arXiv:2301.11016v1 [math-ph] 26 Jan 2023

服从单调统计的粒子热力学

FABIO CIOLLI、FRANCESCO FIDALEO 和 CHIARA MARULLO

摘要。本文旨在初步探究服从单调统计的粒子的热力学。为使潜在的物理应用更切合实际，我们提出一种称为块单调的修正方案，该方案基于由具有紧预解式的正哈密顿量的谱上的自然序关系所诱导的偏序。块单调方案与弱单调方案互不可比；当所涉及哈密顿量的所有特征值均为非简并时，该方案便简化为通常的单调方案。通过详细分析一个基于量子谐振子的模型，我们可以看到：(a) 计算巨配分函数时，其关于活度展开式中的各项均不需要吉布斯修正因子 $n!$（该因子与粒子的不可分辨性有关）；(b) 对巨配分函数中各项的筛减会产生一种类似于费米粒子所遵循的泡利不相容原理的“排斥原理”。这一原理在高密度区间更为显著，在低密度区域则变得可以忽略，这正如预期的那样。

1. 引言

近年来，为了在解决复杂模型物理学中长期悬而未决的问题方面取得进展，人们对各种奇异模型的研究显著增多。在这方面，我们当然必须提到如何为量子电动力学提供令人满意的数学描述这一问题。量子电动力学通过重整化技术得到的预测，与实验结果惊人地完美吻合。

同样，我们也可以看到一些模型旨在研究并统一强相互作用（即量子色动力学）与电弱相互作用。所有这些模型都被称为“标准”模型，优缺点也相同：它们与实验结果吻合良好，但从数学角度来看并不令人满意。自然界中存在的这三种基本力与剩下的一种力——引力——如何统一，这个长期悬而未决的问题，尽管近期有人尝试借助所谓的非交换几何加以处理（例如，[1]），但即便是部分解决，也仍遥不可及。

我们还应提到，对具有奇异对易关系的模型进行研究，可能与其他一些学科相关，例如信息论和量子计算；这两个领域都与具体应用相联系，并且对具体应用具有重要意义。

在这类模型中，我们当然可以找到与所谓的 q-粒子（即夸子）相关的模型，$q \in (-1, 0) \bigcup (0, 1)$；从推广到所谓任意子的角度来看，任意子对应于参数 q 取某些单位根值的情形，此外还有普莱克顿。

2010 数学学科分类。 82B30, 58B34, 58J37, 46F10。关键词和短语。 单调巨正则系综；巨正则系综的热力学；排斥原理；高密度和低密度区域。

这类奇特 c q-粒子自然对应于以下对易关系：

$$\mathbf{a}_q(f)\mathbf{a}_q^\dagger(g) - q\mathbf{a}_q^\dagger(g)\mathbf{a}(f) = \langle g, f\rangle I_{\mathcal{H}}\,, \quad f, g \in \mathcal{H}\,, \tag{1}$$

$\mathcal{H}$ 作为单粒子空间，产生算符和湮灭算符作用于相应的福克空间。夸子当然可以被视为遵循费米统计的粒子（即 $q = -1$）与遵循玻色统计的粒子（即 $q = 1$）之间的一种插值，其间经过描述经典粒子的 $q = 0$ 值，因此遵循玻尔兹曼统计。我们可以观察到，对于 $q = \pm 1$，对易规则 (1) 分别化简为与玻色粒子和费米粒子相关的众所周知的规则（例如，参见 [2]）。

所有这类模型都与所谓的量子概率有关。事实上，从物理意义上说，描述经典粒子统计的玻尔兹曼情形 $q = 0$，也称为自由，因为它自然源自量子概率中的一个特殊情形，称为自由概率 （例如，参见 [3]）。

在量子概率的框架下，对对易规则（1）的各种推广使人们能够引入并研究奇异的量子随机过程（例如参见 [4]）。

众所周知，在玻色和费米情形下，上述各种对易规则都自然源自所谓的二次量子化，而二次量子化与所谓的巨正则系综相关。二次量子化的各种函子使人们能够构造相应的福克空间。福克空间编码了相关粒子所遵循的统计，并使相关的对易关系得以忠实表示。

我们还可以指出，巨正则系综使人们能够研究物质的凝聚态中涉及玻色子的最引人入胜的现象之一，即基态下的玻色–爱因斯坦凝聚（例如参见 [2, 5]）。 [6], 中表明，这种凝聚现象也会出现在类玻色夸子的情形下，即当 $q \in (0, 1]$。

回到奇异对易关系及其在量子概率中的应用，我们可以列举布尔统计和单调统计。与上述所有模型的情形一样，它们满足属于 [7], （推论 3.2）中所描述的一般形式的对易关系，因此与某个适当的福克空间相关联。布尔福克空间是二次量子化最简单的非平凡例子，因为至多只能创建和／或湮灭一个粒子。事实上，它描述了从装置中至多吸收一个光子的过程（见 [8]）。

粒子的单调统计由 [9,10], 独立提出，似乎没有任何明显的物理应用。正如第 2 节所述，通过使用由单粒子希尔伯特空间的全序正交归一基诱导的单调规则，可以轻松构造出相应的福克空间。

现在，我们还可以指出二次量子化方案与平衡统计力学之间众所周知的深刻联系（例如见 [2, 5]）。事实上，从一个根据所涉及粒子的统计构造的福克空间出发，我们至少在原则上可以计算所谓的巨配分函数。这个至关重要的函数被认为包含了大量（数量级为阿伏伽德罗常数 $N_{\mathrm{A}} \sim 10^{23}$）相关粒子所具有的全部热力学性质。对于玻色和费米情形，这当然成立；由于布尔情形的简单性，对布尔情形也同样成立，在这种情形中，粒子的不可分辨性不起作用。

由于吉布斯悖论（参见 [5]），在玻尔兹曼情形下，以相应的全福克空间为基础计算巨配分函数时，应针对所涉及粒子被假定具有的不可分辨性作适当修正（见下文）。夸子的普遍情形（即 $q \in (-1, 0) \cup (0, 1)$）则在 [11], 中以不同方式处理，因为这类奇异粒子所遵循的、必然经过“变形”的统计规律完全未知。

遵循单调统计的非相互作用粒子（在下文中简称为单调粒子）这一情形有两点尚不明确。第一，这种模型具体的物理应用完全未知。第二，我们不知道单调方案是否直接体现了粒子的不可分辨性原理；后者是发展平衡统计力学的一项基本要求。

