УДК 517.9

Ю. А. Митропольский, акад.,
Д. Я. Петрина, чл.-корр. АН Украины (Ин-т математики АН Украины, Киев)

О РАБОТАХ Н. Н. БОГОЛЮБОВА ПО КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

Приведен обзор работ Н. Н. Боголюбова по классической и квантовой статистической механике.

Наведено огляд праць М. М. Боголюбова з класичної та квантової статистичної механіки.

Введение. Николай Николаевич Боголюбов общепризнан как один из самых выдающихся ученых XX столетия, его творчество оказывает влияние на все развитие современной математики и теоретической физики. Его работы открыли новые направления в нелинейной механике, статистической физике и квантовой теории поля.

Удивительная широта творческих интересов Николая Николаевича Боголюбова, огромный диапазон и разнообразие тех областей математики, механики и теоретической физики, в которых он работал, принципиальная важность фундаментальных результатов, которые он получил, выделяют его среди ученых всего мира. Можно смело сказать, что его необыкновенный талант не имеет равного себе среди ученых нашего столетия. Во всех областях математики, механики и теоретической физики, где он работал, он получил основополагающие результаты, которые требовали преодоления чрезвычайных трудностей. Его работы можно считать классическими и их значение с течением времени лишь увеличивается.

Н. Н. Боголюбовым написаны сотни статей и десятки монографий, его результаты вошли во многие монографии и учебники. Вместе с тем ощущается отсутствие обзоров, в которых бы не только перечислялись результаты и говорилось об их значении, но и излагались довольно подробно идеи доказательств и история вопроса по отдельным направлениям его творчества.

Авторы поставили себе целью восполнить этот пробел и дать такой нестандартный обзор работ Н. Н. Боголюбова по статистической механике.

Обзор состоит из введения и девяти разделов. Так как труды Н. Н. Боголюбова по статистической механике были непосредственным продолжением его работ по нелинейной механике, то в разделе 1 сначала приводится краткий обзор по нелинейной механике, а затем излагаются важнейшие работы по статистической механике. Для удобства читателя приведем краткое содержание восьми разделов, относящихся к статистической механике.

Раздел 2 посвящен знаменитой теореме о существовании инвариантной меры у компактных динамических систем. Скажем несколько слов об истории вопроса и о значении этой теоремы для статистической механики.

Во второй половине тридцатых годов интересы Н. Н. Боголюбова постепенно смещаются от нелинейной механики к теории динамических систем и статистической механике. К этому времени фон Нейман и Биркгоф доказали эргодические теоремы, связанные с эргодической гипотезой Больцмана о равенстве средних по времени и фазовому пространству. При доказательстве существенно использовалось предположение о существовании инвариантной меры у динамической системы. Для гамильтоновых систем такой мерой является объем фазового пространства. Вопрос о существовании инвариантной меры у произвольной динамической системы был тогда открытым. Н. Н. Боголюбов совместно с Н. М. Крыловым дали положительный ответ на этот вопрос, доказав фундаментальную теорему о существовании инвариантной меры у компактной динамической системы. Они ввели понятие эргодических множеств и показали, что инвариантную меру можно разложить на инвариантные меры, которые не разлагаются и сосредоточены на эргодических множествах. Эти результаты были перенесены и на стохастические системы, и для них были доказаны эргодические теоремы. При этом были использованы тонкие свойства вполне непрерывных положительных операторов.

В разделе 3 обсуждается модель, демонстрирующая установление статистического равновесия в системе, связанной с термостатом. Модель представляет собой осциллятор, взаимодействующий с большой системой, находящейся в состоянии статистического равновесия — термостатом. Показано, что если число частиц в термостате неограниченно возрастает, а время стремится к бесконечности, то состояние системы стремится к равновесному. Это был первый пример математически строгого обоснования общепринятой гипотезы о приближении к равновесию системы, связанной с термостатом.

В четвертом разделе дан обзор работ по классической статистической механике. В нем обсуждаются в основном работы по исследованию уравнений для последовательности функций распределения и обоснования процедуры термодинамического предела. В монографии „Проблемы динамической теории в статистической физике" классическая статистическая механика сформулирована в терминах последовательностей функций распределения и уравнений для них, называемых теперь уравнениями Боголюбова. По существу было введено новое понятие состояния систем статистической механики как бесконечной последовательности функций распределения, а эволюция состояния описывалась уравнениями Боголюбова. Состояния бесконечных систем определялись из состояний конечных систем в результате процедуры термодинамического предела, впервые в мировой литературе было намечено обоснование термодинамического предела.

Исходя из своих уравнений для функций распределения и фундаментального принципа ослабления корреляций, Н. Н. Боголюбов вывел уравнения Больцмана, не прибегая к гипотезе „молекулярного хаоса", а также уравнения Власова и Ландау. Были четко сформулированы понятия об иерархии времени и связанные с этим различные стадии эволюции: хаотическая, кинетическая и гидродинамическая. Таким образом, впервые разработан последовательный метод строгого построения уравнений физической кинетики для широкого класса нейтральных и заряженных систем.

Эти работы Н. Н. Боголюбова придали классической статистической механике современный вид и являются по существу следующим после Максвелла, Больцмана и Гиббса новым — боголюбовским — этапом в развитии классической статистической механики.

Н. Н. Боголюбов впервые поставил задачу обоснования термодинамического предела для равновесных состояний и свел ее к задаче функционального анализа о существовании решения операторного уравнения для функций распределения и его предельных свойств. Вначале рассматривались системы с отталкиванием. Позже эта задача была полностью решена для общих систем с устойчивым короткодействующим взаимодействием в рамках канонического ансамбля. Метод обоснования термодинамического предела, предложенный Н. Н. Боголюбовым в 1949 г., в шестидесятые годы был открыт заново и применен в рамках большого канонического ансамбля.

В пятом разделе обсуждаются работы по исследованию состояний квантовых систем. В монографии „Лекції з квантової статистики" Н. Н. Боголюбов ввел новое понятие состояния бесконечных систем квантовой статистической механики через бесконечную последовательность статистических операторов, эволюция состояния описывается уравнениями для статистических операторов — уравнениями Боголюбова. В монографии также был разработан новый подход к приближенному вторичному квантованию и дано его применение к полярной теории металла, теории магнетизма.

В этом разделе обсуждается также проблема обоснования термодинамического предела для равновесных состояний квантовых систем и показано, что методы, развитые Н. Н. Боголюбовым для классических равновесных систем, переносятся на квантовые системы.

В шестом разделе излагается созданная Н. Н. Боголюбовым микроскопическая теория сверхтекучести. До появления его работ существовала феноменологическая теория Ландау, основанная на предположении о форме спектра элементарных возбуждений. На основании общего гамильтониана для бозе-систем при предположении, что макроскопическое число частиц находится в основном состоянии с нулевым импульсом (а поэтому операторы рождения и уничтожения частиц с нулевым импульсом — c-числа), Н. Н. Боголюбовым получен определенный аппроксимирующий гамильтониан — квадратичная форма от операторов рождения и уничтожения. Обычная теория возмущения оказалась неприменимой к нему из-за сильного взаимодействия частиц с противоположными импульсами. Поэтому гамильтониан был диагонализован с помощью канонических преобразований (u –v-преобразований Боголюбова), и, явно вне рамок теории возмущений, был найден спектр элементарных возбуждений.

Раскладывая полевые операторы на c-числовую и операторную части, Н. Н. Боголюбов фактически ввел в квантовую теорию метод спонтанного нарушения симметрий для систем с вырожденным основным состоянием. Этот метод был открыт заново в квантовой теории поля спустя десятилетия.

В седьмом разделе излагается теория сверхпроводимости. В 1957 г. Н. Н. Боголюбов создал строгую микроскопическую теорию сверхпроводимости (явление сверхпроводимости открыто в 1911 г. и долго не поддавалось объяснению).

В 1957 г. Бардин, Купер и Шриффер для объяснения сверхпроводимости предложили упрощенную модель, в которой взаимодействуют только электроны с противоположными импульсами и спинами, определили основное состояние, его энергию и спектр элементарных возбуждений.

Одновременно и независимо полную теорию сверхпроводимости построил Н. Н. Боголюбов на основе взаимодействующих электронов и фононов. Обобщив свой метод канонических преобразований на ферми-системы и выдвинув принцип компенсации опасных диаграмм, он определил основное состояние, состоящее из спаренных электронов с противоположными импульсами и спинами, его энергию и энергию элементарных возбуждений. Было показано, что явление сверхпроводимости состоит в спаривании электронов и фазовом переходе из нормального состояния со свободными электронами в сверхпроводящее с конденсатом пар.

Таким образом, Н. Н. Боголюбов создал строгую теорию сверхтекучести и сверхпроводимости и показал, что в физической основе этих двух фундаментальных явлений природы лежит процесс конденсации бозе-частиц и соответственно пар фермионов.

В восьмом разделе изложен новый метод точного решения широкого класса модельных систем квантовой статистической механики — так называемый метод аппроксимирующего гамильтониана. Этод метод возник в теории сверхпроводимости. Задача объяснения явления сверхпроводимости требовала решения очень трудных математических проблем, связанных с обоснованием применяемых приближений. В связи с этим Н. Н. Боголюбов рассмотрел редуцированный гамильтониан, в котором учитывалось взаимодействие одних электронов, и провел для него полное математическое исследование при нулевой температуре. При этом он заложил основы нового мощного метода аппроксимирующего гамильтониана, который позволяет линеаризовать нелинейные квантовые уравнения движения, а всю нелинейность свести к уравнениям самосогласования для обычных функций, в которые переходят определенные операторные выражения. Этод метод был распространен на ненулевые температуры и широкий класс систем и в настоящее время представляет собой один из наиболее мощных методов решения нелинейных уравнений для квантовых полей.

Исследуя явления сверхтекучести и сверхпроводимости, Н. Н. Боголюбов ввел новое понятие квазисредних для систем с вырожденным основным состоянием и доказал теорему „об особенности типа $1/q^2$", из которой вытекает существование дальнодействия у систем со спонтанно нарушенной симметрией. Квазисредние стали основой теории фазовых переходов. Материал о квазисредних и теорема „об особенности типа $1/q^2$" изложены в разделе 9

Работы Н. Н. Боголюбова в классической и квантовой статистической механике создали основы нового раздела в матеметической физике — современную математическую физику бесконечных систем. Характерной чертой последней является само понятие состояния. В классической математической физике состояние системы описывается конечным числом функций, определяемых конечным числом дифференциальных уравнений в частных производных. В отличие от этого в современной математической физике бесконечных систем состояние задается бесконечной последовательностью функций от бесконечного числа аргументов, удовлетворяющих операторным уравнениям. Наиболее развитым разделом современной математической физики является классическая и квантовая статистическая механика, и пионерские работы здесь выполнены Н. Н. Боголюбовым.

1. Нелинейная механика. В 1932 г. Н. Н. Боголюбов совместно со своим учителем академиком Н. М. Крыловым приступили к разработке нового направления математической физики — теории нелинейных колебаний, названной нелинейной механикой.

Здесь уместно заметить, что в 20-е годы в связи с быстрым развитием радио- и электротехники, самолетостроения и в связи с необходимостью учета колебательных процессов в машиностроении изучение нелинейных колебаний приобрело особую актуальность. Для этого было недостаточно применения как строгих, математически обоснованных методов, разработанных А. Пуанкаре и А. Ляпуновым, так и методов теории возмущений, разработанных астрономами.

Как известно, методы Ляпунова — Пуанкаре дают возможность исследовать периодические режимы, а метод теории возмущений применяли в астрономии для исследования исключительно консервативных систем, что налагало существенные ограничения на возможность применения существующих методов, в частности метода теории возмущений, к исследованию колебательных систем, поскольку последние, как правило, — системы неконсервативные.

Исследования в области нелинейной механики Н. М. Крылов и Н. Н. Боголюбов развивали в основном в двух направлениях: создание методов асимптотического интегрирования нелинейных уравнений, описывающих нелинейные колебательные процессы, и математическое обоснование этих методов, сводящееся к исследованию общей теории динамических систем. Первое направление охватывает изучение дифференциальных уравнений с малым или большим параметром и получение приближенных формул для практического применения. Н. Н. Боголюбов совместно с Н. М. Крыловым после преодоления больших принципиальных трудностей распространили методы теории возмущений на общие неконсервативные системы и построили новые асимптотические методы в теории нелинейных колебаний.

Новые асимптотические методы строго обоснованы и позволяют получить решение не только первого приближения (как, например, в методе Ван-дер-Поля), но и высших приближений. Методы применимы для изучения периодических и квазипериодических колебательных процессов, отличаются простотой и наглядностью расчетных схем.

Асимптотические методы нелинейной механики, разработанные Н. Н. Боголюбовым, сыграли огромную роль во всем развитии учения о нелинейных колебаниях в самом широком смысле. Поэтому рассмотрим более подробно идею этих методов.

Идея асимптотических методов становится особенно ясной при рассмотрении, например, уравнения

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = \varepsilon f(x, \frac{dx}{dt}, \varepsilon), \tag{1}$$

описывающего колебательный процесс в системе с одной степенью свободы, близкой к гармоническому вибратору. При отсутствии нелинейности, т. е. при $\varepsilon = 0$, колебания, описываемые уравнением (1), чисто гармонические:

$$x = a\cos\theta \tag{2}$$

с постоянной амплитудой и равномерно вращающимся фазовым углом $(da/dt = 0,\ d\theta/dt = \omega)$. Если $\varepsilon \neq 0$, то естественно ожидать появления обертонов, а также, при неустановившемся режиме, медленного систематического изменения амплитуды и частоты. Эти физические соображения математически выражаются следующим образом: решение уравнения (2) ищется в виде ряда по степеням малого параметра

$$x = a\cos\theta + \varepsilon u_1(a, \theta) + \varepsilon^2 u_2(a, \theta) + \ldots, \tag{3}$$

где $u_1(a, \theta), u_2(a, \theta), \ldots$ периодически зависят от угла θ; a и θ определяются из уравнений

$$da/dt = \varepsilon A_1(a) + \varepsilon^2 A_2(a) + \ldots, \quad d\theta/dt = \omega + \varepsilon B_1(a) + \varepsilon^2 B_2(a) + \ldots .$$

Формальное разложение (3) можно использовать в двух направлениях. С одной стороны, ограничиваясь некоторым числом n членов, получаем расчетную формулу для построения n-го приближения; с другой, — рассматривая эту формулу n-го приближения как некоторую замену переменных, можно привести уравнение (1) к форме, удобной для теоретических исследований и, таким образом, получить как оценку погрешности данного приближения, так и ряд свойств точного решения.

Рассмотренная на простейшем примере основная идея асимптотических методов нелинейной механики была развита их авторами применительно к самым разнообразным случаям систем с малым, а также с большим параметрами, в том числе и к системам с бесконечно большим числом степеней свободы.

В разработке асимптотических методов особое внимание уделено построению простых эффективных приемов, позволяющих получить приближенные формулы, исходя из элементарных соображений. Здесь в первую очередь следует указать, например, весьма эффективный принцип эквивалентной линеаризации и символические методы.

Асимптотические методы параллельно с разработкой применялись их авторами для решения многих актуальных задач, связанных с объяснением и открытием новых явлений, наблюдаемых в нелинейных колебательных системах. Так, были получены формулы второго приближения для определения частоты стационарных колебаний в электронных генераторах, позволяющие определить влияние обертонов на стабильность частоты, исследованы резонансы деления частоты, внутренние резонансы в системах со многими степенями свободы. Особое внимание уделено теории резонанса в нелинейных системах в связи с вопросами использования нелинейных элементов для борьбы с резонансом в машиностроении. С помощью асимптотических методов решены задачи о продольной устойчивости самолета, о колебаниях и устойчивости стержней и рамных конструкций, о синхронизации работы генераторов и др.

Созданная и разработанная Н. Н. Боголюбовым теория метода усреднения, строго математически обоснованная, является важнейшим этапом развития нелинейной механики. В ней показано, что усреднение органически связано с существованием некоторой замены переменных, позволяющей исключить время t из правых частей рассматриваемых уравнений с произвольной степенью точности относительно малого параметра ε.

При этом, исходя из тонких физических соображений, Н. Н. Боголюбов указал как строить не только систему первого приближения (усредненную систему), но и усредненные системы высших приближений, решения которых аппроксимируют решения исходной (точной) системы с произвольной наперед заданной точностью.

Рассматривается дифференциальное уравнение в векторной форме

$$dx/dt = \varepsilon X(t, x), \tag{4}$$

где ε — малый положительный параметр, t — время, x — точки n-мерного евклидова пространства E_n.

Уравнения вида (4), правая часть которых пропорциональна малому параметру ε, названы Н. Н. Боголюбовым уравнениями в стандартной форме.

Далее, при определенных ограничениях, налагаемых на правые части уравнений (4), заменой переменных

$$x = \xi + \varepsilon F_1(t, \xi) + \varepsilon^2 F_2(t, \xi) + \ldots + \varepsilon^m F_m(t, \xi), \tag{5}$$

уравнение (4) приводится к эквивалентному уравнению

$$d\xi/dt = \varepsilon X_0(\xi) + \varepsilon^2 P_2(\xi) + \ldots + \varepsilon^m P_m(\xi) + \varepsilon^{m+1} R(t, \xi). \tag{6}$$

Пренебрегая в уравнении (6) слагаемым $\varepsilon^{m+1} R(t, \xi)$, Н. Н. Боголюбов получает „усредненное" уравнение m-го приближения $d\xi/dt = \varepsilon X_0(\xi) + \varepsilon^2 P_2(\xi) + \ldots$ $\ldots + \varepsilon^m P_m(\xi)$. При этом функции $F_1(t, \xi)$, $F_2(t, \xi)$, $\ldots$, $F_m(t, \xi)$, входящие в правую часть замены (5), находятся элементарно, функции $X_0(\xi)$, $P_2(\xi)$, $\ldots$, $P_m(\xi)$ определяются усреднением правой части уравнения (4) после подстановки в нее выражения (5).

Сформулированный и развитый Н. Н. Боголюбовым метод усреднения (применительно к уравнениям в стандартной форме) получил в его работах (см., например, „О некоторых статистических методах в математической физике") строгое математическое обоснование, сводящееся, в основном, к решению следующих проблем:

1) определение условий, при выполнении которых разность между решением точной системы уравнений

$$dx/dt = \varepsilon X(t, x) \tag{7}$$

и решением соответствующей ей усредненной системы

$$d\xi/dt = \varepsilon X(\xi), \tag{8}$$

где

$$\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T X(t, \xi)\, dt = X_0(\xi) \tag{9}$$

для достаточно малых значений параметра ε, становится сколь угодно малой на сколь угодно большом, но конечном, интервале времени;

2) установление соответствия между различными свойствами решений точных (7) и усредненных (8) уравнений, зависящими от их поведения на бесконечном интервале времени, в частности, установление соответствия между периодическими решениями точной и усредненной систем и установление свойств притяжения ими близких решений.

В решении первой проблемы для достаточно широкого класса дифференциальных уравнений в стандартной форме фундаментальное значение имеет классическая теорема Н. Н. Боголюбова, устанавливающая оценку разности $|x(t) - \xi(t)|$ на сколь угодно большом, однако конечном, интервале времени при достаточно общих условиях, налагаемых на правые части системы (7). При этом для правых частей системы (7) должно существовать только среднее (9).

Эта основная в методе усреднения теорема дала возможность существенно расширить область применения метода усреднения и в дальнейшем получила большое развитие и обобщение в работах многих советских и зарубежных математиков.

При решении второй проблемы Н. Н. Боголюбов доказал несколько важных теорем. В этих теоремах рассматривается соответствие между периодическими решениями, вопрос о существовании и соответствии между почти периодическими решениями, а также выдвинута идея рассмотрения интегральных многообразий для нелинейных дифференциальных уравнений в стандартной форме, и в простейших случаях для уравнений в стандартной форме устанавливается соответствие между интегральными многообразиями для точной системы и соответствующей ей усредненной системы.

