КВАНТОВО-ТЕПЛОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ ЭФФЕКТИВНЫХ МАКРОПАРАМЕТРОВ И ИХ КОРРЕЛЯЦИИ

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

[1]**Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, ОИЯИ**
(Дубна, Россия; e-mail: ogol@mail.ru)

[2]**Российский университет дружбы народов**
(Москва, Россия; e-mail: ogol@oldi.ru)

[3]**Институт магнетизма НАН Украины**
(Киев, Украина; e-mail: bvg@mail.vtv.kiev.ua)

УДК 536.93

Показано, что использование стандартной теории флуктуаций макропараметров в ряде случаев приводит к выходу за рамки термодинамического описания. Сформулированы основы теории квантово-тепловых флуктуаций эффективных макропараметров и их корреляции, согласованной с условиями применимости равновесной термодинамики и основанной на эффективных макропараметрах, учитывающих целостное стохастическое воздействие окружения при любых температурах. Вычислен коррелятор сопряженных макропараметров – эффективной энтропии и эффективной температуры – и установлена его пропорциональность эффективному воздействию, характеризующему стохастическое окружение. Продемонстрировано, что корреляторы пар сопряженных эффективных параметров "энтропия–температура" и "координата–импульс" линейно зависят от эффективного воздействия, а их минимальные значения определяются константой Планка.

1. Проблема учета квантовых эффектов в теории флуктуаций макропараметров

В последние годы наметилась потребность в применении термодинамики к относительно малым объектам (наночастицы, ядерные спины и т.п.), находящимся в тепловом равновесии при низких температурах. Это приводит к необходимости внимательного анализа основ термодинамики.

Как известно, равновесная термодинамика базируется на четырех началах. Среди них исходным является нулевое начало, фиксирующее фундаментальное понятие теплового равновесия объекта с его макроокружением, называемым термостатом. В *классической* термодинамике, в которой все макропараметры определены точно, нулевое начало имеет вид "жесткого" условия равенства температур объекта T и термостата T_0:

$$T = T_0, \tag{1}$$

которое эквивалентно пониманию температуры, измеряемой по шкале Кельвина, как условной "метки" теплового равновесия.

В *статистической* термодинамике [1–5], включающей теорию флуктуации макропараметров, все макропараметры A объекта, в том числе температура, рассматриваются как случайные величины, испытывающие флуктуации δA около своих средних значений $\langle A\rangle$. Для сохранения языка традиционного термодинамического описания одновременно выдвигается дополнительное требование: относительные дисперсии любых макропараметров A ограничены условием [1]:

$$\frac{D(A)}{\langle A\rangle^2} \leqslant 1. \tag{2}$$

Здесь

$$D(A) \equiv \langle(\delta A)^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$$

– дисперсия макропараметра A, вычисленная усреднением по распределению, характерному для теории флуктуаций макропараметров [1–3]. В дальнейшем для удобства мы используем стандартное отклонение ΔA, причем $\Delta A \equiv \sqrt{D(A)}$.

В этом случае понятие теплового равновесия приобретает обобщенный смысл, так как теперь подразумевается, что температура объекта также способна испытывать флуктуации ("мягкое" условие равновесия) благодаря тепловому стохастическому воздействию термостата, характеризуемому постоянной

[1] В тех случаях, когда знаменатель в (2) обращается в нуль, вместо гиббсова среднего в нем следует использовать боголюбовское квазисреднее [6].

Больцмана k_{B}. Это означает, что на величину ΔT также наложено требование, аналогичное неравенству в (2). Вместе с тем температура термостата как системы с бесконечным числом степеней свободы не флуктуирует: $\Delta T_0 = 0$.

В результате в статистической термодинамике нулевое начало принимает вид совокупности двух условий:

$$T = T_0 \pm \Delta T; \quad \frac{(\Delta T)^2}{T_0^2} \leqslant 1, \tag{3}$$

где ΔT – стандартное отклонение от $\langle T \rangle$, а $(\Delta T)^2$ согласно обозначениям в формуле (2) – дисперсия температуры. Таким образом, теперь с температурой термостата T_0 совпадает лишь средняя температура объекта $\langle T \rangle$.

Как известно, в стандартной теории флуктуаций [2, 3] на основе распределения с модулем Θ могут быть получены выражения для дисперсий любых макропараметров. Привлекая феноменологические результаты, величину Θ обычно записывают в виде $\Theta = k_{\mathrm{B}} T_0$. Обращаем внимание на то, что это выражение подразумевает, что для термостата по умолчанию используется модель совокупности классических осцилляторов. Ниже мы будем называть ее классической моделью.

В частности, еще Эйнштейном были установлены формулы [1] для дисперсии температуры:

$$(\Delta T)^2 = \frac{1}{k_{\mathrm{B}} C_V} \Theta^2 = \frac{k_{\mathrm{B}}}{C_V} T_0^2 \tag{4}$$

и дисперсии внутренней энергии объекта U при постоянном объеме V:

$$(\Delta U)^2 = \frac{C_V}{k_{\mathrm{B}}} \Theta^2 = k_{\mathrm{B}} C_V T_0^2, \tag{5}$$

где

$$C_V(T, V) = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V$$

– теплоемкость объекта.

Представляет интерес выяснить, для каких объектов полученные выше выражения удовлетворяют неравенству в условии (2). Ответ кроется в конкретном выражении для теплоемкости. Так, для макроскопических объектов, состоящих из атомов, $U \sim N$, и $(C_V) \sim N$, где N порядка числа Авогадро. Таким образом, дисперсия $(\Delta T)^2 \sim \frac{1}{N}$. Соответственно $(\Delta U)^2 \sim N$, а при $N \gg 1$ условие (2) для относительных дисперсий внутренней энергии и температуры таких объектов при высоких температурах выполняется.