综合考虑以上所有因素，自然会想到研究服从单调处方的粒子的热力学性质，这些性质由单调福克空间编码。遗憾的是，由于单粒子子空间的标准正交基不存在自然的全序，因此这项研究需要进行适当的初步分析。

一个被限制在有限体积中的简单单粒子物理系统，基本上由哈密顿量 H 描述。它是作用于可分希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 上的自伴正算子，且具有紧预解式。由数量级为阿伏伽德罗常数的非相互作用粒子组成的极大系统，其统计（即玻色统计、费米统计或玻尔兹曼统计）由相应的福克空间编码。

由于 H 的特征向量可由相应特征值（即所考虑系统的能级）诱导出自然的顺序，因此人们很容易想到，在统计力学模型中利用这种顺序来实现单调方案。只有当 H 的所有特征值的重数均为 1 时，才能这样做；简单来说，这意味着模型的任一能级都是非简并的。

遗憾的是，在热力学极限下，当所有能级的简并度趋于无穷大时（也就是说，特别是当系统体积趋于占据整个环境时），并非所有具体模型都属于这种情况；在此情形下，可以进行所谓的“连续谱极限”（例如参见 [5, 12]）。

连续谱极限是研究更现实模型热力学性质的基本工具。在这些模型中，单粒子哈密顿量具有连续谱，例如处于 $\mathbb{R}^3$ 中的自由粒子。

在本文中，我们提出一种方法，用以克服这一基本困难，从而将能级可能存在的简并考虑在内。具体而言，我们只需将单调处方推广到指标集；这些指标集仅按照源自具有可能简并能级的正紧预解式哈密顿量的谱所诱导的关系构成偏序。此模型在下文中称为块单调模型，预计更适用于物理应用，具体内容见第 3 节。

由于与（块）单调粒子相关系统的巨配分函数在大多数无限维情形下无法直接计算，本文的其余部分将致力于详细分析一个由无限多个相互独立的量子谐振子构成的简单模型。由于相应的哈密顿量具有非简并特征值，这种计算属于单调方案。该模型的巨配分函数将在第4节中计算。

第5节将专门讨论单调巨正则配分函数展开式中出现的统计权重的显式计算，并对高密度和低密度区域进行更深入的研究。这项研究得出了以下重要事实。

首先，对这类统计权重的计算表明，与活度展开中各项所涉及的粒子不可分辨性相关的吉布斯修正因子 $n!$ 会直接出现在低密度区域，也就是说，当系统温度不断升高时便会出现。这表明，单调方案直接编码了所涉及粒子的不可分辨性。

其次，对构成巨配分函数的各项进行抽取，会产生一种类似于费米粒子所遵循的泡利不相容原理的“排斥原理”。这种排斥原理似乎与高密度区间更为相关，而在低密度区域则会变得可以忽略，符合预期。

第5节的最后一部分致力于对玻尔兹曼模型与单调模型对应的巨配分函数进行更精细的比较，从而能够估算低密度区域内相关热力学量（如平均粒子数）的修正。

最后，我们指出，这项初步研究似乎为块单调方案的潜在物理应用提供了令人期待的视角，我们计划在未来的工作中继续探讨这一问题。

2. 预备知识

单粒子哈密顿量。 我们从一个系统出发，其哈密顿量 H 是一个具有紧预解式、作用于可分希尔伯特空间 $\mathcal{H}$上的自伴正算子（即， $\sigma(H) \subset [0,+\infty)$），该空间称为单粒子空间。

在这种情况下，谱 $\sigma(H)$由孤立点构成；若 $\mathcal{H}$ 是无限维的，这些点会聚集于 $+\infty$。此外，每个特征值 $\varepsilon \in \sigma(H)$的重数 $g(\varepsilon)$均有限。总之，通过考虑 H的恒等算子的谱分解，我们得到 $I \equiv I_{\mathcal{H}} = \sum_{\varepsilon\in\sigma(H)} P_\varepsilon$，

$$H = \sum_{\varepsilon\in\sigma(H)} \varepsilon P_\varepsilon, \text{ and } g(\varepsilon) = \dim\big(\mathrm{Ran}(P_\varepsilon)\big) < \infty\,.$$

令 $k_{\mathrm{B}} \approx 1.3806488 \times 10^{-23}\, JK^{-1}$ 为玻尔兹曼常数， $\beta := \frac{1}{k_B T}$为“逆温度”。假设对每个 $\beta > 0$， $e^{-\beta H}$ 均为迹类，我们便可定义配分函数 $\zeta := \mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$。

巨配分函数。 这里，我们在一个相对一般的框架下定义巨配分函数，该框架针对由遵循较为一般统计规律、因而可能适用于物理应用的非相互作用粒子组成的气体。此类巨配分函数的知识在所谓的平衡统计力学中起着至关重要的作用。对此进行分析的标准方法是所谓的二次量子化（例如参见 [2,5]）。

事实上，对于单粒子希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，我们定义所谓的全福克空间 $\mathcal{F}_0(\mathcal{H}) = \mathcal{F}$，其定义如下：

$$\mathcal{F} := \bigoplus_{n=0}^{+\infty} \underbrace{\mathcal{H}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}}_{\text{n-times}},$$

约定 $\mathcal{H}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H} := \mathbb{C} \equiv \underbrace{\mathbb{C}\Omega}$，其中 Ω 是所谓的真空矢量。0 次

这个数算符 N 有明确的含义（例如参见 [2]）。

对于定义域为 $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$的线性算子 A，我们定义

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\Gamma_o(A)\restriction_{\mathcal{D}\otimes\cdots\otimes\mathcal{D}} := & A\otimes I\otimes\cdots\otimes I + I\otimes A\otimes\cdots\otimes I \\ & + \cdots + I\otimes\cdots\otimes A\otimes I + I\otimes\cdots\otimes I\otimes A\,,\end{aligned}$$

并利用线性将其扩展到整个福克空间。如果 A 是自伴的，那么 $\mathrm{d}\Gamma(A)$ 的闭包仍然是自伴的（例如参见 [2]）。注意，$\mathrm{d}\Gamma(I_{\mathcal{H}})$ 给出了数算符。

现在，设 P 是作用于 $\mathcal{F}$上的自伴投影。对于一个固定的正算符 H （即哈密顿量）以及参数 $\beta > 0$ （逆温度）和 $\mu \in \mathbb{R}$ （化学