С помощью своего метода усреднения Н. Н. Боголюбов рассмотрел изящный пример — физический маятник, свободно вращающийся в вертикальной плоскости вокруг своей точки подвеса, и показал, что при высокой частоте колебаний точки подвеса неустойчивое верхнее положение равновесия маятника становится устойчивым и, кроме того, маятник может синхронно вращаться с угловой скоростью ω (ω — частота колебаний точки подвеса), выполняя работу по преодолению сопротивления, если только эта работа не превышает известную величину.

Следует отметить, что выдвинутая Н. Н. Боголюбовым идея рассмотрения интегральных многообразий — это новый подход в качественной теории дифференциальных уравнений. Известно, что индивидуальные решения дифференциальных уравнений, как правило, очень чувствительны к малым изменениям их правых частей. В теории интегральных многообразий рассматриваются не индивидуальные кривые, а интегральные многообразия (некоторые гиперповерхности), обладающие по сравнению с индивидуальными решениями большей устойчивостью по отношению к малым изменениям в правых частях уравнений. Следовательно, рассматривая интегральные многообразия, можно доказать теоремы, справедливые для индивидуальных решений только при достаточно жестких условиях, налагаемых на правые части уравнений.

Доказанные Н. Н. Боголюбовым теоремы существования и устойчивости интегральных многообразий имеют большое значение для исследования индивидуальных решений, поскольку существование устойчивого многообразия позволяет вместо рассмотрения всего фазового пространства сконцентрировать внимание на решениях, лежащих на интегральном многообразии.

В цикле работ, посвященных исследованию интегральных многообразий, особо важным и получившим в дальнейшем большое развитие и широкое применение в механике и технике является предложенный Н. Н. Боголюбовым одночастотный метод — метод построения двухпараметрического решения, соответствующего одночастотному колебательному режиму в системах со многими степенями свободы.

Рассматривая достижения Н. Н. Боголюбова в области качественного исследования проблем нелинейной механики, нельзя не остановиться на теоремах, относящихся к исследованию стационарных колебательных процессов. Исследуя стационарные колебания, Н. Н. Боголюбов совместно с Н. М. Крыловым в 1934 г. предложили общий подход для изучения уравнений типа

$$\begin{aligned} da/dt &= \varepsilon f_1(a, \theta), \\ d\theta/dt &= \omega + \varepsilon f_2(a, \theta). \end{aligned} \tag{10}$$

Суть этого метода сводится к построению замены переменных, позволяющей отделять „медленные" переменные a от „быстрых" переменных θ. Такая замена позволяет представлять решение системы (10) в виде асимптотического ряда, первый член которого совпадает с решением, получаемым по методу Ван-дер-Поля. Далее, применяя теорию Пуанкаре — Ляпунова, а также теорию Пуанкаре — Данжуа о траекториях на торе, Н. Н. Боголюбов исследовал для уравнений типа (10) характер точного стационарного решения при достаточно малом значении параметра ε и установил теоремы о существовании и устойчивости квазипериодических решений.

Следует заметить, что указанная теория Пуанкаре — Данжуа относится к одномерному случаю, когда исходная система дифференциальных уравнений сводится к уравнениям $d\varphi/dt = \nu + f(\varphi, \theta)$, $d\theta/dt = \omega$. Поэтому в ранних работах, посвященных изучению квазипериодических режимов, Н. Н. Боголюбов установил существование решений и исследовал устойчивость квазипериодического режима только для двух частот, т. е. когда исследование стационарного колебательного режима сводится к исследованию поведения кривой, лежащей на двухмерном тороидальном многообразии. Случай же торов высшей размерности в рамках указанной теории Пуанкаре — Данжуа не удавалось изучить. В связи с этим доказательство фундаментальной теоремы о существовании квазипериодического режима для системы, характеризуемой уравнением $dx/dt = X(x, \varepsilon)$, где x — n-мерный вектор — большое достижение Н. Н. Боголюбова. Этот результат получен им в 1963 г. на основании объединения метода интегральных многообразий с методом ускоренной сходимости.

Основополагающие идеи и фундаментальные результаты, полученные в области нелинейной механики, составляют в настоящее время основу многих современных исследований по общей механике, механике сплошной среды, теории устойчивости, теории регулирования и стабилизации, математической экологии и другим направлениям науки и техники.

Подводя итог основным результатам, полученным Н. Н. Боголюбовым в области создания асимптотических методов нелинейной механики, следует особо отметить, что благодаря своему глубокому теоретическому содержанию и практической направленности эти методы получили широкую известность не только в нашей стране, но и за рубежом. Они обогатили науку новыми достижениями как в области математики, так и в области приложений к механике, физике и технике. С полной уверенностью можно сказать, что во всем мире одним из наиболее эффективных методов расчета нелинейных колебательных процессов являются асимптотические методы нелинейной механики. Как будет видно из дальнейшего, методы нелинейной механики получили широкое применение в статистической механике, в особенности при выводе кинетических уравнений.

2. О существовании инвариантной меры у компактной динамической системы и об эргодических свойствах систем со случайной динамикой.

В конце тридцатых годов интересы Н. Н. Боголюбова постепенно смещаются в статистическую механику, которую можно рассматривать как естественное обобщение классической механики, когда начальные состояния системы точно не определены, а известны лишь плотности распределения вероятностей начальных состояний. К этому времени благодаря работам фон Неймана и Биркгофа были доказаны эргодические теоремы. Эргодическая теория возникла в связи с эргодической гипотезой Больцмана в статистической механике, согласно которой среднее по времени от наблюдаемых совпадает со средним по фазовому пространству для гамильтоновых систем.

Как известно, гамильтоновы системы определяют динамическую систему на фазовом пространстве с инвариантной мерой — мерой Лиувилля. Обозначим через T_t группу преобразований сдвига вдоль траекторий гамильтоновой системы за время t: $T_{t_1+t_2} = T_{t_1}T_{t_2} = T_{t_2}T_{t_1}$, через x точку в фазовом пространстве X, а через $m(dX)$ меру Лиувилля. Статистическая эргодическая теорема фон Неймана утверждает, что существует предел

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f(T_i x) = f^*(x)$$

в смысле сходимости по норме (в среднем квадратичном) для произвольной интегрируемой по модулю в квадрате по мере $m(dx)$ функции $f(x)$, заданной на фазовом пространстве X. Эргодическая теорема Биркгофа утверждает, что для произвольной суммируемой по $m(dx)$ функции $f(x)$ почти всюду существует предел

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f(T_i x) = f^*(x),$$

а если мера всего пространства X конечна $(m(x) < \infty)$, то

$$\int_X f(x)m(dx) = \int_X f^*(x)m(dx). \tag{11}$$

Динамическая система называется транзитивной или эргодической, если в фазовом пространстве X не существует множеств E с положительной мерой $m(E) > 0$, инвариантных относительно преобразований T_t, $T_t E = E$. Для транзитивных систем среднее по времени $f^*(x)$ не зависит от x, $f^*(x) = f^* = \text{const}$ и поэтому (если $m(x) < \infty$) из (11) следует, что среднее по времени равно среднему по мере фазового пространства

$$f^* = \frac{1}{m(X)}\int_X f(x)m(dx). \tag{12}$$

Благодаря эргодическим теоремам проблема обоснования эргодической гипотезы была сведена к доказательству транзитивности динамической системы. Последняя проблема решена только для некоторых конкретных систем.

Первоначально эргодическая теория возникла для гамильтоновых систем, для них преобразование T_t определяется как сдвиг вдоль фазовых траекторий, инвариантная мера — это мера Лиувилля. На самом деле эргодическая теория справедлива для общих динамических систем, которые определяются своим фазовым пространством X, группой преобразований фазового пространства T_t и инвариантной мерой $m(dx)$. Все результаты, сформулированные выше для гамильтоновых систем, справедливы и для общих динамических систем с инвариантной мерой как с дискретным $t = i$, $i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, так и с непрерывным временем.

При исследовании динамических систем не всегда можно указать явно инвариантную меру фазового пространства. Возникает задача о существовании инвариантной меры в общей динамической систéме, заданной на фазовом пространстве X непрерывной группой автоморфизмов преобразований T_t, $T_{s+t} = T_s T_t = T_t T_s$, $T_t x$ — непрерывная функция t, x, $-\infty < t < \infty$, $x \in X$. Решение этой проблемы для динамических систем, фазовое пространство X которых является компактом в метрическом пространстве, было дано в работе „Загальна теорія міри в нелінійній механіці" (Зб. праць з нелінійної механіки. Зап. каф. мат. фізики Ін-ту буд. механіки АН УРСР.– 1937.– Т. 3.– С. 55 – 112), выполненной Н. Н. Боголюбовым совместно с Н. М. Крыловым. Ими доказана следующая фундаментальная теорема.

Теорема. *Каждая компактная динамическая система обладает инвариантной нормированной мерой* $\mu(X) = 1$.

Доказательство этой теоремы классически просто. Рассмотрим произвольную нормированную меру $m(dx)$, заданную на X, и с ее помощью на непрерывных функциях $f(x)$ определим функционал $\varphi(f)$ согласно формуле

$$\varphi(f) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \int_X f(T_i x) m(dx). \tag{13}$$

Этот функционал линеен и непрерывен в пространстве C непрерывных функций с равномерной нормой, положителен $\varphi(f) \geq 0$, если $f \geq 0$, и нормирован $\varphi(1) = 1$. Кроме того, он инвариантен $\varphi(Tf) = \varphi(f)$, $(T_i f)(x) = f(T_i x)$. В силу известных теорем функционального анализа функционал $\varphi(f)$ определяет нормированную инвариантную меру $\mu(dx)$ согласно формуле

$$\varphi(f) = \int_X f(x)\mu(dx), \mu(X) = 1, \mu(A) = \mu(T_i A), A \subset X. \tag{14}$$

В работе проведен детальный анализ меры $\mu(dx)$. Для этого был введен функционал $\varphi(f)$ с помощью нормированной меры

$$\mu_P(A) = \begin{cases} 1, \text{ если } P \in A; \\ 0, \text{ если } P \in X - A \end{cases}$$

и определены квазирегулярные точки P такие, что $\lim\limits_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T_i P)$ существует для всех непрерывных функций $f(x)$. В этом случае имеем

$$\varphi(f) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T_i P) = \int_X f(x)\mu_P(dx), \tag{15}$$

где $\mu_P(dx)$ — инвариантная нормированная мера, которую назовем индивидуальной мерой, соответствующей квазирегулярной точке P. Множество U квазирегулярных точек инвариантно и имеет полную меру (относительно μ_P). Квазирегулярная точка P называется транзитивной, если соответствующая индивидуальная мера μ_P также транзитивна. Оказывается, что множество U_T всех транзитивных точек имеет полную меру.

Кроме того, вводятся квазирегулярные точки плотности P, для которых $\mu_P(S_P^\delta) > 0$, и $S_P^\delta(P' / |P' - P| \leq \delta), \delta > 0$. Множество U_D всех точек плотности инвариантно и имеет полную меру. Наконец, точки P называются регулярными, если они являются одновременно транзитивными и точками плотности. Множество $\mathcal{R}$ всех регулярных точек инвариантно и полной меры.

Две регулярные точки P и q имеют одинаковый эргодический характер, если их индивидуальные меры тождественны $\mu_p = \mu_q$. Множество $\sigma \subset \mathcal{R}$ называется эргодическим, если все его точки имеют одинаковый эргодический характер и невозможно присоединить к нему другие точки, не нарушая это свойство. Обозначим через $\mu\sigma$ индивидуальную меру эргодического множества σ. Множество $\mathcal{R}$ можно представить как объединение эргодических множеств, не имеющих общих точек. Множество всех индивидуальных мер, соответствующих эргодическим множествам, транзитивны и нормированы и, наоборот, всякая нормированная транзитивная мера принадлежит этому множеству.

Основной результат этих построений состоит в том, что любую инвариантную меру можно представить через индивидуальные меры эргодических множеств. Справедлива следующая теорема.

Теорема. *Если m — инвариантная мера, то*

$$m = \int_{\mathcal{R}} \mu_P m(dP). \tag{16}$$

Этой теореме можно придать более наглядный вид. Пусть $\sigma_1, \ldots, \sigma_n, \ldots$ — эргодические множества. Рассмотрим множество мер $c_1\mu\sigma_1 + \ldots + c_n\mu\sigma_n$, $c_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n c_i = 1$ ($\mu\sigma_i$ совпадает с μ_{P_i}, где $P_i \in \sigma_i$) и все их предельные функции. Назовем их симплексом и обозначим $c_0\varphi\sigma$. Формула (16) означает, что все нормированные инвариантные меры принадлежат симплексу $c_0\varphi\sigma$ и, наоборот, всякая мера $m \in c_0\varphi\sigma$ — нормированная и инвариантная мера.

В дальнейшем Н. Н. Боголюбов рассмотрел эргодические свойства различных систем, в том числе таких, эволюция состояния которых не детерминирована. Так, он впервые исследовал эргодические свойства систем, для которых изменения фазового состояния удовлетворяют лишь некоторым вероятностным законам. Изложим вкратце результаты работы Н. Н. Боголюбова „Про деякі проблеми ергодичної теорії стохастичних систем" (Зап. каф. мат. фізики. — Київ: Вид-во АН УРСР, 1939.– Т. 4.– С. 243 – 287), выполненной совместно с Н. М. Крыловым. В этой работе рассматриваются системы в метрическом, сепарабельном и связном фазовом пространстве X, эволюция состояния которого задается вероятностью перехода $P_t(x, U)$ системы из начального состояния x в одно из состояний множества U за время t. Вероятность перехода удовлетворяет очевидному уравнению

$$P_{t+\tau}(x, U) = \int_X P_t(x, dy) P_\tau(y, U), \quad t \geq 0, \tau \geq 0, \tag{17}$$

которое следует из закона умножения вероятностей. Предполагается, что на фазовом пространстве системы задана мера m. Эволюция мер задается формулой

$$m_t(U) = \int_X m(dy) P_t(y, U). \tag{18}$$

Мера m инвариантна, если $m_t(U) = m(U)$ для произвольного множества $U \subset \subset X$. Из (17) следует, что инвариантная мера удовлетворяет уравнению

$$m(U) = \int_X m(dy) P_t(y, U). \tag{19}$$

По аналогии с динамическими системами ставится проблема о равенстве среднего по времени среднему по фазовому пространству

$$\lim_{\tau \to \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(x_t)\, dt = \int_X f(x) m(dx) \tag{20}$$

с вероятностью 1 для произвольного начального состояния x. При этом предполагается, что вероятность перехода $P_t(x, U)$ непрерывна относительно x при любом $U \subset X$ и состояние x_t стохастически непрерывно. Кроме того, из предположения, что вероятность перехода $P_t(x, U)$ абсолютно непрерывна относительно меры m, следует, что $P_t(x, U)$ можно представить в виде

$$P_t(x, U) = \int_U K_t(x, y) m(dy), \tag{21}$$

где $K_t(x, y)$ — плотность вероятности перехода. Плотность $K_t(x, y)$ обладает следующими очевидными свойствами:

$$K_t(x, y) \geq 0, \int_X K_t(x, y) m(dy) = 1, \int_X K_t(x, y) m(dx) = 1,$$

$$K_{t+\tau}(x, y) = \int_X K_t(x, z) K_\tau(z, y) m(dz), t \geq 0, \tau \geq 0.$$

Если ввести интегральный оператор K_t с ядром $K_t(x, y)$, то его собственные числа по модулю не превышают 1, а собственная функция, отвечающая собственному значению равному 1, постоянна. Если дополнительно сделать предположение $K_t(x, y) \leq M$, то ядро $K_t(x, y)$ будет удовлетворять неравенствам

$$\left|K_t(x, y) - 1\right| \leq Ce^{-\alpha t}, \int_X \left|K_t(x, y) - 1\right| dm(y) \leq Ce^{-\alpha t}, \alpha > 0, t > 0. \tag{22}$$

Отсюда следует, что вероятность перехода из произвольного состояния x в произвольную область U фазового пространства при возрастании t стремится к мере этой области

$$\left| P_t(x, U) - m(U) \right| \leq Ce^{-\alpha t}. \tag{23}$$

Это и есть обычная форма эргодической теоремы для стохастических систем.

Н. Н. Боголюбов установил, что справедлива эргодическая теорема и в форме (1), аналогичной обычной теореме Биркгофа. Для этого для произвольной суммируемой функции f рассматривается математическое ожидание квадрата разности среднего по времени и среднего по фазовому пространству

$$D_x^\tau = E_x \left\{ \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(x_t)\, dt - \int_X f(x)\, dx(x) \right\}^2 =$$

$$= E_x \left\{ \frac{1}{\tau} \int_0^\tau F(x_t)\, dt \right\}^2, F(x) = f(x) - \int_X f(x) dx, \int_X F(x) dx = 0, \tag{24}$$

где E_x — условное математическое ожидание, при условии, что в начальный момент система находилась в состоянии x. Для D_x^τ справедливо представление

$$D_x^\tau = \frac{2}{\tau^2} \int_0^\tau \int_0^t \left\{ \int_X \int_X K_\omega(x, y) K_{t-\omega}(y, z) F(y) F(z)\, dy dz \right\} dt d\omega. \tag{25}$$

Из (22), (25) следует справедливость неравенства

$$\left| \int_X K_{t-\omega}(y, z) F(z)\, dz \right| = \left| \int_X \left(K_{t-\omega}(y, z) - 1\right) F(z)\, dz \right| \leq Ce^{\alpha(t-\omega)} F, F = \sup_{x \subset X} \left| F(x) \right|,$$

из которого следует неравенство для D_x^τ:

$$D_x^\tau \le \frac{2F^2C}{\alpha}\frac{1}{\tau}.$$

Из последнего неравенства получаем

$$E_x\left\{\frac{1}{\tau}\int_0^\tau f(x_t)\,dt - \int_X f(x)m(dx)\right\}^2 \le \frac{2F^2CX}{\alpha}\frac{1}{\tau},$$

а уже отсюда вытекает, что с вероятностью единица

$$\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau f(x_t)\,dt = \int_X f(x)m(dx),$$

каково бы ни было начальное состояние x. Это и есть аналог теоремы Биркгофа для стохастических систем.

В этой работе была установлена справедливость эргодической теоремы и для многовременных средних. А именно: с вероятностью единица

$$\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau f(x_t, x_{t+\tau_1}, \ldots, x_{t+\tau_n})\,dt = \int_X\ldots\int_X f(x, x_1, \ldots, x_n)\cdot$$

$$K_{\tau_1}(x, x_1)K_{\tau_2-\tau_1}(x_1, x_2)\ldots K_{\tau_n-\tau_{n-1}}(x_{n-1}, x_n)\,dx\,dx_1\ldots dx_n$$

для любого начального состояния. Эта работа по существу была первой работой по эргодическим свойствам стохастических систем. Кроме того, Н. Н. Боголюбов выполнил цикл работ, в которых исследовал эргодические свойства систем со случайными параметрами и непрерывных групп преобразований.

