [13].

Оскільки початкові дані (3) цілком визначаються одночастинковим оператором густини F_1^0 , а саме $F^{(c)} = \left(I, F_1^0(1), \dots, \prod_{i=1}^s F_1^0(i), \dots \right)$, тобто початкові дані для кожного невідомого оператора густини $F_s(t, 1, \dots, s)$, $s \geq 1$, ієрархії рівнянь (2) не є незалежними, то природно задачу Коші для квантової ієрархії ББГКІ (2), (3) переформулювати як нову задачу Коші для одночастинкового оператора густини $F_1(t)$ для незалежних початкових даних F_1^0 та послідовності функціоналів $F_s(t, 1, \dots, s | F_1(t))$, $s \geq 2$, від $F_1(t)$ замість маргінальних операторів густини (4) для $s \geq 2$.

Для побудови функціоналів $F_s(t, 1, \dots, s | F_1(t))$, $s \geq 2$, кумулянти (5) груп операторів (6) у розв'язку (4) задачі Коші для квантової ієрархії ББГКІ для $s \geq 2$ подано у формі таких кластерних розкладів (*кінетичні кластерні розклади*) за новими еволюційними операторами $\mathfrak{A}_{1+n}(t)$, $n \geq 0$:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathfrak{A}}_{1+n}(t, \{Y\}, s+1, \dots, s+n) &= \sum_{n_1=0}^n \frac{n!}{(n-n_1)!} \mathfrak{A}_{1+n-n_1}(t, \{Y\}, s+1, \dots, s+n-n_1) \times \\ &\times \sum_{D: Z = \bigcup_l X_l} \frac{1}{|D|!} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_{|D|=1}}^{s+n-n_1} \prod_{X_l \subset D} \frac{1}{|X_l|!} \widehat{\mathfrak{A}}_{1+|X_l|}(t, i_l, X_l), \end{aligned} \quad (7)$$

де $\sum_{D:Z=\bigcup_l X_l}$ — сума за усіма можливими поділеннями D лінійно впорядкованої множини

$Z \equiv \{s+n-n_1+1, \dots, s+n\}$ не більше ніж на $s+n-n_1$ лінійно впорядкованих підмножин, $|D|$ — кількість множин поділення D .

В результаті, враховуючи вираз для розв'язку (4) задачі Коші для квантової ієрархії ББГКІ для одночастинкового оператора густини $F_1(t)$, тобто для $s=1$, розклади (4) для $s \geq 2$ набувають форми розкладів за добутками одночастинкового оператора густини $F_1(t)$

$$F_s(t, Y | F_1(t)) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{s+1, \dots, s+n} \mathfrak{V}_{1+n}(t, \{Y\}, X \setminus Y) \prod_{i=1}^{s+n} F_1(t, i), \quad (8)$$

де еволюційні оператори $\mathfrak{V}_{1+n}(t)$, $n \geq 0$, у розкладі (8) визначаються як розв'язки кінетичних кластерних розкладів (7) і зображуються такими комбінаціями кумулянтів операторів розсіяння:

$$\begin{aligned} \mathfrak{V}_{1+n}(t, \{Y\}, X \setminus Y) &\doteq n! \sum_{k=0}^n (-1)^k \prod_{j=1}^k \sum_{n_j=1}^{n-n_1-\dots-n_{j-1}} \frac{1}{(n-n_1-\dots-n_k)!} \times \\ &\times \widehat{\mathfrak{A}}_{1+n-n_1-\dots-n_k}(t, \{Y\}, s+1, \dots, s+n-n_1-\dots-n_k) \times \\ &\times \sum_{D_j: Z_j=\bigcup_{l_j} X_{l_j}} \frac{1}{|D_j|!} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_{|D_j|}=1} \prod_{X_{l_j} \subset D_j} \frac{1}{|X_{l_j}|!} \widehat{\mathfrak{A}}_{1+|X_{l_j}|}(t, i_{l_j}, X_{l_j}). \end{aligned} \quad (9)$$

У формулі (9) використано такі позначення: $\sum_{D_j: Z_j=\bigcup_{l_j} X_{l_j}}$ — сума за усіма можливими поділеннями

