ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

5 - 10465

ХАРРАСОВ
Мухамет Хадисович

НЕРАВЕНСТВА Н.Н.БОГОЛЮБОВА В МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1977

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Б.И.Садовников

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук, профессор
Н.Н.Боголюбов (мл.),
доктор физико-математических наук
И.П.Павлоцкий

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
физико-технический институт АН УССР (Харьков)

Автореферат разослан "   "   1977 г.

Защита диссертации состоится "   "   1977 г.
на заседании специализированного Ученого совета
Лаборатории теоретической физики.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

В.И.Журавлев

Использование методов, основанных на применении математического аппарата теории квантованных полей, оказалось весьма плодотворным при исследовании систем взаимодействия многих частиц в статистической механике. Одно из результативных направлений исследования многочастичных систем связано с методом двухвременных температурных опережающих и запаздывающих функций Грина [I]. Отметим, что двухвременные опережающие и запаздывающие функции Грина имеют более "удобные" аналитические свойства, что позволяет их использование для рассмотрения достаточно широкого круга вопросов статистической теории.

Целью данного исследования является изучение вопросов, связанных с вырождением состояния статистического равновесия в некоторых моделях физических систем. В основу исследования положен единый подход, базирующийся на фундаментальной концепции Н.Н.Боголюбова о квазисредних и неравенствах для коммутаторных функций Грина.

Заметим, что в основополагающей работе Н.Н.Боголюбова [2] было установлено, что в ряде задач статистической механики вследствие наличия аддитивных законов сохранения или, альтернативно, инвариантности гамильтониана системы относительно некоторых непрерывных групп преобразований мы имеем дело с вырождением состояния статистического равновесия. С другой стороны, известно, что аддитивные законы сохранения приводят к определенным правилам отбора для статистических средних и функций Грина. Между тем изучение ряда моделей, описываемых гамильтонианами указанного типа, показывает, что существуют ненулевые средние, характеризующие систему, которые, согласно правилам отбора, должны быть тождественно равны нулю. Этот факт указывает на то, что состояние статистического равновесия, характеризуемое такого рода средними, обладает более низкой симметрией, чем симметрия гамильтониана, и означает спонтанное нарушение симметрии в системе.

Математические проблемы исследования систем с нарушенной симметрией были детально разработаны Н.Н.Боголюбовым, что привело к созданию концепции о квазисредних.

Согласно Н.Н.Боголюбову, квазисредние определяются следующим образом:

$$\langle \ldots \rangle = \lim_{\nu \to 0} Sp(\ldots e^{-\mathcal{H}_\nu/\theta}) / Sp(e^{-\mathcal{H}_\nu/\theta}) \,, \qquad (I)$$

где $\mathcal{H}_\nu = \mathcal{H} + \nu H'$, причем $\mathcal{H}$ - гамильтониан системы, $\nu H'$ $(\nu > 0)$ есть малый член, нарушающий симметрию $\mathcal{H}$ и тем самым правила отбора, с которыми связано вырождение состояния статистического равновесия.

Отметим, что при исследовании систем с вырожденным состоянием статистического равновесия вместо функций Грина, построенных из обычных средних, необходимо использовать функции Грина, построенные из квазисредних (I).

Н.Н.Боголюбовым в работе [2], в частности, было установлено следующее неравенство для фурье-образов двухвременных температурных коммутаторных функций Грина:

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

которое, исходя из спектральных представлений и полагая $A = [Q;\mathcal{H}]$, можно записать в эквивалентной форме

$$\langle B^+B + BB^+ \rangle \geqslant 2\theta \frac{\left| \langle [Q;B] \rangle \right|^2}{\left| \langle [Q;[Q^+;\mathcal{H}]] \rangle \right|} \,. \qquad (3)$$

Аналогичные неравенства имеют место и для функций Грина классической статистической механики [3], а именно:

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

где $\{\ldots;\ldots\}$ означает классические скобки Пуассона от соответствующих функций динамических переменных изучаемой системы.