3. О модели, демонстрирующей справедливость постулата установления состояния статистического равновесия в системе, взаимодействующей с термостатом. В статистической механике принят постулат, согласно которому „малая" система, взаимодействующая с „большой" системой — термостатом, который находится в состоянии статистического равновесия, с течением времени сама приходит к состоянию статистического равновесия. В работе „Элементарный пример установления статистического равновесия в системе, связанной с термостатом", опубликованной как отдельная глава в монографии „О некоторых статистических методах в математической физике" (Киев: Изд-во АН УССР, 1945.– С. 115 – 137), Н. Н. Боголюбов впервые строго доказал справедливость этого постулата. Он рассмотрел в качестве системы и термостата взаимодействующие гармонические осцилляторы. А именно: система S — это осциллятор с гамильтонианом

$$H_s = \tfrac{1}{2}\left(p^2 + \omega^2 q^2\right), \tag{26}$$

а термостат Σ — совокупность из N не взаимодействующих осцилляторов с гамильтонианом

$$H_\Sigma = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^N\left(p_n^2 + \omega_n^2 q_n^2\right). \tag{27}$$

Взаимодействие систем S и Σ задается гамильтонианом взаимодействия

$$H_{S\Sigma} = \varepsilon\sum_{n=1}^N \alpha_n q_n q. \tag{28}$$

Считается, что положение и импульс системы S в начальный момент времени $t = 0$ точно известны, это — (q_0, p_0), а положения и импульсы $(q_1, p_1, \ldots, q_N, p_N)$ системы Σ в начальный момент $t = 0$ являются случайными величинами с плотностью распределения вероятности

$$\rho_\Sigma = \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_\Sigma}, \tag{29}$$

где $\beta = \frac{1}{kT}$, Z_Σ — статистическая сумма, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Вследствие взаимодействия систем S и Σ положение и импульс системы S в произвольный момент времени t $(q(t) = q, p(t) = p)$ тоже являются случайными с плотностью распределения вероятности $\rho_S = \rho(t, q, p)$. Если в термостате Σ число частиц N устремить к бесконечности, то для достаточно большого времени t и при слабом взаимодействии $H_{S\Sigma}$ в системе S также устанавливается состояние статистического равновесия при той же температуре T и функция ρ_S имеет вид

$$\rho_S = \frac{e^{-\beta H_S}}{Z_S}. \tag{30}$$

Это означает, что термостат Σ настолько большой по сравнению с системой S, что система S приходит в состояние равновесия с системой Σ, не меняя при этом состояния Σ. Приведем теперь точную математическую формулировку этого результата. На системы S и Σ налагаются условия

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{0<\omega_n<\nu} \frac{\alpha_n^2}{\omega_n^2} = \int_0^\nu j(\nu)\,d\nu, \quad \lim_{N\to\infty} \sum_{\nu<\omega_n} \frac{\alpha_n^2}{\omega_n^2} = \int_\nu^\infty j(\nu)\,d\nu, \tag{31}$$

где $j(\nu)$ — непрерывная неотрицательная функция, суммируемая на отрезке $(0, \infty)$, $\int_0^\infty j(\nu)\,d\nu < \infty$.

Теорема. *Существует предельная (при $N \to \infty$) плотность вероятности распределения $\rho_S = \rho(t, q, p)$ случайных величин $q = q(t), p = p(t)$, представляющих координату и импульс системы S в момент времени t. При достаточно малом ε функция ρ_S может быть аппроксимирована функцией вида*

$$\rho_S^0 = \rho_0(t, E) = \frac{\omega}{4\pi^2(1-e^{-2\varepsilon^2\delta t})kT} \int_0^{2\pi} d\theta \exp\left\{-\frac{E + E_0 e^{-2\varepsilon\delta t} - 2\sqrt{EE_0}\,e^{-\varepsilon^2\delta t}\cos\theta}{kT\left(1-e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)}\right\}, \tag{32}$$

где

$$E = H_S = \tfrac{1}{2}\left(p^2 + \omega^2 q^2\right), \quad \delta = \tfrac{\pi}{4} j(\omega) \tag{33}$$

в том смысле, что, фиксируя произвольно малое положительное α и произвольно большое β, получаем равномерно по отношению к t в интервале $\alpha / \varepsilon^2 < t < \beta / \varepsilon^2$

$$\frac{1}{\Delta t_\varepsilon} \int_t^{t+\Delta t_\varepsilon} \left\{\rho_S - \rho_S^0\right\} dt \to 0, \ \varepsilon \to 0 \tag{34}$$

для любой последовательности $\{\Delta t_\varepsilon\}$ *такой, что* $\varepsilon^2\Delta t_\varepsilon \to 0$, $\Delta t_\varepsilon \to \infty$ *при* $\varepsilon \to 0$. (Формулировка теоремы процитирована по работе Н. Н. Боголюбова.)

Если в ρ_S^0 устремить $t \to \infty$, то получим обычное распределение Гиббса

$$\rho_S^0 \to \frac{\omega}{2\pi kT} e^{-\frac{E}{kT}}, t \to \infty, \tag{35}$$

описывающее равновесное состояние системы S при температуре T.

Приведем идею доказательства теоремы. Гамильтониан всей системы имеет вид

$$H = H_S + H_\Sigma + H_{S\Sigma} =$$
$$= -\frac{1}{2}\left(p^2 + \omega^2 q^2\right) + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(p_n^2 + \omega_n^2 q_n^2\right) + \varepsilon\sum_{n=1}^{N}\alpha_n q_n q. \tag{36}$$

Уравнения Гамильтона выглядят так:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2 q_n}{dt^2} + \omega_n^2 q_n = -\varepsilon\alpha_n q, \quad \frac{dq_n}{dt} = p_n, \\ &\frac{d^2 q}{dt^2} + \omega^2 q = -\varepsilon\sum_{n=1}^{N}\alpha_n q_n, \quad \frac{dq}{dt} = p. \end{aligned} \tag{37}$$

Исключая из них q_n, получаем замкнутое уравнение для q

$$\begin{aligned} &\frac{d^2 q}{dt^2} + \omega^2 q = \varepsilon^2\int_0^t K_N(t-\tau)q(\tau)d\tau + \varepsilon f_N(t), \\ &K_N(t) = \sum_{n=1}^{N}\alpha_n^2\frac{\sin\omega_n t}{\omega_n}, \; f_N(t) = -\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\frac{\sqrt{2E_n}}{\omega_n}\cos(\omega_n t + \varphi_n). \end{aligned} \tag{38}$$

Независимые случайные величины φ_n равномерно распределены на отрезке $0 \le \varphi_n \le 2\pi$, а E_n — с плотностью вероятности $(kT)^{-1}e^{-(kT)^{-1}E_n}$ и связаны с $q_n(0)$ и $p_n(0)$ таким образом:

$$q_n(0) = \frac{\sqrt{2E_n}}{\omega_n}\cos\varphi_n, \; p_n(0) = -\sqrt{2E_n}\sin\varphi_n. \tag{39}$$

Решение уравнения (38) представляется квадратурой

$$\begin{aligned} &q(t) = q_0 v_N'(t) + p_0 v_N(t) + \varepsilon\int_0^t v_N(t-\tau)f_N(\tau)d\tau, \\ &p(t) = q_0 v_N''(t) + p_0 v_N'(t) + \varepsilon\int_0^t v_N'(t-\tau)f_N(\tau)d\tau. \end{aligned} \tag{40}$$

Здесь $v_n(t)$ выражается формулой

$$v_N(t) = t + \int_0^t (t-\tau)\omega_N(\tau)d\tau \tag{41}$$

через решение уравнения Вольтерра

$$\omega_N(t) + \int_0^t \left\{ \omega^2(t-\tau) - \varepsilon^2 \int_\tau^t Q_N(t-z)\,dz \right\} \omega_N(\tau)\,d\tau =$$

$$= -\omega^2 t + \varepsilon^2 \int_\tau^t Q_N(t-\tau)\,d\tau, \quad Q_N(t) = \sum_{n=1}^N \alpha_n^2 \frac{1-\cos\omega_n t}{\omega_n^2}. \tag{42}$$

Ядро и свободный член в (42) равномерно на конечном интервале стремятся при $N \to \infty$ соответственно к выражениям

$$\omega^2(t-\tau) - \varepsilon^2 \int_\tau^t Q(t-z)\,dz, \quad -\omega^2 t + \varepsilon^2 \int_0^t Q(t-\tau)\,d\tau,$$

$$Q(t) = \lim_{N\to\infty} Q_N(t),$$

поэтому и $\omega_N(t)$ равномерно на конечном интервале стремится при $N \to \infty$ к $\omega(t)$, которое является решением предельного уравнения с Q вместо Q_N. Из (41) следует, что и $v_N(t)$ вместе с первой и второй производной в том же смысле сходятся к $v(t)$.

Рассмотрим случайные величины $q(t)$ и $p(t)$ при конечном N (40) и определим вероятность события $a_1 < q(t) < b_1$, $a_2 < p(t) < b_2$. Она, как легко видеть, равна

$$P_N = E\{f(q(t), p(t))\} =$$

$$= E\{f(q_0 v'_N(t) + p_0 v_N(t) + x_1;\, q_0 v''_N(t) + p_0 v'_N(t) + x_2)\}, \tag{43}$$

где x_1 и x_2 — случайные величины,

$$\begin{aligned} x_1 &= -\varepsilon \sum_{n=1}^N \frac{\alpha_n}{\omega_n} \sqrt{2E_n} \int_0^t v_N(t-\tau)\cos(\omega_n\tau + \varphi_n)\,d\tau, \\ x_2 &= -\varepsilon \sum_{n=1}^N \frac{\alpha_n}{\omega_n} \sqrt{2E_n} \int_0^t v'_N(t-\tau)\cos(\omega_n\tau + \varphi_n)\,d\tau. \end{aligned} \tag{44}$$

Здесь E — математическое ожидание, а f — характеристическая функция прямоугольника $a_1 < q(t) < b_1$, $a_2 < p(t) < b_2$.

Используя свою работу „О некоторых предельных распределениях для сумм, зависящих от произвольных фаз", Н. Н. Боголюбов доказал, что существует предел P_N при $N \to \infty$, и он равен

$$\lim_{N\to\infty} P_N = \int_{a_1}^{b_1}\int_{a_2}^{b_2} \Phi(\xi - q^*(t), \eta - p^*(t), t)\,d\xi\,d\eta, \tag{45}$$

где

$$\begin{aligned} &q^*(t) = q_0 v'(t) + p_0 v(t), \quad p^*(t) = q_0 v''(t) + p_0 v'(t), \\ &\Phi(\xi, \eta, t) = \frac{1}{2\pi\sqrt{AC - B^2}} \exp\left\{ -\frac{C\xi^2 - 2B\xi\eta + A\eta^2}{2(AC - B^2)} \right\}, \end{aligned} \tag{46}$$

а числа A, B, C определяются квадратичной формой

$$A(t)\lambda^2 + 2B(t)\lambda\mu + C(t)\mu^2 = \varepsilon^2 kT\int_0^\infty j(\nu)\left|\int_0^t \left\{\lambda v(z) + \mu v'(z)\right\}e^{-i\nu z}\,dz\right|^2 d\nu. \quad (47)$$

Таким образом показано, что существует предельная плотность распределения вероятности координаты и импульса в момент t

$$\rho_S = \rho(t, q, p) = \Phi(q - q^*(t), p - p^*(t)). \quad (48)$$

Анализируя уравнения (41), (42) для $v(t)$ при достаточно малом ε на интервале $\alpha/\varepsilon^2 < t < \beta/\varepsilon^2$, где α — произвольно малое, а β — произвольно большое, можно установить неравенства

$$\left|A(t) - \frac{kT}{\omega^2}\left(1 - e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)\right| < \xi(\varepsilon), \ \ |B(t)| < \xi(\varepsilon),$$

$$\left|C(t) - kT\left(1 - e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)\right| < \xi(\varepsilon), \ \ \delta = \frac{\pi}{4}j(\omega), \quad (49)$$

где $\xi(\varepsilon) \to 0$ при $\varepsilon \to 0$. Из (46) следует

$$\Phi(\xi, \eta, t) - \frac{\omega}{2\left(1 - e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)\pi kT}\exp\left(-\frac{\omega^2\xi^2 + \eta^2}{2\left(1 - e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)kT}\right) \to 0, \ \varepsilon \to 0,$$

$$\left|q^*(t) - e^{-\varepsilon^2\delta t}\left(q_0\cos\omega_\varepsilon t + p_0\frac{\sin\omega_\varepsilon t}{\omega}\right)\right| \le \xi_1(\varepsilon),$$

$$\left|p^*(t) - e^{-\varepsilon^2\delta t}\left(-q_0\omega\sin\omega_\varepsilon t + p_0\cos\omega_\varepsilon t\right)\right| \le \xi_2(\varepsilon), \quad (50)$$

$$\xi_1(\varepsilon) \to 0, \ \xi_2(\varepsilon) \to 0, \ \varepsilon \to 0, \ \omega_\varepsilon \to \omega, \ \varepsilon \to 0.$$

Отсюда уже следует, что равномерно по t из интервала $\alpha/\varepsilon^2 < t < \beta/\varepsilon^2$

$$\left|\rho_s - \frac{\omega}{2\pi kT\left(1 - e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)}\exp\left(-\frac{E + E_0 e^{-2\varepsilon^2\delta t} - 2\sqrt{EE_0}\,e^{-\varepsilon^2\delta t}\cos\left(\omega_\varepsilon t + \varphi_0 - \varphi\right)}{kT\left(1 - e^{-2\varepsilon^2 t}\right)}\right)\right| \to 0, \quad (51)$$

при $\varepsilon \to 0$, где

$$q = \frac{\sqrt{2E}}{\omega}\cos\varphi, \ p = -\sqrt{2E}\sin\varphi, \ q_0 = \frac{\sqrt{2E_0}}{\omega}\cos\varphi_0, \ p_0 = -\sqrt{2E_0}\sin\varphi_0.$$

Из (51) следует окончательный результат

$$\lim_{\Delta t_\varepsilon \to \infty}\frac{1}{\Delta t_\varepsilon}\int_t^{t+\Delta t_\varepsilon}\left\{\rho_S - \rho_S^0\right\}dt = 0 \quad (52)$$

равномерно по t, $\alpha/\varepsilon^2 < t < \beta/\varepsilon^2$, где

$$\rho_S^0 = \frac{\omega}{4\pi^2 kT\left(1 - e^{-2\varepsilon^2\delta t}\right)}\int_0^{2\pi}d\theta\left\{\exp\left(-\frac{E + E_0 e^{-2\varepsilon^2\delta t} - 2\sqrt{EE_0}\,e^{-\varepsilon^2\delta t}\cos\theta}{kT\left(1 - e^{-\varepsilon^2\delta t}\right)}\right)\right\}, \quad (53)$$

а Δt_ε — такая последовательность, что $\Delta t_\varepsilon \to \infty$, $\varepsilon^2 \Delta t_\varepsilon \to 0$ при $\varepsilon \to \infty$.

Изложенная выше работа стала классической в статистической механике. В ней впервые строго математически было доказано, что в системе, связанной с термостатом, устанавливается состояние статистического равновесия. До работ Н. Н. Боголюбова это утверждение принималось как постулат. Эта работа стала истоком большого количества исследований об установлении равновесия в системах, связанных с термостатом, в особенности в квантовой статистической механике.

Н. Н. Боголюбов рассмотрел также задачу о влиянии случайной силы на гармонический осциллятор и показал, что в зависимости от выбора шкалы времени случайный процесс, описывающий состояние, можно рассматривать как динамический, как марковский и, в общем случае, как немарковский процесс. Здесь впервые четко введено представление об иерархии времен в статистической механике.

Эти работы Н. Н. Боголюбова открыли новое направление на стыке дифференциальных уравнений и теории вероятностей — теорию стохастических дифференциальных уравнений и теперь общепризнаны как основополагающие в этой теории.

4. Классическая статистическая механика. В 1946 г. вышла в свет монография „Проблемы динамической теории в статистической физике", которая оказала решающее влияние на все дальнейшее развитие статистической механики. В ней Н. Н. Боголюбов впервые ввел новое понятие состояния бесконечных систем статистической механики как бесконечной последовательности функций распределения и уравнение для состояния, которые теперь общепринято называть уравнениями Боголюбова или иерархией Боголюбова.

Изложим вкратце эти результаты. Состояние конечной системы, состоящей из N частиц, распределенных с плотностью $1/v$ в области Λ объемом V, $|\Lambda| = V$, описывается функцией распределения вероятностей $D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_N)$, заданной на фазовом пространстве $x = (p, q)$, где p — импульс, а q — координата. Эта функция определяется как решение уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial}{\partial t} D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_N) = [H_{N,\Lambda}, D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_N)] \tag{54}$$

при заданных начальных данных

$$\begin{aligned} D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_N)\big|_{t=0} &= D_{N,\Lambda}(0, x_1, \ldots, x_N), \\ D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_N) &= 0, \quad q_i \notin \Lambda, \ i = 1, \ldots, N. \end{aligned} \tag{55}$$

Через $H_{N,\Lambda}$ обозначен гамильтониан системы. Если потенциал взаимодействия Φ парный, то

$$H_{N,\Lambda} = \sum_{i=1}^{N} \frac{P_i^2}{2m} + \sum_{i<j=1}^{N} \Phi(q_i - q_j), \ \Phi(q) = \Phi(|q|). \tag{56}$$

К нему следует добавить граничные условия упругого отражения от границы $\partial\Lambda$ области Λ, m — масса частиц, которые предполагаются тождественными. Через $[H_{N,\Lambda}, D_{N,\Lambda}]$ обозначена скобка Пуассона.

Средние от наблюдаемой $A_N(x_1, \ldots, x_N)$, где A_N — действительная симметричная функция, вычисляются согласно формуле

$$\overline{A}_N(t) = \int A_N(x_1, \ldots, x_N) D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_N)\, dx_1 \ldots dx_N. \tag{57}$$

Состояние бесконечной системы получается в результате процедуры термодинамического предела, которая состоит в том, что число частиц N и объем V области Λ устремляются к бесконечности при постоянной плотности: $N \to \infty$, $V \to \infty$, $N / V = 1 / v$. Проблема математического обоснования термодинамического предела очень трудна. Так, если в уравнении Лиувилля (54) совершить его формально, то получим скобку Пуассона с гамильтонианом от бесконечного числа переменных, который на определенных конфигурациях вообще не существует. Кроме того, нет общей теории дифференциальных уравнений в частных производных для бесконечного числа переменных.

Новаторская идея Н. Н. Боголюбова состояла в том, что он ввел новое понятие состояния через последовательность частичных функций распределения

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}(t, x_1, \ldots, x_s) = v^s \frac{N!}{(N-s)!} \int\limits_{\Lambda^{N-s}} dx_{s+1} \ldots dx_N D_{N,\Lambda}(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}, \ldots, x_N),$$
$$1 \le s \le N, \tag{58}$$

где $\int\limits_{\Lambda} dx = \int\limits_{\mathcal{R}^\nu} dr \int\limits_{\Lambda} dq$, которые удовлетворяют уравнениям

$$\frac{\partial F_{s,\Lambda}^{(N)}(t, x_1, \ldots, x_s)}{\partial t} = \left[H_{s,\Lambda}, F_{s,\Lambda}^{(N)}(t, x_1, \ldots, x_s) \right] +$$
$$+ \frac{1}{v} \int\limits_{\Lambda} \left[\sum_{i=1}^{s} \Phi(q_i - q_{s+1}), F_{s+1,\Lambda}^{(N)}(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}) \right] dx_{s+1},\ 1 \le s \le N, \tag{59}$$
$$F_{s,\Lambda}^{(N)}(t, x_1, \ldots, x_s)\big|_{t=0} = F_{s,\Lambda}^{(N)}(0, x_1, \ldots, x_s).$$

Если совершить в них термодинамический предел, то получим уравнения для состояния бесконечной системы $F(t) = (F_s(t, x_1, \ldots, x_s))$, $s \ge 1$,

$$F_s(t, x_1, \ldots, x_s) = \lim_{N \to \infty, V \to \infty, \frac{N}{V} = \frac{1}{v}} F_{s,\Lambda}^{(N)}(t, x_1, \ldots, x_s),$$
$$\frac{\partial F_s(t, x_1, \ldots, x_s)}{\partial t} = \left[H_s, F(t, x_1, \ldots, x_s) \right] +$$
$$+ \frac{1}{v} \int \left[\sum_{i=1}^{\infty} \Phi(q_i - q_{s+1}), F_{s+1}(t, x_1, \ldots, x_s, x_{s+1}) \right] dx_{s+1}, \tag{60}$$
$$F_s(t, x_1, \ldots, x_s)\big|_{t=0} = F(0, x_1, \ldots, x_s).$$

Уравнения Боголюбова обладают одним важным свойством: в них первое слагаемое в первой части описывает эволюцию s частиц как бы независимо от остальных частиц, а второе слагаемое учитывает влияние на эволюцию s частиц со стороны остальных частиц. Уравнения Боголюбова открывают возможность построить эволюции любого числа частиц методом постепенного учета влияния остальных частиц.

В своей монографии Н. Н. Боголюбов наметил метод обоснования термодинамического предела и вывел из уравнений (60) обобщенные уравнения Больцмана. Для этого он ввел понятие о стадиях эволюции: хаотической, кинетической и гидродинамической и соответствующие времена: взаимодействия, свободного пробега и макроскопической релаксации. На хаотической стадии частицы синхронизируются и устанавливается локальное равновесие, потом наступает кинетическая стадия и все функции распределения начинают зависеть от времени через одночастичную и, наконец, на гидродинамической стадии функции распределения зависят от времени через макроскопические величины, и в системе устанавливается равновесие.