множини D_j лінійно впорядкованої множини $Z_j \equiv (s+n-n_1-\dots-n_j+1, \dots, s+n-n_1-\dots-n_{j-1})$ не більше ніж на $s+n-n_1-\dots-n_j$ лінійно впорядкованих підмножин та введено еволюційний оператор $\widehat{\mathfrak{A}}_{1+n}(t)$ — кумулянт $(1+n)$ -порядку

$$\widehat{\mathfrak{A}}_{1+n}(t, \{Y\}, X \setminus Y) \doteq \sum_{P: (\{Y\}, X \setminus Y) = \bigcup_i X_i} (-1)^{|P|-1} (|P|-1)! \prod_{X_i \subset P} \widehat{\mathcal{G}}_{|X_i|}(-t, X_i),$$

груп операторів розсіяння

$$\widehat{\mathcal{G}}_n(t) \doteq \mathcal{G}_n(-t, 1, \dots, n) \prod_{i=1}^n \mathcal{G}_1(t, i), \quad n \geq 1,$$

де $\mathcal{G}_n(-t)$ — група операторів (6), $\mathcal{G}_1(t)$ — група операторів, спряжена до групи $\mathcal{G}_1(-t)$. Наведемо приклади еволюційних операторів \mathfrak{V}_n , $n \geq 1$, найнижчих порядків:

$$\mathfrak{V}_1(t, \{Y\}) = \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}),$$

$$\mathfrak{V}_2(t, \{Y\}, s+1) = \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, \{Y\}, s+1) - \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}) \sum_{j=1}^s \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, j, s+1),$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{W}_3(t, \{Y\}, s+1, s+2) &= \widehat{\mathfrak{A}}_3(t, \{Y\}, s+1, s+2) - \\ &- 2! \left(\widehat{\mathfrak{A}}_2(t, \{Y\}, s+1) - \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}) \sum_{i=1}^s \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i, s+1) \right) \sum_{j=1}^{s+1} \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, j, s+2) - \\ &- \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}) \left(\sum_{i=1}^s \widehat{\mathfrak{A}}_3(t, i, s+1, s+2) + \sum_{i \neq j=1}^s \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i, s+1) \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, j, s+2) \right). \end{aligned}$$

Функціонал $F_s(t, 1, \dots, s \mid F_1(t))$, $s \geq 2$, існує і зображується рядом, який збігається за нормою простору $\mathfrak{L}^1(\mathcal{H}_s)$ за умови

$$\|F_1^0\|_{\mathfrak{L}^1(\mathcal{H})} < e^{-1} \left(1 - \frac{e}{\sqrt{1+e^2}} \right). \quad (10)$$

Для редукованих кумулянтів груп операторів рівнянь Неймана така умова встановлена в [14] (для класичних систем аналог такої умови встановлено в [15]).

Зауважимо, що в результаті застосування аналогів формул Дюамеля до еволюційних операторів (9) перші члени розкладу функціоналів (8) формально збігаються з відповідними виразами з функціонала, побудованого в працях Боголюбова за теорією збурень [9, 10].

Для побудови еволюційного рівняння, яким визначається еволюція одночастинкового оператора густини з функціоналів (8), продиференціюємо розклад (4) для $s = 1$, у сенсі поточної збіжності в просторі $\mathfrak{L}^1(\mathcal{H})$ і врахуємо кінетичні кластерні розклади (7). У результаті отримаємо співвідношення для оператора $F_1(t)$, яке будемо трактувати як еволюційне рівняння для одночастинкових маргінальних станів.

Одночастинковий оператор густини $F_1(t)$ є розв'язком такої задачі Коші:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F_1(t, 1) &= -\mathcal{N}_1(1) F_1(t, 1) + \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr}_{2,3,\dots,n+2} (-\mathcal{N}_{\text{int}}(1, 2)) \mathfrak{W}_{1+n}(t, \{1, 2\}, 3, \dots, n+2) \prod_{i=1}^{n+2} F_1(t, i), \end{aligned} \quad (11)$$

$$F_1(t, 1)|_{t=0} = F_1^0(1), \quad (12)$$

де еволюційні оператори $\mathfrak{W}_{1+n}(t)$, $n \geq 0$, визначаються розкладами (9) та використано введені вище позначення. Еволюційне рівняння (11) будемо називати *узагальненим квантовим кінетичним рівнянням*, оскільки відомі квантові кінетичні рівняння є скейлінговою границею цього рівняння [3, 4].

