01

Концепция элементарных возбуждений в классической статистической механике

© А.Ю. Захаров

Новгородский государственный университет, Великий Новгород
E-mail: ayz@novsu.ac.ru

Поступило в Редакцию 20 февраля 2001 г.

Получены точные представления производящего функционала однокомпонентных классических систем с центральным межатомным потенциалом через функциональные интегралы по вспомогательным полям, определенным в пространстве волновых векторов. Доказано, что задача вычисления классической статистической суммы системы частиц с произвольным межатомным потенциалом эквивалентна проблеме расчета статистического интеграла системы взаимодействующих осцилляторов с гамильтонианом, зависящим от температуры. Работа выполнена при финансовой поддержке Программы "Университеты России" (грант N 990019).

Производящий функционал системы N частиц, взаимодействующих между собой через парный потенциал $v(\mathbf{r})$ и находящихся во внешнем поле $\varphi(\mathbf{r})$, после интегрирования по импульсам имеет известный вид:

$$Z\{\varphi(\mathbf{r})\} = \frac{V^N}{N!\lambda^{DN}} \int\limits_{(V^N)} \cdots \int \left(\prod_{s=1}^{N} \frac{d^D\mathbf{R}_s}{V} \right) \exp\left(-\beta \sum_{s=1}^{N} \varphi(\mathbf{R}_s) \right)$$
$$\times \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{\substack{s,s'=1 \\ s\neq s'}}^{N} v(|\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}|) \right), \qquad (1)$$

где $\lambda = (2\pi\hbar^2/mk_BT)^{1/2}$ — тепловая длина волны де Бройля, $\beta = 1/k_BT$ — обратная температура, V — объем системы, D — размерность пространства, $\hbar$ и k_B — постоянные Планка и Больцмана соответственно.

Экспонента, содержащая внешнее поле, является произведением идентичных одноатомных сомножителей вида $\exp(-\beta\varphi(\mathbf{R}_s))$. Вторая экспонента на одноатомные сомножители не распадается из-за взаимного "зацепления" атомных координат $\mathbf{R}_s$ через потенциал взаимодействия.

Одним из способов "расцепления" атомных координат для межатомных потенциалов общего вида является использование функционального интегрирования. Известно несколько вариантов подобного представления [1–4] для статистической суммы. Будем использовать вариант метода факторизации, предложенный в работе [5] (опуская эргодическую теорему Г. Вейля и связанное с ней эргодическое приближение), развитый далее в [6,7].

Положим, что центральный межатомный потенциал $v(\mathbf{r})$ допускает разложение Фурье. Тогда энергия парных взаимодействий частиц системы представляется в виде:

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{s,s'=1\\ s\neq s'}}^{N} v(|\mathbf{R}_s-\mathbf{R}_{s'}|)=-\frac{N}{2}v(0)+\frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k}\in\Omega^+} v^+(\mathbf{k})\Big[C^2(\mathbf{k})+S^2(\mathbf{k})\Big]$$

$$-\frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k}'\in\Omega^-} v^-(\mathbf{k}')\Big[C^2(\mathbf{k}')+S^2(\mathbf{k}')\Big]; \qquad (2)$$

здесь введены обозначения:

$$C(\mathbf{k})=\sum_s \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_s); \quad S(\mathbf{k})=\sum_s \sin(\mathbf{k}\mathbf{R}_s), \qquad (3)$$

слагаемое $-\frac{N}{2}v(0)$ компенсирует члены с $s=s'$ в правой части (2), $\Omega^{\pm}$ — части пространства волновых векторов, в которых Фурье-трансформанта $\tilde{v}(\mathbf{k})$ межатомного потенциала положительна и отрицательна соответственно, $v^{\pm}(\mathbf{k})=\pm v(\mathbf{k})$, $\mathbf{k}\in\Omega^{\pm}$.