势），使得 $Pe^{-\beta \mathrm{d}\Gamma(H-\mu I)}P \equiv Pe^{-\beta(\mathrm{d}\Gamma(H)-\mu N)}P$ 是迹类，我们将巨正则配分函数定义为

$$Z_P \equiv Z_{H,P}(\beta,\mu) := \mathrm{Tr}\big(Pe^{-\beta \mathrm{d}\Gamma(H-\mu I)}P\big)\,. \tag{2}$$

描述玻色气体和费米气体热力学的最重要情形，是 P 为分别投影到完全对称子空间和反对称子空间上的自伴投影（相对于置换在 $\mathcal{F}$ 上的自然作用）。

当 P 为恒等算子 $I \equiv I_{\mathcal{F}}$ 时，相应的巨配分函数将描述经典粒子的热力学，也就是服从玻尔兹曼统计的粒子的热力学。不幸的是，情况并非如此，原因将在 [11, 13] 中解释。下面，我们概述如何在玻尔兹曼情形下得到这样的巨配分函数。

我们还可以指出，q 变形的福克空间 $\mathcal{F}_q(\mathcal{H})$（例如，[4] 和 [14]，用于研究由此产生的遍历性质）可用于计算所谓的夸子 的巨配分函数，从而计算其热力学性质。不幸的是，在这种情形下，二次量子化方法同样行不通。夸子自由气体的巨配分函数已在 [11] 中完整计算，且未使用 q 变形的福克空间。

所谓的布尔 （例如，[15]）和单调 模型（见下文）也可以按照上述方式描述。对于布尔情形，这一点无疑成立，其中 $\mathcal{F}_{\mathrm{boole}}(\mathcal{H}) = \mathbb{C} \bigoplus \mathcal{H}$，因此粒子的不可分辨性不存在疑问。我们将在后续分析中看到，对于本文讨论的单调模型及其推广，这一点同样成立。

单调福克空间。为方便读者，我们概述单调福克空间及其基本算子的一些基本事实（更多详情见 [9, 10, 16]）。这里，我们定义了单调粒子的一种推广，使其适用于物理应用。不过，作为一个直接源自量子物理的特例，我们将详细研究一个满足单调统计／对易关系的简单模型的热力学。对于感兴趣的读者，我们指出，目前已有针对奇异对易关系的新研究，这些关系与前文提及的关系相关，并可能具有潜在的物理应用（见 [17]）。

对于 $k \geq 1$，记作 $I_k := \{(i_1, i_2, \ldots, i_k) | i_1 < i_2 < \cdots < i_k,\ i_j \in \mathbb{N},\ j = 1, \ldots, k\}$，它表示所有长度为 k 的自然数有序序列构成的类。对于 $k = 0$，我们取 $I_0 := \{\emptyset\}$。如果 $k \geq 0$，则希尔伯特空间 $\mathcal{H}_k := l^2(I_k)$ 称为 k-粒子空间。特别地，0-粒子空间 $\mathcal{H}_0 = l^2(\emptyset)$ 与复数标量域 $\mathbb{C}$ 等同。于是，单调福克空间定义为 $\mathcal{F}_{\mathrm{m}} := \bigoplus_{k=0}^{\infty} \mathcal{H}_k$。

对于任意递增的自然数序列 $\alpha = \{i_1, i_2, \ldots, i_k\}$，我们将其典范地关联到向量 e_α；对于所有此类序列 α，这些向量构成 $\mathcal{F}_{\mathrm{m}}$ 的典范基。对于任意一对这样的序列 $\alpha = \{i_1, i_2, \ldots, i_k\}$、$\beta = \{j_1, j_2, \ldots, j_l\}$，我们规定，若 $i_k < j_1$，则 $\alpha < \beta$。按照约定，对于每个 $\alpha \neq I_0$，$I_0 < \alpha$。

换言之，若 $\{e_n \mid n \in \mathbb{N}\}$ 是 $\ell^2(\mathbb{N})$ 的规范有序基（或可分希尔伯特空间的任意有序基），则 n 粒子空间由向量 $e_\alpha \equiv e_{j_1} \otimes e_{j_2} \otimes \cdots \otimes e_{j_n}$ 生成，其中 $\alpha = \{j_1, j_2, \ldots, j_n\}$ 且 $j_1 < j_2 < \cdots < j_n$。如果放宽最后一个条件，仅假设 $j_1 \leq j_2 \leq \cdots \leq j_n$，我们将得到所谓的 弱单调福克空间（例如参见 [16]）。注意，$\mathcal{F}_{\mathrm{m}}$ 和 $\mathcal{F}_{\mathrm{wm}}$ 分别是作用于全福克空间 $\mathcal{F}$ 上的自伴投影 P_{m} 和 P_{wm} 的值域:

$$\mathcal{F}_{\mathrm{m}} = P_{\mathrm{m}}\mathcal{F} \ \text{ and } \ \mathcal{F}_{\mathrm{wm}} = P_{\mathrm{wm}}\mathcal{F}\,.$$

即使在接下来的分析中不会用到，我们仍可以说明单调产生算子和湮灭算子的结构，以及生成的对易关系；这些内容对于量子概率的应用仍然很有用。事实上，单调产生算子和

湮灭算子分别对任意 $i \in \mathbb{Z}$ 定义如下：

$$a_i^\dagger(e_{(i_1,i_2,\dots,i_k)}) := \begin{cases} e_{(i,i_1,i_2,\dots,i_k)} & \text{if } \{i\} < \{i_1, i_2, \dots, i_k\}\,, \\ 0 \end{cases} \tag{3}$$

否则，

$$a_i(e_{(i_1,i_2,\dots,i_k)}) := \begin{cases} e_{(i_2,\dots,i_k)} & \text{if } k \geq 1 \quad \text{and} \quad i = i_1\,. \\ 0 \end{cases} \tag{4}$$

可以验证 $||a_i^\dagger|| = ||a_i|| = 1$ （例如参见 [16], 命题 8）。此外， $a_i^\dagger$ 和 a_i 互为伴随，并满足以下关系：

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j^\dagger = a_j a_i = 0 \quad & \text{if } i \geq j\,, \\ a_i a_j^\dagger = 0 \quad & \text{if } i \neq j\,. \end{aligned}$$

