ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Лаборатория теоретической физики

Р-136

Н.Н.Боголюбов

ОБ ОДНОМ ВАРИАЦИОННОМ ПРИНЦИПЕ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ

ДАН, 1958, т 119, №2 стр 244-246.

1958

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Лаборатория теоретической физики

Р-136

Н.Н.Боголюбов

ОБ ОДНОМ ВАРИАЦИОННОМ ПРИНЦИПЕ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ

1958

Имея в виду приложения к теории ядерной материи рассмотрим модельную динамическую систему с гамильтонианом:

$$H = \sum_{k,\sigma} \{E(k) - E_F\} \overset{+}{a}_{k\sigma} a_{k\sigma} +$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{(k,k',\ldots\sigma\ldots)} J(k,k'|\sigma_1,\sigma_2,\sigma_2',\sigma_1') \overset{+}{a}_{k\sigma_1} \overset{+}{a}_{-k\sigma_2} a_{-k'\sigma_2'} a_{k'\sigma_1'}. \qquad (I)$$

Здесь σ представляет дискретный индекс, характеризующий, например, спин и изотопический спин. E_F - "Ферми-энергия" - - параметр, играющий роль химического потенциала, V - объем системы.

Неполнота, "модельность" такого гамильтониана обусловлена тем, что в нем учитываются только взаимодействия пар частиц с противоположными импульсами. Для удобства записи целесообразно ввести вместо импульсного индекса $\vec{k}$ индекс $\vec{q}$ пары($\vec{k}, -\vec{k}$); $\vec{q}$ и $-\vec{q}$ описывают одну и ту же пару; суммирование по q понимается как суммирование по различным парам. При этом, очевидно, потребуется ввести еще дополнительный индекс $\rho = \pm 1$ и k описывать как (q, ρ). Целесообразно ρ как дискретный индекс соединить вместе с σ и положить $S = (\sigma, \rho)$. В таких обозначениях рассматриваемый гамильтониан (I) представится в следующей форме

$$H = \sum_{q,s} \{E(q) - E_F\} \overset{+}{a}_{qs} a_{qs} + \qquad (2)$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{(q,q'\ldots s\ldots)} I(q,q'|S_1,S_2,S_2',S_1') + \overset{+}{a}_{qS_1} \overset{+}{a}_{qS_2} a_{q'S_2'} a_{q'S_1'}.$$

Покажем сейчас, что основное состояние в нашей схеме можно найти асимптотически точно для процесса предельного перехода: $V \to \infty$. Здесь будет удобно воспользоваться вариантом приема заметки[I], предложенным Д.Н.Зубаревым и Ю.А.Церковниковым. Введем какие-то C-функции $A_q(s_1, s_2)$ и запишем гамильтониан (2) в виде

$$H = U_0 + H_0 + H_1,$$

где

$$U_0 = Const = \frac{-1}{2V} \sum I(q, q' | s_1, s_2, s_2', s_1') \overset{*}{A}_q(s_1, s_2) A_{q'}(s_1', s_2')$$

$$H_0 = \sum H_q, \quad H_1 = \frac{1}{2V} \sum I(q, q' | s_1, s_2, s_2', s_1') \overset{+}{B}_q(s_1, s_2) B_{q'}(s_1', s_2'),$$

причем

$$H_q = \{E(q) - E_F\} \sum_s \overset{+}{a}_{qs} a_{qs} +$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum \{ I(q, q' | s_1, s_2, s_2', s_1') A_{q'}(s_1', s_2') \overset{+}{a}_{qs_1} \overset{+}{a}_{qs_2} +$$

$$+ I(q', q | s_1, s_2, s_2', s_1') \overset{*}{A}_{q'}(s_1, s_2) a_{qs_2'} a_{qs_1'} \}$$

$$B_q(s_1, s_2) = a_{qs_2} a_{qs_1} - A_q(s_1, s_2) \tag{3}$$

2/

Так как H_q является квадратичной формой из Ферми-операторов , то ее диагонализация совершается элементарно с помощью линейного канонического преобразования

$$a_{qs} = \sum_{s'} \{ u(q,s,s')\alpha_{qs'} + v(q,s,s')\overset{+}{\alpha}_{qs'} \} \qquad (4)$$

