СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17 - 12130

А.М.Курбатов, Д.П.Санкович

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА И ТЕОРЕМА БОГОЛЮБОВА (МЛ.) - ПЕТРИНЫ

1978

P17 - 12130

А.М.Курбатов, Д.П.Санкович

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА И ТЕОРЕМА БОГОЛЮБОВА (МЛ.) - ПЕТРИНЫ

Курбатов А.М., Санкович Д.П. P17 - 12130

Кластеризация гамильтониана и теорема Боголюбова (мл.)-
-Петрины

В работе установлена возможность расширения класса модельных гамильтонианов Боголюбова (мл.) - Петрины, для которого в рамках распространения метода аппроксимирующих гамильтонианов на пространство трансляционно-инвариантных функций доказано, что корреляционные функции по исходному гамильтониану являются решениями тех же уравнений, что и корреляционные функции по аппроксимирующему. Для трансляционно-инвариантного гамильтониана, описывающего систему, в которой взаимодействуют частицы лишь из нескольких определенных групп (кластеров), дано конструктивное построение аппроксимирующего гамильтониана, термодинамически эквивалентного исходному.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Kurbatov A.M., Sankovic D.P. P17 - 12130

Clusterisation of Hamiltonian and Bogolubov (Jr.)-Petrina Theorem

The possibility was established of the generalization of a class of Bogolubov (Jr.)-Petrina model Hamiltonians for which is shown by the method of approximating Hamiltonian for the space of translationally-invariant functions that the correlation functions for initial Hamiltonian are the solution of the same equations as the equations for the correlation functions of the approximating Hamiltonian. The constructive method of a construction of approximating Hamiltonians which are equivalent to the initial ones is proposed for the class of translationally-invariant Hamiltonians.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

I. В недавней работе Н.Н.Боголюбова (мл.) и Д.Я.Петрины /I/ установлен класс модельных гамильтонианов, допускающий термодинамически эквивалентную аппроксимацию /2,3/, результатом которой является понижение "операторной степени" исходного гамильтониана. Распространение метода аппроксимирующего гамильтониана /4/ на пространство трансляционно-инвариантных функций /5/ позволило установить следующий важный результат /I/: корреляционные функции по исходному гамильтониану являются решениями тех же уравнений, что и корреляционные функции по аппроксимирующему гамильтониану.

При доказательстве основной теоремы в работе /I/ как потенциал взаимодействия, так и сами корреляционные функции были подчинены некоторым, достаточно общим условиям.

Учитывая существенный интерес к проблеме построения по заданному модельному гамильтониану термодинамики эквивалентного ему аппроксимирующего, следует рассмотреть возможность расширения класса модельных гамильтонианов Боголюбова (мл.)-Петрины /I/. Это и составляет предмет данной работы.

2. Рассмотрим семейство S операторов рождения и уничтожения $\psi_r^+(f)$ и $\psi_r(f)$:

$$\psi_r(f) = \int \overline{f(x)}\,\psi_r(x)\,dx\,, \quad \psi_r^+(f) = \int f(x)\,\psi_r^+(x)\,dx\,, \qquad (1)$$

где операторные величины $\psi_r(x), \psi_r^+(x)$ удовлетворяют стандартным антикоммутационным соотношениям:

$$\{\psi_r(x), \psi_r(y)\} = 0\,, \quad \{\psi_r(x), \psi_s^+(y)\} = \delta_{rs}\,\delta(x-y)\,, \qquad (2)$$

а $f(x)$-квадратично интегрируемая функция.

Здесь $\{A,B\} \equiv AB + BA$ – антикоммутатор. Величина $\psi_r(x)$ уничтожает фермион спина r в точке x трехмерного пространства в момент времени $t=0$, $\psi_r^+(x)$ – рождает такой фермион. Везде в дальнейшем мы будем работать с операторами, относящимися к моменту времени $t=0$. Благодаря соотношениям (2), операторы из семейства S – ограниченные. Квадрат их нормы есть $\int |f|^2 dx$. Определим теперь алгебру $\mathbb{R}$ как алгебру фон Неймана, которая генерируется семейством S. Это означает, что $\mathbb{R}$ состоит из всех операторов, являющихся ограниченными функциями операторов из S.

Рассмотрим следующий гамильтониан:

$$H = \lim_{V\to\infty} \int dx \left[\psi_r^+(x)\left(-\frac{\Delta}{2m} - \mu\right)\psi_r(x) - C \right] + \lim_{V\to\infty} H_{int}(V). \quad (3)$$

Мы используем естественную систему единиц $\hbar = 1$, $c = 1$.

$$H_{int}(V) = \sum_{m,n} \int_V f_{m,n}(x_1, x_2, \ldots, x_m | y_1, y_2, \ldots, y_n), \quad (4)$$

$$\psi_{r_1}^+(x_1)\psi_{r_2}^+(x_2)\ldots\psi_{r_m}^+(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\ldots\psi_{s_n}(y_n)\,dx_1\ldots dy_n.$$