Вместе с тем, обращаем внимание на то, что, например, для одного классического осциллятора ($N = 1$), у которого $U = k_{\mathrm{B}} T$ и $C_V = k_{\mathrm{B}}$, в равновесии с термостатом имеем

$$\frac{(\Delta U)^2}{\langle U \rangle^2} = 1; \quad \frac{(\Delta T)^2}{\langle T \rangle^2} = 1.$$

Тем самым, условие макроскопичности ($N \gg 1$) не является строго обязательным при расчетах, основанных на классической статистической механике в области высоких температур.

Иная ситуация возникает при относительно низких температурах, когда проявляются квантовые эффекты. В этом случае главное внимание по-прежнему уделяется теплоемкости

$$(C_V)_{\mathrm{qu}} = \left. \frac{\partial U_{\mathrm{qu}}}{\partial T} \right|_V,$$

однако для ее расчета используется внутренняя энергия U_{qu}, вычисляемая уже в рамках квантовой статистической механики. Вместе с тем модель термостата не претерпевает изменений и остается классической. На этом пути удовлетворительные результаты по-прежнему получаются для систем из частиц с $N \gg 1$, (кроме, может быть, области сверхнизких температур). Однако возникают проблемы для равновесного теплового излучения (где понятие числа частиц отсутствует) и одиночного квантового осциллятора.

Продемонстрируем сказанное на примере квантового осциллятора. Согласно Эйнштейну [7] его внутренняя энергия

$$U_{\mathrm{qu}} = \frac{\hbar\omega}{\exp\{2\varkappa\frac{\omega}{T}\} - 1} = \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\exp\{-\varkappa\frac{\omega}{T}\}}{\sinh(\varkappa\frac{\omega}{T})}, \tag{6}$$

где введено обозначение

$$\varkappa = \hbar / 2k_{\mathrm{B}},$$

и теплоемкость

$$(C_V)_{\mathrm{qu}} = k_{\mathrm{B}} \left(\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}} T} \right)^2 \frac{\exp\{2\varkappa\frac{\omega}{T}\}}{(\exp\{2\varkappa\frac{\omega}{T}\} - 1)^2} =$$

$$= k_{\mathrm{B}} \left(\varkappa \frac{\omega}{T} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2(\varkappa\frac{\omega}{T})}. \tag{7}$$

В соответствии с общей формулой (5) дисперсия внутренней энергии квантового осциллятора при замене (C_V) на $(C_V)_{\mathrm{qu}}$ имеет вид

$$(\Delta U_{\mathrm{qu}})^2 = k_{\mathrm{B}} (C_V)_{\mathrm{qu}} T^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2(\varkappa\frac{\omega}{T})} =$$

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2011. Т. 56, №10

$$= \hbar\omega U_{\rm qu} + U_{\rm qu}^2 = \exp\left\{2\varkappa\frac{\omega}{T}\right\} U_{\rm qu}^2, \tag{8}$$

а относительная дисперсия его внутренней энергии

$$\frac{(\Delta U_{\rm qu})^2}{U_{\rm qu}^2} = \frac{\hbar\omega}{U_{\rm qu}} + 1 = \exp\left\{2\varkappa\frac{\omega}{T}\right\}. \tag{9}$$

Аналогичный результат имеет место для относительной дисперсии энергии теплового излучения в спектральном интервале $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ в объеме V:

$$\frac{(\Delta U_\omega)^2}{U_\omega^2} = \frac{\hbar\omega}{U_\omega} + \frac{\pi^2 c^3}{V\omega^2\Delta\omega} = \frac{\pi^2 c^3}{V\omega^2\Delta\omega} \exp\left\{2\varkappa\frac{\omega}{T}\right\}. \tag{10}$$

Эти факты наглядно указывают на неприменимость избранного метода расчета: относительные дисперсии внутренней энергии (9) и (10) не удовлетворяют условию (2) применимости термодинамического описания. Отметим, что это обстоятельство не привлекало особого внимания исследователей. Единственным, кто это отметил, был, по-видимому, А.И. Ансельм [3], указавший в связи с этим, что “при понижении температуры ... обычная термодинамика не применима”. Это означает, что статистическая термодинамика как макротеория не может быть *в полной мере* основана на квантовой статистической механике как микротеории.

На наш взгляд, причиной этому служит исходное кредо квантовой статистической механики, согласно которому квантовое и тепловое воздействия окружения учитываются в ней независимо. В связи с этим общепринято сначала находить квантовые характеристики системы микрообъектов (при $T_0 = 0$), а только затем помещать ее в классический термостат с модулем распределения $k_{\rm B}T_0$. В то же время формула (6) для квантового осциллятора и аналогичная формула для внутренней энергии теплового излучения, подтверждаемые экспериментом, показывают, что эти два типа стохастического воздействия проявляются, как правило, совместно и неаддитивно.

Для преодоления возникших проблем нами была развита теория [8–11], в основе которой лежит совместный учет квантового и теплового стохастических воздействий окружения. Она предполагает отказ от классической модели термостата в пользу квантовой, в том числе и при расчете теплоемкости.

Более того, при этом требуется ввести иную “метку” состояния теплового равновесия. Дело в том, что используемая в квантовой статистической механике для этих целей кельвинова температура оказывается неинформативной характеристикой в той области, где совместно проявляются квантовые и тепловые эффекты, так как отражает лишь тепловое стохастическое воздействие (через постоянную Больцмана). Кроме того, она вообще принимается равной нулю в квантовой механике, где тем не менее стохастическое воздействие (но уже квантового типа, через постоянную Планка) принципиально имеет место.