Таким чином, початкові задачі (2), (3) та (11), (12) еквівалентні і має місце таке твердження:

Твердження 1. *За умови (10) задача Коші для квантової ієрархії ББГКІ (2), (3) у просторі $\mathfrak{L}^1(\mathcal{F}_{\mathcal{H}})$ еквівалентна задачі Коші для узагальненого кінетичного рівняння (11), (12) та послідовності функціоналів $F_s(t, 1, \dots, s \mid F_1(t))$, $s \geq 2$, які визначаються розкладами (8).*

Зауважимо, той факт, що для відповідних початкових умов усі можливі стани систем частинок можуть бути описані в термінах одночастинкового оператора густини без будь-якої апроксимації, є характерною властивістю динаміки нескінченних систем частинок.

У роботі розглянуто основи кінетичного опису еволюції квантових багаточастинкових систем. Для початкових станів квантових систем частинок, які описуються одночастинковим оператором густини, узагальнене квантове кінетичне рівняння (11) дає альтернативний підхід опису еволюції станів до підходу на основі квантової ієрархії ББГКІ (2).

1. *Benedetto D., Castella F., Esposito R., Pulvirenti M.* A short review on the derivation of the nonlinear quantum Boltzmann equations // *Commun. Math. Sci.* – 2007. – **5**. – P. 55–71.
2. *Arnold A.* Mathematical properties of quantum evolution equations // *Lect. Notes Math.* – 2008. – **1946**. – P. 45–109.
3. *Spohn H.* Kinetic equations from Hamiltonian dynamics // *Rev. Mod. Phys.* – 1980. – **52**. – P. 569–615.
4. *Gerasimenko V. I.* Approaches to derivation of quantum kinetic equations // *Укр. фіз. журн.* – 2009. – **54**, No 8–9. – P. 834–846.
5. *Erdős L., Schlein B., Yau H.-T.* Derivation of the cubic non-linear Schrödinger equation from quantum dynamics of many-body systems // *Invent. Math.* – 2007. – **167**. – P. 515–614.
6. *Fröhlich J., Graffi S., Schwarz S.* Mean-field and classical limit of many-body Schrödinger dynamics for bosons // *Commun. Math. Phys.* – 2007. – **271**. – P. 681–697.
7. *Боголюбов М. М.* Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем. – Київ: Рад. школа, 1949. – 207 с.
8. *Petrina D. Ya.* Mathematical foundations of quantum statistical mechanics. – Dordrecht: Kluwer, 1995. – 444 p.
9. *Cercignani C., Gerasimenko V. I., Petrina D. Ya.* Many-particle dynamics and kinetic equations. – Dordrecht: Kluwer, 1997. – 252 p.
10. *Боголюбов М. М., Гуров К. П.* Кинетические уравнения в квантовой механике // *Журн. эксп. и теорет. физики.* – 1947. – **17**. – С. 614–628.
11. *Green M. S., Piccirelly R. A.* Basis of the functional assumption in the theory of the Boltzmann equation // *Phys. Rev.* – 1963. – **132**. – P. 1388–1410.
12. *Cohen E. G. D.* Bogolyubov and kinetic theory: the Bogolyubov equations // *Укр. фіз. журн.* – 2009. – **54**. – P. 847–861.
13. *Gerasimenko V. I.* Groups of operators for evolution equations of quantum many-particle systems // *Operator Theory: Adv. and Appl.* – 2009. – **191**. – P. 341–355.
14. *Цвір Ж. А.* Кластерні розклади в теорії кінетичних рівнянь // *Вісн. Київ. ун-ту. Мат. Мех.* – 2010. – **23**. – P. 25–30.
15. *Gerasimenko V. I., Petrina D. Ya.* On the generalized kinetic equation // *Доп. НАН України.* – 1997. – No 7. – P. 7–12.

*Інститут математики НАН України, Київ
Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка*

Надійшло до редакції 07.07.2010

V. I. Gerasimenko, Zh. A. Tsvir

Quantum generalized kinetic equation

For initial states of quantum many-particle systems which are given in terms of a one-particle density operator, the equivalence of the Cauchy problem of the quantum BBGKY hierarchy, the Cauchy problem of the generalized quantum kinetic equation, and a sequence of explicitly defined functionals of a solution of this generalized kinetic equation is established in the space of sequences of trace class operators.