Фундаментальная концепция Н.Н.Боголюбова о квазисредних и неравенства для коммутаторных функций Грина, лежащие в основе известной теоремы Н.Н.Боголюбова об особенностях типа $1/q^2$ в теории вырожденных бозе- и ферми-систем, согласно которой, например, плотность непрерывного распределения частиц по импульсам при $\vec{q} \to 0$ стремится к бесконечности не медленнее, чем $1/q^2$, оказываются эффективным методом при исследовании явлений, связанных с вырождением состояния статистического равновесия [4,5].

Предложенная в [2] математическая схема представляет собой алгоритм установления нетривиальных неравенств для средних (квазисредних), позволяет исследовать вопрос о специфическом упорядочении в модельных системах и рассмотреть структуру энергетического спектра слабовозбужденных состояний $(\vec{q} \to 0)$.

Важнейшим моментом в дальнейшем использовании результатов, полученных Н.Н.Боголюбовым, явилось их применение в качестве источника получения строгого доказательства отсутствия специфического упорядочения при $\theta \neq 0$ и определенном ограничении на потенциал взаимодействия в бесконечных одно- и двухмерных моделях взаимодействующих многих частиц [6-8].

Отметим, что при изучении модельных систем получение математически строгих результатов, и, в частности, строгих оценок, является одной из важнейших задач статистической механики. На наш взгляд, неравенства (3) и (4), носящие общий характер, являются наиболее перспективными в этой области.

Одним из актуальных вопросов теории фазовых переходов является вопрос о специфическом упорядочении в некоторых моделях одно- и двухмерных систем. Интерес к этому вопросу вызывается не только с теоретической, но и с практической точки зрения. Так, например, высказывается возможность создания одно- и двухмерных сверхпроводников с большой критической температурой на основе нефононного механизма возникновения результирующего притяжения между электронами [9]. Несомненно, что создание одно-и двухмерных макроскопических областей упорядочения является важной проблемой. В связи с этим представляет интерес установить критерии возможности существования специфического упорядочения в одно- и двухмерных системах, не противоречащие теоремам об отсутствии упорядочения в соответствующих бесконечных системах.

Как нами показано, неравенства (3), (4) могут быть использованы для выяснения вопросов, связанных с существованием эффектов дальнего порядка в конечных одно- и двухмерных системах. Зная минимальный импульс $q_{min} \gtrsim 2\pi/L$ (L -характерный размер системы), оказывается возможным оценить максимальные размеры систем, совместимые с некой степенью специфического упорядочения. Следует отметить, что возможность специфического упорядочения существенным образом определяется особенностью корреляционных функций в длинноволновом пределе ($\vec{q} \to 0$). При этом случай $\theta = 0$ следует рассматривать особо, поскольку, как можно показать, при $\theta = 0$ особенности корреляционных функций систем, описываемых гамильтонианом, инвариантным относительно некоторой непрерывной группы преобразований, вследствие наличия ветви элементарных возбуждений бесщелевого типа, отличаются от имевшего место при $\theta \neq 0$. Для получения такого результата нам потребовалось установить неравенство Н.Н.Боголюбова для нуля температуры, поскольку при этом спектральные представления являются иными, чем в случае $\theta \neq 0$.

Результаты, полученные при рассмотрении модельных систем, таких как изотропный гейзенберговский ферромагнетик, пространственно-периодическая система, система сверхпроводящего типа, указывают на возможность специфического упорядочения при $\theta \neq 0$ в конечных одно- и двухмерных системах.

В работе продемонстрирована плодотворность использования неравенств (3), (4) для получения строгих оценок равновесных характеристик системы. Так, с их помощью показано, что дебаевские значения статического структурного фактора и внутренней энергии однокомпонентной плазмы являются точно ограниченными снизу.