Чисто интуитивные соображения подталкивают к тому, чтобы принять в качестве новой “метки” выражение, вытекающее из формулы Планка для энергии квантового осциллятора $U_{\rm Pl}$, а именно:

$$\mathbb{T} \equiv \frac{U_{\rm Pl}}{k_{\rm B}} = \frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}} \coth\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T} = \varkappa\omega \coth\frac{\varkappa\omega}{T}, \tag{11}$$

где использовано введенное ранее обозначение $\varkappa = \hbar/2k_{\rm B}$. Эту величину мы называем *эффективной температурой*. Существенно, что при кельвиновой температуре $T = 0$ эффективная температура имеет минимальное значение

$$\mathbb{T}^{\min} = \varkappa\omega \neq 0. \tag{12}$$

Согласно формулам (11) и (12) в общем случае эффективная температура является двупараметрической функцией $\mathbb{T} = f(T, \omega)$. Она сводится к функции одного параметра только в предельных случаях $T = 0$ и $T \gg \mathbb{T}^{\min}$, когда, соответственно, $\mathbb{T} \approx \mathbb{T}^{\min}$ и $\mathbb{T} \approx T$. Ее зависимость одновременно от мировых постоянных Планка и Больцмана позволяет утверждать, что даже при кельвиновой температуре $T_0 = 0$ стохастическое воздействие “теплового” типа, учитывая, что $\varkappa = \frac{\hbar}{2k_{\rm B}}$, нельзя игнорировать.

На этом фундаменте применительно к макропараметрам мы строим теорию флуктуаций и их корреляции, излагаемую ниже. При этом, сохраняя все традиционные соотношения между термодинамическими величинами, связанными с температурой, мы вводим соответствующие эффективные макропараметры, являющиеся теми же функциями эффективной температуры.

2. Флуктуации эффективной температуры и эффективной внутренней энергии

Для вычисления дисперсий макропараметров с учетом стохастического воздействия квантового типа при любых температурах мы воспользуемся результатами работы [9], представляющей собой макроописание в рамках теории, называемой нами современной стохастической термодинамикой [11]. Оно основано на распределении Гиббса в пространстве макропараметров [12, 5].

Для описания стохастического окружения мы вводим квантовую модель (кванто-термостат), объединяющую понятия вакуума и термостата. Она представляет собой бесконечную совокупность квантовых нормальных мод всех частот при любой фиксированной кельвиновой температуре, являющуюся аналогом равновесного теплового излучения.

Предполагается, что эффективная температура объекта (11) с характерной частотой ω также флуктуирует, так что нулевое начало в развиваемой теории принимает вид

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}_0 \pm \Delta\mathbb{T}, \tag{13}$$

где $\mathbb{T}_0$ – эффективная температура термостата, а $\Delta\mathbb{T}$ – стандартное отклонение эффективной температуры объекта в условиях равновесия.

С современной точки зрения, исходным принципом теории флуктуаций макропараметров является принцип максимума энтропии в состоянии теплового равновесия. Из него вытекает экспоненциальная гиббсова форма распределения в пространстве макропараметров [12]:

$$dW(\mathcal{E}) = \rho(\mathcal{E})d\mathcal{E} = \frac{1}{\Theta}\exp\left\{-\frac{\mathcal{E}}{\Theta}\right\}d\mathcal{E}. \tag{14}$$

Здесь $\mathcal{E}$ – случайное значение внутренней энергии макрообъекта, зависящее от макропараметров, характеризующих тип его контакта с окружением.

Напомним, что в первоначальном варианте теории флуктуаций макропараметров модуль распределения соответствовал классической модели термостата с кельвиновой температурой T_0. Поскольку в развиваемой теории используется квантовая модель термостата, в ней модуль распределения выражается через эффективную температуру термостата $\mathbb{T}_0$ в виде $k_{\mathrm{B}}\mathbb{T}_0$. В итоге стандартная формула для распределения флуктуаций макропараметров [1–3] и следующие из нее выражения для дисперсий любых макропараметров остаются формально неизменными, но записываются через эффективные макропараметры.

Тем самым, дисперсия эффективной температуры макрообъекта вместо (4) принимает вид

$$(\Delta\mathbb{T})^2 = \frac{k_{\mathrm{B}}}{\mathbb{C}_V}\mathbb{T}_0^2, \tag{15}$$

где эффективная теплоемкость объекта

$$\mathbb{C}_V \equiv \frac{\partial\mathbb{U}}{\partial\mathbb{T}}. \tag{16}$$

Для дисперсии эффективной внутренней энергии, соответственно, вместо (5) получаем

$$(\Delta\mathbb{U})^2 = k_{\mathrm{B}}\mathbb{C}_V\mathbb{T}_0^2. \tag{17}$$

Иными словами, все выражения (13)–(17) в новой теории сохраняют прежнюю форму. Тем самым, сохраняется и понятие состояния равновесия объекта со стохастическим окружением. Однако теперь это равновесие является обобщенным, учитывающим в целостном понятии эффективной температуры $\mathbb{T}$ наличие двух неаддитивных типов стохастического воздействия.

Применим теперь полученные результаты к макрообъекту, который можно моделировать квантовым осциллятором [2]. Для него $\mathbb{U} \equiv U_{\mathrm{Pl}}$, а эффективная теплоемкость $\mathbb{C}_V = k_{\mathrm{B}}$. Тогда формула (15) для дисперсии эффективной температуры примет вид

$$(\Delta\mathbb{T})^2 = (\mathbb{T}_0)^2,$$

так что относительная дисперсия эффективной температуры этого объекта теперь подчиняется условию (3). В этом состоит ее отличие от дисперсии кельвиновой температуры того же объекта в квантовой статистической механике.

Соответственно относительная дисперсия его внутренней энергии, с учетом общей формулы (17), $C_V = k_{\mathrm{B}}$ и $\mathbb{U} = k_{\mathrm{B}}\mathbb{T}_0$ принимает вид

$$\frac{(\Delta\mathbb{U})^2}{\mathbb{U}^2} = \frac{k_{\mathrm{B}}C_V(\mathbb{T}_0)^2}{(k_{\mathrm{B}}\mathbb{T}_0)^2} = 1, \tag{18}$$

так что условие (2) вновь выполняется.