Н. Н. Боголюбов ввел важный принцип ослабления корреляций, согласно которому функция распределения s частиц представляется в виде произведения групп из $\{s_1\}$ и $\{s_2\}$ частиц $s_1 + s_2 = s$, если расстояние между координатами этих групп стремится к бесконечности

$$\lim F_s\big(t,(x)_s\big) = F_{s_1}\big(t,(x)_{s_1}\big)F_{s_2}\big(t,(x)_{s_2}\big),\ (x)_{s_1} \cup (x)_{s_2} = (x)_s,$$
$$\min\left|q_i - q_j\right| \to \infty,\ q_i \in \{s_1\},\ q_j \in \{s_2\},\ (x)_s = \big(x_1,\dots,x_s\big). \tag{61}$$

Физический и вероятностный смысл этого принципа ясен: на большом расстоянии частицы не взаимодействуют и ведут себя независимо.

На кинетическом этапе эволюции все функции распределения зависят от времени через одночастичную

$$F\big(t,x_1,\dots,x_s\big) = F_s\big((x)_s,F_1\big) = F_s^0\big((x)_s,F_1\big) + \frac{1}{v}F_s^1\big((x)_s,F_1\big) + \dots, \tag{62}$$

а одночастичная функция распределения удовлетворяет нелинейному уравнению

$$\partial F_1(t,x_1)/\partial t = A_0(x_1;F_1) + \frac{1}{v}A_1(x_1;F_1) + \dots\,. \tag{63}$$

Уравнение (62) называется кинетическим. Здесь F_s^i и A_i подобраны так, чтобы последовательность $F_1(t,x_1), F_2(t,x_1,x_2),\dots,F_s(t,x_1,\dots,x_s)$ удовлетворяла уравнениям (60).

Н. Н. Боголюбов показал, что кинетическое уравнение (63) уже в первом приближении приводит в пространственно-однородном случае к известному уравнению Больцмана.

Таким образом, исходя из уравнений для функций распределения (60) и принципа ослабления корреляций впервые было получено уравнение Больцмана без привлечения гипотезы о молекулярном хаосе. Кроме того, предложенный метод позволяет в принципе получить кинетические уравнения и в высших порядках по плотности. Следует отметить, что описанный выше метод очень тесно примыкает к асимптотическим методам нелинейной механики и теории интегральных многообразий. Так, в нелинейной механике зависимость решений от времени задается через амплитуду и фазу, формулой (63) выделяется гиперповерхность низшей размерности в функциональном пространстве последовательностей функций распределения — аналог интегрального многообразия. Математическое обоснование этого метода в настоящее время отсутствует. Только в последнее время удалось строго вывести уравнение Больцмана— Энскога для системы упругих шаров в пределе Больцмана — Грэда.

Среди решений уравнений Боголюбова важную роль играют определенные стационарные решения, описывающие равновесные состояния. Они определяются как термодинамический предел равновесного состояния конечной системы из N частиц в области Λ, определяемого конечной последовательностью функций распределения

$$F_\Lambda^{(N)} = \Big(F_{s,\Lambda}^{(N)}\big(x_1,\dots,x_s\big)\Big)_{1\le s\le N},$$

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}\big(x_1,\dots,x_s\big) = Z(N,V,\beta)^{-1}\frac{N!}{(N-s)!}\int\limits_{\Lambda^{N-s}}\exp\left(-\beta\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i<j=1}^{N}\Phi\big(q_i-q_j\big)\right)\right)dx_{s+1}\dots dx_N. \tag{64}$$

где

$$Z(N,V,\beta)^{-1} = \int\limits_{\Lambda^N} \exp\left(-\beta\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i<j=1}^{N}\Phi\left(q_i-q_j\right)\right)\right)dx_1\dots dx_N.$$

Функции распределения равны произведению функций, одна из которых зависит только от импульсов как распределение Максвелла, а вторая от координат. Общепринято поэтому выделять зависимость от импульсов и рассматривать функции распределения, зависящие только от координат

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}(q_1,\dots,q_s) = Q(N,V,\beta)^{-1}\frac{N!}{(N-s)!}\int\limits_{\Lambda^{N-s}} \exp\left(-\beta\sum_{i<j=1}^{N}\Phi\left(q_i-q_j\right)\right)dq_{s+1}\dots dq_N,$$

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}(q_1,\dots,q_s) = F_{s,\Lambda}^{(N)}((q)_s), \quad (q_1,\dots,q_s) = (q)_s, \tag{65}$$

где

$$Q(N,V,\beta) = \int\limits_{\Lambda^N} \exp\left(-\beta\sum_{i<j=1}^{N}\Phi\left(q_i-q_j\right)\right)dq_1\dots dq_N,$$

и переходить в них к термодинамическому пределу.

Математическое обоснование существования термодинамического предела оказалось очень трудной задачей. Чтобы составить представление о характере трудностей, заметим, что функции распределения (65) равны отношению величин, которые в термодинамическом пределе расходятся как N^N, и нужно доказать, что эти расходимости сокращаются, а предельные функции распределения определены как математический объект. Хотя основные формулы (64) – (65) для равновесных функций распределения были известны еще с работ Гиббса, ввиду этих трудностей проблема обоснования процедуры термодинамического предела оставалась нерешенной около полстолетия. Только в 1949 г. Н. Н. Боголюбов предложил решение этой проблемы: он свел ее к задаче функционального анализа о существовании решения операторных уравнений и их предельных свойств. Это было сделано на основе уравнений для функций распределения. Последовательности F_Λ^N удовлетворяют соотношениям

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}((q)_s) = a(N,V)e^{-\beta W_1((q)_s)}\chi_\Lambda((q)_s)\Big[F_{s-1,\Lambda}^{(N-1)}\left((q)_s^1\right) +$$

$$+ \sum_{k=1}^{N-s}\frac{1}{k!}\int\limits_{\Lambda^k}\prod_{i=1}^{k}\varphi_{q_1}(y_i)F_{s-1+k,\Lambda}^{(N-1)}\left((q)_s^1,(y)_k\right)d(y)_k\Big],\ 1 \le s \le N, \tag{66}$$

$$a(N,V) = \frac{Q(N-1,V)}{Q(N,V)},\ F_{0,\Lambda}^{(N-1)} = 1,\ \varphi_{q_1}(y) = e^{-\beta\Phi(q_1-y)} - 1,$$

$$W_1((q)_s) = \sum_{i=2}^{s}\Phi(q_1-q_i),\ \chi_\Lambda((q)_s) = \prod_{i=1}^{s}\chi_\Lambda(q_i),\ d(y)_k = dy_1\dots dy_k,$$

$$\chi_\Lambda(q) = 1,\ q\in\Lambda,\ \chi_\Lambda(q) = 0,\ q\notin\Lambda,\ (q)_s^1 = (q_2,\dots,q_s).$$

Если в них перейти формально к термодинамическому пределу, предположив, что существуют

$$\lim_{N\to\infty, V=vN} a(N,V) = a(v),\quad \lim_{N\to\infty, V=vN} F_{s,\Lambda}^{(N)}((q)_s) = F_s((q)_s),$$

то получим уравнения

$$F_s\big((q)_s\big) = a(v)e^{-\beta W_1((q)_s)}\Big[F_{s-1}\big((q)_s^1\big) +$$

$$+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!}\int\prod_{i=1}^{k}\varphi_{q_1}(y_i)F_{s-1+k}\big((q)_s^1,(y)_k\big)d(y)_k\Big],\ F_0 = 1,\quad s \geq 1, \tag{67}$$

которые называются уравнениями Кирквуда — Зальцбурга. Соотношения (66) и уравнение (67) рассматривались в банаховом пространстве E_ξ, $\xi > 0$, состоящем из последовательностей ограниченных функций $f = (f(q)_s)$, $s \geq 1$, с нормой

$$\|f\| = \sup_{s\geq 1}\frac{1}{\xi^s}\sup_{(q)_s}\left|f_s\big((q)_s\big)\right|.$$

Их можно представить в виде

$$F^{(N)} = K^{(N)}F^{(N-1)} + F_0^{(N)}, \tag{68}$$

$$F = KF + F_0, \tag{69}$$

где операторы $K^{(N)}$ и K определены правыми частями соотношений (68) и уравнениями (69). При условиях регулярности и устойчивости, налагаемых на потенциал

$$\int\left|e^{-\beta\Phi(q)} - 1\right|dq = C(\beta) < \infty,\ \sum_{i<j=1}^{N}\Phi\big(q_i - q_j\big) \geq -BN,\ B > 0, \tag{70}$$

и достаточно малых активностях $z = a(v)$ операторы $K^{(N)}$ и K определены и ограничены в E_ξ, $\xi = C^{-1}(\beta)$, и их нормы меньше единицы. Поэтому уравнения (69) имеют единственное решение, которое можно представить рядом

$$F = \sum_{n=0}^{\infty}(K)^n F^0, \tag{71}$$

сходящимся по норме пространства E_ξ. Последовательности $F^{(N)}$ тоже существуют и принадлежат E_ξ, и они сходятся в термодинамическом пределе к F в том смысле, что последовательность $F_{s,\Lambda}^{(N)}\big((q)_s\big)$ при $N \to \infty$ сходится равномерно по $(q)_s$ на компактах к $F_s((q)_s)$. Предельная последовательность аналитически зависит от плотности в окрестности нуля и описывает равновесное состояние бесконечной системы. Эти результаты были получены в рамках канонического ансамбля, когда в конечной системе имеется фиксированное число частиц. Позже они были перенесены на системы, описываемые в рамках большого канонического ансамбля, когда система состоит из случайного числа частиц и фиксируется их среднее число. В настоящее время построены равновесные состояния бесконечных систем при произвольных термодинамических параметрах и сверхустойчивом регулярном снизу потенциале, состояние F удовлетворяет уравнениям Кирквуда — Зальцбурга, но, вообще говоря, не единственно. Отметим еще, что равновесные функции распределения $F = (F_s(x)_s)_{s\geq 1} = (F_s(x_1, \ldots, x_s))_{s\geq 1}$ в фазовом пространстве принадлежат функциональному пространству последовательностей ограниченных функций $f = (f_s(x)_s)_{s\geq 1}$ с нормой

$$\|f\| = \sup_{s\geq 1}\sup_{(x)_s}\left|f_s\big((x)_s\big)\right|e^{\beta\sum_{i=1}^{s}\frac{p_i^2}{2m}}. \tag{72}$$

Это пространство тоже обозначим через E_ξ.

С помощью процедуры термодинамического предела определены нестационарные решения уравнений Боголюбова для одномерных систем на конечном промежутке времени для начальных данных из E_ξ и на всем временном промежутке для так называемых локальных возмущений равновесных состояний. Аналогичные результаты получены для модели упругих шаров любой размерности и для специальных начальных состояний модели упругих шаров, взаимодействующих через короткодействующий потенциал. Сделано это следующим образом.

Установлено, что уравнения Боголюбова для конечных систем являются эволюционными уравнениями с оператором в правой части (60), являющимся инфинитезимальным оператором сильно непрерывной группы в прямой сумме пространств суммируемых симметричных функций. В этом пространстве они имеют единственное решение, описывающее состояние конечных систем. Задача обоснования термодинамического предела состоит в том, чтобы расширить группу на пространство E_ξ или его подмножества. Это удается сделать в указанных выше случаях.

Существует и другой подход к построению решений уравнений Боголюбова, когда сразу рассматривается бесконечное число гамильтоновых уравнений. Их решения для одномерных систем определены для почти всех начальных данных, и с помощью этих решений определяется эволюция мер, являющихся возмущением равновесной меры бесконечной системы. Функции распределения, определенные по возмущенной мере, являются слабыми решениями уравнений Боголюбова.

Следует отметить, что проблема построения решений уравнений Боголюбова для трехмерных систем частиц с короткодействующим потенциалом еще далека от своего полного решения. Даже для тех случаев, когда решения построены, не исследована их асимптотика при больших временах.

Ждет математического обоснования вывод уравнений Больцмана из уравнений Боголюбова. В последнее время получены строгие результаты по обоснованию предела Больцмана — Грэда для модели упругих шаров любой размерности и показано, что уравнения Боголюбова при определенных начальных данных сводятся в этом пределе к уравнениям Больцмана — Энскога. Ждет также математического обоснования вывод уравнений гидродинамики.

5. Квантовая статистическая механика. В 1949 г. вышла в свет монография „Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем" (К.: Рад. шк., 1949), в которой Н. Н. Боголюбов ввел новое понятие состояния бесконечных систем квантовой статистической механики как бесконечной последовательности статистических операторов и вывел уравнение для состояния — уравнение Боголюбова.

Изложим эти результаты. Состояние конечной системы N частиц в области $\Lambda, |\Lambda| = N$, в квантовой статистической механике описывается матрицей плотности $\rho_{N,\Lambda}(t, q_1, \ldots, q_N; q_1', \ldots, q_N')$, которая определяется как решение квантового уравнения Лиувилля

$$i\frac{\partial\rho_{N,\Lambda}\big(t,(q)_N;(q')_N\big)}{\partial t} = \big[H_{N,\Lambda}, \rho_{N,\Lambda}\big(t,(q)_N;(q')_N\big)\big], \quad (q)_N = (q_1, \ldots, q_N), \tag{73}$$

при заданных начальных данных

$$\begin{gathered}\rho_{N,\Lambda}\big(t,(q)_N;(q')_N\big)\big|_{t=0} = \rho_{N,\Lambda}\big(0,(q)_N;(q')_N\big),\\ \rho_{N,\Lambda}\big(t,(q)_N;(q')_N\big) = 0, \; q_i \notin \Lambda, \; q_j' \notin \Lambda, \; i, j = 1, \ldots, N.\end{gathered} \tag{74}$$

Здесь гамильтониан $H_{N,\Lambda} = -\sum_{i=1}^{N}\frac{\Delta_i}{2m} + \sum_{i<j=1}^{N}\Phi\left(q_i - q_j\right)$, определен на соответствующей области в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_N(\Lambda)$ функций n переменных $q_1, \ldots, q_N$, сосредоточенных в Λ, суммируемых по модулю в квадрате и с нулевыми граничными условиями. Постоянная Планка положена равной единице, m — масса частицы. Через $[H_{N,\Lambda}, \rho_{N,\Lambda}]$ обозначена квантовая скобка Пуассона, на потенциал налагаются условия, обеспечивающие существенную самосопряженность гамильтониана. Матрица плотности $\rho_{N,\Lambda}(t)$ задана своим ядром, и она действует в $\mathcal{H}_N(\Lambda)$ согласно формуле

$$\left(\rho_{N,\Lambda}(t) f_N\right)\left((q)_N\right) = \int\limits_{\Lambda^N}\rho_{N,\Lambda}\left(t,(q)_N;(q')_N\right) f_N\left((q')_N\right) d(q)_N$$

и при конечной области Λ является ядерным положительно определенным оператором. Средние от наблюдаемых $A_N = A_N((q)_N;(q')_N)$ вычисляются согласно формуле

$$\overline{A}_N(t) = \operatorname{Tr} A\rho_{N,\Lambda}(t) = \int\limits_{\Lambda^{2N}} A_N\left((q)_N;(q')_N\right)\rho_{N,\Lambda}\left(t,(q')_N;(q)_N\right) d(q')_N d(q)_N, \quad (75)$$

где Tr означает операцию взятия следа. Как и в классической статистической механике, состояния бесконечных систем квантовой статистической механики получаются в результате процедуры термодинамического предельного перехода, когда $N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V = 1/v$, из состояния конечной системы $\rho_{N,\Lambda}\left(t,(q)_N;(q')_N\right)$. Математическое обоснование существования термодинамического предела непосредственно для $\rho_{N,\Lambda}\left(t,(q)_N;(q')_N\right)$ и уравнения Лиувилля наталкивается на трудности, связанные с приданием смысла гамильтониану и уравнению в частных производных с функцией от бесконечного числа переменных.

Чтобы разрешить эти трудности, Н. Н. Боголюбов ввел новое понятие состояния с помощью последовательности статистических операторов

$$F_\Lambda(t) = \left(F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(t, q_1, \ldots, q_s; q_1', \ldots, q_s'\right)\right)_{1\le s\le N} = \left(F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(t,(q)_s;(q')_s\right)\right)_{1\le s\le N},$$

где

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(t,(q)_s;(q')_s\right) = \frac{N!}{(N-s)!}\operatorname{Tr}_{s+1\ldots s+n}\rho_{N,\Lambda}(t) =$$

$$= \frac{N!}{(N-s)!}\int\limits_{\Lambda^{N-s}}\rho_{N,\Lambda}\left(t,(q)_s, q_{s+1}, \ldots, q_N;(q')_s, q_{s+1}, \ldots, q_N\right) dq_{s+1}\ldots dq_N, \quad (76)$$

$F_{s,\Lambda}^{(N)}$ при $s > N$ полагаются равными нулю.

Последовательность $F_\Lambda(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\frac{\partial F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(t,(q)_s;(q')_s\right)}{\partial t} = \left[H_{s,\Lambda}, F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(t,(q)_s;(q')_s\right)\right] +$$

$$+ \int\limits_{\Lambda}\left[\sum_{i=1}^{s}\Phi\left(q_i - q_{s+1}\right), F_{s+1,\Lambda}^{(N)}\left(t,(q)_s, q_{s+1};(q')_s, q_{s+1}\right)\right] dq_{s+1}, \; 1 \le s \le N, \quad (77)$$

при начальных данных

$$F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(t,(q)_s;(q')_s\right)\Big|_{t=0} = F_{s,\Lambda}^{(N)}\left(0,(q)_s;(q')_s\right),$$

$$F_{s,\Lambda}^{(N)} = 0 \quad \text{при} \quad s > N.$$

Формулами (76) были введены статистические операторы в рамках канонического ансамбля, когда система состоит из фиксированного числа частиц N в конечной области Λ. В рамках большого канонического ансамбля, когда с определенной вероятностью система состоит из любого числа частиц в области Λ при фиксированном среднем числе частиц N, статистические операторы $F_{s,\Lambda}\left(t,(q)_s;(q')_s\right)$ вводятся согласно формулам

$$F_{s,\Lambda}\left(t,(q)_s;(q')_s\right) =$$

$$= \Xi^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int\limits_{\Lambda^n}\rho_{s+n,\Lambda}\left(t,(q)_s,q_{s+1},\ldots,q_{s+n};(q')_s,q_{s+1},\ldots,q_{s+n}\right)dq_{s+1}\ldots dq_{s+n}, \quad (78)$$

где большая статистическая сумма

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int\limits_{\Lambda^n}\rho_{n,\Lambda}\left(t,(q)_n;(q)_n\right)d(q)_n.$$

Последовательность $F_\Lambda(t) = \left(F_{s,\Lambda}\left(t,(q)_s;(q')_s\right)_{s\geq 1}\right)$ определяет состояние конечной системы и удовлетворяет тем же уравнениям (77) с той лишь разницей, что все $F_{s,\Lambda}\left(0,(q)_s;(q')_s\right)$ отличны от нуля. Состояние бесконечной системы получается из состояния конечной системы $F_\Lambda(t)$ с помощью процедуры термодинамического предела. Если существуют пределы

$$\lim_{\substack{N\to\infty, V\to\infty,\\ N/V = 1/v}} F_{s,\Lambda}\left(t,(q)_s;(q')_s\right) = F_s\left(t,(q)_s;(q')_s\right),$$

то последовательность $F(t) = \left(F_s\left(t,(q)_s;(q')_s\right)_{s\geq 1}\right)$ и описывает состояние бесконечной системы. Последовательность $F(t)$ удовлетворяет уравнениям

$$i\frac{\partial F_s\left(t,(q)_s;(q')_s\right)}{\partial t} = \left[H_s, F_s\left(t,(q)_s;(q')_s\right)\right] +$$

$$+\int\left[\sum_{i=1}^{s}\Phi\left(q_i - q_{s+1}\right), F_{s+1}\left(t,(q)_s,q_{s+1};(q')_s,q_{s+1}\right)\right]dq_{s+1}, \quad (79)$$

которые и называются уравнениями Боголюбова. Их вид не зависит от типа ансамбля. Первое слагаемое в правой части (79) описывает изменение статистического оператора из-за взаимодействия s-частиц между собой, второе — из-за взаимодействия остальных частиц с s-ми. Уравнения (79) открывают возможность построить статистические операторы, постепенно учитывая влияние все большего числа частиц на состояние фиксированного конечного числа частиц.

