

УДК 530.1

Б. И. САДОВНИКОВ, К. БУКЛИ

НЕРАВЕНСТВО БОГОЛЮБОВА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ КЛАССИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Для двухвременных температурных функций Грина, введенных в статистической механике классических систем, доказывается аналог неравенства Н. Н. Боголюбова. Приложение результатов иллюстрируется примером.

§ 1. В последнее время исследование эффектов дальнего порядка в квантовых статистических системах основывается на применении установленного Н. Н. Боголюбовым в [1] неравенства для спектральных интенсивностей квантовых температурных функций Грина [2, 3]. В связи с этим интересно установление аналогичного неравенства также и для функций Грина, введенных в статистической механике классических систем [4].

В работе [5] был предложен один из вариантов вывода неравенства Н. Н. Боголюбова для классических систем, которое с точностью до так называемых «поверхностных поправок» совпадает с основной формой неравенства, полученной путем предельного перехода $\hbar \rightarrow 0$ классической статистики. Однако нам представляется более естественным провести доказательство классического аналога неравенства Н. Н. Боголюбова, основываясь на использовании «классических» функций Грина, в силу конструкции которых не возникает необходимости при рассмотрении конкретных задач каждый раз оценивать «поверхностные поправки».

В данной статье приведено доказательство классического аналога неравенства Н. Н. Боголюбова, точно совпадающего с классическим пределом квантового, и исследование на его основе конкретных физических систем.

Рассмотрим типичную задачу статистической механики и возьмем классическую динамическую систему, состоящую из весьма большого числа одинаковых частиц N , находящихся в макроскопическом объеме V , с бинарным взаимодействием $\Phi(|\vec{q}|)$, гамильтониан которой в канонических переменных q и p имеет форму¹.

¹ При этом мы всегда имеем в виду предельный переход статистической механики $N \rightarrow \infty$ $V \rightarrow \infty$ $\frac{N}{V} = \nu = \text{const.}$

$$H(p, q) = \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|). \quad (1)$$

Как было показано в [4], двухвременные температурные запаздывающие и опережающие функции Грина для статистической механики классических систем можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned} G_{\text{ret}}(t, t') &= \theta(t - t') \langle \{A(t), B(t')\} \rangle, \\ G_{\text{adv}}(t, t') &= -\theta(t' - t) \langle \{A(t), B(t')\} \rangle, \\ \theta(t - t') &= \begin{cases} 1, & t - t' > 0, \\ 0, & t - t' < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь выражение $\{A(t), B(t')\}$ представляет классическую скобку Пуассона для функций динамического состояния изучаемой системы:

$$\begin{aligned} A(t) &= A(q_1(t), \dots, q_N(t); p_1(t), \dots, p_N(t)), \\ B(t') &= B(q_1(t'), \dots, q_N(t'); p_1(t'), \dots, p_N(t')), \\ \{A; B\} &= \sum_{1 \leq i \leq N} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right). \end{aligned}$$

Координаты и импульсы в момент времени t определяются уравнениями движения и начальными значениями $q_i(0) = q_i$, $p_i(0) = p_i$. Усреднение $\langle \dots \rangle$ выполняется по гиббсовскому ансамблю с гамильтонианом (1)

$$\langle \dots \rangle = Q^{-1} \int \dots e^{-\frac{H(p, q)}{\theta}} dp_1 \dots dp_N dq_1 \dots dq_N, \quad (3)$$

где Q — интеграл состояний.

В таком случае среднее $\langle A(t) B(t') \rangle$ будет зависеть от разности $(t - t')$ [4]. При этом имеют место следующие спектральные формулы:

$$\langle A(t) B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (4)$$

$$\langle A(t); B(t') \rangle = -\frac{i}{\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega) \omega e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (5)$$

Для соответствующих функций Грина типа (2) в E -представлении можем записать

$$\langle \langle A; B \rangle \rangle_E^{\text{ret}} = \frac{1}{2\pi\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega J_{AB}(\omega) \frac{d\omega}{E \pm i\epsilon - \omega},$$

для комплексных значений E -функция $\langle \langle A; B \rangle \rangle$ задается формулой

$$\langle \langle A; B \rangle \rangle = \frac{1}{2\pi\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega J_{AB}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega}. \quad (6)$$

§ 2. Докажем классический аналог неравенства Н. Н. Боголюбова, для чего воспользуемся основными положениями работы [1].