Входящие сюда функции u, v должны удовлетворять соотношениям ортогональности

$$\xi = \sum_{s''} \{ u^*(q,s,s'')u(q,s',s'') + \overset{*}{v}(q,s,s'')v(q,s',s'') \} = \delta_{s',s''}$$

$$\eta = \sum_{s''} \{ u(q,s,s'')v(q,s',s'') + v(q,s,s'')u(q,s',s'') \} = 0 \qquad (5)$$

Определив u, v из секулярных уравнений, соответствующих форме (3), мы приведем ее к виду

$$H_q = \Gamma_q + \sum_s \mathcal{E}_s(q)\overset{+}{\alpha}_{qs}\alpha_{qs}$$

Поэтому у гамильтониана H_0 основное состояние C_0 будет вакуумным состоянием для новых фермионных амплитуд

$$\alpha_{ks} C_0 = 0$$

Подберем теперь C - функции A таким образом, что

$$\langle \overset{*}{C}_0 B_q(s_1, s_2) C_0 \rangle = 0$$

и примем во внимание тот важный факт, что $H_q, B_q, \overset{+}{B}_q$, соответствующие различным q, все коммутируют между собой. Тогда с помощью рассуждения, приведенного в (I), нетрудно показать, что вклад в энергию основного состояния, происходящий от H_1, становится пренебрежимо малым по сравнению с вкладом от $U_0 + H_0$, при $V \to \infty$. Грубо говоря, это положение обусловлено тем обстоятельством, что $\overline{H_1^2}$ остается конечным при $V \to \infty$, тогда как энергия пропорциональна V.

Итак, соответствующим подбором функций u, v можно добиться того, что среднее значение $\overline{H} = \langle \overset{*}{C}_0 H C_0 \rangle$ асимптотически точно представляет энергию основного состояния для рассматриваемого гамильтониана H. Отсюда вытекает, что фактическое определение u, v можно произвести следующим образом: - подставляем формулы преобразования (4) в выражение $\bar{H}$ и находим

$$\bar{H} = \sum_{q,s} \{E(q) - E_F\} \sum_{s'} \overset{*}{v}(q,s,s') v(q,s,s') +$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{(q,q', \quad s \quad)} \overset{\circ}{I}(q,q'|s_1,s_2,s_2',s_1') (\sum_s \overset{*}{v}(q,s_1,s) \overset{*}{u}(q,s_2,s)) \times$$

$$\times (\sum_s u(q,s_2',s) v(q,s_1',s_1)) = \mathcal{E}(u,v). \tag{6}$$

Тогда u, v мы должны определить из условия минимума формы $\mathcal{E}(u,v)$ при наличии дополнительных условий (5). Для таких u, v выражение $\mathcal{E}$ и дает искомое значение энергии основного состояния. Соответствующее уравнение стационарности будет

$$\delta\tilde{\mathcal{E}} = \delta\{\mathcal{E} + \sum_{q,s,s'} [\lambda(q,s,s')\xi(q,s,s') + \mu(q,s,s')\eta(q,s,s') +$$

$$+ \overset{*}{\mu}(q,s,s')\overset{*}{\eta}(q,s,s')]\} = 0, \tag{7}$$

где λ, μ - эйлеровские множители. Легко заметить, что это уравнение всегда допускает тривиальное решение:

$$u_q = \theta_G(q)\delta_{s,s'} \quad , \quad v_q = \theta_F(q)\delta_{s,s'}$$

$$\mu = 0, \quad \lambda = \theta_F(q)(E_F - E(q))\delta_{ss'}, \tag{8}$$

где $\theta_F(q)$ равно единице внутри сферы Ферми и нулю вне;

$$\theta_G(q) = 1 - \theta_F(q)$$

Как видно, в соответствующем состоянии $C_0^{(n)}$ взаимодействие неэффективно и весь вклад в энергию его вносится только первым членом гамильтониана (I). Чтобы решить вопрос о том, когда энергия

