ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4 - 9336

ТОНЧЕВ
Николай Стойчев

МЕТОД АППРОКСИМИРУЮЩЕГО ГАМИЛЬТОНИАНА ДЛЯ СИСТЕМ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С БОЗОННЫМ ПОЛЕМ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Дубна 1975

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований .

Научные руководители:

член-корреспондент АН СССР профессор Л.В.КЕЛДЫШ ,

доктор физико-математических наук

профессор Н.Н.БОГОЛЮБОВ (мл.).

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук В.Ф.ЕЛЕСИН,

доктор физико-математических наук Б.И.САДОВНИКОВ .

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Ленинградский государственный университет им. А.А.Жданова.

Автореферат разослан "   "   1975 года.

Защита диссертации состоится "   "   1975 года на заседании Ученого совета Лаборатории теоретической физики.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

Р.А.АСАНОВ

4 - 9336

ТОНЧЕВ
Николай Стойчев

МЕТОД АППРОКСИМИРУЮЩЕГО ГАМИЛЬТОНИАНА ДЛЯ СИСТЕМ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С БОЗОННЫМ ПОЛЕМ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

При исследовании модельных задач статистической физики и в первую очередь критических явлений и фазовых переходов решающую роль играет учет корреляций между частицами. Основные трудности, возникающие при этом, обусловлены необходимостью учета в рассматриваемой системе взаимодействия большого числа частиц. Поэтому большинство интересных физических моделей исследуется главным образом приближенными методами. Для обоснования и определения области применения различных приближений особенно полезными оказываются точно решаемые модельные задачи. К ним прежде всего относятся некоторые одномерные и двухмерные системы/I/.

В трехмерном случае в качестве примеров можно указать модельную динамическую систему Бардина-Купера-Шрифера (БКШ) и ее обобщения/2/, некоторые спиновые модели, характеризуемые взаимодействием специального вида/3/, и интенсивно изучаемую в последнее время модель Дикке/4/.

Весьма плодотворный путь для получения точных в термодинамическом пределе результатов был намечен в работах Н.Н.Боголюбова/5/. Основная идея метода состоит в том, что некоторые операторы, асимптотически коммутирующие (при $V \to \infty$ и $n = \frac{N}{V} = const$. V - объем системы и n - плотность частиц) со всей алгеброй локальных наблюдаемых, в модельном гамильтониане могут быть заменены C -числами. Получающийся при этом аппроксимирующий гамильтониан обычно легко приводится к диагональному виду, после чего нетрудно вычислить соответствующие термодинамические характеристики системы. Наиболее важной особенностью этого подхода является возможность строгого доказательства термодинамической эквивалентности модельной и аппроксимирующей систем.

Дальнейшее развитие эта идея получила в работах Н.Н.Боголюбова (мл.)[2], где был развит эффективный метод математически строгого исследования широкого класса задач и, в частности, была доказана важная теорема о совпадении в термодинамическом пределе плотностей удельных свободных энергий аппроксимирующей и модельной систем, справедливая при произвольных температурах.

Отметим, что указанный метод применялся первоначально в связи с изучением систем, содержащих взаимодействие, вводимое ограниченными по норме операторами. Вместе с тем ряд физически важных задач приводит к необходимости исследования систем, гамильтонианы которых содержат взаимодействие с бозонным полем, т.е. неограниченные операторы. К таким системам относятся: система молекул, взаимодействующих с выделенной модой электромагнитного поля[4, 6], системы, в которых имеет место структурное превращение, вызванное неустойчивостью решетки типа удвоения периода[7] и т.д.

В настоящей диссертации предлагается метод исследования модельных гамильтонианов, содержащих неограниченные операторы, являющийся дальнейшим обобщением асимптотически точных методов исследования, развитых в работах[2] x).

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и приложения.

Во введении дан краткий обзор литературы по рассматриваемому в работе кругу вопросов, а также представлен план изложения материала.

---

x) Отметим, что недавно другой вариант такого обобщения был предложен в работе[8].