Для более подробного сравнения полученных формул с формулами из квантовой статистической механики представим дисперсию эффективной внутренней энергии квантового осциллятора в виде

$$(\Delta\mathbb{U})^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\left[1 + \sinh^{-2}\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right)\right]. \tag{19}$$

Сопоставление формул (19) и (8), где теплоемкость имеет вид (7), позволяет придать второму слагаемому в (19) форму, напоминающую исходную формулу (5), но с явной зависимостью от кельвиновой температуры T_0:

$$(\Delta\mathbb{U})^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 + k_{\mathrm{B}}(C_V)_{\mathrm{qu}}T_0^2. \tag{20}$$

[2] Отметим, что круг задач, решаемых с помощью этой модели, достаточно широк, ибо вблизи минимума потенциальная энергия может быть аппроксимирована параболой.

 ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2011. Т. 56, №10

Очевидно, что выражение (20) отличается от (9) лишним слагаемым, которое можно записать в виде

$$\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 = \frac{\hbar}{2}\rho_\omega(\omega,0)\omega^2, \tag{21}$$

где

$$\rho_\omega(\omega,0) \equiv \left.\frac{\partial\mathbb{U}}{\partial\omega}\right|_{T=0} = \frac{\hbar}{2}, \tag{22}$$

– спектральная плотность эффективной внутренней энергии при $T_0 = 0$. Тогда формула (20) принимает вид

$$(\Delta\mathbb{U})^2 = \frac{\hbar}{2}\rho_\omega(\omega,0)\omega^2 + k_\mathrm{B}(C_V)_\mathrm{qu}T_0^2. \tag{23}$$

Интересно отметить, что в отличие от квантово-статистической формулы (8) для квантового осциллятора в формуле (23) излагаемой здесь теории появляется дополнительное слагаемое, проявляющее себя и при $T_0 = 0$. Действительно, в пределе $T_0 \to 0$ в формуле (23) второе слагаемое исчезает, так что

$$(\Delta\mathbb{U}^{\,\min})^2 = \frac{\hbar}{2}\rho_\omega(\omega,0)\omega^2 = (\mathbb{U}^{\,\min})^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 \neq 0. \tag{24}$$

В противоположность этому при $T_0 \to 0$ в квантовой статистической механике $(\Delta U_\mathrm{qu})^2 \to 0$. Таким образом, выполнение условия (2) для эффективной внутренней энергии как при произвольной кельвиновой температуре, так и при $T_0 \to 0$ в развиваемой нами теории существенно связано с учетом энергии нулевых колебаний.

По нашему мнению, здесь получен еще один важный результат. Он означает, что нулевая энергия также не является бесконечно тонким уровнем, а имеет некоторую "ширину", в пределах которой возможны ее флуктуации. Естественно возникает вопрос, за счет чего это происходит. Ответ состоит в том, что в этом случае система находится в равновесном контакте с "холодным" (в смысле Кельвина) вакуумом, оказывающим квантовое стохастическое воздействие. Последнее и влечет за собой случайные значения внутренней энергии объекта даже при абсолютном нуле.

3. Флуктуации эффективной энтропии и их корреляция с флуктуациями эффективной температуры

В условиях теплового равновесия наряду с флуктуациями отдельных макропараметров δA и δB существенную роль играет и корреляция между ними. Мерой этой корреляции, как известно, является выражение $\sigma_{AB} \equiv \langle \delta A, \delta B\rangle$, называемое в общем случае коррелятором.

Перейдем к исследованию корреляции флуктуаций эффективных макропараметров. При этом нас будет интересовать нетривиальный случай сопряженных эффективных макропараметров.

Как известно, понятие сопряженных величин является одним из ключевых в квантовой механике. Тем не менее, оно используется и в термодинамике, но обычно на основе эвристических соображений. При анализе термодинамических потенциалов (например, Зоммерфельд [13]), бросается в глаза, что в них входят устойчивые парные комбинации макропараметров типа (Ada) или (adA). Так, температура всегда комбинируется с энтропией, давление – с объемом. Эти отношения в каждой паре физически проявляют себя в существовании ненулевого коррелятора между флуктуациями макропараметров, что отражает их взаимную зависимость. Это служит исходным основанием считать пару эффективных величин $\mathbb{S}$ и $\mathbb{T}$ термодинамически сопряженными, подобно паре координата–импульс в квантовой механике.

Чтобы обосновать это утверждение в рамках развиваемой теории, вычислим дисперсию эффективной энтропии и коррелятор флуктуаций эффективных энтропии и температуры. Учитывая то, что при фиксированном эффективном объеме $\mathbb{V}$ флуктуация эффективной энтропии

$$\delta\mathbb{S} = \left.\frac{\delta\mathbb{U}}{\mathbb{T}_0}\right|_{\mathbb{V}} = \frac{1}{\mathbb{T}_0}\,\mathbb{C}_\mathbb{V}\,\delta\mathbb{T}, \tag{25}$$

для соответствующей дисперсии получим

$$(\Delta\mathbb{S})^2 \equiv \langle(\delta\mathbb{S})^2\rangle = \frac{\mathbb{C}_V^2}{\mathbb{T}_0^2}\,\langle(\delta\mathbb{T})^2\,\rangle = \frac{\mathbb{C}_V^2}{\mathbb{T}_0^2}\,(\Delta\mathbb{T})^2. \tag{26}$$

Принимая во внимание следствие общей формулы (15) для стандартного отклонения эффективной температуры $(\Delta\mathbb{T}) = (k_\mathrm{B})^{1/2}\mathbb{T}_0(\mathbb{C}_\mathbb{V})^{-1/2}$ и извлекая квадратный корень из (26), для стандартного отклонения эффективной энтропии имеем

$$\Delta\mathbb{S} = \frac{\mathbb{C}_V^2}{\mathbb{T}_0}\,(\Delta\mathbb{T}) = \left(k_\mathrm{B}\mathbb{C}_V^2\right)^{1/2}. \tag{27}$$

Для получения искомого коррелятора флуктуаций $\sigma_{\mathbb{ST}}$ вновь воспользуемся формулой (25) и получим, что коррелятор пропорционален дисперсии температуры:

$$\sigma_{\mathbb{ST}} = \langle\delta\mathbb{S}\cdot\delta\mathbb{T}\rangle = \frac{\mathbb{C}_V}{\mathbb{T}_0}\,\langle\delta\mathbb{T}\cdot\delta\mathbb{T}\rangle = \frac{\mathbb{C}_V}{\mathbb{T}_0}(\Delta\mathbb{T})^2. \tag{28}$$

С учетом (15) соответствующий коррелятор флуктуаций принимает вид

$$\sigma_{\mathbb{ST}} = \frac{\mathbb{C}_V}{\mathbb{T}_0}\,\frac{k_{\rm B}}{\mathbb{C}_V}(\mathbb{T}_0)^2 = k_{\rm B}\mathbb{T}_0, \tag{29}$$

где зависимость от эффективной теплоемкости выпадает.

