Доклады Академии наук СССР
1974. Том 216, № 3

УДК 531.19 *МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА*

Б. И. САДОВНИКОВ, М. Х. ХАРРАСОВ

НЕРАВЕНСТВА Н. Н. БОГОЛЮБОВА В РАВНОВЕСНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 23 XI 1973)

Фундаментальная концепция Н. Н. Боголюбова о квазисредних (1) и неравенство для коммутаторных функций Грина и мажорирующие их неравенства, положенные в основу известной теоремы Н. Н. Боголюбова об особенностях типа $1/q^2$ в теории вырожденных Бозе- и Ферми-систем, являются эффективным методом исследования проблем, связанных с вырождением состояния статистического равновесия, обусловленного наличием аддитивных законов сохранения или, альтернативно, инвариантностью гамильтониана относительно некоторой группы преобразований (2–5).

Существенным моментом в дальнейшем использовании неравенств, полученных Н. Н. Боголюбовым, явилось их применение как источника получения строгого доказательства об отсутствии специфического упорядочения в одно- и двухмерных системах многих частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала, удовлетворяющего определенным ограничениям. Отметим, что неравенства Н. Н. Боголюбова, а также их классические аналоги (5) могут применяться и для весьма нетривиального характера оценок (6).

Здесь на основе неравенства Н. Н. Боголюбова мы получим оценку статического структурного фактора равновесной однокомпонентной плазмы. При этом в силу конструкции самих функций Грина отпадает необходимость учета граничных условий и существенным образом зависящих от их поверхностных поправок.

1. Выберем наиболее простую модель рассматриваемой системы, а именно, будем считать, что плазма представляет собой газ заряженных частиц, которые двигаются в среде, имеющей противоположный заряд, так что в целом система нейтральна (выбор такой модели не ограничивает общность рассмотрения задачи).

Таким образом, мы рассматриваем динамическую систему, состоящую из весьма большого числа одинаковых частиц N, находящихся в макроскопическом объеме V. Гамильтониан рассматриваемой системы в классическом случае имеет форму

$$H=\sum_{1\leq i\leq N}\frac{p_i^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\Phi(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|). \tag{1}$$

Заметим, что двухвременные температурные опережающие и запаздывающие функции Грина в статистической механике классических систем можно ввести следующим образом (7).

$$G_{\mathrm{adv}}(t,t')=-\theta(t'-t)\langle\{F(t);\,D(t')\}\rangle,$$
$$G_{\mathrm{ret}}(t,t')=\theta(t-t')\langle\{F(t);\,D(t')\}\rangle, \tag{2}$$

$$\theta(x)=\begin{cases}1, & x>0,\\ 0, & x<0;\end{cases}$$

здесь $\{F;\ D\}$ означает классическую скобку Пуассона, где F и D — функции динамического состояния изучаемой системы.

Осреднение в (2) выполняется по гиббсовскому ансамблю с гамильтонианом (1).

В работе [5] было доказано, что для Фурье-образов функций Грина (2) имеет место неравенство

$$|\langle\langle A;\ B\rangle\rangle_{E=0}|^2 \leqslant \langle\langle A;\ A^*\rangle\rangle_{E=0}\cdot\langle\langle B^*;\ B\rangle\rangle_{E=0}, \qquad (3)$$

которое обосновывается аналогично тому, как это сделано для квантово-статистических функций Грина в работе [1]. Исходя из спектральных представлений и полагая $A=\dot{Q}=\{Q;\ H\}$, неравенство (3) можно привести к эквивалентной форме

$$\langle B^*(t)B(t)\rangle \geqslant \theta\,\frac{|\langle\{Q(t);B(t)\}\rangle|^2}{\langle\{Q(t);\{Q^*(t);H\}\}\rangle}, \qquad (4)$$

причем для большей эффективности в качестве $Q=Q_k$ целесообразно выбрать «квазиинтеграл» движения данной задачи $Q_k(t)$: $\lim\limits_{k\to 0}\{Q_k;\ H\}=0$.

Имея в виду, что статический структурный фактор системы определяется выражением

$$S(\mathbf{k}) = \lim_{\substack{N\to\infty\\ V\to\infty\\ N/V=n}} \frac{1}{N}\left\langle\Big|\sum_{1\leqslant i\leqslant N} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}\Big|^2\right\rangle, \qquad (5)$$

обратимся к неравенству (4). Введем локальную плотность заряда

$$n(\mathbf{r}) = e\sum_i \delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}) \qquad (6)$$

или, переходя к представлению Фурье,

$$n_k = e\sum_i \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i\}. \qquad (7)$$

Отсюда ясно, что оценку для статического структурного фактора можно получить, конкретизируя величину B, входящую в неравенство (4), следующим образом:

$$B=n_k=\sum_i \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i\}. \qquad (8)$$

Для выбора $Q=Q_k$ заметим, что в рассматриваемой системе выполняется закон сохранения суммарного заряда.

Введем вектор потока

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{e}{m}\mathbf{p}_i\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}), \qquad (9)$$

или в представлении Фурье

$$\mathbf{j}_k = \frac{e}{m}\sum_i \mathbf{p}_i\exp\{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i\}, \qquad (10)$$

который и будет в нашей задаче «квазиинтегралом» движения, т. е. $\{\mathbf{j}_0;\ H\}=0$.