Рассмотрим средние типа $\langle A(t)B(t') \rangle$ как билинейные формы из A и B . Заметим, что для рассматриваемых средних

$$\begin{aligned}\langle AA^* \rangle &\geq 0, \quad \langle AB \rangle^* = \langle A^*B^* \rangle, \\ \langle AB \rangle^* &= \langle B^*A^* \rangle.\end{aligned}\quad (7)$$

Покажем, что для спектральных функций $J_{AB}(\omega)$ имеет место следующее соотношение:

$$J_{AB}^*(\omega) = J_{B^*A^*}(\omega). \quad (8)$$

Принимая во внимание инвариантность гамильтониана и фазового объема Лиувилля по отношению с каноническим преобразованиям и считая, что в классической механике произведение динамических величин коммутативно, убеждаемся в справедливости утверждения (8), а именно:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle B^*(t) A^*(0) \rangle e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle A(t) B(0) \rangle^* e^{-i\omega t} dt.$$

Докажем, что

$$J_{AA^*}(\omega) \geq 0. \quad (9)$$

Для этого возьмем любую достаточно регулярную функцию $f(\omega)$, убывающую достаточно быстро на бесконечности, и покажем, что для всякой функции из этого класса:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} J_{AA^*}(\omega) |f(\omega)|^2 d\omega \geq 0. \quad (10)$$

Введем функцию

$$h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

при этом

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t) e^{-i\omega t} dt.$$

Тогда левую часть (10) можно записать в виде

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} J_{AA^*}(\omega) |f(\omega)|^2 d\omega &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_{AA^*}(\omega) h(t) h^*(\tau) e^{-i\omega(t-\tau)} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle A^*(\tau) A(t) \rangle h(t) h^*(\tau) = \langle u^* u \rangle,\end{aligned}$$

где

$$u = \int_{-\infty}^{+\infty} A^*(\tau) h^*(\tau) d\tau, \quad u^* = \int_{-\infty}^{+\infty} A(t) h(t) dt.$$

Отсюда на основании (7) следует неравенство (10). Таким образом,

справедливость неравенства (9) установлена, поскольку всегда можно локализовать $|f(\omega)|^2$ в сколь угодно узкой окрестности любой точки ω_0 .

Пусть далее $f(A, B)$ есть произвольная билинейная форма по отношению к функциям A и B , такая, что

$$f(AA^*) \geq 0, \quad \{f(AB)\}^* = f(B^*A^*). \quad (11)$$

Покажем, что

$$|f(AB)|^2 \leq f(AA^*) f(B^*B). \quad (12)$$

Заметим, что согласно (11)

$$f(xA + y^*B^*, x^*A + yB^*) \geq 0 \quad (13)$$

(где x и y — произвольные с-числа), или раскрывая:

$$|x|^2 f(A, A^*) + x^* y f(B^* A^*) + x y f(AB) + |y|^2 f(B^*, B) \geq 0. \quad (14)$$

Положим

$$x^* = -f(A, B), \quad x = -f^*(A, B) = -f(B^*, A^*),$$

$$y = y^* = f(A, A^*),$$

тогда

$$-|f(A, B)|^2 f(A, A^*) + \{f(AA^*)\}^2 f(B^*B) \geq 0.$$

Откуда получим неравенство (12), если $f(A, A^*) \neq 0$.

Теперь следует показать, что если $f(A, A^*) = 0$, то и $f(A, B) = 0$.