此外，还满足以下对易关系。该关系在 $\mathcal{B}(\mathcal{F}_{\mathrm{m}})$ 的弱算子拓扑中给出，并属于 [7] 推论 3.2 中所处理的对易关系的一般类别，可用于量子概率领域：

$$a_i a_i^\dagger = \mathbb{1} - \sum_{k \leq i} a_k^\dagger a_k$$

该关系也成立。

关于单调系统的一些性质，包括其遍历性质，参见例如 [18]及其中引用的文献。

玻尔兹曼情形的巨配分函数。玻尔兹曼（或经典）情形非常特殊，因为在玻尔兹曼统计中会出现吉布斯悖论（例如， [5]），因此我们应当适当地修正统计权重。

至于玻色和费米情形下 $\mathsf{Z}_{\pm 1}$ 的计算（例如， [2,5]），自然可以像上文所述，使用全福克空间 $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ 和 巨正则哈密顿量 $K := \mathrm{d}\Gamma(H) - \mu N$，前提是对于固定的 β 和 μ， K 是迹类。这相当于在（2）中取 $P = I_{\mathcal{F}}$。

这一简单计算见 [13], ，其结果为

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K}\right) = \frac{1}{1 - \zeta e^{\beta\mu}}\,,$$

这对 $\mu < \min \sigma(H)$ 仍然成立。

出于 [11, 13], 中所述的原因，这样的公式并不现实。然而，正确的公式应为 $Z_0 = e^{\zeta e^{\beta\mu}}$。

定义逸度（也称为活度）*fugacity*， *activity*，使其满足 $z := e^{\beta\mu}$ 后，我们得到：

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K}\right) = \sum_{n=0}^{+\infty} \zeta^n z^n\,, \quad 0 \leq z < 1\,. \tag{5}$$

有趣的是，如果在级数的分母中用权重 $n!$ 修正公式（5），从而将粒子的不可分辨性考虑在内，正如通常为避免吉布斯悖论所做的那样，我们便得到正确的公式：

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\zeta^n}{n!} z^n = e^{\zeta z}\,. \tag{6}$$

简谐振子。 由于我们对由非相互作用简谐振子构成的简单模型进行了详细研究，为方便读者，现列出以下分析中用到的一些基本事实。因此，相对于玻尔兹曼统计，我们在逆温度 β 和活度$z = e^{\beta\mu}$下计算相对巨配分函数，其中 μ 为化学势。

事实上，鉴于 K 充当弹簧的劲度系数，而 m 是所涉及粒子的质量，众所周知，该模型的哈密顿量谱由非简并特征值构成，具体如下：

$$\sigma(H) = \left\{ \hbar\omega(n+1/2) \mid n \in \mathbb{N} \right\}, \tag{7}$$

其中 $\omega := \sqrt{K/m}$ 是给定的频率。

由此可得配分函数：

$$\zeta \equiv \mathrm{Tr}\big(e^{-\beta H}\big) = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \sum_{n=0}^{+\infty} \big(e^{-\beta\hbar\omega}\big)^n = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\,.$$

考虑吉布斯修正（例如，[5, 11, 13]）后，可得巨配分函数：

$$Z_0 = e^{z\zeta} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n e^{\frac{n\beta\hbar\omega}{2}}}{n!} \Big(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\Big)^n.$$

3. 块单调粒子

本节旨在对粒子的统计单调处方进行推广：一方面，这种推广更适用于潜在的物理应用；另一方面，它始终不同于上文简要介绍的弱单调方案。

为此，我们考虑一个指标集 I，它必然是有限或可数的，并且是有限个或可数个有限集的不交并。事实上，$I := \bigsqcup_{j=0}^{+\infty} I_j$，其中 $|I_j| < +\infty, j = 0, 1, \ldots$。集合 I 具有自然的偏序，因为如果 k_j，l_j 属于同一个子集 I_j，那么它们之间没有预先规定的顺序。反之，如果 $k_1 \in I_{j_1}$ 和 $k_2 \in I_{j_2}$，那么 $k_1 \prec k_2 \Longleftrightarrow j_1 < j_2$。

这种图景是由潜在的物理应用所启发的。事实上，如第 2 节所述，在可分希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 上作用的、具有紧预解式的正哈密顿量 H，会在 $\mathcal{H}$ 的自然基上诱导出如上所示的自然顺序。该自然基由与 H 的特征值 $\{\varepsilon_j\}$ 相对应的特征向量构成，其中相关子集的有限基数由特征值 ε_j 的简并度 g_j 给出。由此分析得到的图景称为**块单调**。相应的块单调福克空间 $\mathcal{F}_{\mathrm{bm}}$ 及其相应的产生算符和湮灭算符可如下轻松构造。

令 $\{e_j \mid j \in I\}$ 为 $\mathcal{H}$ 的一组标准正交基，并赋予前文所述的偏序。通常，这种偏序由具有紧预解式的正哈密顿量诱导。如上所述，$\mathcal{F}_{\mathrm{bm}}$ 是完整 Fock 空间 $\mathcal{F} \equiv \mathcal{F}_0$ 的一个子空间；在 n 粒子子空间上，n 粒子块单调子空间按下文所述生成。

这样的 n 粒子子空间由所有满足条件 $k_1 < k_2 < \cdots < k_n$ 的初等（标准正交）张量序列 $e_{k_1} \otimes \cdots e_{k_n}$ 生成，其中条件是相对于上文定义的偏序而言的。根据上述偏序，块单调产生算符和湮灭算符分别与式（3）和（4）具有相同的形式。

我们将 P_{bm} 记为作用于全福克空间、投影到 $\mathcal{F}_{\mathrm{bm}}$ 上的自伴投影。根据（2），这使我们能够计算巨配分 Z_{bm}。现在，我们可以针对最简单的非平凡有限维情形，显式计算这样的巨配分函数。在该情形下，$\mathcal{H}$ 由标准正交基 $\{(e_1,\ e_2)\ e\}$ 生成；哈密顿量的特征值为 $h,\ k$，其重数分别为 2 和 1。我们用活度 $z = e^{\beta\mu}$ 表示这样的巨配分函数。

在这个简单情形下，块单调福克空间 $\mathcal{F}_{\mathrm{bm}}$ 以二粒子子空间为终点，并由下式给出：

$$\mathcal{F}_{\mathrm{bm}} = \mathbb{C} \bigoplus \Big((\mathbb{C}e_1 \oplus \mathbb{C}e_2) \oplus \mathbb{C}e \Big) \bigoplus \Big(\mathbb{C}(e_1 \otimes e) \oplus \mathbb{C}(e_2 \otimes e) \Big) .$$