Среди решений уравнений Боголюбова особую роль играют специальные решения — так называемые гиббсовские. Они определяются как термодинамический предел последовательности $F_\Lambda = (F_{s,\Lambda}((q)_s;(q')_s))_{s\geq 1}$, где

$$F_{s,\Lambda}\left((q)_s;(q')_s\right) = \Xi^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^{s+n}}{n!}\int\limits_{\Lambda^n}e^{-\beta H_{s+n,\Lambda}}\left((q)_s,(u)_n;(q')_s,(u)_n\right)d(u)_n, \quad (80)$$

а

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} e^{-\beta H_{n,\Lambda}}\left((u)_n; (u)_n\right) d(u)_n.$$

Здесь z — активность, а $e^{-\beta H_{n,\Lambda}}\left((q)_n; (q')_n\right)$ — ядро операторов $e^{-\beta H_{n,\Lambda}}$. Для квантового случая более детально исследованы равновесные состояния в рамках большого канонического ансамбля, поэтому ограничимся именно этим случаем.

Воспользуемся формулой Фейнмана — Каца, с помощью которой ядро $e^{-\beta H_{n,\Lambda}}\left((q)_n; (q')_n\right)$ представляется через интеграл Винера

$$e^{-\beta H_{n,\Lambda}}\left((q)_n; (q')_n\right) = \int P_{(q)_n;(q')_n}\left(d(\omega)_n\right) \exp\left\{-\int_0^{\beta} \sum_{i<j=1}^{n} \Phi\left(\omega_i(t)-\omega_j(t)\right) dt\right\} \alpha_\Lambda\left((\omega)_n\right), \tag{81}$$

где $P_{(q)_n;(q')_n}\left(d(\omega)_n\right)$ — условная мера Винера на траекториях $\omega_1(t)$, $0 \le t \le \beta$, проходящих через точки q_i и q_i', $\omega_1(0) = q_i$, $\omega_1(\beta) = q_i'$, $\alpha_\Lambda((\omega)_n)$ — характеристическая функция траекторий, полностью сосредоточенных в области Λ. Если подставить (81) в (80), то получим выражения для $F_{s,\Lambda}((q)_s; (q')_s)$ через интеграл Винера

$$F_{s,\Lambda}\left((q)_s;(q')_s\right) = \Xi^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{s+n}}{n!} \int \int_{\Lambda^n} P_{(q)_s,(u)_n;(q')_s,(u)_n}\left(d(\omega)_{s+n}\right) \times$$

$$\times \exp\left\{-\int_0^{\beta} \sum_{i<j=1}^{s+n} \Phi\left(\omega_i(t)-\omega_j(t)\right) dt\right\} \alpha_\Lambda\left((\omega)_{s+n}\right) d(u)_n =$$

$$= \int P_{(q)_s;(q')_s}\left(d(\omega)_s\right) \rho_\Lambda\left((\omega)_s\right), \tag{82}$$

где

$$\rho_\Lambda\left((\omega)_s\right) = \Xi^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{s+n}}{n!} \int \int_{\Lambda^n} P_{(u)_n;(u)_n}\left(d(\omega)_n\right) \times$$

$$\times \exp\left\{-\int_0^{\beta} \sum_{i<j=1}^{s+n} \Phi\left(\omega_i(t)-\omega_j(t)\right) dt\right\} \alpha_\Lambda\left((\omega)_{s+n}\right). \tag{83}$$

Выражение (83) для функционала на s траекториях полностью напоминает функции распределения в классической статистической механике. Для последовательности $\rho_\Lambda = (\rho_\Lambda((\omega)_s))_{s\ge1}$ можно вывести аналог уравнений Кирквуда — Зальцбурга и доказать, что для нее существует термодинамический предел $\rho((\omega)_s)_{s\ge1}$. По последовательности $\rho((\omega)_s)_{s\ge1}$ можно построить последовательность $F = (F_s((q)_s; (q')_s))$ предельных статистических операторов

$$F_s\left((q)_s; (q')_s\right) = \int P_{(q)_s;(q')_s}\left(d(\omega)_s\right) \rho\left((\omega)_s\right), \tag{84}$$

которая описывает состояние бесконечной равновесной системы. Операторы F_s ограничены в $\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_j(\mathcal{R}^{\nu s})$, но не ядерны, и удовлетворяют принципу ослабления корреляций. Исследовано также равновесное состояние для квантовых статистик (Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака) при низких плотностях и показано, что оно единственно и аналитически зависит от плотности v^{-1}. При более жестких ограничениях на потенциал доказано существование равновесного состояния бесконечных систем при любых термодинамических параметрах, но при этом отсутсвует единственность.

Из изложенного выше видно, что метод обоснования термодинамического перехода, предложенный Н. Н. Боголюбовым в классической статистической механике, полностью переносится и на квантовую статистическую механику, конечно с необходимыми модификациями.

Изучение неравновесных состояний в квантовой статистической механике не проведено с той же полнотой, что и в классической. Доказано существование решений уравнений Боголюбова в пространстве последовательностей ядерных операторов, которые описывают состояния конечных систем. Чтобы построить состояния бесконечных систем, необходимо совершить термодинамический предельный переход и придать смысл решениям на определенном множестве ограниченных операторов. Эта задача до сих пор не решена.

6. Микроскопическая теория сверхтекучести. Явление сверхтекучести было открыто Л. П. Капицей. Оно состоит в потере вязкости жидкого гелия при температурах близких к абсолютному нулю. Феноменологическую теорию сверхтекучести создал Л. Д. Ландау. Центральным местом в его теории был постулат о спектре элементарных возбуждений, из которого следовало, что при скорости меньшей некоторой критической жидкий гелий не испытывает трения и не имеет вязкости.

В 1947 г. Н. Н. Боголюбов построил последовательную микроскопическую теорию сверхтекучести, из которой следовала постулированная Л. Д. Ландау форма спектра элементарных возбуждений. Н. Н. Боголюбов исходил из общего гамильтониана взаимодействующих через парный потенциал Φ бозонов с массой m

$$H_\Lambda = H_0 + H_1 = \int\limits_\Lambda \Psi^*(q)\left(-\frac{\Delta}{2m}\right)\Psi(q)dq + \frac{1}{2}\int\limits_{\Lambda^2} \Psi^*(q)\Psi^*(q')\Phi(q-q')\Psi(q')\Psi(q)dqdq'. \tag{85}$$

Здесь $\Psi(q)$, $\Psi^*(q)$ — операторы уничтожения и рождения бозонов, удовлетворяющие каноническим коммутационным соотношениям

$$[\Psi(q), \Psi^*(q')] = \delta(q-q'), \quad [\Psi(q), \Psi(q')] = [\Psi^*(q), \Psi^*(q')] = 0.$$

Система бозонов заключена в области Λ — кубе с ребром L и объемом V — при периодических граничных условиях. Считается, что потенциал $\Phi(q)$ сферически симметричен и пропорционален малому параметру. Кроме того, предполагается, что при нулевой температуре некая макроскопическая часть частиц с ненулевой плотностью находится в состоянии с нулевым импульсом.

Операторы $\Psi(q)$ и $\Psi^*(q)$ представляются в виде

$$\Psi(q) = \frac{a_0}{\sqrt{V}} + \theta(q), \Psi^*(q) = \frac{a_0^*}{\sqrt{V}} + \theta^*(q), \tag{86}$$

где a_0, a_0^* — операторы уничтожения и рождения частиц с нулевым импульсом. Операторы $\theta(q)$ и $\theta^*(q)$ в силу периодических граничных условий представляются рядами Фурье

$$\theta(q) = \sum_{p\neq 0} a_p \frac{e^{-ipq}}{\sqrt{V}}, \ \theta^*(q) = \sum_{p\neq 0} a_p^* \frac{e^{ipq}}{\sqrt{V}}, \quad p = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3), \tag{87}$$

где n_1, n_2, n_3 — целые числа.

Операторы a_p, a_p^* удовлетворяют каноническим коммутационным соотношениям

$$\left[a_p, a_{p'}^*\right] = \delta_{p,p'}, \left[a_p, a_{p'}\right] = \left[a_p^*, a_{p'}^*\right] = 0, \ \delta_{p,p'} = \begin{cases} 1, & p = p'; \\ 0, & p \neq p' \end{cases} \tag{88}$$

и представляют собой операторы уничтожения и рождения частиц с импульсом p. Для объяснения сверхтекучести необходимо вычислить спектр гамильтониана, что является очень сложной задачей. Н. Н. Боголюбов выдвинул смелую идею приближенного вычисления спектра основного состояния и его элементарных возбуждений, основываясь на физической сущности явления сверхтекучести. Его идея состоит из двух предположений. Считается, что, во-первых, при нулевой температуре макроскопическое число частиц с ненулевой плотностью имеет равный нулю импульс. Поэтому операторы $a_0 / \sqrt{V}$, $a_0^* / \sqrt{V}$ в термодинамическом пределе просто коммутируют $\left[\frac{a_0}{\sqrt{V}}, \frac{a_0^*}{\sqrt{V}}\right] = \frac{1}{V} \xrightarrow[V\to\infty]{} 0$ и являются c-числами, а вместе с ними является c-числом оператор числа частиц $N_0 = a_0^* a_0$. Во-вторых, частицы с отличными от нуля импульсами появляются при нулевой температуре вследствие слабого взаимодействия, поэтому будем считать их малыми величинами и пренебрегать произведениями больше чем двух операторов $\theta(q), \theta^*(q)$ в гамильтониане. Подставляя выражение (86) в (85) и учитывая изложенное выше, получаем аппроксимирующий (приближенный) гамильтониан, который обозначим H_{appr}. Выражая его через операторы a_0, a_0^*, a_p, a_p^*, находим

$$\begin{gathered} H_{\text{appr}} = \sum_p E_p a_p^* a_p + \Phi_0 \frac{1}{2} \frac{N_0^2}{V} + \frac{a_0^2}{2V} \sum_{p\neq 0} \nu(p) a_p^* a_{-p}^* + \\ + \frac{a_0^{*2}}{2V} \sum_{p\neq 0} \nu(p) a_p a_{-p} + \frac{N_0}{V} \sum_{p\neq 0} \nu(p) a_p^* a_p, \quad E_p = \frac{p^2}{2m}, \\ \Phi(q - q') = \frac{1}{V} \sum_p e^{ip(q-q')} \nu(p), \quad \Phi_0 = \int \Phi(q)\, dq. \end{gathered} \tag{89}$$

Аппроксимирующий гамильтониан является квадратичной формой относительно a_p, a_p^*. Приведем его к диагональному виду с помощью канонических преобразований

$$a_p = \frac{\alpha_p + L_p \alpha_{-p}^*}{\sqrt{1 - |L_p|^2}}, \quad a_p^* = \frac{\alpha_p^* + L_p^* \alpha_{-p}}{\sqrt{1 - |L_p|^2}}, \tag{90}$$

где α_p, α_p^* удовлетворяют каноническим коммутационным соотношениям. Здесь

$$L_p = \frac{a_0^2 V}{N_0^2 \nu(p)}\left[\varepsilon(p) - E_p - \frac{N_0}{V}\nu(p)\right], \ \varepsilon(p) = \sqrt{E_p^2 + \frac{2N_0}{V} E_p \nu(p)}. \tag{91}$$

Формулы (90) можно обратить и выразить операторы α_p, α_p^* через a_p, a_p^*:

$$\alpha_p = \frac{a_p - L_p a_{-p}^*}{\sqrt{1-|L_p|^2}}, \quad \alpha_p^* = \frac{a_p^* - L_p^* a_{-p}}{\sqrt{1-|L_p|^2}}. \tag{92}$$

Непосредственными вычислениями убеждаемся, что канонические преобразования (90) приводят аппроксимирующий гамильтониан (89) к диагональному виду относительно α_p, α_p^*:

$$H_{\text{appr}} = \frac{N^2}{2V}\Phi_0 + \frac{1}{2}\sum_p\left(\varepsilon_p - E_p - \frac{N_0\nu(p)}{V}\right) + \sum_p \varepsilon_p \alpha_p^* \alpha_p. \tag{93}$$

Обозначим через Ψ_0 состояние вакуума для операторов α_p, α_p^*, которые будем называть операторами уничтожения и рождения квазичастиц; n-частичные возбужденные состояния имеют вид $\alpha_{p_1}^* \ldots \alpha_{p_n}^* \Psi_0$. Энергия основного состояния Ψ_0 равна $\dfrac{N_0}{2V}\Phi_0 + \dfrac{1}{2}\sum\limits_p\left(\varepsilon_p - E_p - \dfrac{N_0\nu(p)}{V}\right)$, энергия n-частичных возбужденных состояний отличается от основного на величину $\sum\limits_{i=1}^{n}\varepsilon(p_i)$. Рассмотрим более детально энергию одночастичного возбуждения

$$\varepsilon_p = \sqrt{E_p^2 + 2\frac{N_0}{V}E_p\nu(p)}. \tag{94}$$

При малых p она имеет асимптотическое поведение $\varepsilon_p = \sqrt{\dfrac{N_0\nu(0)}{V_m}}|p| = c|p|$, где c — скорость звука; при больших p имеем $\varepsilon_p = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{\nu(p)}{v}$. Покажем, что из свойств спектра одночастичных возбуждений следует сверхтекучесть рассматриваемой системы бозе-частиц. Будем вести отсчет энергии от энергии основного состояния. Если в системе возникает одночастичное возбуждение с импульсом p, то энергия всей системы будет равна ε_p. Предположим, что система как единое целое движется со скоростью u. Тогда энергия E всей системы будет равна

$$E = \varepsilon_p + up + \frac{Mu^2}{2}, \tag{95}$$

где M — масса системы. Если в системе не было возбуждения, то ее энергия была равна $Mu^2/2$, поэтому $\varepsilon_p + up$ — изменение энергии вследствие одночастичного возбуждения. Это изменение должно быть отрицательно, ибо энергия движущейся системы должна уменьшаться после возникновения возбуждения:

$$\varepsilon_p + up < 0. \tag{96}$$

Отсюда получаем ограничение на скорость

$$|u| > \min_p \frac{\varepsilon(p)}{|p|} = u_{\text{кр}}, \tag{97}$$

из которого следует, что возбуждения могут возникать при скоростях всей системы больших по модулю, чем критическая $u_{\text{кр}}$. При скоростях $|u| < u_{\text{кр}}$

изменение энергии положительно, и поэтому возникновение элементарных возбуждений энергетически невыгодно. Это означает, что при движении бозе-жидкости через капилляр со скоростью $|u| < u_{кр}$ в ней не будут возникать элементарные возбуждения, жидкость не будет взаимодействовать со стенками капилляра и не будет замедляться, т. е. у нее не будет вязкости и бозе-жидкость — гелий обнаружит сверхтекучесть.

Если подсчитать согласно правилам статистической механики функцию распределения квазичастиц в импульсном пространстве, то получим

$$w(p) = c\delta(p) + w_1(p), \tag{98}$$

где $w_1(p)$ — непрерывная, суммируемая функция. Эта формула показывает, что при любой температуре макроскопическая часть частиц имеет нулевой импульс, а остальные непрерывно распределены по импульсам отличным от нуля. Отсюда следует, что функция распределения двух частиц имеет вид

$$F_2(q_1, q_2) = c + f_2(q_1 - q_2), \tag{99}$$

где функция $f_2(q_1 - q_2)$ стремится к нулю при стремлении $|q_1 - q_2|$ к бесконечности. Функция распределения $F_2(q_1, q_2) \to c$ при $|q_1 - q_2| \to \infty$, т. е. в системе имеет место дальнодействие. Таким образом, при возникновении в системе сверхтекучего состояния, что можно рассматривать как возникновение фазового перехода, появляется одновременно и дальнодействие, несмотря на короткодействующий характер потенциала Φ.

Гамильтониан (85) инвариантен относительно калибровочного преобразования $a_k' = e^{i\varphi}a_k$, $a_k^{*\prime} = e^{-i\varphi}a_k^+$, где φ — произвольное действительное число. Поэтому средние $\left\langle a_0/\sqrt{V}\right\rangle, \left\langle a_0^*/\sqrt{V}\right\rangle$ должны быть равными нулю. Но это противоречит нашим предположениям, что $a_0/\sqrt{V}$ и $a_0^*/\sqrt{V}$ становятся числами в термодинамическом пределе и $\frac{a_0^* a_0}{V} = \frac{N_0}{V} \neq 0$, откуда следует, что $\frac{a_0}{\sqrt{V}} = \frac{N_0}{\sqrt{V}}e^{i\alpha} \neq 0$, $\frac{a_0^*}{\sqrt{V}} = \frac{N_0}{\sqrt{V}}e^{-i\alpha} \neq 0$, α — действительное произвольное число. Противоречие может быть разрешено, если предположить, что собственные состояния гамильтониана вырождены и не инвариантны относительно калибровочных преобразований, т. е. имеет место спонтанно нарушенная симметрия.

Средние $\left\langle a_0/\sqrt{V}\right\rangle, \left\langle a_0^*/\sqrt{V}\right\rangle$, которые при спонтанно нарушенной калибровочной инвариантности отличны от нуля, называются аномальными средними или квазисредними. В современной квантовой физике системы со спонтанно нарушенной симметрией изучаются с помощью преобразований операторов вида (87) $\Psi(q) = a_0/\sqrt{V} + \theta(q)$, $\Psi^*(q) = a_0^*/\sqrt{V} + \theta^*(q)$, где $a_0/\sqrt{V}$ и $a_0^*/\sqrt{V}$ — числа, впервые введенные Н. Н. Боголюбовым еще в 1947г. при исследовании явления сверхтекучести. Для системы со спонтанно нарушенной симметрией вместо обычных средних рассматриваются квазисредние. Оказывается, что не только в системе бозе-частиц, но и в любых системах со спонтанно нарушенной симметрией проявляется дальнодействие. Изложенная выше работа Н. Н. Боголюбова предвосхитила на много лет методы изучения систем со спонтанно нарушенной симметрией. Такие системы детально изучены в разделе 9.

Как уже говорилось, для объяснения сверхтекучести Н. Н. Боголюбов сделал предположение, что операторы $a_0/\sqrt{V}$, $a_0^*/\sqrt{V}$ в термодинамическом пределе становятся c-числами. Строгому доказательству этого утверждения были посвящены работы Н. Н. Боголюбова и Жинибра. Доказательство Н. Н. Боголюбова основано на рассмотрении уравнений для двухвременных функций Грина и предположении о справедливости принципа ослабления корреляций. Было доказано, что решения уравнений для функций Грина системы с гамильтонианом (85) совпадают с решениями уравнений системы с тем же гамильтонианом, в котором операторы $a_0/\sqrt{V}$, $a_0^*/\sqrt{V}$ заменены числами. Сами эти числа определяются из условия минимума свободной энергии. Так как все средние в обеих системах совпадают, то совпадают также их свободные энергии. В работе Жинибра было показано, что удельные свободные энергии обеих систем совпадают в термодинамическом пределе.

Вопрос об оценке погрешности в спектре гамильтониана, когда пренебрегают высшими, чем вторые, степенями операторов $\theta(q)$, $\theta^*(q)$, остается до сих пор открытым.

7. Теория сверхпроводимости. Явление сверхпроводимости было открыто голландским физиком Камерлинг-Оннесом в 1911 г. Оно состоит в исчезновении сопротивления при определенных критических температурах. Вначале это были температуры, близкие к абсолютному нулю, но в последнее время показано, что у металлокерамик появляется сверхпроводимость при температурах сжижения азота. Эту сверхпроводимость называют высокотемпературной, в отличие от обычной или низкотемпературной. В обоих случаях состояние сверхпроводимости устойчиво в том смысле, что оно исчезает только после воздействия конечного возмущения.