В первой главе[6, 9] рассматривается система, состоящая из двух взаимодействующих подсистем B и L и описываемая гамильтонианом

$$H_N=\sum_{k=1}^{M}\omega_k b_k^+ b_k + H_{L,N} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=1}^{M}\lambda_k\left(b_k L_k^+ + b_k^+ L_k\right) ; \qquad (I)$$

$$\omega_k \geqslant \omega_0 > 0 , \; k=1,\dots,M .$$

Пространство состояний такой системы $\mathcal{H}$ является тензорным произведением соответствующих гильбертовых подпространств $\mathcal{H}_B$ и $\mathcal{H}_L$, т.е. $\mathcal{H}=\mathcal{H}_B\otimes\mathcal{H}_L$. Подсистема B является свободным бозонным полем (операторы b_k и b_k^+) с ограниченным числом мод, равным M , а N – частичная подсистема описывается гамильтонианом $H_{L,N}$. Операторы $H_{L,N}, L_k$ и L_k^+ удовлетворяют следующим общим условиям:

$$\frac{1}{N}\|H_{L,N}\|\le c_1,\ \frac{1}{N}\|H_{L,N}L_k-L_kH_{L,N}\|\le c_2,\ \frac{1}{N}\|L_k\|\le c_3 ,$$

$$\frac{1}{N}\|L_kL_m-L_mL_k\|\le c_4,\ \frac{1}{N}\|L_k^+L_m-L_mL_k^+\|\le c_4 , \qquad (2)$$

$$\left|(\beta N)^{-1}\ln \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_L}\exp\{-\beta H_{L,N}\}\right|\le c_5,$$

где постоянные c_1, c_2, c_3, c_4, c_5 не зависят от N, $\|\dots\|$ означает норму соответствующего оператора, вычисленную в $\mathcal{H}_L$, и β – обратная температура.

В первом параграфе приводятся основные математические определения и теоремы.

Во втором параграфе математически строго показано[9], что плотность свободной энергии системы (I)

$$-(\beta N)^{-1}\ln \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\exp\{-\beta H_N\} \qquad (3)$$

существует и ограничена равномерно по N и β. Далее в соответствии с методами работ /2, 5, 6, 9/ строится аппроксимирующий гамильтониан для рассматриваемой модели

$$H_{0N}(\eta)=\sum_{k=1}^{M}\omega_k\left(b_k^+ + \frac{\lambda_k}{\omega_k}\sqrt{N}\,\eta_k^*\right)\left(b_k+\frac{\lambda_k}{\omega_k}\sqrt{N}\,\eta_k\right)+H_{L,N}$$

$$-\sum_{k=1}^{M}\frac{\lambda_k^2}{\omega_k}\left(L_k^+\eta_k+L_k\eta_k^*\right)+N\sum_{k=1}^{M}\frac{\lambda_k^2}{\omega_k}|\eta_k|^2, \tag{4}$$

где комплексные параметры $\eta=(\eta_1,\dots,\eta_M)$ определяются, как показано в § 2, из принципа минимальности удельной свободной энергии аппроксимирующей системы:

$$\min_{(\eta)} f_N[H_{0N}(\eta)]=f_N[H_{0N}(\bar{\eta})]. \tag{5}$$

Второй параграф посвящен доказательству асимптотической близости удельных свободных энергий модельной $f_N[H_N]$ и аппроксимирующей $f_N[H_{0,N}(\eta)]$ систем. Доказательство проводится при помощи модифицированной мажорационной процедуры Н.Н.Боголюбова (мл.), и на любом ограниченном интервале температур получена оценка/6, 9/:

$$\left| f_N[H_N]-\min_{(\eta)} f_N[H_{0N}(\eta)]\right|\leq O\left(\frac{1}{N^{1/4}}\right), \tag{7}$$

причем $O\left(\frac{1}{N^{1/4}}\right)\to 0$ при $N\to\infty$.

Необходимо подчеркнуть, что при разработке основных положений метода в гл. I явный вид операторов $H_{L,N}, L_k$ и L_k^+ не использовался; поэтому установленные здесь результаты справедливы для любых систем, удовлетворяющих весьма общим дополнительным условиям (2). Подобная общность рассмотрения позволяет расширить круг физических явлений, допускающих строгое описание в рамках предложенного метода. Ряд конкретных физических систем рассмотрен в главах П и Ш в качестве примеров.

В § I второй главы рассматривается обобщенная модель Дикке/6/, гамильтониан которой имеет вид:

$$H_D=\sum_{k=1}^{M}\omega_k b_k^+ b_k+\epsilon S^z+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=1}^{M}\lambda_k\{b_k J^+ + b_k J^-\}, \tag{7}$$

где $J^{\pm}=S^{\pm}+\mu S^{\mp}$, $S^{\pm}=S^x\pm iS^y$, $S^{\alpha}=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^{\alpha}$,

$\sigma^{\alpha}\ (\alpha=x,y,z)$ – матрицы Паули.