相应地，巨配分函数为：

$$Z_{\mathrm{bm}}(z,\beta) = 1 + z(2e^{-\beta h} + e^{-\beta k}) + 2z^2 e^{-\beta(h+k)} .$$

最后指出，若所有 I_j 都是单元素集（或空集），则块单调方案将退化为通常的单调方案。在前面的例子中，块单调方案与单调方案之间的比较不依赖于我们对 H 的第一个特征向量子集所规定的顺序，因此得到：

$$Z_{\mathrm{m}}(z,\beta) = 1 + z(2e^{-\beta h} + e^{-\beta k}) + z^2\big(e^{-2\beta h} + 2e^{-\beta(h+k)}\big) .$$

在接下来的分析中，我们将较为一般地研究这类非平凡情形。

反过来，块单调方案与弱单调方案从不具有可比性。事实上，上一个例子的弱单调版本在二粒子子空间的基底中增加了五个元素，此外还包含涉及所有 n-粒子子空间的非平凡贡献。确实，

$$\begin{aligned} Z_{\mathrm{wm}}(z,\beta) =& 1 + z\big(2e^{-\beta h} + e^{-\beta k}\big) + z^2\big(4e^{-2\beta h} + 2e^{-\beta(h+k)} + e^{-2\beta k}\big) \\ &+ \sum_{n=3}^{+\infty} z^n a_n(h,k,\beta) . \end{aligned}$$

4. 单调粒子的巨配分函数

由于在大多数无限维情形下无法显式计算单调巨配分函数，因此我们将问题简化为第 2 节简要介绍的一维量子谐振子这一简单情形。相关哈密顿量 (7) 的谱由重数为一的特征向量构成。因此，在这种情形下，第 3 节介绍的块单调模型便简化为通常的单调模型。

将相对于量子谐振子的这一单调巨配分函数记为 Z_{m}，我们得到：

命题1。 对于巨配分函数 Z_{m}，有

$$Z_{\mathrm{m}} = 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} z^n e^{\frac{n\beta\hbar\omega}{2}} \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\big(e^{k\beta\hbar\omega} - 1\big)} .$$

此外，$0 \le Z_{\mathrm{m}} \le Z_0$，其中 Z_0 是式(6)给出的玻尔兹曼巨正则配分函数，因此 Z_{m} 对所有 $z \ge 0$ 和 $\beta > 0$ 均收敛。

证明。 我们以如下观察开启后半部分：

$$e^{k\beta\hbar\omega} - 1 = \big(e^{\beta\hbar\omega} - 1\big) \sum_{l=0}^{k-1} e^{l\beta\hbar\omega} \ge k\big(e^{\beta\hbar\omega} - 1\big) ,$$

因此，

$$0 \le \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\big(e^{k\beta\hbar\omega} - 1\big)} \le \frac{1}{n!\big(e^{\beta\hbar\omega} - 1\big)^n} .$$

因此，$Z_{\mathrm{m}} \le Z_0 < +\infty$。

关于前半部分，考虑到由单调假设产生的排斥规则，很容易验证，对于相对于 n 粒子子空间的贡献， $n \geq 1$,

$$\mathrm{Tr}\Big(P_{\mathrm{m}} e^{-\beta \mathrm{d}\Gamma(H)} P_{\mathrm{m}} \restriction_{\underbrace{\mathcal{H}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}}_{\text{n-times}}}\Big) = e^{-\frac{n\beta\hbar\omega}{2}} \sum_{k_1=0}^{+\infty} e^{k_1\beta\hbar\omega} \sum_{k_2=k_1+1}^{+\infty} e^{k_2\beta\hbar\omega}$$
$$\cdots\cdots \sum_{k_n=k_{n-1}+1}^{+\infty} e^{k_n\beta\hbar\omega} = e^{\frac{n\beta\hbar\omega}{2}} \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\big(e^{k\beta\hbar\omega}-1\big)}\,.$$

□

现在，我们可以比较两个巨配分函数 Z_{m} 和 Z_0。具体而言，定义

$$Z_{\#} = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n^{(\#)}(\beta) z^n\,,$$

表示“0”和“单调”，我们可以讨论两个具有物理意义的情形： $\beta \downarrow 0$（高能/低密度区域）和 $\beta \uparrow +\infty$（低能/高密度区域）。

对于高能情形，

$$a_n^{(\mathrm{m})}(\beta) = \frac{1}{(\hbar\omega)^n}\Big(\frac{1}{\beta}\Big)\Big(\frac{1}{2\beta}\Big)\cdots\Big(\frac{1}{n\beta}\Big) + o\Big(\frac{1}{\beta^n}\Big) \equiv \frac{1}{n!(\hbar\omega\beta)^n} + o\Big(\frac{1}{\beta^n}\Big)\,, \tag{8}$$

由此得到

$$a_n^{(0)}(\beta) = a_n^{(\mathrm{m})}(\beta) + o\Big(\frac{1}{\beta^n}\Big),\ \text{for } \beta \downarrow 0\,. \tag{9}$$

注 2. 方程（8）和（9）表明，从某种意义上说，至少对于简谐振子这一简单情形，在高能极限下（即 $\beta \downarrow 0$），单调巨配分函数 Z_{m} 的各项行为与 Z_0相同，后者对应于经典粒子。下一节将对这一现象作更深入的分析。

关于吉布斯修正项 $n!$ 的出现（即式（8）），我们可以立即指出，单调福克空间会自然地考虑粒子的不可分辨性。

现在，我们转而讨论低能量极限（通常涉及所谓的基态） $\beta \uparrow +\infty$。事实上，

$$\prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\big(e^{k\beta\hbar\omega}-1\big)} \approx \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega\sum_{k=1}^{n}k}} = e^{-\beta\hbar\omega\frac{n(n+1)}{2}}\,,$$

因此，

$$Z_{\mathrm{m}} \approx \sum_{n=0}^{+\infty} z^n e^{-\frac{n^2\beta\hbar\omega}{2}}\,.$$

相对于玻尔兹曼配分函数，根据上述推理，我们得到：

$$Z_0 \approx \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n}{n!} e^{-\frac{n\beta\hbar\omega}{2}},\ \text{for } \beta \uparrow +\infty\,.$$