Для доказательства положим в (14) $f(A, A^*) = 0$, $x^* = -f(A, B)$, $x = -f(B^*, A^*)R$ и $y = y^* = 1$, где R — любое положительное число. В этом случае найдем

$$-2R|f(AB)|^2 + f(B^*, B) \geq 0.$$

При $R \rightarrow \infty$ видим, что при $f(AB) \neq 0$ левая часть этого неравенства стремится к $-\infty$, что невозможно. Таким образом неравенство (12) доказано.

Заметим, что условиям (11) удовлетворяют билинейные формы

$$f(A, B) = J_{AB}(\omega).$$

Следовательно, для них можем записать

$$|J_{AB}(\omega)|^2 \leq J_{AA^*}(\omega) J_{B^*B}(\omega).$$

С другой стороны, условиям (11) удовлетворяют также и билинейные формы вида

$$f(A, B) = \frac{1}{2\pi\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega) d\omega,$$

поэтому на основании спектральных представлений (6) для фурье-образов, введенных функцией Грина, получим

$$|\langle\langle A; B \rangle\rangle|_{E=0}^2 \leq \langle\langle A; A^* \rangle\rangle_{E=0} \langle\langle B^* B \rangle\rangle_{E=0}. \quad (15)$$

Неравенство (15) представляет аналог неравенства Н. Н. Боголюбова [1] для функций Грина, введенных в статистической механике классических систем.

Приведем один из возможных вариантов неравенства (15), который требуется для дальнейших исследований. Будем исходить из спектральных представлений (4) и (5), в которых положим

$$A = \frac{dD}{dt} = \{D; H\}, \quad A^* = \frac{dD}{dt} = \{D^*; H\}. \quad (16)$$

Тогда спектральная формула (4) примет вид

$$\langle B(t') D(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega.$$

С другой стороны, в силу (16)

$$\langle B(t') A(t) \rangle = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \omega J_{AB}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega.$$

Откуда заключаем, что $J_{AB}(\omega) = -i\omega J_{AB}(\omega)$. Далее, используя спектральные представления (5) при $t=t'$ в случае $E=0$, получим

$$\langle \{D(t); B(t)\} \rangle = -2\pi \langle \{A; B\} \rangle_{E=0}.$$

Аналогично $\langle \{A; A^*\} \rangle_{E=0} = -\frac{1}{2\pi} \langle \{D(t), A^*(t)\} \rangle$. Заметим также, что в силу спектральных теорем (4,6):

$$-\frac{1}{2\pi\theta} \langle B^*(t) B(t) \rangle = \langle \{B^*; B\} \rangle_{E=0}.$$

Поэтому окончательно для формулы (15) получим

$$\langle B^*(t), B(t) \rangle \geq \frac{|\langle \{D(t); B(t)\} \rangle|^2}{\langle \{D(t); A^*(t)\} \rangle}. \quad (17)$$

Отметим, что неравенство (17) носит довольно общий характер и может быть использовано при исследовании различных физических систем.

§ 3. Для иллюстрации полученного неравенства рассмотрим, как и в работе [5], классический аналог модели Гейзенберга, гамильтониан которой имеет вид

$$H = - \sum_{\langle f_1, f_2 \rangle} J(f_1 - f_2) (\vec{S}_{f_1} \cdot \vec{S}_{f_2}) - \beta \sum_f S_f^{(3)}, \quad (18)$$

и исследуем вопрос о возможности существования спонтанной намагниченности в одно- и двумерных системах такого типа.

Здесь $\{f\}$ — пространственные точки, соответствующие N узлам решетки Бравэ, β — малое магнитное поле, S_f — векторы момента, $J(f_1 - f_2)$ — неотрицательные числа; предполагается, что $J(f_1 - f_2)$ положительны, например, когда f_1 и f_2 будут ближайшими соседями.