Иными словами, коррелятор эффективных макропараметров $\sigma_{\mathbb{ST}}$ определяется только характеристикой кванто-термостата – его эффективной температурой, которая согласно (12) принципиально не обращается в нуль. Тем самым, он ведет себя подобно квантовому коррелятору переменных p и q в квантовой механике, который также не обращается в нуль. Это обстоятельство представляет собой дополнительный аргумент считать эффективные макропараметры $\mathbb{S}$ и $\mathbb{T}$ сопряженными величинами.

4. Взаимосвязь корреляции флуктуаций сопряженных микро- и макропараметров с эффективным воздействием окружения

Для выяснения физического смысла выражения $\sigma_{\mathbb{ST}}$ вида (29) мы обращаемся к $(\hbar, k)$-динамике [8, 10]. При этом мы исходим из идеи Боголюбова [14], согласно которой причиной возникновения нетривиальной корреляции флуктуаций как микро-, так и макропараметров может служить только стохастическое воздействие окружения.

В $(\hbar, k)$-динамике [10] было установлено, что это воздействие на микроуровне описывается специфическим оператором-*шредингерианом*

$$\hat{j} \equiv \delta\hat{p}\,\delta\hat{q} = \hat{\sigma} - i\hat{j}_0, \tag{30}$$

где

$$\delta\hat{p} = \hat{p} - \langle|\hat{p}|\rangle; \quad \delta\hat{q} = \hat{q} - \langle|\hat{q}|\rangle;$$

$$\hat{\sigma} \equiv \frac{1}{2}\{\delta\hat{p}, \delta\hat{q}\}; \quad \hat{j}_0 \equiv \frac{i}{2}[\hat{p}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{2}\hat{I},$$

а $\hat{I}$ – единичный оператор.

В качестве естественной меры стохастического воздействия окружения на *микроуровне* нами был введен специфический параметр – воздействие $\mathcal{J}$ как модуль среднего от шредингериана:

$$\mathcal{J} \equiv \sqrt{\Sigma^2 + \frac{\hbar^2}{4}}, \tag{31}$$

где Σ и $\frac{\hbar}{2}$ – средние значения операторов $\hat{\sigma}$ и $\hat{j}_0$. При этом

$$\Sigma = \left|\langle\psi^*(q)|\,\hat{\sigma}\,|\,\psi(q)\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\alpha$$

определяется фазой комплексной волновой функции

$$\psi(q) = \left[2\pi(\Delta q)^2\right]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{q^2}{4(\Delta q)^2}(1 - i\alpha)\right\}.$$

Подобный вид имеет, например, волновая функция свободной микрочастицы, описывающая расплывание ее начального состояния со временем при нулевой кельвиновой температуре [15].

Однако смысл $\mathcal{J}$ может быть также истолкован иначе. Его можно рассматривать и как модуль “квантового коррелятора” $\left|\langle\,\delta p\,|\,\delta q\,\rangle\right|$ флуктуаций канонически сопряженных величин (координаты и импульса):

$$\mathcal{J} \equiv \left|\langle\,|\,\hat{j}\,|\,\rangle\right| = \left|\langle\,|\,\delta\hat{p}\,\delta\hat{q}\,|\,\rangle\right| = \left|\langle\,\delta p\,|\,\delta q\,\rangle\right|. \tag{32}$$

На *макроуровне* в состоянии равновесия с кванто-термостатом область применимости определения (32) расширяется [8, 10, 11]. В роли волновой функции, по которой осуществляется усреднение оператора $\hat{j}$, оказывается комплексная волновая функция теплого вакуума в координатном представлении, зависящая от кельвиновой температуры кванто-термостата:

$$\psi_{T_0}(q) = \left[2\pi(\,\Delta\mathbb{Q})^2\right]^{-1/4} \exp\left\{-\frac{q^2}{4(\Delta\mathbb{Q})^2}(1 - i\alpha_{T_0})\right\}, \tag{33}$$

где входящая в фазу волновой функции характеристика

$$\alpha_{T_0} = \frac{1}{\sinh(\varkappa\frac{\omega}{T_0})}, \tag{34}$$

а дисперсия координаты

$$(\Delta\mathbb{Q})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\coth\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right). \tag{35}$$

В результате в качестве характеристики целостного стохастического воздействия на *макроуровне* естественно появляется эквивалентная $\mathcal{J}$ величина

$$\mathbb{J}_0 = \left|\langle\psi^*_{T_0}(q)|\,\hat{j}\,|\,\psi_{T_0}(q)\rangle\right| =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar^2}{4}\,\alpha^2_{T_0} + \frac{\hbar^2}{4}} = \frac{\hbar}{2}\coth\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right), \tag{36}$$

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2011. Т. 56, №10

Величина $\mathbb{J}_0$ ранее была введена эмпирическим путем как новый эффективный термодинамический параметр – *эффективное воздействие* кванто-термостата, характерный для стохастической термодинамики [9, 11]. Его важная особенность заключается в том, что он формально равноправен с другими эффективными макропараметрами равновесной стохастической термодинамики, но теперь через фазу волновой функции, зависящей от α_{T_0}, генетически связан с микроописанием.