现在，利用斯特林公式，当 $n \uparrow +\infty$ 和 $\beta \uparrow +\infty$时，仅保留首项，我们得到：

$$a_n^{(0)}(\beta) \approx e^{-n(\beta\hbar\omega/2+\ln n)},\ \text{whereas } a_n^{(\mathrm{m})}(\beta) \approx e^{-n^2\beta\hbar\omega/2}\,. \tag{10}$$

注 3. 在 $\beta, n \uparrow +\infty$所描述的高密度区间内，也就是说，当物质状态非常致密时，单调粒子遵循一种类似于费米子所遵循的泡利不相容原理的排斥原理。启发式公式（10）似乎证实了这种原理的存在。

5. 低密度区域

我们讨论对应于 $\beta, z \approx 0$ 的低密度区域，证明在此极限下，

$$Z_{\mathrm{m}}(\beta, z) \approx Z_0(z, \beta), \text{ for } \beta, z \to 0\,.$$

命题 4. 对于单调和玻尔兹曼巨正则配分函数，我们有：

$$(1 - f(\beta, z)) Z_0(z, \beta) \leq Z_{\mathrm{m}}(\beta, z) \leq Z_0(z, \beta)\,, \tag{11}$$

其中 $f(\beta, z) := \frac{z^2 e^{\beta\hbar\omega}}{4(e^{\beta\hbar\omega} - 1)}$。

证明。（略）。当 $x := e^{\beta\hbar\omega}$ 且

$$\Delta_n(x) := 1 - \frac{n!}{(1+x)(1+x+x^2)\cdots\left(\sum_{k=0}^{n-1} x^k\right)}\,, \quad n = 1, 2, \ldots\,, \tag{12}$$

注意到 $\beta \downarrow 0 \Longleftrightarrow x \downarrow 1$，对于 $n \geq 2$（对于 $n = 0$，1，两者相同），我们得到：

$$a_n^{(0)} - a_n^{(\mathrm{m})} = \frac{1}{n!(x-1)^n}\left(\Delta_n(1) + \Delta_n'(1)(x-1) + \frac{\Delta_n''(\xi_n)}{2}(x-1)^2\right). \tag{13}$$

这里，我们应用带二阶拉格朗日余项的泰勒公式；因此，ξ_n 是区间 (1，x) 内的某个数（显然取决于 n）。

由于 $\Delta_n(1) = 0$，$\Delta_n'(1) = \frac{n}{(n-1)\ 4}$，最后，我们得到证据表明，只要 $x > 1$，就有 $\Delta_n''(\xi_n) < 0$（见附录 A）。将这些结果汇总起来，我们有：

$$a_n^{(0)} - a_n^{(\mathrm{m})} \leq \frac{\sqrt{x}}{n!(x-1)^n}\Big(\frac{n(n-1)}{4}(x-1)\Big) \equiv \frac{n(n-1)}{4}(x-1)a_n^{(0)}\,.$$

定义 $y := \frac{z\sqrt{x}}{x-1}$ 后，我们可以求和，得到：

$$\begin{aligned} Z_0 - Z_{\mathrm{m}} \leq & \frac{(x-1)}{4}\sum_{n=0}^{+\infty} n(n-1)\frac{y^n}{n!} = \frac{(x-1)}{4}y^2\frac{\mathrm{d}^2 Z_0}{\mathrm{d}y^2} \\ \equiv & \frac{z^2 x}{4(x-1)}e^y \equiv \frac{z^2 x}{4(x-1)}Z_0\,. \end{aligned} \tag{14}$$

现在，由 (14) 可轻易得到：

$$Z_0\left(1 - \frac{z^2 e^{\beta\hbar\omega}}{4(e^{\beta\hbar\omega} - 1)}\right) \leq Z_{\mathrm{m}}\,,$$

根据命题1，证明随之成立。 □

为了进一步研究低密度区域，式（11）可写为

$$(1 - f(\beta, z)) \leq \frac{Z_{\mathrm{m}}(\beta, z)}{Z_0(\beta, z)} \leq 1\,, \tag{15}$$

而式（15）给出了一个有用的条件，当且仅当 $(1 - f(\beta, z)) > 0$。

现在定义 $t := z^2/4$ 较为方便，并施加限制 $0 \leq t < 1$，从而得到

$$1 - \frac{xt}{x-1} > 0 \Longleftrightarrow x > \frac{1}{1-t}\,.$$

取对数并还原变量 z 和 β，我们得到：

$$\beta\hbar\omega > -\ln\left(1-(z/2)^2\right).$$

另一方面，若对于某个 $0<\gamma<1$,

$$\beta\hbar\omega \geq -\ln\left(1-(z/2)^{2\gamma}\right) > -\ln\left(1-z^2/4\right), \tag{16}$$

同样，用 x 和 t表示，我们有：

$$x \geq \frac{1}{1-t^\gamma} \Longleftrightarrow \frac{xt^\gamma}{x-1} \leq 1 \Longleftrightarrow \frac{xt}{x-1} \leq t^{1-\gamma} \to 0$$

只要 $t\downarrow 0$，或者等价地， $z\downarrow 0$。

恢复原始变量后，上述计算的含义很简单：

$$0 \leq f(\beta,z) \equiv \frac{z^2 e^{\beta\hbar\omega}}{4(e^{\beta\hbar\omega}-1)} \leq (z^2/4)^{1-\gamma} \to 0,$$

当所选区域中的 z 以及必然也有的 β 变为 0 时。

因此，我们证明如下：

命题 5. 对于每个固定的 $0<\gamma<1$ 以及位于由 $0\leq z<2$和条件所界定的区域 R 内的(z,β)

$$\beta\hbar\omega > -\ln\left(1-(z/2)^{2\gamma}\right),$$

我们得到

$$\lim_{\substack{(\beta,z)\to(0,0)\\(\beta,z)\in R}} \frac{Z_{\mathrm{m}}(\beta,z)}{Z_0(\beta,z)} = 1.$$

关于低密度区域，命题 5 的含义如下。事实上，对于由（16）定义的区域内的β， $z\approx 0$，

$$Z_{\mathrm{m}}(\beta,z) \approx (1-f(\beta,z))Z_0(\beta,z), \tag{17}$$

其中，注 3 将负号解释为单调粒子的泡利不相容原理的类似物。这种单调排斥原理在高密度区间（$\beta\uparrow+\infty$，见注 3）趋于变得非常重要，而在低密度区域则趋于消失（命题 5）。在后一种情形下，函数 $1-f(\beta,\ z)$ 给出了相对于单调情形的热力学势修正，与相对于玻尔兹曼情形的相应修正相比。