Экспонента с энергией двухчастичных взаимодействий в производящем функционале (1) распадается на произведения по $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ сомножителей типа $\exp(-\frac{\beta v^+(\mathbf{k})}{2V}[C^2(\mathbf{k})+S^2(\mathbf{k})])$, $\exp(\frac{\beta v^-(\mathbf{k}')}{2V}[C^2(\mathbf{k}')+S^2(\mathbf{k}')])$, для каждого из которых осуществляется преобразование Стратоновича–Хаббарда. В результате найдем представление производящего функционала через функциональный интеграл:

$$Z\{\varphi(\mathbf{r})\} = \frac{V^N}{N!\lambda^{DN}}\, e^{\frac{\beta N}{2}v(0)} \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int \left(\prod_{\mathbf{k}\epsilon\Omega^+} \frac{\beta m\omega^2(\mathbf{k})dx^+(\mathbf{k})dy^+(\mathbf{k})}{2\pi} \right.$$

$$\left. \times \exp\left\{ -\frac{\beta m\omega^2(\mathbf{k})([x^+(\mathbf{k})]^2 + [y^+(\mathbf{k})]^2)}{2} \right\} \right)$$

$$\times \left(\prod_{\mathbf{k}'\epsilon\Omega^-} \frac{\beta m\omega^2(\mathbf{k}')dx^-(\mathbf{k}')dy^-(\mathbf{k}')}{2\pi} \right.$$

$$\left. \times \exp\left\{ -\frac{\beta m\omega^2(\mathbf{k}')([x^-(\mathbf{k}')]^2 + [y^-(\mathbf{k}')]^2)}{2} \right\} \right)$$

$$\times \Big[\mathcal{F}_1\big(x^{\pm}(\mathbf{k}), y^{\pm}(\mathbf{k}), \{\varphi(\mathbf{r})\}\big) \Big]^N, \tag{4}$$

где

$$\mathcal{F}_1\big(x^{\pm}(\mathbf{k}), y^{\pm}(\mathbf{k}), \{\varphi(\mathbf{r})\}\big) = \int\limits_{(V)} \left\langle \frac{d\mathbf{R}}{V}\, e^{-\beta\varphi(\mathbf{R})} \right.$$

$$\times \exp\left\{ i\beta \sum_{\mathbf{k}\epsilon\Omega^+} \sqrt{\frac{mv^+(\mathbf{k})}{V}}\, \omega(\mathbf{k}) \Big[x^+(\mathbf{k})\cos(\mathbf{k}\mathbf{R}) + y^+(\mathbf{k})\sin(\mathbf{k}\mathbf{R}) \Big] \right\}$$

$$\left. \times \exp\left\{ \beta \sum_{\mathbf{k}'\epsilon\Omega^-} \sqrt{\frac{mv^-(\mathbf{k}')}{V}}\, \omega(\mathbf{k}') \Big[x^-(\mathbf{k}')\cos(\mathbf{k}'\mathbf{R}) + y^-(\mathbf{k}')\sin(\mathbf{k}'\mathbf{R}) \Big] \right\} \right\rangle, \tag{5}$$

где $\omega(\mathbf{k})$ — произвольная положительная функция волнового вектора, имеющая размерность круговой частоты; m — произвольный параметр, имеющий размерность массы, $x^{\pm}(\mathbf{k})$, $y^{\pm}(\mathbf{k})$ — вспомогательные переменные, возникшие вследствие преобразования Стратоновича–Хаббарда.

Приведем выражение (4) к виду статистического интеграла системы осцилляторов с взаимодействием. Воспользовавшись тождеством

$$\frac{\beta}{2\pi m}\iint\limits_{-\infty}^{+\infty} dp_x dp_y \exp\left[-\beta\left(\frac{p_x^2}{2m}+\frac{p_y^2}{2m}\right)\right]=1, \tag{6}$$

получим:

$$Z\{\varphi(\mathbf{r})\}=\frac{V^N}{N!\lambda^{DN}}\,e^{\frac{\beta N}{2}v(0)}$$

$$\times\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\left(\prod_{\mathbf{k}\epsilon\Omega^+}\left[\frac{\beta\omega(\mathbf{k})}{2\pi}\right]^2 dx^+(\mathbf{k})dp_x^+(\mathbf{k})dy^+(\mathbf{k})dp_y^+(\mathbf{k})\right)$$

$$\times\left(\prod_{\mathbf{k}'\epsilon\Omega^-}\left[\frac{\beta\omega(\mathbf{k}')}{2\pi}\right]^2 dx^-(\mathbf{k}')dp_x^-(\mathbf{k}')dy^-(\mathbf{k}')dp_y(\mathbf{k}')\right)$$