Теоретическое объяснение явления низкотемпературной сверхпроводимости состоит в том, что сверхпроводящее состояние соответствует наименьшему собственному числу гамильтониана системы, а возбужденные состояния имеют собственные числа, отделенные конечной щелью от собственного числа сверхпроводящего состояния. В этом случае системе выгодно пребывать в сверхпроводящем состоянии, и оно будет устойчивым, ибо для того чтобы система перешла в возбужденное состояние, нужно приложить к ней возмущение с энергией порядка щели в спектре гамильтониана. При этом считается, что сверхпроводимость возникает практически при нулевых температурах.

Для объяснения высокотемпературной сверхпроводимости и определения критических температур (в том числе и для низкотемпературной сверхпроводимости) следует изучить особенности температурных функций Грина, которые определяют спектр элементарных возбуждений, и показать, что в нем имеется щель, которая исчезает при температурах, превышающих критическую.

Для объяснения низкотемпературной сверхпроводимости одновременно и независимо были предложены теория Боголюбова, основанная на гамильтониане взаимодействующих электронов и фононов (гамильтониане Фрелиха) и выдвинутого им принципа компенсации „опасных" диаграмм, и теория Бардина — Купера — Шриффера, основанная на редуцированном гамильтониане, учитывающем только взаимодействие электронов с противоположными импульсами и спинами.

Приступим к изложению теории Боголюбова. Предположим, что система взаимодействующих электронов и фононов заключена в ящике — кубе Λ с ребром длины L и объемом V. Обозначим через $b_q^*, b_q, a_{k,s}^*, a_{k,s}$ операторы рождения и уничтожения фононов с импульсами q и соответственно электронов с импульсами k и спинами s, $s = \pm 1$. Операторы $b_q, b_q^*, a_{k,s}, a_{k,s}^*$ удовлетворяют каноническим коммутационным и соответственно антикоммутационным соотношениям. Импульсы q и k принимают значения $\frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3)$, n_1, n_2, n_3 — целые числа, на гранях куба Λ заданы периодические граничные условия.

Взаимодействие данной системы электронов и фононов описывается гамильтонианом Фрелиха

$$H = \sum_{k,s}(E_k - \mu)a^+_{k,s}a_{k,s} + \sum_q \omega_q b^+_q b_q +$$

$$+ q \sum_{\substack{k,k'q,s \\ k'-k=q}} \left(\frac{\omega_q}{2V}\right)^{\frac{1}{2}} \left[a^+_{k,s}a_{k',s}b^+_q + a^+_{k',s}a_{k,s}b_q\right] = H_0 + H_1, \qquad (100)$$

где H_0 — свободный гамильтониан электронов и фононов, H_1 — гамильтониан взаимодействия, q — константа взаимодействия, $E_k = \dfrac{k^2}{2m}$ — энергия свободного электрона, m — его масса, ω_q — энергия свободного фонона, $\omega_q \sim |q|$, а μ — химический потенциал.

Перейдем к новым операторам рождения и уничтожения $\alpha^+_{k0}, \alpha_{k0}, \alpha^+_{k1}, \alpha_{k1}$ с помощью канонических преобразований

$$\begin{aligned} \alpha^+_{k0} &= u_k a^+_{k,+} - v_k a_{-k,-}, \ \alpha_{k0} = u_k a_{k,+} - v_k a^+_{-k,-}, \\ \alpha^+_{k1} &= u_k a^+_{-k,-} + v_k a_{k,+}, \ \alpha_{k1} = u_k a_{-k,-} + v_k a^+_{k,+}, \end{aligned} \qquad (101)$$

где u_k, v_k — действительные четные функции, удовлетворяющие условиям $u_k^2 + v_k^2 = 1$. Операторы $\alpha^+_{k0}, \alpha_{k0}, \alpha^+_{k1}, \alpha_{k1}$ удовлетворяют каноническим антикоммутационным соотношениям. Будем называть их операторами рождения и уничтожения квазичастиц с индексами $i = 0, 1$ и импульсами k. Операторы $a^+_{k,s}, a_{k,s}$ выражаются через $\alpha^+_{ki}, \alpha_{ki}$ согласно формулам

$$\begin{aligned} a^+_{k,+} &= u_k\alpha^+_{k0} + v_k\alpha_{k1}, \ a_{k,+} = u_k\alpha_{k0} + v_k\alpha^+_{k1}, \\ a^+_{k,-} &= u_k\alpha^+_{-k1} - v_k\alpha_{-k0}, \ a_{k,-} = u_k\alpha_{-k1} - v_k\alpha^+_{-k0}. \end{aligned} \qquad (102)$$

Подставляя (102) в (100), получаем гамильтониан взаимодействующих квазичастиц и фононов

$$H = U + H_0 + H_1, \qquad (103)$$

где

$$U = \sum_k 2(E_k - \mu)v_k^2, \ \ H_0 = \sum_k \varepsilon_k\left(\alpha^+_{k0}\alpha_{k0} + \alpha^+_{k1}\alpha_{k1}\right) + \sum_q \omega_q b^+_q b_q,$$

$$\varepsilon_k = (E_k - \mu)\left(u_k^2 - v_k^2\right), \ H_1 = H_1 + H_2 + H_3,$$

$$H_1 = \sum_{\substack{k,k',q \\ k'-k=q}} q\left(\frac{\omega_q}{2V}\right)^{\frac{1}{2}} \Big[\left(u_k v_{k'} + u_{k'}v_k\right)\left(\alpha^+_{k0}\alpha^+_{k'1} + \alpha_{k1}\alpha_{k'0}\right)b^+_q +$$

$$+ \left(u_k v_{k'} + u_{k'}v_k\right)\left(\alpha^+_{k'0}\alpha^+_{k1} + \alpha_{k'1}\alpha_{k0}\right)b_q\Big],$$

$$H_2 = \sum_{\substack{k,k',q\\ k'-k=q}} q\left(\frac{\omega_q}{2V}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(u_k u_{k'} - v_k v_{k'})\left(\alpha^*_{k0}\alpha_{k'0} + \alpha^*_{k'1}\alpha_{k1}\right)b^*_q + \right.$$

$$+ (u_k u_{k'} - v_k v_{k'})\left(\alpha^*_{k'0}\alpha_{k0} + \alpha^*_{k1}\alpha_{k'1}\right)b_q$$

$$H_3 = 2\sum_k (E_k - \mu)u_k v_k\left(\alpha^*_{k0}\alpha^*_{k1} + \alpha_{k1}\alpha_{k0}\right).$$

Отметим, что слагаемые H_1 и H_3 не сохраняют число квазичастиц, ибо содержат только произведения операторов рождения $\alpha^*_{k0}\alpha^*_{k'1}$ или уничтожения $\alpha_{k1}\alpha_{k0}$. Гамильтониан (100) сохраняет число электронов, ибо он содержит только произведения операторов $a^*_{k,s}a_{k',s}$. Обозначим через Ψ_0 состояние вакуума для квазичастиц $\alpha_{k0}\Psi_0 = 0$, $\alpha_{k1}\Psi_0 = 0$, а через $\alpha^*_{k0}\Psi_0$, $\alpha^*_{k1}\Psi_0$ — одночастичные возбужденные состояния. Состояния вакуума можно определить в явном виде. А именно: состояние

$$\Psi_0 = \prod_k \left(u_k + v_k a^*_{k,+}a^*_{-k,-}\right)|0\rangle,\ u_k^2 + v_k^2 = 1, \tag{104}$$

где $|0\rangle$ — свободный вакуум для электронов $a_{k,+}|0\rangle = 0$, $a_{k,-}|0\rangle = 0$ и фононов $b_q|0\rangle = 0$, удовлетворяет уравнениям $\alpha_{k0}\Psi_0 = \alpha_{k1}\Psi_0 = 0$ и нормировано $(\Psi_0, \Psi_0) = 1$. Состояние Ψ_0 состоит (с определенной вероятностью) из произвольного числа пар электронов с противоположными импульсами и спинами. Легко убедиться, что в одночастичных возбуждениях пара с импульсом k разорвана. Будем называть состояние Ψ_0 основным, а $\alpha^*_{k0}\Psi_0, \alpha^*_{k1}\Psi_0$ — его одночастичными возбуждениями.

Определим энергию основного и возбужденных состояний по теории возмущений, применяя диаграммную технику. Напомним основы диаграммной техники. Сопоставим α^*_{k0} линию $\bullet\!\xrightarrow{k0}$, α_{k0} — $\bullet\!\xleftarrow{k0}$, α^*_{k1} — $\bullet\!\xrightarrow{k1}$, α_{k1} — $\bullet\!\xleftarrow{k1}$. Операторам b^*_q, b_q сопоставим волнистые линии и . Числовым факторам в H_1, H_2, H_3 сопоставим вершины с индексами 1, 2, 3. В качестве примера укажем, что первые слагаемые в H_1, H_2 и H_3 изображаются графически диаграммами первого порядка (порядок равен числу вершин) (рис. 1).

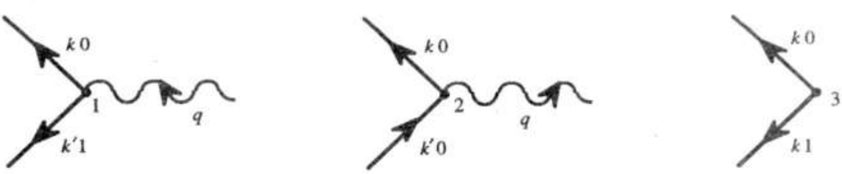


Рис. 1

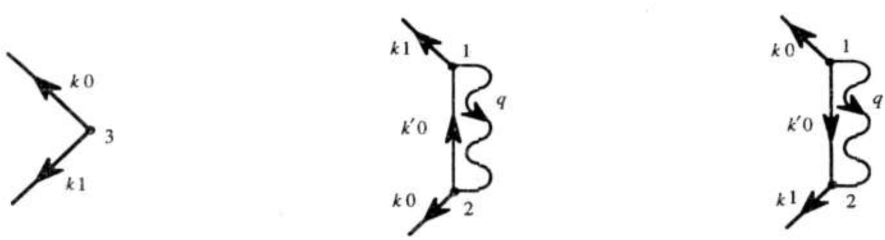
Произвольные диаграммы получаются из этих простейших соединением линий с индексами 0 и 1 и волнистых линий между собой так, чтобы направление стрелок совпадало. Внутренним линиям, соединяющим вершины, соответствуют антикоммутаторы операторов рождения и уничтожения квазичастиц, а волнистым линиям — коммутаторы операторов уничтожения и рождения фононов. По импульсам внутренних линий ведется суммирование (по всем (n_1, n_2, n_3)), которое при $V \to \infty$ переходит в интегрирование. Энергия основного состояния по теории возмущений вычисляется согласно формуле

$$E = E^0 + E^{(1)} + E^{(2)} + \ldots + E^{(i)} + \ldots =$$
$$= E^0 + \left(\Psi_0, H_I \Psi_0\right)_c + \left(\Psi_0, H_I \frac{1}{E^0 - H_0} H_I \Psi_0\right)_c +$$
$$+ \left(\Psi_0, H_I \frac{1}{E^0 - H_0} H_I \frac{1}{E^0 - H_0} H_I \Psi_0\right)_c + \ldots . \tag{105}$$

Энергия возбужденных состояний определяется той же формулой (105), только следует Ψ_0 заменить на Ψ_k. Здесь $H_0\Psi_0 = E^0\Psi_0$, $(\cdot, \cdot)$ — скалярное произведение в гильбертовом пространстве состояний, $E^{(i)}$ — энергия в i-м порядке теории возмущений. Индекс „c" означает, что следует учитывать вклады только от связных диаграмм. Кроме того, следует учитывать в них энергетические знаменатели от операторов $\dfrac{1}{E^0 - H_0}$. Эти энергетические знаменатели имеют вид $(E^0 = 0)$

$$E_n = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon(k_i), \quad \varepsilon(k) = \left(E_k - \mu\right)\left(u_k^2 - v_k^2\right), \tag{106}$$

и в общем случае они не опасны, ибо функция $\left(\sum_{i=n}^{n} \varepsilon(k_i)\right)^{-1}$ интегрируема в шаре $\sum_{i=n}^{n} k_i^2 < C$. Энергетические знаменатели становятся опасными, если часть импульсов k_i совпадает, а знаменатель берется в степени высшей, чем первая. Так, если $k_1 = k_2$, $E_2 = 2\varepsilon(k_1)$, то интеграл $\int\limits_{k_1^2 < c} \dfrac{dk_1}{\left[\varepsilon(k_1)\right]^2}$ расходится. Такие „опасные" знаменатели появляются, как это следует из (105), если степени гамильтониана взаимодействия, действуя на основное состояние Ψ_0, порождают состояние с двумя квазичастицами с одинаковыми импульсами. Легко видеть, что такое состояние содержит выражения $H_3\Psi_0$ и $H_2 \dfrac{1}{E^0 - H_0} H_1 \Psi_0$, и оно изображается диаграммами, приведенными на рис. 2*а* и 2*б* соответственно.



а *б*

Рис. 2

Если состояния, изображенные на рис. 2, взаимно уничтожаются, то расходимости не возникнут включительно до третьего порядка по теории возмущений.

Действительно, если учесть, что $E^0 = 0, E^{(1)} = 0$, то для энергии (включительно до третьего порядка по теории возмущений) из (105) получим выражение

$$E = \left(\Psi_0, H_\mathrm{I}\frac{1}{E^0 - H_0}\left(H_\mathrm{I} + H_\mathrm{I}\frac{1}{E^0 - H_0}H_\mathrm{I}\right)\Psi_0\right)_c. \tag{107}$$

Если в $\left(H_\mathrm{I} + H_\mathrm{I}\frac{1}{E^0 - H_0}H_\mathrm{I}\right)\Psi_0$ нет состояний с двумя квазичастицами с одинаковыми (или противоположными) импульсами, то опасные знаменатели в (107) не появятся и энергия E будет свободной от расходимостей. Диаграммы, изображенные на рис. 2, называются „опасными", а требование взаимного уничтожения состояний, которые им соответствуют, — принципом компенсации „опасных" диаграмм. Приравнивая к нулю суммарный коэффициент при $\alpha^*_{k0}\alpha^*_{k1}\Psi_0$ в $\left(H_\mathrm{I} + H_\mathrm{I}\frac{1}{E^0 - H_0}H_\mathrm{I}\right)\Psi_0$, получаем уравнения компенсации

$$(E_k - \mu)u_k v_k - \sum_{k'}\frac{g^2}{2V}\frac{\omega(k-k')}{\omega(k-k') + \varepsilon(k') + \varepsilon(k)}u_k v_k\left(u^2_{k'} - v^2_{k'}\right) -$$
$$- \sum_{k'}\frac{g^2}{2V}\frac{\omega(k-k')}{\omega(k-k') + \varepsilon(k') + \varepsilon(k)}u_{k'} v_{k'}\left(u^2_{k} - v^2_{k}\right) = 0, \tag{108}$$

которые совместно с условиями каноничности $u_k^2 + v_k^2 = 1$ являются уравнениями для определения u_k и v_k.

После ряда преобразований уравнения (108) приводятся к виду

$$u_k = \left\{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi(k)}{\sqrt{c^2(k) + \xi^2(k)}}\right)\right\}^{\frac{1}{2}}, \; v_k = \left\{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi(k)}{\sqrt{c^2(k) + \xi^2(k)}}\right)\right\}^{\frac{1}{2}}, \tag{109}$$

где $\xi(k)$ — известная функция, а $c(k)$ удовлетворяет нелинейному уравнению

$$c(k) = \sum_{k'}\frac{g^2}{2V}\frac{\omega(k-k')}{\omega(k-k') + \varepsilon(k') + \varepsilon(k)}\frac{1}{2}\frac{c(k')}{\sqrt{c^2(k') + \xi^2(k')}}. \tag{110}$$

Функция $c(k)$ называется щелью, а уравнение (110) — уравнением для щели. Доказывается, что уравнение (110) имеет тривиальное нулевое решение, а также решение, отличное от нуля и неаналитически зависящее от константы взаимодействия $c(k) = e^{-1/Wg^2}$. Нулевое решение соответствует нормальному основному состоянию, а ненулевое — сверхпроводящему. Если определить согласно (107) энергию основного нормального и сверхпроводящего состояний, то окажется, что энергия сверхпроводящего состояния меньше энергии нормального состояния и отделена от него щелью, неаналитически зависящей от g^2. Поэтому системе энергетически выгодно быть в сверхпроводящем состоянии. Подставляя в формулу (105) одночастичные возбужденные состояния Ψ_{k0} или Ψ_{k1}, получаем энергию одночастичных возбуждений $E_e(k)$:

$$E_e(k) = \sqrt{(E_k - \mu)^2 + c^2(k)}, \tag{111}$$

откуда следует, что энергия одночастичных возбуждений отделена щелью $c(k)$

от энергии нормальных возбуждений $E_c(k) = E(k) - \mu$. Это свидетельствует об устойчивости основного сверхпроводящего состояния.

Подводя итог, сформулирием основные положения метода компенсации „опасных" диаграмм.

1. Вычисляется по теории возмущений энергия основного состояния, которое содержит с определенной вероятностью произвольное число пар электронов с противоположными импульсами и спинами. Вычисляется также энергия одночастичных возбуждений основного состояния. Основное состояние не является вакуумом для операторов рождения и уничтожения электронов.

2. Над операторами рождения и уничтожения электронов совершается каноническое преобразование и вводятся операторы рождения и уничтожения квазичастиц, для которых это основное состояние является вакуумом, и каноническое преобразование позволяет проводить вычисления аналогичные случаю обычного вакуума и обычных операторов рождения и уничтожения. Параметры канонического преобразования остаются неопределенными.

3. Основное состояние в термодинамическом пределе трансляционно-инвариантно и не принадлежит обычному пространству состояний Фока. Оно обладает возбужденными состояниями, когда пары частиц имеют одинаковые или противоположные импульсы, эти состояния в термодинамическом пределе также не принадлежат обычному пространству состояний Фока. Прямые вычисления показывают, что из-за таких возбужденных состояний возникают „опасные" знаменатели и расходимости. Эти состояния графически изображаются „опасными" диаграммами.

4. Параметры канонического преобразования определяются из условия взаимной компенсации вкладов „опасных" диаграмм. Уравнение компенсации приводит к нелинейному уравнению для щели.

5. Имеются два основных состояния: нормальное и сверхпроводящее, энергия сверхпроводящего состояния меньше энергии нормального, поэтому оно энергетически выгоднее. Энергия возбужденных состояний отделена щелью от энергии основного, сверхпроводящего, поэтому последнее устойчиво.

8. Метод аппроксимирующего гамильтониана. При исследовании явления сверхпроводимости Н. Н. Боголюбовым был предложен метод аппроксимирующего гамильтониана и обоснован для случая нулевых температур. С помощью метода аппроксимирующего гамильтониана им была точно решена модель сверхпроводимости Бардина — Купера — Шриффера при нулевой температуре. Модель задается гамильтонианом взаимодействующих электронов с противоположными импульсами и спинами вида

$$H = \sum_{k,s} (E_k - \mu) a^*_{k,s} a_{k,s} + \frac{1}{V} \sum_{k,k'} \lambda(k)\lambda(k') a^*_{k,+} a^*_{-k,-} a_{k',-} a_{k',+} +$$

$$+ \nu \sum_k \left(\lambda(k) a^*_{k,+} a^*_{-k,-} + \lambda(k) a_{-k,-} a_{k,+} \right) = H_0 + H_1. \tag{112}$$

Предполагается, что электроны с противоположными импульсами и спинами притягиваются. Неявно предполагается, что притяжение электронов возникает в результате их взаимодействия с фононами решетки. Поэтому гамильтониан (1) часто называют редуцированным. В гамильтониан введены источники $\nu \sum_{k'} \left(\lambda(k) a^*_{k,+} a^*_{-k,-} + \lambda(k) a_{-k,-} a_{k,+} \right)$. Их нужно учитывать при промежуточных вычислениях, а в конечных выражениях, после перехода к термодинамическому пределу, они устремляются к нулю.