$C_0^{(n)}$ не будет минимальной и когда, следовательно, основное состояние $C_0^{(s)}$ будет характеризоваться нетривиальным решением уравнений (7), обратимся к известной процедуре вариационного исчисления. Построим выражение второй вариации $\delta^2\tilde{\mathcal{E}}$ для тривиального решения. Найдем

$$\delta^2\tilde{\mathcal{E}} = \sum_{q,s,s'} |E(q) - E_F| \Psi^*(q,s,s')\Psi(q,s,s') +$$

$$+ \frac{1}{2V}\sum_{(q,q',s)} I(q,q'|s_1,s_2,s_2',s_1')\Psi^*(q,s_1,s_2)\Psi(q',s_1',s_2'),$$

6/ где

$$\Psi(q,s,s') = \Theta_F(q)\,\delta u(q,s,s') + \Theta_G(q)\,\delta v(q,s,s').$$

Функции Ψ связаны только одними условиями антисимметрии:

$\Psi(q,s',s) = -\Psi(q,s,s')$, получающимися при вариации условий ортонормальности.

Возвратимся теперь к системе индексов, принятой при написании гамильтониана (I). Получим

$$\delta^2\tilde{\mathcal{E}} = \sum_{k,\sigma,\sigma'} |E(k) - E_F| \Psi^*(k,\sigma,\sigma')\Psi(k,\sigma,\sigma') +$$

$$+ \frac{1}{2V}\sum_{(k,k',\sigma)} J(k,k'|\sigma_1,\sigma_2,\sigma_2',\sigma_1')\Psi^*(k,\sigma_1,\sigma_2)\Psi(k',\sigma_1',\sigma_2').$$

Условием антисимметрии будет

$$\Psi(-k,\sigma_2,\sigma_1) = -\Psi(k,\sigma_1,\sigma_2).$$

Как видно, знак $\delta^2\tilde{\mathcal{E}}$ может быть сделан отрицательным тогда, и только тогда, когда уравнение

$$2|E(k)-E_F|\Psi(k,\sigma_1,\sigma_2)+\frac{1}{V}\sum_{(k',\sigma_1',\sigma_2')} J(k,k'|\sigma_1,\sigma_2,\sigma_2',\sigma_1')\Psi(k',\sigma_1',\sigma_2')= \tag{9}$$

$$=E\Psi(k,\sigma_1,\sigma_2)$$

имеет собственное решение с отрицательным значением E. В таком случае энергия $C_0^{(n)}$ не будет минимальной и возникает основное состояние $C_0^{(s)}$ другого типа, характеризующееся нетривиальным решением уравнений (7). Интересно отметить, что уравнение (9), написанное в τ - представлении (для взаимодействия, независящего от скорости):

$$2|E(k)-E_F|\Psi(\vec{\tau},\sigma_1,\sigma_2)+\sum_{(\sigma_1',\sigma_2')} \Phi(\vec{\tau}|\sigma_1,\sigma_2,\sigma_2',\sigma_1')\Psi(\vec{\tau},\sigma_1',\sigma_2')=$$

$$=E\Psi(\vec{\tau},\sigma_1,\sigma_2) \tag{I0}$$

весьма напоминает уравнение Шредингера для задачи двух тел в системе центра инерции. Отличие состоит в своеобразной форме оператора "кинетической энергии". Это отличие естественно исчезает в случае нулевой плотности, когда $E_F=0$.

Полученное уравнение (I0) можно применить для исследования вопроса о сверхтекучести ядерной материи в качестве критерия неустойчивости нормального состояния.

В заключение заметим, что приведенные рассуждения обобщаются для расчета свободной энергии при температуре, отличной от нуля. Здесь получаются довольно сложные нелинейные уравнения, но уравнения для определения критической температуры фазового перехода опять будут линейными. Так, например, если ограничиться случаем системы частиц одного сорта, взаимодействующих только с противоположными спинами, то из уравнения (I2) работы (I) найдем:

$$2|E(k)-E_F|\,\mathrm{cth}\frac{|E(k)-E_F|}{2\Theta}\Psi(\vec{\tau})+\Phi(\vec{\tau})\Psi(\vec{\tau})=0,$$

где θ - критическая температура.