Использование неравенств Н.Н.Боголюбова позволило исследовать одну из интересных моделей статистической механики - модель Хаббарда [10], которая оказывается пригодной, например, для описания диэлектриков и исследования перехода металл-диэлектрик. Интерес к этой модели вызывается и тем, что она допускает антиферромагнитное решение. В ряде работ гамильтониан Хаббарда использовался для объяснения конечной величины цели в спектре π -электронов в бесконечных полиенновых цепочках. Основываясь на неравенствах Н.Н.Боголюбова, мы показали, что величина щели в спектре одночастичных возбуждений в бесконечных одно- и двухмерной моделях Хаббарда является конечной лишь при $\theta = 0$, в то время как для конечных систем величина первого электронного перехода отлична от нуля и при $\theta \neq 0$. Сходные результаты получены и при рассмотрении гейзенберговской модели двухподрешеточного ферромагнетика.

Диссертация состоит из введения и трех глав. Во введении дан обзор работ, рассмотрены вкратце содержание диссертации и полученные результаты.

Первая глава посвящена использованию аппарата функций Грина в описании многочастичных систем. В §I приводятся необходимые сведения об опережающих и запаздывающих функциях Грина в квантовой и классической статистической механике. В § 2 рассматривается метод квазисредних Н.Н.Боголюбова, а в § 3 приведены неравенства Н.Н.Боголюбова, которые на основе спектральных представлений записаны в более удобной форме. Заметим здесь, что до сих пор неравенства Н.Н.Боголюбова использовались при получении точных соотношений для корреляционных функций лишь при $\theta \neq 0$. В ряде случаев представляет интерес получить подобные соотношения и при $\theta = 0$. В связи с этим в §4, на основе спектральных представлений для $\theta = 0$, установлены неравенства для корреляционных функций и функций Грина для этого особого случая $\theta = 0$. Причем для корреляционных функций типа $\langle B_q^+ B_q^+ + B_q B_q^+ \rangle$ получено следующее неравенство

$$\langle B_q^+ B_q^+ + B_q B_q \rangle \geqslant \mathcal{E}(q) \frac{|\langle [B_q ; Q_q] \rangle|^2}{|\langle [Q_q ; [Q_q^+ ; \mathcal{H}]] \rangle|}, \qquad (5)$$

где $\mathcal{E}(\vec{q})$ – минимальная энергия элементарного возбуждения с импульсом $\vec{q}$. Заметим, что при спонтанном нарушении симметрии и определенном ограничении на потенциал взаимодействия энергией элементарных возбуждений бесщелевого типа являются

$(\lim_{q\to 0} \mathcal{E}(q) = 0)$, существование которых обусловливается инвариантностью гамильтониана относительно некоторой непрерывной группы преобразований и соответствующим вырождением состояния статистического равновесия [2]. Тогда особенности, появляющиеся у корреляционных функций при $\theta = 0$, будут иными, чем в случае $\theta \neq 0$. Входящий в (5) оператор Q_q является произвольным. Однако, рассматривая корреляционную функцию $\langle B_q^+ B_q^+ + B_q B_q^+ \rangle$ в длинноволновом пределе $\vec{q} \to 0$, для большей эффективности (5) в качестве Q_q следует выбрать квазиинтеграл движения данной задачи: $\lim_{q\to 0} [Q_q ; \mathcal{H}] = 0$. Полученные здесь результаты использованы в главе П.

Во второй главе исследованы магнитные системы: модель Гейзенберга (§ 5), модель Хаббарда (§ 6) и двухподрешетчатый гейзенберговский ферромагнетик (§ 7).

Заметим, что гамильтониан Гейзенберга, являясь скаляром, инвариантен относительно группы трехмерных вращений спина. При этом, рассматривая два различных основных состояния системы, отличающиеся поворотом спинов на некоторый угол $\varphi \in (0, 2\pi)$ вокруг произвольной оси и описываемые волновыми функциями Ψ_0 и Ψ_φ соответственно, можно показать, что скалярное произведение (Ψ_0, Ψ_φ) равно нулю, причем преобразование $\Psi_0 \to \Psi_\varphi$ не может быть описано унитарным оператором. Следовательно, рассматриваемое преобразование меняет значение макроскопической наблюдаемой – намагниченности, что ввиду инвариантности гамильтониана относительно указанных преобразований означает спонтанное нарушение симметрии в этой системе.