Изложим метод аппроксимирующего гамильтониана на примере редуцированного гамильтониана (112) теории сверхпроводимости. Тождественно преобразуем гамильтониан (112) к виду

$$H = \sum_{k,s}(E_k - \mu)a^*_{k,s}a_{k,s} + \frac{1}{V}\sum_k \lambda(k)\left(a^*_{k,+}a^*_{-k,-} - \sigma V\right)\sum_k \lambda(k)\left(a_{-k,-}a_{k,+} -\right.$$

$$\left.- \sigma^* V\right) + \left(\sigma^* + \nu\right)\sum_k \lambda(k)a^*_{k,+}a^*_{-k,-} + (\sigma + \nu)\sum_k \lambda(k)\left(a_{-k,-}a_{k,+} +\right.$$

$$+ V\left|\sigma^2\right|\left(\sum_k \lambda(k)\right)^2 = H_{\text{appr}} + \frac{1}{V}\sum_k \lambda(k)\left(a^*_{k,+}a^*_{-k,-} - \sigma V\right) \times$$

$$\times \sum_k \lambda(k)\left(a_{-k,-}a_{k,+} - \sigma^* V\right). \qquad (113)$$

Аппроксимирующий гамильтониан H_{appr} авляется квадратичной формой операторов рождения и уничтожения

$$H_{\text{appr}} = \sum_k (E_k - \mu)a^*_{k,s}a_{k,s} + (\sigma + \nu)\sum_k \lambda(k)a^*_{k,+}a^*_{-k,-} +$$

$$+ \left(\sigma^* + \nu\right)\sum_k \lambda(k)a_{-k,-}a_{k,+} + V|\sigma|^2\left(\sum_k \lambda(k)\right)^2, \qquad (114)$$

в то время как редуцированный гамильтониан (112) — полином четвертой степени от операторов рождения и уничтожения. Редуцированный модельный гамильтониан (112) без источников $\nu = 0$ сохраняет число частиц и коммутирует с оператором числа частиц $N = \sum_{k,s} a^*_{k,s}a_{k,s}$. Аппроксимирующий гамильтониан (114) не сохраняет числа частиц и не коммутирует с оператором числа частиц N. На функцию $\lambda(k)$ налагаются определенные ограничения, обеспечивающие самосопряженность H и H_{appr}.

В основе метода аппроксимирующего гамильтониана лежит доказательство термодинамической эквивалентности модельного (112) и аппроксимирующего (114) гамильтонианов. Под термодинамической эквивалентностью понимается совпадение удельных свободных энергий и функций Грина для модельного и аппроксимирующего гамильтонианов в термодинамическом пределе $V \to \infty$ и при $\nu \to \infty$.

Объясним, почему в модельный гамильтониан вводятся источники. Так как модельный гамильтониан при $\nu = 0$ (112) коммутирует с N, а аппроксимирующий гамильтониан с N не коммутирует и при $\nu = 0$, то их термодинамическая эквивалентность возможна лишь при условии, что основное и возбужденные состояния модельного гамильтониана вырождены по числу частиц. Вводя источники в модельный гамильтониан (112), мы снимаем это вырождение, при $\nu \neq 0$ оба гамильтониана не коммутируют с оператором числа частиц N. Предполагается, что модельный и аппроксимирующий гамильтонианы устойчивы относительно возмущений источниками.

В аппроксимирующий гамильтониан входит неопределенный параметр σ. Он определяется из условия минимума удельной свободной энергии. Основной результат метода аппроксимирующего гамильтониана выражается следующей теоремой.

Теорема. *Удельные свободные энергии и функции Грина модельного и аппроксимирующего гамильтониана совпадают в термодинамическом пределе, т. е. гамильтонианы* (112) *и* (114) *термодинамически эквивалентны.*

После совершения термодинамического предела в функциях Грина устремляем источники к нулю, $\nu \to 0$. Аппроксимирующий гамильтониан квадратичен, как уже говорилось, по операторам рождения и уничтожения, и его можно диагонализировать с помощью канонических $u-v$-преобразований. В результате H_{appr} принимает вид

$$H_{\text{appr}} = \sum_k \sqrt{\lambda^2(k)\left(\nu+\sigma^*\right)(\nu+\sigma)+\left(E_k-\mu\right)^2}\left(\alpha_{k0}^*\alpha_{ko}+\alpha_{k1}^*\alpha_{k1}\right)+$$

$$+\frac{1}{2}V\left\{\sigma^*\sigma-\frac{1}{V}\sum_k\left[\sqrt{\lambda^2(k)\left(\nu+\sigma^*\right)(\nu+\sigma)+\left(E_k-\mu\right)^2}-\left(E_k-\mu\right)\right]\right\}, \quad (115)$$

где $\alpha_{k0}^*, \alpha_{k0}, \alpha_{k1}^*, \alpha_{k1}$ — операторы рождения и уничтожения квазичастиц, которые вводятся, как и в разделе 7, с помощью канонических преобразований. Основным состоянием для H_{appr} служит вакуум Ψ_0 для квазичастиц, который имеет тот же вид, что и вакуум модели Фрелиха (см. раздел 7). Энергия одночастичных возбуждений вакуума $\overset{*}{\alpha}_{k0}\Psi_0, \alpha_{k1}\Psi_0$ отделена от энергии основного состояния щелью $\sqrt{\lambda^2(k)\left(\nu+\sigma^*\right)(\nu+\sigma)+\left(E_k-\mu\right)^2}$. Все функции Грина модельного гамильтониана вычисляются явно через свободные двухчастичные функции Грина аппроксимирующего гамильтониана. Таким образом, методом аппроксимирующего гамильтониана удается точно определить спектр основного и возбужденного гамильтониана и явно вычислить функции Грина.

Как упоминалось выше, метод аппроксимирующего гамильтониана был впервые предложен и обоснован Н. Н. Боголюбовым для модельного гамильтониана теории сверхпроводимости Бардина — Купера — Шриффера для случая нулевой температуры. Метод аппроксимирующего гамильтониана был обобщен на произвольные температуры и широкий класс модельных гамильтонианов, описывающих важные физические процессы, Н. Н. Боголюбовым (младшим).

В рамках метода было также предложено рассматривать модельный гамильтониан (112) непосредственно при бесконечном объеме. С помощью алгебраических методов было показано, что модельный гамильтониан (112) сводится к аппроксимирующему, если представление канонических антикоммутационных соотношений является неприводимым. При исследовании уравнений для функций Грина непосредственно при бесконечном объеме в специфичном пространстве трансляционно-инвариантных функций было показано, что они имеют два решения — свободные функции Грина и функции Грина, определяемые по аппроксимирующему гамильтониану.

В методе аппроксимирующего гамильтониана определенные операторные выражения полагаются равными c-числам, которые определяются самосогласованным образом из условия минимума свободной энергии системы с аппроксимирующим гамильтонианом. Можно сказать, что сущность метода аппроксимирующего гамильтониана состоит в том, что степень гамильтониана взаимодействия, рассматриваемого как полином от операторов рождения и уничтожения, понижается путем замены определенных операторных выражений на c-числа. Был установлен общий критерий, когда у модельных гамильтонианов возможно такое понижение степени гамильтониана взаимодействия. Он состоит в том, что в гамильтониане взаимодействия, кроме обычного закона сохранения импульса, должны содержаться добавочные законы сохранения. Установлено, какие операторные выражения должны при этом заменяться функциями. Все известные модельные системы удовлетворяют этому критерию.

Доказательство термодинамической эквивалентности модельного (112) и аппроксимирующего (114) гамильтонианов очень сложно, хотя сама идея очень проста. Она состоит в том, что операторные выражения

$$\sigma(V) = \frac{1}{V}\sum_k \lambda(k) a^*_{k,+} a^*_{-k,-}, \ \sigma^*(V) = \frac{1}{V}\sum_k \lambda(k) a_{-k,-} a_{k,+} \tag{116}$$

коммутируют со всеми операторами $a^*_{k,s}$ и $a_{k,s}$ в термодинамическом пределе $V \to \infty$. Если операторы $a^*_{k,s}, a_{k,s}$ задают неприводимое представление антикоммутационных соотношений

$$\left\{a_{k,s} a^*_{k',s'}\right\} = \delta_{k,k'}\delta_{s,s'}, \left\{a_{k,s} a_{k',s'}\right\} = \left\{a^*_{k,s} a^*_{k',s'}\right\} = 0, \tag{117}$$

то операторные выражения $\sigma(V)$ и $\sigma^*(V)$ становятся числами σ и σ^* в термодинамическом пределе. Это приводит к тому, что уравнения Гейзенберга становятся линейными. Так, уравнения Гейзенберга для операторов $a_{k,s}(t)$, $a^*_{k,s}(t)$ для модельной системы с гамильтонианом (112) имеют вид

$$\begin{aligned} i\frac{\partial a_{k,s}(t)}{\partial t} &= (E_k - \mu) a_{k,s}(t) + \lambda(k) a_{k,s}(t) \frac{1}{V}\sum_k \lambda(k) a_{k,+}(t) a_{-k,-}(t), \\ -i\frac{\partial a^*_{k,s}(t)}{\partial t} &= (E_k - \mu) a^*_{k,s}(t) + \lambda(k) a^*_{k,s}(t) \frac{1}{V}\sum_k \lambda(k) a_{-k,-}(t) a_{k,+}(t) \end{aligned} \tag{118}$$

и содержат полином третьей степени по операторам $a_{k,s}(t), a^*_{k,s}(t)$ в правой части. В термодинамическом пределе операторы (116) можно заменить числами σ и σ^*, и в результате уравнения (117) примут вид

$$\begin{aligned} i\frac{\partial a(k,s,t)}{\partial t} &= (E_k - \mu) a(k,s,t) + \lambda(k) a(k,s,t)\sigma, \\ i\frac{\partial a^*(k,s,t)}{\partial t} &= (E_k - \mu) a^*(k,s,t) + \lambda(k) a^*(k,s,t)\sigma^*. \end{aligned} \tag{119}$$

Числа σ и σ^* определяются из условия минимума удельной свободной энергии системы с аппроксимирующим гамильтонианом (114). Легко проверить, что уравнения (119) совпадают с уравнениями Гейзенберга системы с аппроксимирующим гамильтонианом (114). В отличие от уравнений (118) уравнения (119) линейны. Таким образом, методом аппроксимирующего гамильтониана операторные уравнения Гейзенберга (118) линеаризуются. Нелинейность уравнений (118) сохраняется в том смысле, что числа σ и σ^* удовлетворяют нелинейным уравнениям, которые следуют из условия минимума удельной свободной энергии. Эти простые соображения были впервые высказаны Н. Н. Боголюбовым в 1947 г. еще при создании микроскопической теории сверхтекучести, которую мы изложили выше. Естественно, что все доказательство сводится к доказательству того, что операторы $\sigma(V)$ и $\sigma^*(V)$ (116) в термодинамическом пределе становятся числами σ и σ^*. Прямого доказательства неприводимости представления антикоммутационных соотношений (117) до сих пор не существует. Поэтому доказательство термодинамической эквивалентности систем с модельным (112) и аппроксимирующим гамильтонианами (118) сводится к установлению справедливости утверждения, что операторы $\sigma(V)$ и $\sigma^*(V)$ становятся числами σ и σ^* в термодинамическом пределе и проводится с помощью уравнений для функций Грина и изучения удельных свободных энергий систем. Эти доказательства в основном получены в работах Н. Н. Боголюбова (младшего).

9. Квазисредние в статистической механике и теорема об особенностях типа $\frac{1}{q^2}$ в теории сверхтекучести бозе- и ферми-систем. Исследуя явление сверхтекучести и сверхпроводимости, Н. Н. Боголюбов обнаружил существование определенных параметров порядка, для сверхтекучести — это $\left\langle \frac{a_0}{\sqrt{V}} \right\rangle = \left\langle \frac{a_0^*}{\sqrt{V}} \right\rangle$ (бозе-системы), для сверхпроводимости — $\langle a(p,+)a(-p,-)\rangle = \left\langle a^*(p,+)a^*(-p,-)\right\rangle$ (ферми-системы). Если эти параметры порядка отличны от нуля, то имеется сверхтекучесть и соответственно сверхпроводимость. Та температура, при которой исчезают параметры порядка, называется критической. В критической точке происходит фазовый переход, и система частиц переходит из нормального состояния в сверхтекучее или соответственно в сверхпроводящее.

Эти параметры порядка выражаются так называемыми аномальными средними. Чтобы объяснить этот термин, введем общее понятие средних от наблюдаемых. Приведем вначале определения для бозе-систем. Рассмотрим совокупность операторов уничтожения $a(p)$ и рождения $a^*(p)$, которые удовлетворяют каноническим коммутационным соотношениям

$$\left[a_p, a_{p'}^*\right] = \delta_{p,p'}, \quad \left[a_p, a_{p'}\right] = \left[a_p^*, a_{p'}^*\right] = 0. \tag{120}$$

Образуем из них произвольный полином $A(a, a^*)$ и вычислим статистическое среднее по гамильтониану

$$H_\Lambda = \sum_p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right) a_p^* a_p + \frac{1}{2V} \sum_{p_1, p_2, p_3, p_4} \delta_{p_1+p_2,\, p_3+p_4} \Phi(p_1 - p_3)\, a_{p_1}^* a_{p_2}^* a_{p_3} a_{p_4} \tag{121}$$

при обратной температуре β, $V = |\Lambda|$

$$\langle A\rangle_{H_\Lambda} = \frac{\operatorname{Tr} A e^{-\beta H_\Lambda}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H_\Lambda}}. \tag{122}$$

Выполнив в (122) термодинамический предел (в рамках большого канонического ансамбля), получим

$$\langle A\rangle_H = \lim_{V\to\infty} \frac{\operatorname{Tr} A e^{-\beta H_\Lambda}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H_\Lambda}} = \langle A\rangle \tag{123}$$

— среднее от полинома A. Если A пробегают все возможные полиномы и, в определенном смысле, их пределы, которые будем называть алгеброй наблюдаемых, то средние $\langle A\rangle_H$ определяют функционал на этой алгебре. Этот функционал называется состоянием и обозначается $\omega(A)$. Зная функционал-состояние $\omega(A)$, можно вычислить все средние от наблюдаемых.

Не все средние от полиномов $A(a, a^*)$ отличны от нуля. Дело в том, что существуют определенные правила отбора, вытекающие из законов сохранения. Так, если гамильтониан H коммутирует с оператором числа частиц

$$N = \int a^*(p)a(p)dp, \quad [H, N] = 0,$$

то средние $\left\langle \ldots a^* \ldots a \ldots \right\rangle$ отличны от нуля только тогда, когда число операторов рождения равно числу операторов уничтожения и при условии, что собственные состояния гамильтониана не вырождены относительно оператора числа частиц. Так как в сверхтекучести и сверхпроводимости отличны от нуля средние $\left\langle \frac{a_0}{\sqrt{V}} \right\rangle = \left\langle \frac{a_0^*}{\sqrt{V}} \right\rangle$ и, соответственно, $\left\langle a(p,+)a(-p,-) \right\rangle = \left\langle a^*(p,+)a^*(-p,-) \right\rangle$, то это означает, что собственные состояния гамильтониана вырождены относительно оператора числа частиц N. Средние, в которых число операторов рождения отлично от числа операторов уничтожения, называются аномальными.

Существуют и другие правила отбора, например, связанные с законом сохранения импульса, когда $[H, P] = 0$, где $P = \int pa^*(p)a(p)dp$ — оператор импульса. Согласно этим правилам отбора средние вида $\left\langle a^*(p)a(p') \right\rangle$ отличны от нуля только при $p = p'$, если собственные состояния гамильтониана не вырождены относительно оператора импульса. Если же состояния вырождены и $\left\langle a^*(p)a(p') \right\rangle$ отличны от нуля и при $p \neq p'$, то такие средние тоже называются аномальными.

В связи с существованием аномальных средних Н. Н. Боголюбовым было предложено фундаментальное понятие квазисредних. Введем его на примере явления сверхтекучести для гамильтониана (120). Как отмечалось выше, наличие аномальных средних $\left\langle \frac{a_0}{\sqrt{V}} \right\rangle = \left\langle \frac{a_0^*}{\sqrt{V}} \right\rangle$ указывает на вырожденность собственных состояний гамильтониана (120) относительно оператора числа частиц. Введя в гамильтониан (120) добавку-источник $\nu\sqrt{V}\left(a_0 + a_0^*\right)$, которая явно снимает вырождение по оператору числа частиц, получим гамильтониан

$$H_\nu = H_\Lambda - \nu\sqrt{V}\left(a_0 + a_0^*\right). \tag{124}$$

Определим по H_ν состояние $\omega(A) = \langle A \rangle_{H_\nu}$ и устремим параметр ν к нулю, $\nu \to 0$ (после выполнения термодинамического предела). Если все средние $\omega(A)$ при этом получают бесконечно малые вместе с ν приращения, то это означает, что рассматриваемое состояние статистического равновесия не вырождено. Если же некоторые средние получают при $\nu \to 0$ конечное приращение, то состояние вырождено. В этом случае вместо обычных средних $\langle A \rangle_H$ вводятся квазисредние

$$\langle A \rangle = \lim_{\nu \to 0} \langle A \rangle_{H_\nu}, \tag{125}$$

для которых обычные правила отбора несправедливы.

В случае сверхпроводимости в гамильтониан Бардина — Купера — Шриффера вводится источник $\nu \sum_k \lambda(k)(a_{k,+}^* a_{-k,-}^* + a_{-k,-}a_{k,+})$, и по гамильтониану H_ν определяются согласно (125) квазисредние. В общем случае источники вводятся, чтобы снять вырождение. Если бесконечно малые источники дают бесконечно малый вклад в средние, то это означает, что соответствующего вырождения нет, и не следует вводить источников в гамильтониан. В противном случае вырождение есть, и его снимают источниками. Обычные средние получаются из квазисредних усреднением по параметрам, которые характеризуют вырождение.

Квазисредние могут быть получены из обычных средних с помощью принципа ослабления корреляций, который был четко сформулирован Н. Н. Боголюбовым. Это было сделано впервые при выводе уравнений Больцмана из цепочки уравнений для функций распределения, при исследовании модельного гамильтониана теории сверхпроводимости. Наиболее полно этот принцип был сформулирован в работе „Квазисредние в задачах статистической механики". Приведем его формулировку. Для этого рассмотрим средние (квазисредние) вида

$$F(t_1, x_1, \dots, t_n, x_n) = \left\langle \dots \Psi^*(t_i, x_i) \dots \Psi(t_j, x_j) \dots \right\rangle, \tag{126}$$

где число операторов рождения Ψ^* не обязательно равно числу операторов уничтожения Ψ. Зафиксируем времена и разобъем аргументы $(t_1, x_1), \dots, (t_n, x_n)$ на несколько групп $(\dots, t_\alpha, x_\alpha, \dots), \dots, (\dots, t_\beta, x_\beta, \dots)$. Предположим, что расстояния между всеми группами $|x_\alpha - x_\beta|$ стремятся к бесконечности. Тогда согласно принципу ослабления корреляций среднее (126) стремится к произведению средних от совокупностей операторов с аргументами $(\dots, t_\alpha, x_\alpha, \dots)$, $\dots, (\dots, t_\beta, x_\beta, \dots)$

$$\lim_{|x_\alpha - x_\beta| \to \infty} F(t_1, x_1, \dots, t_n, x_n) = F(\dots, t_\alpha, x_\alpha, \dots) \dots F(\dots, t_\beta, x_\beta, \dots).$$

Для равновесных состояний при малых плотностях и короткодействующего потенциала справедливость этого принципа вытекает из работ Жинибра. В общем случае он не доказан. Н. Н. Боголюбов сформулировал его не только для обычных средних, но и для квазисредних, т. е. и для аномальных средних. Он выполняется для ряда важных моделей, в том числе моделей сверхтекучести и сверхпроводимости.

Квазисредние играют важную роль при доказательстве теоремы „об особенностях типа $\frac{1}{q^2}$", доказанной Н. Н. Боголюбовым, к изложению которой мы переходим.