此外，利用（17），我们可以确定粒子平均数为

$$\begin{aligned} N_{\mathrm{m}}(\beta,z) =& z\frac{\partial \ln Z_{\mathrm{m}}(\beta,z)}{\partial z} \approx z\frac{\partial \ln(1-f(\beta,z))}{\partial z} + N_0(\beta,z) \\ =& N_0(\beta,z) - \frac{z^2 e^{\beta\hbar\omega}}{2\left((e^{\beta\hbar\omega}-1)-(z/2)^2 e^{\beta\hbar\omega}\right)}, \end{aligned}$$

其中 末项中的第二个附加项确实为负，这是由式（16）导致的。

最后我们指出，命题 5 使我们能够计算*Connes* 谱作用量（参见 [1]）的渐近行为。该作用量与单调粒子的平均粒子数相关，如 [19] 中对 q 粒子的描述，但需满足式（16）所述的条件。我们将把这一方面的研究留待未来的分析。

6. 结论

此前对单调模型的分析表明，它们在物理学中的潜在应用似乎颇有意义且富有成效，尽管热力学量的显式计算似乎相当复杂。因此，即使对于大多数无限维系统而言，相关的巨配分函数无法完全计算，系统地研究单调系统的统计性质仍是顺理成章的。下面我们列出一些可在未来研究中探讨的自然问题。

第一个问题涉及所考虑的能级存在简并的模型。一个简单的例子是能级简并度均匀的情况。一个具体但更复杂的例子是处于 d 维环境中的各向同性谐振子， $d>1$。这种简并并不均匀，但很容易计算，结果为：

$$\varepsilon = \hbar\omega \sum_{i=1}^{d} (n_i + 1/2)\,, \quad n_i \in \mathbb{N},\ i = 1, 2, \ldots, d\,,$$
$$g(\varepsilon) = \binom{d+n-1}{n}\,, \quad n \in \mathbb{N}\,.$$

第二个自然需要探讨的问题，是研究由单调粒子构成的自由气体。这与简并有关，可以通过以下两种方式进行研究：一是考虑限制在盒子中的自由粒子，然后像 [19], 的第 4 节和第 5 节那样“取连续极限”；二是去除谐振势（即在胡克常数趋于 0 时取适当的极限）。对于 $d=1$，第二种方法似乎可以直接应用，因为如上所述，其能级是非简并的；而第一种方法在 $d=1$ 的情况下已经涉及非平凡的简并。

第三个同样重要的问题，是系统地研究单调系统的统计性质，尤其关注低密度和高密度区间。如上所述，对低密度区域的详细研究还涉及明确计算 $\beta \downarrow 0$ 的渐近行为；这与单调系统的 Connes 谱作用量（例如 [1]）有关，因此也与非交换几何有关。

研究高密度区间，尤其是零温度下的情形（即在极限$\beta \uparrow \infty$下），或许能解释单调处方所引发的抽取效应的定量影响。这正是我们先前称为“单调排斥原理”的效应，也就是零温度下费米子情形中泡利不相容原理的对应形式。

例如，我们可以认为，（块）单调系统的统计性质或许能够合理地应用于吸收（或发射）能量量子的复杂系统。我们想到的系统是一个原子，它捕获光子后进入激发态，甚至再次发射光子，从而达到更稳定的状态。另一个例子涉及核电站中裂变材料（如铀 U^{92}_{235}）的原子核，它们会捕获热中子并发生核裂变。在这两种情况下，相关研究对象或许不是被吸收的粒子（前一种情况下是玻色子，后一种情况下是费米子），而是根据其哈密顿量特征值的顺序吸收（或发射）能量的复杂系统。这些考量或许表明，块单调规定在从统计学角度研究此类复杂系统时具有一定作用。

最后我们指出，这种单调排斥原理应当不允许单调粒子在基态中发生凝聚现象。若能对自由气体中的这一猜想给出严格证明，将会很有意义：

该自由气体由处于 d 维（或更具体地说，欧几里得三维）空间中的单调粒子构成。

F.C. 和 F.F. 感谢 MIUR 卓越系项目，该项目授予罗马第二大学数学系，项目编号为 CUP E83C18000100006，以及 INDAM-GNAMPA。F.C. 感谢 ERC 高级资助项目 669240 QUEST“量子代数结构与模型”。

附录 A.

本工作的主要目的是探究服从单调处方的粒子是否具有潜在的物理应用。因此，在这一阶段，我们没有详细证明命题 4。具体而言，在证明概要中，对于 $n = 2$，3，.....以及所有 $x > 1$，我们使用了 $\Delta_n(x)$ 的二阶导数满足负性条件这一结论。尽管这一性质合理且直观，但要给出其解析证明并不容易。因此，我们对不同取值的 n 进行了数值计算，得到相应的二阶导数，并将其图像列于图 1。

另一方面，虽然不难看出 $\Delta_n'(1) = {}^{n}{}_{(n-1)\ 4}$，但为了估算式 (13) 中最后一项，我们用一个四次多项式对 ${}^{\Delta_n''}{}_{(1)\ 2}$ 进行拟合，其形式为

$$p(n) = b_4 n^4 + b_3 n^3 + b_2 n^2 + b_1 n + b_0\,,$$

其中

$$b_0 \approx 0, \quad b_1 \approx 0.09028, \quad b_2 \approx -0.13542, \quad b_3 \approx 0.07639, \quad b_4 \approx -0.03125,$$