Положим теперь

$$Q_k = \frac{e}{m}\sum_i \mathbf{p}_i\exp\{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i\}, \qquad Q_k=\mathbf{j}_{-k}. \qquad (11)$$

Тогда вычисляя скобки Пуассона, входящие в правую часть неравенства (4), для структурного фактора $S(\mathbf{k})$ получим

$$S(\mathbf{k}) \geqslant \lim_{\left(\substack{N\to\infty \\ V\to\infty \\ N/V=n}\right)} \frac{k^2 N}{3k^2 N + \frac{n^2}{2\theta} \int\limits_{(V)} d\mathbf{r} \int\limits_{(V)} d\mathbf{R}\,(1-\cos \mathbf{kr}) \frac{\partial^2 \Phi(r)}{\partial \mathbf{r}^2} F_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})}, \tag{12}$$

где $F_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ — двухчастичная функция распределения в переменных $\mathbf{r}=\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j$, $\mathbf{R}=\mathbf{r}_i$.

Это выражение может быть существенно упрощено в рамках метода самосогласованного поля, когда можно приближенно полагать

$$F_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = F_2(r) = 1 - \frac{e^2}{\theta r} e^{-\alpha r}, \qquad \Phi(r) = \frac{e^2}{r} e^{-\alpha r}, \quad \alpha^2 = \frac{4\pi n e^2}{\theta}, \tag{13}$$

что справедливо в частном случае кулоновских сил. При этом

$$S(\mathbf{k}) \geqslant k^2/(3k^2+\alpha^2), \tag{14}$$

т. е. статический структурный фактор классической равновесной однокомпонентной плазмы точно ограничен снизу.

2. Аналогичная оценка может быть получена и для статистической механики квантовых систем. При этом гамильтониан рассматриваемой системы может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2m} \int \overset{+}{\psi} \Delta \psi\, dx + \frac{1}{2} \int \overset{+}{\psi}(t, x_1) \overset{+}{\psi}(t, x_2)\, \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\, \psi(t, x_2)\, \psi(t, x_1)\, dx_1\, dx_2, \tag{15}$$

где интегрирование по x включает интегрирование по координатам $\mathbf{r}$ и суммирование по спиновому индексу $\sigma = \pm {}^1/_2$.

Запишем следующий вариант неравенства Н. Н. Боголюбова

$$\langle B\overset{+}{B} + \overset{+}{B}B \rangle \geqslant 2\theta \frac{|\langle [Q; B] \rangle|^2}{|\langle [Q; [\overset{+}{Q}; H]] \rangle|}, \tag{16}$$

где B и Q — операторы динамических величин в гейзенберговском представлении, $\langle \ldots \rangle$ означает осреднение по большому ансамблю Гиббса.

Замечая, что статический структурный фактор может быть построен на операторах Фурье-компонент плотности числа частиц в импульсном представлении $S(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle$, в качестве оператора B, входящего в неравенство (16), выберем плотность числа частиц в представлении Фурье, а именно:

$$B = B_k = \rho_{-k} = \sum_{p\sigma} \overset{+}{a}_{p,\sigma} a_{p-k,\sigma}. \tag{17}$$

Вводя далее оператор потока числа частиц и записывая его Фурье-компоненту

$$j_k = \frac{1}{m} \sum_{p\sigma} \frac{2\mathbf{p}+\mathbf{k}}{2} \overset{+}{a}_{p,\sigma} a_{p+k,\sigma}, \tag{18}$$

замечаем, что $\lim\limits_{k\to 0} [j_k, H] = 0$, т. е. величина j_k является «квазиинтегралом» движения в нашей системе.

Положим

$$Q = Q_k = j_k. \tag{19}$$

Тогда, вычисляя коммутаторы, входящие в неравенство (16), после некоторых преобразований для статического структурного фактора получаем следующую оценку:

$$S(\mathbf{k}) \geqslant$$

$$\geqslant \frac{k^2}{\dfrac{k^4}{4m\theta} + \lim\limits_{\substack{N\to\infty\\ V\to\infty\\ N/V=n}} \dfrac{3}{N\theta}\left\langle \sum\limits_{p\sigma} \dfrac{(\mathbf{pk})}{m} \overset{+}{a}_{p\sigma} a_{p\sigma} \right\rangle + \dfrac{k^2 n}{V} \int\limits_{(V)} d\mathbf{r} \int\limits_{(V)} d\mathbf{R} \cos \mathbf{kr}\, \Phi(\mathbf{r})\, F_2(\mathbf{r}, \mathbf{R})}. \tag{20}$$

Как классический предел этого выражения в приближении самосогласованного поля мы получаем формулу (14).

Поскольку статический структурный фактор связан с внутренней энергией системы ([8])

$$E = \frac{3}{2} N\theta + \frac{N}{2V} \sum_{(\mathbf{k}\neq 0)} \frac{4\pi e^2}{k^2} (S(\mathbf{k}) - 1), \tag{21}$$

то из формулы (14) следует оценка для внутренней энергии рассматриваемой системы:

$$E \geqslant \frac{3}{2} N\theta - \frac{e^2 \alpha}{3^{2/3}} N. \tag{22}$$

Таким образом, применение неравенств Н. Н. Боголюбова и их классических аналогов оказывается весьма полезным для оценок равновесных характеристик системы.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за внимание к работе и ценные замечания.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
29 X 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *Н. Н. Боголюбов*, Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ, Дубна, 1961. [2] *Б. И. Садовников, Е. М. Сорокина*, ДАН, т. 188, № 4 (1969). [3] *Е. М. Сорокина*, ДАН, т. 190, № 1 (1970). [4] *Б. И. Садовников, В. К. Федянин*, Теоретич. и матем. физ., т. 16, № 3 (1973). [5] *Б. И. Садовников, К. Букли*, Вестн. Московск. унив., физика, астрономия, № 1 (1970). [6] *N. D. Mermin*, J. Phys. Soc. Japan, v. 26, Suppl. (1969). [7] *Н. Н. Боголюбов мл., Б. И. Садовников*, ЖЭТФ, т. 43, 677 (1962). [8] *D. Pines, P. Nozieres*, The Theory of Quantum Liquids, N. Y., 1966.