Это обстоятельство может быть использовано для истолкования более глубоких взаимосвязей между двумя уровнями описания природы – квантовой теорией и термодинамикой. В частности, из сопоставления (36) и (34) можно видеть, что

$$\Sigma_{T_0} = \left|\langle\psi^*_{T_0}(q)|\,\hat{\sigma}\,|\,\psi_{T_0}(q)\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\alpha_{T_0}. \tag{37}$$

В то же время, используя формулу (7) для теплоемкости $(C_V)_{\rm qu}$, получаем

$$\Sigma_{T_0} = \frac{T_0}{\omega}\sqrt{k_{\rm B}(C_V)_{\rm qu}}. \tag{38}$$

Тем самым, одна и та же величина Σ_{T_0}, характеризующая тепловое воздействие в состоянии равновесия, жестко связана с ненулевой *фазой* волновой функции теплого вакуума на *микроуровне* и одновременно с отличной от нуля *теплоемкостью* на *макроуровне*.

В работе [8] было показано, что в состоянии равновесия квантового осциллятора с кванто-термостатом квантовый коррелятор “координата-импульс” имеет вид

$$\sigma_{\mathbb{PQ}} = \frac{\hbar}{2}\coth\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right) = \mathbb{J}_0. \tag{39}$$

Подчеркнем, что в данном контексте сами величины p и q приобретают смысл эффективных макропараметров $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$ объекта в модели квантового осциллятора в состоянии равновесия с окружением.

Осуществляя в пределе $T_0 \to 0$ переход к микроописанию, формуле (39) удается придать вид

$$\sigma^{\min}_{\mathbb{PQ}} = \mathbb{J}^{\min}_0 = \frac{\hbar}{2}, \tag{40}$$

где минимальное значение $\sigma_{\mathbb{PQ}}$ определяется мировой постоянной – константой Планка, характеризующей квантовое стохастическое воздействие. Сравнение формул (40) и (36) подсказывает, что в общем случае эффективное воздействие $\mathbb{J}_0$ в состоянии равновесия можно представить в виде

$$\mathbb{J}_0 = \frac{1}{2}\hbar^*(\hbar, k_{\rm B}) \geqslant \frac{\hbar}{2}, \tag{41}$$

где величину $\hbar^* \equiv \hbar\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\rm B}T_0}\right)$ естественно трактовать как обобщение элементарного действия $\hbar$ на случай $T_0 \neq 0$.

Из сопоставления формул (12) и (36) выяснилось, СН имеют место величины $\mathbb{J}_0$ и $\mathbb{T}_0$ пропорциональны друг другу:

$$\mathbb{T}_0 = \frac{\omega}{k_{\rm B}}\mathbb{J}_0. \tag{42}$$

Это дает основание во всех термодинамических соотношениях в качестве “метки” равновесия с окружением использовать $\mathbb{J}_0$ вместо $\mathbb{T}_0$.

Обратимся теперь к коррелятору флуктуаций сопряженных макропараметров – эффективных энтропии и температуры, типичных для макроописания. Используя взаимосвязь (42), покажем, что коррелятор $\sigma_{\mathbb{ST}}$ вида (29) также зависит от $\mathbb{J}_0$. Действительно, соотношению (29) с использованием (42) можно придать вид

$$\sigma_{\mathbb{ST}} = \langle\delta\,\mathbb{S}, \delta\mathbb{T}\rangle = \omega\mathbb{J}_0. \tag{43}$$

Рассматривая при кельвиновой температуре $T_0 \to 0$ предельное значение коррелятора $\sigma_{\mathbb{ST}}$, равное $\omega\mathbb{J}^{\min}_0$, мы видим, что в этом случае величина коррелятора $\sigma_{\mathbb{ST}}$ определяется только стохастическим воздействием квантового типа:

$$\sigma^{\min}_{\mathbb{ST}} = \omega\mathbb{J}^{\min}_0 = \mathbb{U}^{\min}_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \tag{44}$$

где справа стоит энергия нулевых колебаний.

Итак, согласно формулам (40) и (44) минимальные значения корреляторов флуктуаций для обеих пар сопряженных переменных $(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ и $(\mathbb{S}, \mathbb{T})$ определяются одной и той же мировой постоянной Планка. При этом с увеличением температуры корреляторы $\sigma_{\mathbb{PQ}}$ и $\sigma_{\mathbb{ST}}$ возрастают синхронно, оставаясь пропорциональными друг другу.

5. Соотношения неопределенностей Шредингера и их роль в теории флуктуаций микро- и макропараметров

Как известно, физический смысл соотношения неопределенностей (СН), впервые введенного Гейзенбергом в квантовой механике, долгие годы связывался исключительно с теорией измерений. Однако, как выяснилось, что СН имеют место и в других теориях: в равновесной термодинамике, теории броуновского движения и т.п. По нашему мнению, это связано с наличием стохастического воздействия окружения, неявно формирующего СН в этих теориях. На этом основании вполне оправдан поиск универсальной связи между СН, возникающими при нулевой и конечных температурах. Проведенный выше анализ флуктуаций сопряженных микро- и макропараметров позволяет истолковать СН в рамках развитой здесь теории флуктуаций.

С математической точки зрения наиболее общее СН, предложенное Шредингером (СНШ) представляет собой реализацию неравенства Коши–Буняковского–Шварца в пространстве соответствующих величин [15]:

$$\mathcal{UP}_{AB} \equiv \Delta A \Delta B \geqslant \sigma_{AB}. \tag{45}$$

Здесь UP_{AB} – произведение стандартных отклонений (“uncertainties product”). При этом стандартные отклонения ΔA и ΔB выступают мерой “неопределенностей” случайных величин – макропараметров A и B. Соответственно σ_{AB} – коррелятор флуктуаций этих величин.