Рассмотрим средние от операторов в представлении Гейзенберга

$$\begin{gathered}
\langle\langle A(t), B(\tau)\rangle\rangle^{ret} = -i\theta(t-\tau)\langle A(t)B(\tau) - B(\tau)A(t)\rangle, \\
\langle\langle A(t), B(\tau)\rangle\rangle^{adv} = i\theta(\tau-t)\langle A(t)B(\tau) - B(\tau)A(t)\rangle, \\
\langle\langle A(t), B(\tau)\rangle\rangle^{c} = -i\left\langle T\left(A(t)B(\tau)\right)\right\rangle = \\
= -i\left\{\theta(t-\tau)\langle A(t)B(\tau)\rangle + \theta(\tau-t)\langle B(\tau)A(t)\rangle\right\}.
\end{gathered} \tag{127}$$

Такие средние называются функциями Грина — запаздывающей, опережающей и причинной соответственно. Можно показать, что преобразования Фурье запаздывающей и опережающей функций Грина являются различными граничными значениями на действительной оси одной и той же функции, голоморфной в комплексной E-плоскости с разрезами вдоль действительной оси

$$\langle\langle A, B\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J_{A,B}(\omega)\,\frac{e^{\beta\omega}-1}{E-\omega}\,d\omega. \tag{128}$$

Здесь функция $J_{A,B}(\omega)$ обладает свойствами

$$J_{A^+,A}(\omega) \geq 0,\ J^*_{A,B}(\omega) = J_{B^*,A^*}(\omega), \tag{129}$$

кроме того, она является билинейной формой операторов $A = A(0)$, $B = B(0)$. Отсюда вытекает, что и билинейная форма

$$-\langle A, B\rangle_{E=0} = Z(A, B) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} J_{A,B}(\omega)\frac{e^{\beta\omega}-1}{\omega}\,d\omega$$

имеет аналогичные свойства

$$Z\left(A, A^*\right) \geq 0,\ Z^*_*(A, B) = Z\left(B^*, A^*\right). \tag{130}$$

Поэтому билинейная форма $Z(A, B)$ имеет все свойства скалярного произведения в линейном пространстве, элементами которого являются операторы A, B, ..., действующие в пространстве состояний Фока. Это скалярное произведение можно ввести согласно формуле

$$(A, B) = Z\left(A^*, B\right). \tag{131}$$

Так же, как это доказывается для скалярного произведения в гильбертовом пространстве, устанавливается неравенство

$$\left|(A, B)\right|^2 \leq \left(A, A^*\right)\left(B^*, B\right). \tag{132}$$

Отсюда вытекает, что $(A, B) = 0$, если $(A, A) = 0$ или $(B, B) = 0$. Если ввести фактор-пространство по совокупности тех операторов, что $(A, A) = 0$, то получим обычное гильбертово пространство, элементами которого являются линейные операторы, а скалярное произведение задано согласно (131).

Рассмотрим бозе-систему с выделенным конденсатом, задаваемую гамильтонианом

$$H_\Lambda = \int_\Lambda \Psi^*(x)\left(-\frac{\Delta}{2m}\right)\Psi(x)dx - \mu\int_\Lambda \Psi^*(x)\Psi(x)dx + \frac{1}{2}\int_\Lambda \Psi^*(x_1)\Psi^*(x_2)\Phi(x_1 - x_2) \times$$
$$\times\ \Psi(x_2)\Psi(x_1)dx_1dx_2.$$

В системе с выделенным конденсатом отличны от нуля аномальные средние $\left\langle\frac{a_0}{\sqrt{V}}\right\rangle = \left\langle\frac{a_0^*}{\sqrt{V}}\right\rangle$, что свидетельствует о вырождении состояний гамильтониана по числу частиц. Для снятия этого вырождения введем в гамильтониан бесконечно малые члены вида — $\nu\sqrt{V}\left(a_0 + a_0^*\right)$. В результате получим гамильтониан

$$H_\nu = H - \nu\sqrt{V}\left(a_0 + a_0^*\right). \tag{133}$$

Для этого гамильтониана доказывается фундаментальная теорема „об особенностях типа $\frac{1}{q^2}$" у функций Грина. Для простоты ограничимся простейшим вариантом этой теоремы. Она состоит в том, что

$$\left|\left\langle\left\langle a_q, a_q^*\right\rangle\right\rangle_{E=0}\right| \geq \frac{\text{const}}{q^2}.$$

Приведем идею доказательства теоремы. Сделаем над операторами рождения и уничтожения $\Psi^*(r)$ и $\Psi(r)$ бесконечно малые градиентные преобразования

$$\Psi^*(r) \to \Psi^{*\prime}(r) = \big(1 + i\delta\chi(r)\big)\Psi^*(r),\ \ \Psi(r) \to \Psi'(r) = \\ = \big(1 - i\delta\chi(r)\big)\Psi(r),\ \ \delta\chi(r) = \left(e^{iqr} + e^{-iqr}\right)\delta\xi, \tag{134}$$

где $\delta\xi$ — бесконечно малая вещественная величина.

Вычислим вариацию гамильтониана

$$\delta H_\nu = H_\nu\left(\Psi^{*\prime}, \Psi'\right) - H_\nu\left(\Psi^*, \Psi\right) = U_q\delta\xi, \tag{135}$$

где

$$U_q = -\frac{iq^2}{2m}\sum_k \frac{(2k+q)q}{q^2}\left(a^*_{k+q}a_k - a^*_k a_{k+q}\right) + \\ + i\nu\left(a_q + a_{-q} - a^*_q - a^*_{-q}\right).$$

Прямым подсчетом можно убедиться, что

$$\left\langle U_q\right\rangle_{H_\nu + \delta H_\nu} - \left\langle U_q\right\rangle_{H_\nu} = -4\left(N\frac{q^2}{2m} + \nu\sqrt{N_0}V^{\frac{1}{2}}\right)\delta\xi, \\ \left\langle a_q\right\rangle_{H_\nu + \delta H_\nu} - \left\langle a_q\right\rangle_{H_\nu} = i\sqrt{N_0}\,\delta\xi,\ \ N = \sum_k \langle N_k\rangle_{H_\nu}. \tag{136}$$

С другой стороны,

$$\left\langle U_q\right\rangle_{H_\nu + \delta H_\nu} - \left\langle U_q\right\rangle_{H_\nu} = 2\pi\left\langle\left\langle U_q, U_q\right\rangle\right\rangle_{E=0}\delta\xi, \\ \left\langle a_q\right\rangle_{H_\nu + \delta H_\nu} - \left\langle a_q\right\rangle_{H_\nu} = 2\pi\left\langle\left\langle a_q, U_q\right\rangle\right\rangle_{E=0}\delta\xi. \tag{137}$$

Применяя неравенство Буняковского — Шварца к $\left\langle\left\langle a_q, U_q\right\rangle\right\rangle_{E=0}$, получаем

$$\frac{N_0}{4\pi^2} = \left|\left\langle\left\langle a_q, U_q\right\rangle\right\rangle_{E=0}\right|^2 \le \left\langle\left\langle a_q, a^*_q\right\rangle\right\rangle_{E=0}\left\langle\left\langle U_q, U_q\right\rangle\right\rangle_{E=0}. \tag{138}$$

Отсюда, учитывая (136), (137), имеем

$$\left\langle\left\langle a_q, a^*_q\right\rangle\right\rangle_{E=0} \ge \frac{N_0}{4\pi\left(N\dfrac{q^2}{2m} + \nu\sqrt{N_0}\,V^{\frac{1}{2}}\right)} = \\ = \frac{N_0 2m}{4\pi\left(Nq^2 + \nu 2m\sqrt{N_0}\,V^{\frac{1}{2}}\right)} = \frac{\rho_0 m}{4\pi\left(\rho q^2 + \nu 2m\sqrt{\rho_0}\right)},$$

$$\frac{N}{V} = \rho,\ \ \frac{N_0}{V} = \rho_0.$$

Устремляя в нем $\nu \to 0$, получаем окончательно нужную формулу

$$\left\langle\left\langle a_q, a_q^* \right\rangle\right\rangle_{E=0} \geq \frac{\rho_0 m}{4\pi\rho} \frac{1}{q^2}. \quad (139)$$

Из этой теоремы „об особенностях типа $\frac{1}{q^2}$" следует, что в исследуемой системе имеется дальнодействие, а плотность непрерывного распределения частиц по импульсам при $q \to 0$ стремится к бесконечности как $\frac{1}{q^2}$. Теорема „об особенностях типа $\frac{1}{q^2}$" справедлива для сверхтекучих ферми-систем. Эта теорема нашла широкое применение. В частности, из этой теоремы вытекает невозможность одно- и двухмерной сверхпроводимости.

Раздел 1

1. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* Исследование продольной устойчивости аэроплана. – М.; Л.: Госавиаавтотрактиздат, 1932. – 60с.
2. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* О колебаниях синхронных машин. 2. Об устойчивости параллельной работы *n*-синхронных машин. – Харьков: Енерговидав, 1932. – 98 с.
3. *Боголюбов Н. Н.* Новые методы для решения некоторых математических проблем, встречаемых в технике. – Харьков: Будвидав, 1933. – 96 с.
4. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* Новые методы нелинейной механики в их применении к изучению работы электронных генераторов. – М.; Л.: Гостехтеоретиздат, 1934. – Ч. 1. – 243 с.
5. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* Приложение методов нелинейной механики в теории стационарных колебаний. – Киев: Изд-во ВУАН, 1934. – 112 с.
6. *Крилов М. М., Боголюбов М. М.* Про деякі формальні розклади нелінійної механіки. – Київ: Вид-во ВУАН, 1934. – 89 с.
7. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* Введение в нелинейную механику (Приближенные и асимптотические методы нелинейной механики). – Киев: Изд-во АН УССР, 1937. – 365 с.
8. *Боголюбов Н. Н.* Одночастотные свободные колебания в нелинейных системах со многими степенями свободы // Сб. тр. Ин-та строит. механики АН УССР. – 1948. – Т. 10. – С. 9 – 21.
9. *Боголюбов М. М.* Синхронізація релаксійних коливань // Наук. зап. Київ. держ. ун-ту, 1950. – **9**, вип. 9. – Мат зб. – № 4. – С. 5 – 28.
10. *Боголюбов Н. Н.* Теория возмущений в нелинейной механике // Сб. тр. Ин-та строит. механики АН УССР. – 1950. – №. 14. – С. 9 – 34.
11. *Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А.* Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. – М.: Гостехиздат, 1955. – 448 с.
12. *Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н.* Метод асимптотического приближения для систем с вращающейся фазой и его применение к движению заряженных частиц в магнитном поле // Укр. мат. журн. – 1955. – **1**, № 1. – С. 5 – 17.
13. *Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А.* Метод интегральных многообразий в нелинейной механике. – Киев: Ин-т математики АН УССР, 1961. – 126 с.
14. *Боголюбов Н. Н.* О квазипериодических решениях в задачах нелинейной механики // Первая летняя мат. школа (Канев, июнь – июль 1963 г.). – Киев: Наук. думка, 1964. – Ч. 1. – С. 11 – 101.
15. *Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А., Самойленко А. М.* Метод ускоренной сходимости в нелинейной механике. – Киев: Наук. думка, 1969. – 274 с.

Раздел 2

16. *Крилов М. М., Боголюбов М. М.* Загальна теорія міри в нелінійній механіці // Зб. праць з нелінійної механіки. – К.: Вид-во АН УРСР, 1937. – С. 55 – 112.
17. *Крилов М. М., Боголюбов М. М.* Наслідки дії статистичної зміни параметрів відносно ергодичних властивостей динамічних неконсервативних систем // Там же. – С. 154 – 171.
18. *Крилов М. М., Боголюбов М. М.* Наслідки дії статистичної зміни параметрів на рух динамічних консервативних систем протягом досить тривалих періодів часу // Там же. – С. 119 – 135.
19. *Krylov N. M., Bogolubov N. N.* La théorie generale de la mesure dans son application á l'étude des systémes dynamiques de la mécanique non-linéaire // Ann. Math. Ser. 2. – 1937. – **38**, № 1. – P. 65 – 113.

20. *Крилов М. М., Боголюбов М. М.* Про повторювані ітерації зі змінними параметрами // Зб. праць з нелінійної механіки. Зап. каф. мат. фізики Ін-ту буд. механіки АН УРСР. – 1937. – С. 191 – 200.
21. *Боголюбов М. М.* Про деякі ергодичні властивості суцільних груп перетворень // Наук. зап. Київ. держ. ун-ту. Фіз.-мат. зб. – **4**, вип. 5. – 1939. – С. 45 – 52.
22. *Крилов М. М. , Боголюбов М. М.* Про деякі проблеми ергодичної теорії стохастичних систем // Зап. каф. мат. фізики АН УРСР. – 1939. – **4** – С. 243 – 287.

Раздел 3

23. *Крилов М. М. , Боголюбов М. М.* Про рівняння Фоккера – Планка, що виводяться в теорії пертрубацій методом, основаним на спектральних властивостях пертрубаційного гамільтоніана // Там же. – С. 5 – 80.
24. *Боголюбов Н. Н.* О влиянии случайной силы на гармонический вибратор // Уч. зап. Моск. ун-та. – 1945. – Вып. 77. – Физика. – Кн. 3. – С. 51 – 73.
25. *Боголюбов Н. Н.* О некоторых предельных распределениях для сумм, зависящих от произвольных фаз // Там же. – С. 43 – 50.
26. *Боголюбов Н. Н.* О некоторых статистических методах в математической физике. – Киев: Изд-во АН УССР, 1945. – 139 с.
27. *Боголюбов Н. Н.* Элементарный пример установления равновесия в системе, связанной с термостатом // О некоторых статистических методах в мат. физике. – Киев: Изд-во АН УССР, 1945. – С. 115 – 137.

Раздел 4

28. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. – М.; Л.: Гостехиздат, 1946. – 119 с.
29. *Боголюбов Н. Н.* Кинетические уравнения // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1946. – **16**, вып. 8. – С. 691 – 702.
30. *Боголюбов М. М.* Рівняння гідродинаміки в статистичній механіці // Зб. праць Ін-ту математики АН УРСР. – 1948. – № 10. – С. 41 – 59.
31. *Боголюбов Н. Н., Хацет Б. И.* О некоторых математических вопросах теории статистического равновесия // Докл. АН СССР. – 1949. – **66**, № 3. – С. 321 – 324.
32. *Боголюбов Н. Н., Петрина Д. Я., Хацет Б. И.* Математическое описание равновесного состояния классических систем, основанное на каноническом формализме // Теорет. и мат. физика. – 1969. – **1**, № 2. – С. 251 – 274.
33. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты. – М.: Мир, 1971. – С. 368.
34. *Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Малышев П. В.* Математические основы классической статистической механики. – Киев: Наук. думка, 1985. – 262 с.

Раздел 5

35. *Боголюбов М. М.* Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем. – К.: Рад. школа, 1949. – 227 с.
36. *Боголюбов Н. Н., Гуров К. П.* Кинетические уравнения в квантовой механике // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1947. – **17**, вып. 7. – С. 614 – 628.
37. *Ginibre J.* Reduced density matrices of quantum gases. I. Limit of infinite volume // J. Math. Phys. – 1968. – **6**, N 2. – P. 238 – 251; Reduced density matrices of quantum gases. II. Cluster property // Ibid. – P. 252 – 262.
38. *Петрина Д. Я.* О решениях кинетических уравнений Боголюбова. Квантовая статистика // Теорет. и мат. физика. – 1972. – **13**, № 3. – С. 391 – 405.

Раздел 6

39. *Боголюбов Н. Н.* К теории сверхтекучести // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1947. – **11**, № 1. – С. 77 – 90.
40. *Боголюбов Н. Н.* Энергетические уровни неидеального Бозе – Эйнштейновского газа // Вестн. Моск. ун-та. – 1947. – № 7. – С. 43 – 56.
41. *Bogolubov N. N.* On the theory of superfluidity // J. Phys. – 1947. – **11**, № 1. – P. 23 – 32.
42. *Боголюбов М. М.* До теорії надплинності // Зб. праць Ін-ту математики АН УРСР. – 1948. – № 9. – С. 89 – 103.

Раздел 7

43. *Боголюбов Н. Н.* О новом методе в теории сверхпроводимости. – Дубна, 1957. – 13 с. – (Препринт / Объед. ин-т ядер. исслед. : Р-99). – Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1958. – **34**, вып. 1. – С. 73 – 79.
44. *Bogolubov N. N.* On a new method in the theory of superconductivity // Nuovo cim. – 1958. – **7**. – P. 794 – 805.

45. *Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В.* Новый метод в теории сверхпроводимости. – М.: Изд-во АН СССР, 1958. – 128 с.
46. *Боголюбов Н. Н.* Основные принципы теории сверхтекучести и сверхпроводимости // Вестн. АН СССР. – 1958. – № 8. – С. 36 – 46.
47. *Боголюбов Н. Н.* К вопросу об условии сверхтекучести в теории ядерной материи // Докл. АН СССР. – 1958. – **119**, № 1. – С. 52 – 55.
48. *Боголюбов Н. Н.* О принципе компенсации и методе самосогласованного поля. – Дубна, 1958. – 49 с. – (Препринт / Объед. ин-т ядер. исслед.; Р-267).
49. *Боголюбов Н. Н.* Об одном вариационном принципе в задаче многих тел. – Дубна, 1958. – 11 с. – (Препринт / Объед. ин-т ядер. исслед.; Р-136).

Раздел 8

50. *Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., Церковников Ю. А..* Асимптотически точное решение для модельного гамильтониана теории сверхпроводимости // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1960. – **39**, вып. 1. – С. 120 – 129.
51. *Боголюбов Н. Н.* К вопросу о модельном гамильтониане в теории сверхпроводимости. – Дубна, 1960. – 99 с. – (Препринт / Объед. ин-т ядер. исслед.; Мат. ин-т АН СССР; Р-511).
52. *Bogolubov N. N.* On some problem of the theory of superconductivity // Physica, Suppl. (Proc. Int. Congr. on many-Particle Problems, Utrecht, June, 1960). – 1960. – **26**. – P. 51 – 116.
53. *Haag R.* The mathematical structure of the Bardeen – Cooper – Schrieffer model // Nuovo cim. – 1962. – **25**. – P. 287 – 302.
54. *Боголюбов Н. Н.(мл.).* Вычисление свободной энергии для модельных систем // Укр. мат. журн. – 1965. – **17**, № 3. – С. 3 – 15.
55. *Боголюбов Н. Н.(мл.).* Метод исследования модельных гамильтонианов. – М.: Наука, 1974. – 178 с.
56. *Боголюбов Н. Н.(мл.), Садовников Б. И.* Некоторые вопросы статистической механики. – М.: Высш. шк., 1975. – 352 с.
57. *Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н.(мл.).* Введение в квантовую статистическую механику. – М. : Наука, 1984. – 384 с.
58. *Боголюбов Н. Н.(мл.), Бранков Й. Г., Загребнов В. А., Курбатов А. М., Тончев Н. С.* Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике. – София: Изд-во БАН, 1981. – 246 с.
59. *Боголюбов Н. Н.(мл.), Петрина Д. Я.* Об одном классе модельных систем, допускающих понижение степени гамильтониана в термодинамическом пределе. Ч. I, II // Теорет. и мат. физика. – 1977. – **33**, № 2. – С. 231 – 245; 1978. – **37**, № 2. – С. 246 – 257.
60. *Петрина Д. Я.* О гамильтонианах квантовой статистической механики и о модельном гамильтониане теории сверхпроводимости // Теорет. и мат. физика. – 1970. – **4**, № 3. – С. 394 – 410.
61. *Петрина Д. Я., Яцишин В. П.* О модельном гамильтониане теории сверхпроводимости // Там же. – 1972. – **10**, № 2. – С. 283 – 300.

Раздел 9

62. *Боголюбов Н. Н.* Квазисредние в задачах статистической механики. – Дубна, 1961. – 123 с. – (Препринт / Объед. ин-т ядер. исслед.; Д-781).
63. *Боголюбов Н. Н.* О принципе ослабления корреляции и метода квазисредних. – Дубна, 1961. – 149 с. – (Препринт / Объед. ин-т ядер. исслед.; 549).
64. *Mermin N. D., Wagner H.* Absence of Ferromagnetism and Antiferromagnetism in One-or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // Phys. Rev. Lett. – 1966. – **17**, N 22. – P. 1133 – 1136.

Получено 06. 07. 92