Нетрудно заметить, что система, описываемая гамильтонианом (7), является частным случаем более общей системы (I). Поэтому с помощью ранее развитой техники можно построить соответствующий аппроксимирующий гамильтониан, для которого вычисляется плотность свободной энергии $f_N[H_D(\eta)]$. Далее показывается, что взаимодействие с электромагнитным полем приводит к появлению дальнего порядка/ 6 /, и устанавливаются условия, при которых указанный эффект имеет место. Кроме того, оказывается, что, хотя первоначальная система распадается на две независимые подсистемы, квазиспиновую и бозонную, электромагнитное поле не может рассматриваться как свободное, что проявляется в микроскопическом заполнении соответствующих фотонных мод.

В следующем параграфе 2 рассматривается модель Маттиса-Ланге-ра/7/для фазового перехода металл-полупроводник, существование точного решения для которой впервые было установлено в работе/I0/.

Система описывается гамильтонианом Фрёлиха с выделенной модой:

$$H_Q=\sum_{k,\sigma}(\epsilon_k-\mu)a^+_{k,\sigma}a_{k,\sigma}+\omega(Q)b^+_Q b_Q+ \tag{10}$$
$$+g(Q)V^{1/2}\sum_{k,\sigma}\left\{a^+_{k+Q,\sigma}a_{k,\sigma}b_Q+\text{э.с.}\right\}.$$

Здесь $a^+_{k,\sigma}, a_{k,\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов (k - квазиимпульс и σ -спин), b^+_Q, b_Q - фононные операторы, и для выделенного квазиимпульса Q спектр обладает свойством

$$\epsilon_k=-\epsilon_{k+Q}.$$

В рассматриваемом случае более чем наполовину заполненной зоны вычисляется плотность свободной энергии и исследуются уравнения самосогласования в основном состоянии. Полученные здесь результаты доказывают, что приближение самосогласованного поля является асимптотически точным для этой модели. Следует отметить, что установленные во втором параграфе соотношения справедливы и в случае изотропной модели полуметалла с перекрывающимися зонами, предложенной Л.В.Келдышем и Ю.В.Копаевым/II/, **см. также**/I6/.

Последняя, Ш глава/I2-I4/ диссертации посвящена модели, в которой имеют место сразу два типа фазовых переходов: структурный и сверхпроводящий. Интерес к системам этого типа/I5, I6/ в последнее время сильно возрос в связи с экспериментально обнаруженной корреляцией между температурой сверхпроводящего фазового перехода T_s и структурного фазового перехода T_d.

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет следующий вид:

$$H=H_Q+V_{БКШ},$$

$$V_{БКШ}=-\frac{g_s}{2V}\sum_{\substack{k,\sigma\\ k',\sigma'}}\lambda(k,\sigma)\lambda(k',\sigma')a^+_{k,\sigma}a^+_{-k,-\sigma}a_{-k',-\sigma'}a_{k',\sigma'}. \tag{II}$$

Наличие образующих λ -функции в гамильтониане (II)

$$\lambda(k,\sigma)=\begin{cases}1\cdot\operatorname{sign}\sigma, & |\epsilon_k-\mu_0|\leq\omega_D,\\ 0, & |\epsilon_k-\mu_0|>\omega_D\end{cases}$$

позволяет последовательно, на каждом этапе вычисления, учитывать тот факт, что куперовское притяжение проявляется только в узком энергетическом слое порядка $2\omega_D$ около уровня Ферми μ_0.

В § I в соответствии с методом гл. I строится аппроксимирующий гамильтониан для модельной системы (II):

$$H_0(\Delta,S,\mu)=\frac{1}{2}\sum_{p,\sigma}\Psi^+_{p,\sigma}\hat{A}_{p,\sigma}\Psi_{p,\sigma}+\frac{1}{2}V\left\{\frac{\Delta^2}{g_d^2}+\frac{S^2}{g_s^2}-2\mu\right\}, \tag{I2}$$

суммирование проводится по половине первоначальной зоны Бриллюэна, определяемой соотношением $\epsilon_p<0$. Кроме того, введены следующие обозначения:

$$\Psi^+_{p,\sigma}=(a^+_{p,\sigma}\,a^+_{p+Q,\sigma}\,a_{-p,-\sigma}\,a_{-p+Q,-\sigma}),$$

$$\hat{A}_{p,\sigma}=\begin{vmatrix}\epsilon_p-\mu & -\Delta & -S\lambda(p,\sigma) & 0\\ -\Delta & -\epsilon_p-\mu & 0 & -S\lambda(p+Q,\sigma)\\ -S\lambda(p,\sigma) & 0 & -\epsilon_p+\mu & \Delta\\ 0 & -S\lambda(p+Q,\sigma) & \Delta & \epsilon_p+\mu\end{vmatrix},$$

где $\Delta=g_d^2\bar{\eta}_d$ - диэлектрический и $S=g_s^2\bar{\eta}_s$ - сверхпроводящий параметры порядка $g_d^2=\frac{2g^2(Q)}{\omega(Q)}$.