Для сопряженных микро- и макропараметров ненулевой коррелятор флуктуаций накладывает ограничение на взаимное поведение стандартных отклонений этих величин. Чтобы продемонстрировать фундаментальный характер подобных ограничений, в соотношении (45) левую и правую части следует вычислять независимо как в микро- , так и в макротеориях.

Для вычисления $\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}}$, характерного для макротеории, используем формулы (27) и (15). В итоге получим, что эта величина не зависит от эффективной теплоемкости и имеет вид

$$\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}} \equiv (\Delta\mathbb{S})(\Delta\mathbb{T}) = k_{\mathrm{B}}\mathbb{T}_0. \tag{46}$$

Сравнивая формулы (46) и (29), отмечаем, что в состоянии равновесия между объектом, моделируемым квантовым осциллятором, и кванто-термостатом две различные физические величины ($\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}}$ и $\sigma_{\mathbb{ST}}$) принимают одинаковые значения. Поэтому СН Шредингера “эффективная энтропия–эффективная температура” приобретает в данном случае форму равенства, т.е. оказывается насыщенным

$$\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}} = \sigma_{\mathbb{ST}}. \tag{47}$$

При $\mathbb{V} \neq \mathrm{const}$ за счет возрастания $\Delta\mathbb{S}$ при неизменном значении $\sigma_{\mathbb{ST}}$ [3] обсуждаемое СНШ трансформируется в неравенство, так что в общем случае имеем

$$\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}} \geqslant \sigma_{\mathbb{ST}}. \tag{48}$$

Учтем, что коррелятору $\sigma_{\mathbb{ST}}$ можно придать вид (43). Это равносильно утверждению о том, что взаимные ограничения на неопределенности $\Delta\mathbb{S}$ и $\Delta\mathbb{T}$ объекта в состоянии равновесия диктуются целостным стохастическим воздействием окружения, характеризуемым величиной $\mathbb{J}_0$. Тем самым, в состоянии равновесия СНШ “эффективная энтропия–эффективная температура” принимает вид

$$\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}} = \omega\mathbb{J}_0 = \omega\frac{\hbar^*}{2} = U_{\mathrm{Pl}}. \tag{49}$$

Подчеркнем, что левая и правая части данного СНШ были получены в рамках *макротеории*, в которой выражение для энергии Планка U_{Pl} берется из эксперимента. В пределе $T_0 \to 0$ соотношение (49) принимает вид

$$\mathcal{UP}^{\min}_{\mathbb{ST}} = \omega\mathbb{J}^{\min}_0 = U^{\min}_{\mathrm{Pl}} = \frac{\hbar\omega}{2}, \tag{50}$$

где справа стоит энергия нулевых колебаний.

Для вычисления $\mathcal{UP}_{\mathbb{PQ}}$, характерного для микротеории, используем в случае квантового осциллятора в равновесии с квантовым термостатом выражения

$$\Delta\mathbb{P} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}\coth\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right)}$$

и

$$\Delta\mathbb{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}\coth\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right)},$$

входящие в волновые функции теплого вакуума в импульсном и координатном представлениях соответственно. Тогда получаем:

$$\mathcal{UP}_{\mathbb{PQ}} = \frac{\hbar}{2}\coth\left(\varkappa\frac{\omega}{T_0}\right). \tag{51}$$

Сравнивая формулы (51) и (36), получим СНШ “координата–импульс” для квантового осциллятора в равновесии с кванто-термостатом

$$\mathcal{UP}_{\mathbb{PQ}} = \mathbb{J}_0, \tag{52}$$

где минимальное значение $\mathbb{J}^{\min}_0 = \hbar/2$.

Подчеркнем, что левая и правая части СНШ (52) в отличие от СНШ (49) были получены в рамках *микротеории*. Насыщенная форма этого СНШ обусловлена тем, что усреднение соответствующих операторов стохастического воздействия проводилось по волновой функции, зависящей от температуры. Тот факт, что оба СНШ (49) и (52) определяются одним и тем же макропараметром – эффективным воздействием $\mathbb{J}_0$ – является существенным подтверждением переплетения теорий, которые традиционно считаются относящимися исключительно либо к микро-, либо к макроописаниям природы.

Укажем еще на одно интересное следствие такого переплетения. Как известно, наличие минимального ограничения на $\mathcal{UP}_{\mathbb{PQ}}$, равного $\hbar/2$, позволяет в рамках микротеории ввести в фазовом пространстве переменных "координата–импульс" элементарные ячейки $2\pi\hbar$, что является основой квазиклассического приближения в квантовой теории. Следуя установленной выше аналогии, можно в рамках макротеории также ввести фазовое пространство переменных "эффективная энтропия – эффективная температура". Наличие ограничения на $\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}}$ при произвольной температуре, равного $\frac{1}{2}\omega\hbar^*$, соответствует тому, что это пространство также разделено на элементарные ячейки $2\pi\omega\hbar^*$, размер которых, однако, увеличивается с ростом температуры.

В связи с этим появляется заманчивая идея трактовать теорию флуктуаций макропараметров в равновесной стохастической термодинамике как квазиклассическую теорию в фазовом пространстве переменных $(\mathbb{S},\mathbb{T})$. В свою очередь, квазиклассическое приближение в квантовой теории можно трактовать как теорию флуктуаций микропараметров в фазовом пространстве переменных (p,q). Подобная интерпретация позволит объединить математические аппараты соответствующих теорий в рамках синтетической теории, охватывающей в значительной степени и традиционную термодинамику и традиционную квантовую теорию.

6. Некоторые итоги

Итак, в данной работе предложен подход, позволяющий преодолеть основной парадокс стандартной теории флуктуаций макропараметров, связанный с тем, что общепринятый метод учета квантовых эффектов приводит к выходу ее результатов за рамки термодинамического описания. В результате на основе квантовой модели термостата и микроописания в форме $(\hbar,k)$-динамики развита теория квантово-тепловых флуктуаций эффективных макропараметров и их корреляции при сохранении термодинамического описания.