§ 2.

Рассмотрим динамическую систему Ферми-частиц с гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = \sum \left\{ T(f,f') - \lambda \delta_{f,f'} \right\} \overset{+}{a}_f a_{f'} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum J(f_1, f_2, f_2', f_1') \overset{+}{a}_{f_1} \overset{+}{a}_{f_2} a_{f_2'} a_{f_1'} , \tag{I}$$

где λ - химический потенциал, a, a^{+} - Ферми-амплитуды, f - совокупность индексов, характеризующих состояние одной частицы.

Совершим линейное преобразование Ферми/амплитуд:

$$a_f = \sum_\nu (u_{f\nu} \alpha_\nu + v_{f\nu} \overset{+}{\alpha}_\nu) . \tag{2}$$

Чтобы это преобразование было каноническим и не нарушало тем самым коммутационных свойств Ферми-амплитуд, С - функции u, v должны удовлетворять следующим условиям ортонормальности

$$\xi_{ff'} \equiv \sum_\nu \left\{ u_{f\nu} \overset{*}{u}_{f'\nu} + v_{f\nu} \overset{*}{v}_{f'\nu} \right\} = \delta_{ff'}$$

$$\eta_{ff'} \equiv \sum_\nu \left\{ u_{f\nu} v_{f'\nu} + v_{f\nu} u_{f'\nu} \right\} = 0 . \tag{3}$$

Подставим (2) в выражение (I) и найдем среднее значение $\mathcal{H}$ по вакуумному состоянию C_0 :

$$\alpha_\nu C_0 = 0$$

для новых Ферми-амплидуд.

9/ Получим

$$\overline{\mathcal{H}} = \sum \left\{ T(f, f') - \lambda \delta_{ff'} \right\} F_1(f, f') +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum J(f_1, f_2, f_2', f_1') \left\{ \Phi^*(f_1, f_2) \Phi(f_1', f_2') + \right.$$

$$\left. + F_1(f_1, f_1') F_1(f_2, f_2') - F_1(f_2, f_1') F_1(f_1, f_2') \right\} = \mathcal{E}(u, v), \qquad (4)$$

где

$$F_1(f, f') = \sum_{(\nu)} v^*_{f\nu} v_{f'\nu}$$

$$\Phi(f, f') = \sum_{(\nu)} v_{f\nu} u_{f'\nu}$$

Определим u, v из условия минимума формы $\mathcal{E}(u, v)$ при наличии дополнительных условий (3). Соответствующее уравнение стационарности будет

$$\delta \tilde{\mathcal{E}}(u, v) = 0$$

$$\tilde{\mathcal{E}}(u, v) = \mathcal{E}(u, v) + \sum_{f, f'} \left\{ \lambda(f, f') \xi(f, f') + \mu(f, f') \eta(f, f') + \mu^*(f, f') \eta^*(f, f') \right\}, \qquad (5)$$

где λ, μ - Эйлеровские множители; вариации $\delta u, \delta v$ и $\delta u^*, \delta v^*$ рассматриваются здесь как независимые. Мы приходим теперь к формулировке нового приближенного метода в задаче многих тел. В этом методе мы берем такие u, v, удовлетворяющие уравнениям стационарности, которые дают минимальное значение форме $\mathcal{E}(u,v)$. Для них соответствующее C_0 считаем волновой функцией основного состояния, а $\mathcal{E}(u,v)$ [10] энергией основного состояния. Вопрос об обосновании метода и пределах применимости является достаточно сложным. Поэтому мы здесь ограничимся лишь рядом замечаний.

Так, на основании результатов § I можем утверждать, что предложенный метод дает точное решение задачи в случае, когда в гамильтониане учитываются только взаимодействия пар частиц с противоположными импульсами.