Фиксируем величину каждого момента. Тогда наша система будет описываться $2N$ каноническими переменными θ_f и $S_f^{(3)}$, где θ_f — угол между проекцией $\vec{S}_f$ в плоскости 1—2 и осью 1, а $S_f^{(3)}$ — проекция $\vec{S}_f$ на ось 3. Тогда

$$S_f^{(1)} = (\vec{S}_f^2 - (S_f^{(3)})^2)^{1/2} \cos \theta_f, \quad S_f^{(2)} = (\vec{S}_f^2 - (S_f^{(3)})^2)^{1/2} \sin \theta_f. \quad (19)$$

Скобки Пуассона для функций динамического состояния изучаемой системы в этом случае имеют вид

$$\{A; B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial \theta_i} \frac{\partial B}{\partial S_i^{(3)}} - \frac{\partial A}{\partial S_i^{(3)}} \frac{\partial B}{\partial \theta_i} \right), \quad (20)$$

или с учетом (19):

$$\{A; B\} = \sum_i \vec{S}_i \cdot \left[\frac{\partial A}{\partial \vec{S}_i} \times \frac{\partial B}{\partial \vec{S}_i} \right], \quad (21)$$

где $\left[\frac{\partial A}{\partial \vec{S}_i} \times \frac{\partial B}{\partial \vec{S}_i} \right]$ — вектор с компонентами:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial A}{\partial S_i^{(2)}} \frac{\partial B}{\partial S_i^{(3)}} - \frac{\partial B}{\partial S_i^{(2)}} \frac{\partial A}{\partial S_i^{(3)}} \right); \left(\frac{\partial A}{\partial S_i^{(1)}} \frac{\partial B}{\partial S_i^{(3)}} - \frac{\partial A}{\partial S_i^{(3)}} \frac{\partial B}{\partial S_i^{(1)}} \right); \\ & \left(\frac{\partial A}{\partial S_i^{(1)}} \frac{\partial B}{\partial S_i^{(2)}} - \frac{\partial B}{\partial S_i^{(1)}} \frac{\partial A}{\partial S_i^{(2)}} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Основываясь на неравенстве (17), покажем, что в одно- и двухмерном случаях в рассматриваемой системе отсутствует спонтанная намагниченность.

Существенно подчеркнуть, что для большой эффективности неравенства (17) при исследовании конкретных задач функцию D (зависящую от k) следует выбирать такой, чтобы при $k \rightarrow 0$ она соответствовала интегралу движения в рассматриваемой системе [6].

Для чего положим в (17) $B = S_k^{(1)}$, $B^* = S_k^{(1)}$, $D = S_k^{(2)}$, $D^* = S_{-k}^{(2)}$, $S_k^{(\alpha)} = \sum_i S_i^{(\alpha)} e^{-i(\vec{f} \cdot \vec{k})}$, $S_i^{(\alpha)} = \frac{1}{N} \sum_k S_k^{(\alpha)} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{f})}$, $\alpha = 1, 2, 3$, N — число узлов.

Тогда в наших обозначениях неравенство (17) примет вид

$$|\langle S_k^{(1)} S_{-k}^{(1)} \rangle| \geq \theta \frac{|\langle \{S_k^{(2)}; S_{-k}^{(1)}\} \rangle|^2}{|\langle \{S_k^{(2)}; \{S_{-k}^{(2)}; H\} \rangle|}. \quad (23)$$

Остается вычислить скобки Пуассона, входящие в это неравенство. Для чего, пользуясь (21), можно показать, что

$$\{S_i^{(\alpha)}; S_{f'}^{(\beta)}\} = \Delta(f - f') \sum_{\gamma=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_i^{(\gamma)}, \quad (24)$$

где

$$\Delta(f - f') = \begin{cases} 1, & f = f' \\ 0, & f \neq f' \end{cases}, \quad (\alpha, \beta) = 1, 2, 3,$$

$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный, абсолютно антисимметричный тензор третьего ранга, в котором $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = +1$, $\epsilon_{321} = \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = -1$, а все прочие элементы равны нулю. В таком случае для числителя правой части (23) находим

$$|\langle \{S_k^{(2)}; S_{-k}^{(1)}\} \rangle|^2 = \left| \sum_i \langle S_i^{(3)} \rangle \right|^2,$$