误差可忽略不计（见图 2）。

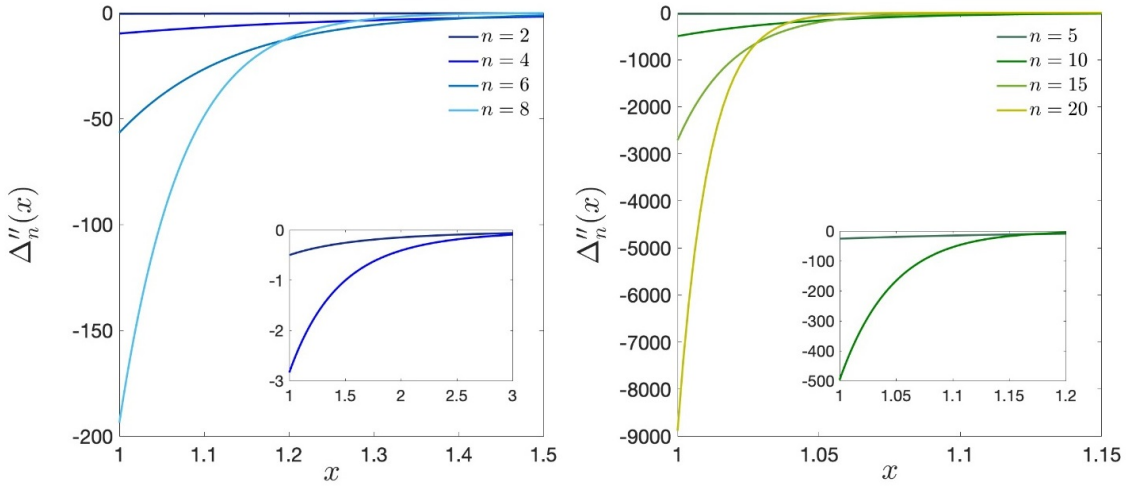

图 1. $\Delta_n(x)$、 $x > 1$ 的二阶导数。

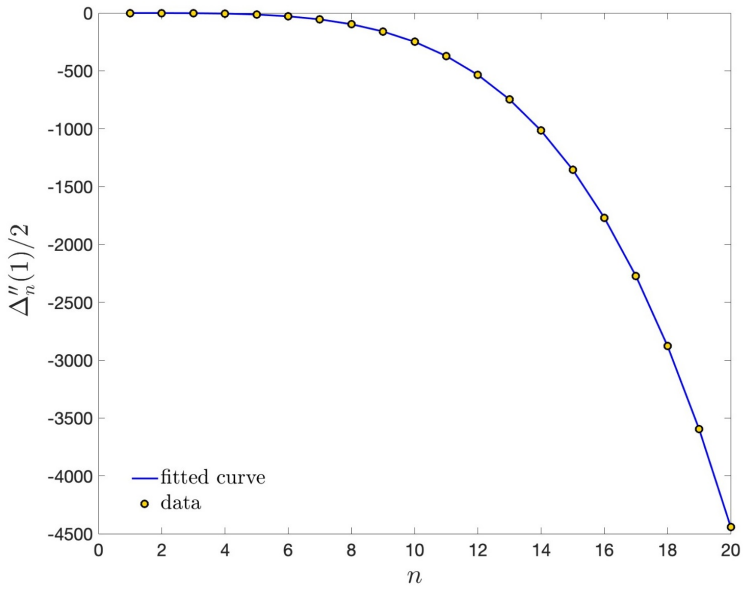

图 2. $\Delta_{n(1)\ 2}''$ 的拟合。

参考文献

[1] Chamseddine, A.H.; Connes, A. 谱作用原理。《*Commun. Math. Phys.*》**1997年，** *186*卷，731–750页。[2] Bratteli, O.; Robinson, D.W. 《算子代数与量子统计力学》第二卷；Springer：柏林/海德堡，德国，1997年。[3] Voiculescu, D.V.; Dykema, K.J.; Nica, A. 《自由随机变量》；美国数学学会：美国纽约州纽约，1992年；第70页。[4] Bożejko, M.; Kümmerer, B.; Speicher R. q-高斯过程：非交换与经典方面《*Commun. Math. Phys.*》**1997年**，*185*卷，129–154页。[5] Huang, K. 《统计力学》；John Wiley & Sons：美国新泽西州霍博肯，1987年。[6] Accardi, L.; Fidaleo. 粒子与 q-粒子在平衡及非平衡热力学中的凝聚。《*Rep. Math. Phys.*》**2016年**，*77*卷，153–182页。

[7] Bożejko, M.; Speicher R. 考克斯特群上的完全正映射、变形交换关系与算子空间。《数学年刊》1994, 300 , 97–120. [8] von Waldenfels, W. 关于谱线压力展宽理论的一种研究方法。载于《概率论与信息论 II》；《数学讲义》；Behara, M., Krickeberg, K., Wolfowitz, J., 编；Springer：柏林/海德堡，德国；纽约，纽约州，美国。1973；第 29 卷，第 19–69 页。[9] Lu, Y.G. 相互作用自由 Fock 空间与反正弦律。《概率与数理统计》1997, 17, 149-166. [10] Muraki, N. 单调福克空间中的非交换布朗运动。《数学物理通讯》1997, 183, 557 570– . [11] Ciolli, F.; Fidaleo, F. 关于单调粒子的热力学。《熵》 2022, 24, 159. [12] Fidaleo, F.; Viaggiu, S. 对某些开放系统热力学的一种提议。《物理学 A》2017, 468, 677 690– .[13] Werner, R.F. 自由夸子气体遭遇吉布斯悖论。《物理评论 D》1993, 48, 2929. [14] Dykema, K.; Fidaleo, F. 由 q-正则交换关系生成的 C^*-代数上移位的唯一混合性。《休斯敦数学杂志》2010, 36, 275–281. [15] Fidaleo, F. 布尔随机过程札记。《开放系统与信息动力学》2015, 22, 1550004. [16] Bożejko, M. 变形 Fock 空间、赫克算子与 Muraki 的单调福克空间。《数学演示》2012, XLV, 399-413. [17] Bożejko, M.; Dołęga, M.; Ejsmont, W.; Gal, Ś.R. B/C 型渐近表示论中的双参数反射长度及其应用。《泛函分析杂志》2023, 284, 109797. [18] Fidaleo, F. 关于 C^*-动力系统遍历平均的一致收敛。《地中海数学杂志》2020, 17, 125. [19] Ciolli, F.; Fidaleo, F. q-粒子的谱作用及其渐近行为。《物理学杂志 A》2022, 55, 424001.

卡拉布里亚大学数学与计算机科学系，彼得罗·布奇街，30B号楼，I-87036 伦德，意大利电子邮箱地址：fabio.ciolli@unical.it

罗马第二大学数学系，科学研究街1号，I-00133 罗马，意大利电子邮箱地址：fidaleo @mat.uniroma2.it

罗马第一大学“圭多·卡斯特尔诺沃”数学系，阿尔多·莫罗广场5号，I-00185 罗马，意大利电子邮箱地址：chiara.marullo@uniroma1.it