С другой стороны покажем, что среди решений уравнения стационарности всегда содержится решение, точно соответствующее известному методу Фока[2]. Возьмем, в самом деле, ортонормированную в обычном смысле систему функций $\varphi_{f\nu}$:

$$\zeta(f,f') = \sum_{\nu} \varphi^*_{f\nu}\, \varphi_{f'\nu} = \delta_{ff'} \qquad (6)$$

и разделим всю совокупность индексов ν на две части F и G. В качестве F - "сферы Ферми" - возьмем конечное множество индексов ν, состоящее из N элементов (где N - число частиц). Остальные ν объединим в дополнительное множество G. Положим

$$u_{f\nu} = 0\,, \quad v_{f\nu} = \varphi_{f\nu}\,, \quad \nu \in F$$

$$u_{f\nu} = \varphi_{f\nu}\,, \quad v_{f\nu} = 0\,, \quad \nu \in G\,. \qquad (7)$$

Тогда очевидно все условия ортонормальности (3) будут выполнены. Если подставить такие u, v в форму $\mathcal{E}$, то Φ в ней исчезнет и она будет зависеть от F_1, а тем самым только от $\varphi_{f\nu}$ при $\nu \in F$. Условимся обозначить $\nu \in F$ буквой ω. Определим $\varphi_{f\omega}$ из условия минимума формы $\mathcal{E}(\varphi_{f\omega})$ при дополнительных условиях (6).

Соответствующее уравнение стационарности будет

$$\delta \tilde{\mathcal{E}}_F = 0, \quad \tilde{\mathcal{E}}_F = \mathcal{E}(\varphi_{\alpha\omega}) + \sum_{f,f'} \lambda(f,f') \zeta(f,f') \tag{8}$$

Нетрудно заметить, что мы сейчас сформулировали ничто иное, как обычный метод Фока. Волновая функция системы C^0 соответствует такому положению, когда индивидуальные частицы занимают все состояния $\varphi_{\alpha\omega}$; остальные состояния $\varphi_{f\nu}$ пусты. С другой стороны из уравнений (5) видим, что они всегда имеют решение типа (7), в котором $\varphi_{f\omega}$ подобраны по методу Фока как решения уравнений (8).

Итак, наш метод может рассматриваться как обобщение метода Фока и, следовательно, его пределы применимости во всяком случае не будут более узкими. Рассуждая как в работе (I) и поставив выражение для второй вариации $\delta^2 \tilde{\mathcal{E}}(u, v)$ для "нормального решения" (7), можем получить условие его неустойчивости. Условие это формулируется с помощью задачи на собственные значения из соответствующей системы линейных уравнений.

Практически оно может быть использовано, например, для получения критерия сверхпроводимости в модели, в которой явными образом учитывается кристаллическая решетка металла.

В заключение заметим, что изложенный метод может получить дальнейшее развитие и уточнение с помощью исследования цепочки уравнений для "функций распределения".

$$\alpha^{+}_{f_1} \dots \alpha^{+}_{f_s} \alpha_{f'_\tau} \dots \alpha_{f'_1} = F_{s+\tau}(t, f_1, \dots f_s, f'_\tau, \dots f'_1).$$

12

Так, например, если взять стационарный случай и оставить в уравнениях цепочки только функции $F_{0+2}(f_1, f_2)$, $F_{2+0}(f'_1 f'_2)$, а остальными пренебречь, то мы опять получим уравнения нашего метода. Взяв случай, когда F_{0+2} , F_{2+0} явно зависят от времени и ограничиваясь линейным приближением по отклонениям

$$F_{0+2} - F^{st}_{0+2} , \quad F_{2+0} - F^{st}_{2+0}$$

получим уравнения для определения спектра коллективных колебаний.

Пользуясь случаем выразить свою признательность Д.Н.Зубареву и Ю.А.Церковникову за ценные замечания.

Литература

1. Н.Н.Боголюбов, Д.Н.Зубарев, Ю.А.Церковников " К теории фазового перехода" ДАН СССР (В печати).
2. В.А.Фок Zs f Phys. 61, 126 (1930).