а для знаменателя после соответствующих преобразований получим

$$|\langle \{S_k^{(2)}; \{S_{-k}^{(2)}; H\} \rangle| = \left| 2 \sum_{\vec{f}, \vec{g}} J(\vec{f} - \vec{g}) (1 - \cos(\vec{f} - \vec{g})) \langle S_f^{(1)} S_g^{(1)} + S_f^{(3)} S_g^{(3)} \rangle + \beta \sum_{\vec{f}} \langle S_f^{(3)} \rangle \right|.$$

Таким образом, неравенство (23) принимает вид

$$|\langle S_{-k}^{(1)} S_k^{(1)} \rangle| \geq \theta \frac{\left| \sum_{\vec{f}} \langle S_f^{(3)} \rangle \right|^2}{\left| 2 \sum_{\vec{f}, \vec{g}} J(\vec{f} - \vec{g}) (1 - \cos(\vec{f} - \vec{g})) k \langle S_f^{(1)} S_g^{(1)} + S_f^{(3)} S_g^{(3)} \rangle + \beta \sum_{\vec{f}} \langle S_f^{(3)} \rangle \right|}. \quad (25)$$

Суммируя полученное неравенство по k (лежащим в первой зоне Бриллюэна), заметим, что в силу трансляционной инвариантности средние типа $\langle S_f^{(\alpha)} S_f^{(\gamma)} \rangle$ не зависят от $\vec{f}$, и поэтому

$$\sum_k \langle S_{-k}^{(\alpha)} S_k^{(\gamma)} \rangle = N \sum_{\vec{f}} \langle S_f^{(\alpha)} S_f^{(\gamma)} \rangle = N^2 \langle S_{f_0}^{(\alpha)} S_{f_0}^{(\gamma)} \rangle,$$

где f_0 — некоторое число.

Интересуясь далее случаем малых k , положим

$$1 - \cos(\vec{f} - \vec{g}) k \approx \frac{(\vec{f} - \vec{g})^2 k^2}{2!}$$

и пусть $\vec{R} = \vec{f} - \vec{g}$.

Тогда после обычного предельного перехода статистической механики для неравенства (25) получим

$$|\langle S_{f_0}^{(1)} S_{f_0}^{(1)} \rangle| \geq \frac{\theta}{v} S_z^2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^n} \left\{ \sum_{\vec{R}} |J(\vec{R})| R^2 k^2 \langle S_{R+\vec{g}_0}^{(1)} S_{\vec{g}_0}^{(1)} + S_{R+\vec{g}_0}^{(3)} S_{\vec{g}_0}^{(3)} \rangle + \beta |S_z| \right\}^{-1}. \quad (26)$$

Здесь $S_z = \langle S_f^{(3)} \rangle$ — соответствует предельному значению намагниченности на частицу в однородном поле β ; v — удельный объем, n — число измерений, а интегрирование проводится по первой зоне Бриллюэна.

Вычисляя интеграл в правой части (26) для одно- и двухмерного случая, можно показать, что для спонтанной намагниченности справедливы следующие оценки, сходные с оценками работы [5]:

$$|S_z| < \frac{\text{const}}{\theta^{1/2}} \frac{1}{|\ln |\beta||^{1/2}} \text{ двухмерный случай.}$$

$$|S_z| < \frac{\text{const}}{\theta^{2/3}} |\beta|^{1/3} \text{ одномерный случай.}$$

Таким образом, в рассмотренной модели с взаимодействием конечного радиуса отсутствует спонтанная намагниченность при отличных от нуля температурах в исчезающе малых полях β .

Авторы выражают благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за внимание к работе и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт, ОИЯИ, Дубна, 1961.
2. Mermin N. D., Wagner H. Phys. Rev. Lett., 17, 1133, 1966.
3. Hohenberg P. C. Phys. Rev., 158, 383, 1967.
4. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. ЖЭТФ, 43, 677, 1962.
5. Mermin N. D. J. Math. Phys., 8, 1097, 1967.
6. Садовников Б. И., Сорокина Е. М. ДАН СССР, 188, 788, 1969.

Поступила в редакцию
12.3 1969 г.

Кафедра
квантовой статистики