Нами показано, что эффективное воздействие как макропараметр, отражающий стохастическое влияние окружения, формирует соответствующие дисперсии и корреляторы. Также установлено, что произведение неопределенностей сопряженных макропараметров – эффективной энтропии и эффективной температуры – характеризующее площадь элементарной ячейки в фазовом пространстве, при приближении к абсолютному нулю ограничено снизу энергией нулевых колебаний.

Кроме того, продемонстрировано, что корреляторы пар сопряженных эффективных макропараметров $(\mathbb{S},\mathbb{T})$ и $(\mathbb{P},\mathbb{Q})$ в состоянии равновесия пропорциональны друг другу при любой кельвиновой температуре и линейно зависят от одного и того же макропараметра – эффективного воздействия $\mathbb{J}_0$ квантотермостата.

Наконец, показано, что минимальные значения $\mathcal{UP}_{\mathbb{PQ}}$ и $\mathcal{UP}_{\mathbb{ST}}$ определяются одной и той же мировой постоянной – константой Планка. Это позволяет трактовать теорию флуктуаций эффективных макропараметров как квазиклассическую теорию в фазовом пространстве переменных $(\mathbb{S},\mathbb{T})$, а квазиклассическую теорию в фазовом пространстве переменных (p,q) как теорию флуктуаций микропараметров.

Считаем своим приятным долгом выразить благодарность А.Г. Загороднему и Ю.П. Рыбакову за внимание к работе и участникам семинаров Института теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова и кафедры теоретической физики РУДН за полезную дискуссию. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-01-90408).

1. А. Эйнштейн, *Собрание научных трудов*, ред. Я.А. Смородинский (Наука, Москва, 1966), т. 3, с. 67.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика*, ред. Л.П. Питаевский, Ч. 1 (Физматлит, Москва, 2001).
3. А.И. Ансельм, *Основы статистической физики и термодинамики* (Наука, Москва, 1973).
4. А.Д. Суханов, Элементарные частицы и атомные ядра **36,6**, 1281 (2005).
5. А.Д. Суханов, Ю.Г. Рудой, УФН **176,5**, 551 (2006).
6. Н.Н. Боголюбов, *Собрание научных трудов в 12 томах*, ред. А.Д. Суханов (Наука, Москва, 2006), т. 6, с. 236.
7. А. Эйнштейн, *Собрание научных трудов*, ред. Я.А. Смородинский (Наука, Москва, 1966), т. 3, с. 145.
8. А.Д. Суханов, Теоретическая и математическая физика **148,2**, 1123 (2006).
9. А.Д. Суханов, Теоретическая и математическая физика **154,1**, 153 (2008).

10. А.Д. Суханов, О.Н Голубева, Теоретическая и математическая физика **160,2**, 369 (2009).
11. A.D. Sukhanov and O.N. Golubjeva, *Modern Stochastic Thermodynamics*, ed. T. Mizutani (INTECH, Vienna, 2011), Ch. 4.
12. Дж.В. Гиббс, *Термодинамика. Статистическая механика*, ред. Д.Н. Зубарев (Наука, Москва, 1982).
13. А. Зоммерфельд, *Термодинамика и статистическая физика* (ИИЛ, Москва, 1955).
14. Н.Н. Боголюбов, *Собрание научных трудов в 12 томах*, ред. А.Д. Суханов (Наука, Москва, 2006), т. 6, с. 432.
15. А.Д. Суханов, Теоретическая и математическая физика **132**, 1276 (2002).

Получено 05.07.11

КВАНТОВО-ТЕПЛОВІ ФЛУКТУАЦІЇ ЕФЕКТИВНИХ МАКРОПАРАМЕТРІВ ТА ЇХ КОРЕЛЯЦІЇ

О.Д. Суханов, О.Н. Голубєва, В.Г. Бар'яхтар

Р е з ю м е

Показано,що використання стандартної теорії флуктуацій макропараметрів у деяких випадках приводить до виходу за межі термодинамічного опису. Сформульовано основи теорії квантово-теплових флуктуацій ефективних макропараметрів та їх кореляції, узгодженої з умовами застосовності рівноважної термодинаміки і заснованої на ефективних макропараметрах, що враховують цілісний стохастичний вплив оточення за будь-яких температур. Обчислено корелятор спряжених макропараметрів – ефективної ентропії та ефективної температури – і встановлено його пропорційність ефективному впливу, що характеризує стохастичне оточення. Продемонстровано, що корелятори пар спряжених ефективних параметрів "ентропія–температура" і "координата–імпульс" лінійно залежать від ефективного впливу, а їх мінімальні значення визначаються сталою Планка.

QUANTUM-THERMAL FLUCTUATIONS OF EFFECTIVE MACROPARAMETERS AND THEIR CORRELATIONS

A.D. Sukhanov[1]*, O.N. Golubjeva*[2]*, V.G. Baryakhtar*[3]

[1]N.N. Bogoliubov Laboratory of theoretical physics, JINR (*Dubna, Russia; e-mail: ogol@mail.ru*),
[2]Peoples' Friendship University of Russia (*Moscow, Russia; e-mail: ogol@oldi.ru*),
[3]Institute of Magnetism, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine (*Kyiv, Ukraine; e-mail: bvg@mail.vtv.kiev.ua*)

S u m m a r y

The application of the conventional theory of macroparameter fluctuations has been shown to go beyond the framework of thermodynamic description in a number of cases. The principles of the theory of quantum-thermal fluctuations of effective macroparameters and their correlations have been formulated. The theory satisfies the applicability conditions of equilibrium thermodynamics and is based on effective macroparameters, which take into account the integral stochastic action of the environment at any temperatures. The correlator of conjugate macroparameters, namely, the effective entropy and the effective temperature, has been calculated. The correlator was found to be proportional to the effective action that characterizes the stochastic environment. The pair correlators for conjugate effective parameters "entropy–temperature" and "coordinate–momentum" have been demonstrated to depend linearly on the effective action, with their minimum values being determined by Planck's constant.