$$\times\left[\mathcal{F}_1\left(x^\pm(\mathbf{k}),y^\pm(\mathbf{k}),\{\varphi(\mathbf{r})\}\right)\right]^N$$

$$\times\exp\Bigg\{-\beta\sum_{\mathbf{k}\epsilon\Omega^+}\Bigg(\frac{([p_x^+(\mathbf{k})]^2+[p_y^+(\mathbf{k})]^2)}{2m}$$

$$+\frac{m\omega^2(\mathbf{k})([x^+(\mathbf{k})]^2+[y^+(\mathbf{k})]^2)}{2}\Bigg)\Bigg\}$$

$$\times\exp\Bigg\{-\beta\sum_{\mathbf{k}'\epsilon\Omega^-}\Bigg(\frac{([p_x^-(\mathbf{k}')]^2+[p_y^-(\mathbf{k}')]^2)}{2m}$$

$$+\frac{m\omega^2(\mathbf{k}')([x^-(\mathbf{k}')]^2+[y^-(\mathbf{k}')]^2)}{2}\Bigg)\Bigg\}. \tag{7}$$

Данный интеграл представляет собой классическую статистическую сумму системы, описываемой гамильтонианом $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\epsilon\Omega^+} \left\{ \left[\frac{[p_x^+(\mathbf{k})]^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\mathbf{k})(x^+(\mathbf{k}))^2}{2} \right] + \left[\frac{[p_y^+(\mathbf{k})]^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\mathbf{k})(y^+(\mathbf{k}))^2}{2} \right] \right\}$$
$$+ \sum_{\mathbf{k}'\epsilon\Omega^-} \left\{ \left[\frac{[p_x^-(\mathbf{k}')]^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\mathbf{k}')(x^-(\mathbf{k}'))^2}{2} \right] + \left[\frac{[p_y^-(\mathbf{k}')]^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\mathbf{k}')(y^-(\mathbf{k}'))^2}{2} \right] \right\} - \frac{N}{\beta} \ln \mathcal{F}_1 \Big(x^{\pm}(\mathbf{k}), y^{\pm}(\mathbf{k}), \{\varphi(\mathbf{r})\} \Big). \tag{8}$$

Заметим, что множитель $2\pi/\beta\omega(\mathbf{k})$ в подынтегральном выражении формулы (7) играет роль естественной элементарной ячейки фазового пространства (т. е. постоянной Планка) и имеет ее размерность.

Гамильтониан (8) помимо "естественных" переменных — обобщенных координат $x^{\pm}(k)$, $y^{\pm}(k)$ и обобщенных импульсов $p_x^{\pm}(\mathbf{k})$, $p_y^{\pm}(\mathbf{k})$ — содержит еще и температуру, поскольку от последней зависит функция $\mathcal{F}_1(x^{\pm}(\mathbf{k}), y^{\pm}(\mathbf{k}), \{\varphi(\mathbf{r})\})$.

Таким образом, исследование статистических свойств системы классических частиц, взаимодействующих через произвольный двухчастичный потенциал (допускающий разложение Фурье), эквивалентно исследованию системы (квази) частиц (или элементарных возбуждений), описываемой гамильтонианом $\mathcal{H}$. В связи с этим представляется весьма интересным исследование систем, описываемых данным гамильтонианом.

Список литературы

[1] *Зубарев Д.Н.* // ДАН СССР. 1954. Т. 95. № 4. С. 757.
[2] *Edwards S.F.* // Phil. Mag. 1959. V. 4. P. 1171.
[3] *Hubbard J., Schofield P.* // Phys. Lett. A. 1972. V. 40. N 3. P. 245.

[4] *Ребенко А.Л.* // УМН. 1988. Т. 43. № 3. С. 55.
[5] *Zakharov A.Yu.* // Phys. Lett. A. 1990. V. 147. N 8/9. P. 442.
[6] *Захаров А.Ю., Локтионов И.К.* // ТМФ. 1999. Т. 119. № 1. С. 167.
[7] *Захаров А.Ю.* // Ж. физич. химии. 2000. Т. 74. № 1. С. 48.