Для модели Гейзенберга на основе концепции о квазисредних и неравенств (3) получено неравенство типа

$$n_q \geqslant \frac{Const}{q^2}\,, \qquad (6)$$

которое является аналогом теоремы Н.Н.Боголюбова о „$1/q^2$" для изучаемой модели (n_q есть плотность спиновых волн с импульсом q).

Отметим, что на основе подобных неравенств в [7] впервые было получено доказательство отсутствия специфического упорядочения в одно- и двухмерных моделях Гейзенберга. Однако этот результат справедлив только для бесконечных систем (при $\theta \neq 0$). Оказалось возможным использовать теорему о „$1/q^2$" для выяснения вопроса о спиновом упорядочении в конечных одно- и двухмерных системах. Показано, что в конечных одно- и двухмерных системах, описываемых моделью Гейзенберга, возможно спиновое упорядочение, если число частиц в системе ограничено некоторым $\mathcal{N}_{max}$, причем эти области упорядочения являются вполне макроскопическими, и выполняются условия термодинамической устойчивости.

В § 6 развитый подход распространяется для исследования модели Хаббарда, а именно: на основе неравенства (3) для $\theta \neq 0$ устанавливается, что величина щели $\Delta E(\mathcal{N})$ в спектре одночастичных возбуждений в одно- и двухмерных системах стремится к нулю при $\mathcal{N} \to \infty$. При этом для конечных систем при реальных значениях параметров модели для полиеновой цепочки полученные оценки по порядку величин согласуются с экспериментальными данными. Случай $\theta = 0$ исследован на основе неравенства (5). Как получено, величина $\Delta E(\mathcal{N})$ имеет статистический порядок $\mathcal{N}^0$, т.е. при $\theta = 0$ и в бесконечных одно- и двухмерных системах величина щели отлична от нуля. Аналогичные оценки справедливы и

для щели в спектре элементарных возбуждений в двухподрешетчатом гейзенберговском ферромагнетике.

Третья глава содержит результаты, относящиеся к оценке статического структурного фактора плазмы и рассмотрению возможности сверхпроводящего и кристаллического состояний в конечных одно- и двухмерных системах.

В § 8 для получения оценки статического структурного фактора плазмы выбрали наиболее простую модель рассматриваемой системы, считая, что плазма представляет собой газ заряженных частиц, которые двигаются в среде, имеющей противоположный заряд. Ясно, что такой выбор не ограничивает общности рассмотрения задачи. В работе отдельно рассмотрены случаи статистической механики классической и квантовой систем. В классическом случае для статического структурного фактора

$$S(q) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left\langle \Big| \sum_{1 \leq j \leq \mathcal{N}} e^{i\vec{q}\vec{r}_j} \Big|^2 \right\rangle$$

в приближении самосогласованного поля получена оценка

$$S(q) \geqslant \frac{q^2}{3q^2 + \alpha^2}\,, \quad \alpha^2 = \frac{4\pi n e^2}{\theta}\,. \qquad (7)$$

Получена соответствующая оценка для статического структурного фактора квантовых систем $S(q) = \mathcal{N}^{-1} \langle \rho_q \rho_{-q} \rangle$ (ρ_q -фурье-компонента плотности числа частиц), которая в приближении самосогласованного поля и классическом пределе дает результат (7). Оказывается возможным получить оценку и внутренней энергии системы. В частности, в классическом случае имеем

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

В § 9 обсуждаются вопросы, связанные с возможностью сверхпроводящего дальнего порядка в конечных одно-и двухмерных системах, описываемых модельным гамильтонианом Фрелиха. В основу рассмотрения положен тот факт, что свойство сверхпроводимости микроскопическая теория связывает с появлением отличных от нуля аномальных средних $\langle a_f a_{-f} \rangle$, $\langle a^+_{-f} a^+_f \rangle$ (a^+_f, a_f — ферми-операторы, $f=(q,s)$, $s=\pm 1/2$). Показано, что в конечных одно- и двухмерных системах возможно существование сверхпроводящего дальнего порядка, если число частиц ограничено некоторым N_{max}.