В § 2 проводится диагонализация аппроксимирующего гамильтониана (I2) и получена система уравнений для параметров Δ, S и μ.

Полученная система уравнений, однако, имеет довольно сложный вид, и в общем случае не удается найти явного решения. В связи с этим в § 3 проводится исследование спектра элементарных возбуждений в различных предельных случаях.

Результаты этого исследования в дальнейшем используются при приближенном решении системы уравнений для Δ, S и μ. Кроме того, в области $\mathfrak{B}=\{k: |\epsilon_k| \leq |\omega_D - \mu_0|\}$, которая существенна в случае $\omega_D \gg \mu_0$, для новых квазичастиц получено каноническое преобразование в явном виде. Область сосуществования сверхпроводящей S-фазы и диэлектрической фазы при $T=0$ изучается в § 4. Исследование уравнений удобно проводить в случаях $\omega_D > \mu_0$ и $\omega_D < \mu_0$ по отдельности. Найдены уравнения для границ раздела S и ΔS фазы. Приближенное исследование уравнения самосогласования в основном состоянии проводится в § 5. Здесь получены выражения для сверхпроводящей щели как функции параметров g_s, g_d и μ_0. В предельном случае $\omega_D \gg \mu_0$ и $\omega_D \gg \Delta$ результат совпадает с результатом работы /16/. Исследован также и другой предельный случай $\mu_0 \gg \omega_D$. Найдены условия, при которых имеет место увеличение $S(\Delta)$ по сравнению с $S(0)$. В § 6 показано, что увеличение сверхпроводящего параметра S приводит к увеличению соответствующей сверхпроводящей температуры.

В заключение перечислены основные результаты, полученные в работе, сделаны некоторые замечания и выводы.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах /6,9,10, 12-14/ и докладывались на семинарах ЛТФ ОИЯИ, отдела статистической механики МИАН СССР, кафедры квантовой статистики МГУ, на Ш Международной школе по статистической механике (Вагенинген, Голландия, 1974 г.) и У Рабочем совещании по статистической физике (Львов, 1975).

ЛИТЕРАТУРА

1. C.N.Yang, Stony Brook, New York 11790. Some Exactly Suluble Problems in Statistical Mechanics. Feb. Lebures given at the Karpacz School, Poland (1970).
2. N.N.Bogolubov (jr). Physica (32), 933 (1966); Н.Н.Боголюбов (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов. Изд. "Наука", 1974.
3. Gr.Scharf. Phys. Lett., 38A, 123 (1972); J.G.Brankov, A.S.Shymovsky, V.A.Zagrebnov. Physica, 78, 183 (1974).
4. K.Hepp, E.H.Lieb. Ann. Phys., 76, 360, 1973; Phys.Rev., 8A, 2577 (1973).
5. Н.Н.Боголюбов. Изв. АН СССР, сер. физ., 11, 77 (1947). Вестн. Моск. ун-та, 7, 43 (1947); ЖЭТФ, 18, 622 (1948).
6. Й.Г.Бранков, В.А.Загребнов, Н.С.Тончев. ТМФ, 22, 20 (1975).
7. D.C.Mattis, W.D.Langer. Phys. Rev. Lett., 25, 376 (1970).
8. N.N.Bogolubov (Jr.), V.N.Plechko. Preprint IC/75/68-Trieste 1975.
9. V.A.Zagrebnov, J.G.Brankov, N.S.Tonchev. Preprint JINR, E4-8818, Dubna, 1975. (ДАН СССР, 225, № 1, 1975).
10. J.G.Brankov, N.S.Tonchev, V.A.Zagrebnov. Physica, 79A, 125 (1975).
11. Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев. ФТТ, 6, 2791 (1967).
12. Й.Г.Бранков, Н.С.Тончев. Сообщение ОИЯИ, Р4-8150, Дубна, 1974.
13. Й.Г.Бранков, Н.С.Тончев. Сообщение ОИЯИ, Р4-8907, Дубна, 1975.

14. Й.Г.Бранков, Н.С.Тончев. Сообщение ОИЯИ, Р4-8940, Дубна, 1975.

15. Ю.В.Копаев. ЖЭТФ, 58, 1012 (1970);
Ю.В.Копаев, Р.Х.Тимеров. ЖЭТФ, 63, 220 (1972).

16. А.И.Русинов, До Чан Кат, Ю.В.Копаев. ЖЭТФ, 65, 1974 (1973).

Рукопись поступила в издательский отдел
25 ноября 1975 года.