В § 10 при рассмотрении вопроса о возможности кристаллического упорядочения в конечных одно- и двухмерных классических системах исходили из установленного на основе (4) неравенства для корреляционных функций вида "плотность-плотность" $\langle \rho_{k+G}\, \rho_{-k-G} \rangle$. Для оценки максимальных размеров конечных одно- и двухмерных систем, совместимых с некой степенью специфического упорядочения, потребовалось найти двухчастичную функцию распределения, что было определено в приближении самосогласованного поля из цепочки уравнений Н.Н.Боголюбова. При этом граничное условие выбиралось в виде внешнего изотропного давления. Полученные результаты указывают на возможность кристаллического упорядочения в конечных одно- и двухмерных системах. В связи с этим нужно отметить работу [II], в которой подобный вывод сделан на основе "экспериментального" исследования положений равновесия конечного числа классических частиц, представляющих одномерную систему.

Резюмируя, заметим, что в работе рассматривались различные физические явления на единой основе фундаментальной концепции Н.Н.Боголюбова о квазисредних, и неравенств для коммутаторных

функций Грина. Полученные результаты позволяют заключить, что неравенства Н.Н.Боголюбова являются эффективным инструментом при установлении строгих соотношений для корреляционных функций и исследовании проблем, связанных с вырождением состояния статистического равновесия.

Основные результаты диссертации докладывались на П Международной конференции по теории плазмы (Киев, 1974), Пятом рабочем совещании по статистической физике (Львов, 1975), семинарах отдела статистической механики Математического института им.В.А. Стеклова и кафедры квантовой статистики Московского государственного университета, а также на семинаре по методам статистической механики (Баку, 1976) и опубликованы в следующих работах:

Б.И.Садовников, М.Х.Харрасов. ДАН СССР, <u>216</u>, 513 (1974)

М.Х.Харрасов. ДАН СССР, <u>230</u>, 826 (1976)

Б.И.Садовников, М.Х.Харрасов. Препринт ИТФ-74-ШР, Киев, 1974

Б.И.Садовников, М.Х.Харрасов. Тезисы П Международной конференции по теории плазмы, Киев, 1974

М.Х.Харрасов. Препринт Р4-8951 ОИЯИ, Дубна, 1975

М.Х.Харрасов. Препринт Р4-9087 ОИЯИ, Дубна, 1975.

Цитированная литература.

1. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ДАН СССР, <u>126</u>, 53 (1959).
2. Н.Н.Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт Д-781 ОИЯИ, Дубна, 1961.
3. Н.Н.Боголюбов (мл.), Б.И.Садовников. ЖЭТФ, <u>43</u>, 677 (1962).
4. Б.И.Садовников, В.К.Федянин. ТМФ, <u>16</u>, 368 (1973).
5. В.К.Федянин. ТМФ, <u>7</u>, 241 (1971); Phys.Lett., <u>34A</u>, 6 (1971).
6. N.D.Mermin, H.Wagner, Phys. Rev.Lett., <u>17</u>, 1133 (1966).

7. P.C.Hohenberg. Phys. Rev., 158, 383 (1967).
8. Б.И.Садовников, Е.М.Сорокина. ДАН СССР, I88, 788 (I969); Ind. J.Pure and Appl. Phys., 8, 64 (1970).
9. W.A.Little. Phys. Rev., 134A, 1416 (1964); В.Л.Гинзбург, Д.А.Киржниц. ДАН СССР, I76, 553 (I967).
IO. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc., 276A, 238 (1963).
II. F.C.Andrews, J.M.Benson. Phys. Rev., 20, 16 (1966).

Рукопись поступила в издательский отдел
22 февраля I977 года.