Будем считать, что $H_{int}(V) = H_{int}^+(V)$, $H_{int}(V)$ – фермичетен, то есть $m+n$ – четное число, H – трансляционно-инвариантен, то есть:

$$f_{m,n}(x_1,\ldots,x_m|y_1,\ldots,y_n) = \int v_{m,n}(p_1,\ldots,p_m|q_1,\ldots,q_n), \quad (5)$$

$$\delta(p_1+\ldots+p_m-q_1-\ldots-q_n)\exp\left\{-i\left[\sum_1^m p_k x_k - \sum_1^n q_e y_e\right]\right\} dp_1\ldots dp_m dq_1\ldots dq_n.$$

Кроме того, $f_{m,n}(x_1, x_2, \ldots, x_m | y_1, y_2, \ldots, y_n)$ антисимметрична по аргументам $(x_1, x_2, \ldots, x_m)$ и $(y_1, y_2, \ldots, y_n)$ соответственно, а также $f_{m,n}(x_1,\ldots,x_m|y_1,\ldots,y_n)$ быстро убывает при $|x_i|$ $(i=1,2,\ldots,m)$ или $|y_i|$ $(i=1,2,\ldots,n)$, достаточно больших.

Предположим, что во взаимодействии участвуют не все частицы, а лишь частицы из нескольких групп ("кластеров"). В соответствии с этим предложением построим следующий модельный гамильтониан:

$$H_{int}^{(M)} = \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \sum_{m,n} \int_V f_{m,n}^{(M)}(x_1, x_2, \ldots, x_m | y_1, y_2, \ldots, y_n), \quad (6)$$

$$\psi_{r_1}^+(x_1)\psi_{r_2}^+(x_2)\ldots\psi_{r_m}^+(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\ldots\psi_{s_n}(y_n)\,dx_1\ldots dx_m dy_1\ldots dy_n,$$

где

$$f_{m,n}^{(M)} = \int v_{m,n}(p_1, p_2, \ldots, p_m | q_1, q_2, \ldots, q_n), \quad (7)$$

$$\delta(p_1+\ldots+p_m)\delta(q_1+\ldots+q_n)\exp\left\{-i\left[\sum_1^m p_j x_j - \sum_1^n q_j y_j\right]\right\} dp_1\ldots dp_m dq_1\ldots dq_n.$$

Будем также предполагать, что m и n – четные числа. Отметим, что $f_{m,n}^{(M)}(x_i|y_j)$ – трансляционно-инвариантна отдельно по аргументам $(x_1, x_2, \ldots, x_m)$ и $(y_1, y_2, \ldots, y_n)$. В дальнейшем мы будем пользоваться следующей леммой /5/.

Лемма. Пусть $Q(x)$ – квазилокальная величина,

$$Q(x) = \int F(z_1, z_2, \ldots, z_m | z_1', z_2', \ldots, z_n')\psi^+(x+z_1)\ldots\psi(x+z_n')\,dz_1\ldots dz_n', \quad (8)$$

причем $F(z_1, z_2, \ldots, z_m | z_1', z_2', \ldots, z_n')$ быстро убывает, когда хотя бы один из аргументов стремится к $\pm\infty$. Кроме того, $F(z_i, z_j')$ не является трансляционно-инвариантной по совокупностям $\{z_1, z_2, \ldots, z_m\}$ и $\{z_1', z_2', \ldots, z_n'\}$, своих аргументов. Конструкция (8) предполагается ферми-четной. Тогда $\overline{Q} = \lim_{V\to\infty} 1/V \int Q(x)\,dx$ имеет C – числовой характер в случае, когда мы имеем дело с неприводимым представлением алгебры фон Неймана $\mathbb{R}$, то есть коммутирует со всеми элементами этой алгебры.

Доказательство.

Очевидно, достаточно показать, что $[\overline{Q}, \psi_r^+(f)] = 0$ и $[\overline{Q}, \psi_r(f)] = 0$.

Имеем:

$$[\overline{Q}, \psi^+(f)] = \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \int F(z_1, z_2, \ldots, z_m | z_1', z_2', \ldots, z_n') f(y) \times$$

$$\times \left[\psi^+(x+z_1)\ldots\psi^+(x+z_m)\psi(x+z_1')\ldots\psi(x+z_n'), \psi^+(y)\right] dz_1\ldots dz_m dz_1'\ldots dz_n' dx dy =$$

$$= \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{m} (-1)^{j+1} \int F(z_1,\dots,z_m|z_1',\dots,z_n') f(y)\, \delta(y-x-z_j'),$$

$$\psi^+(x+z_1)\dots\psi^+(x+z_m)\,\psi(x+z_1')\dots\psi(x+z_n'),$$

$$dz_1\dots dz_m\, dz_1'\dots dz_n'\, dx\, dy = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\Phi(g) = 0.$$

Здесь $\Phi(g)$ – оператор из $\mathbb{R}$, поскольку g принадлежит пространству быстро убывающих на бесконечности функций.

Наш модельный гамильтониан (6) не принадлежит классу $\overline{Q}$, описанному в лемме, поскольку имеет одну лишнюю интеграцию (в силу свойств функции $f^{(M)}_{m,n}$). Однако коммутатор $H^{(M)}_{int}$ с $\psi^+_r(x)$ и $\psi_r(x)$ можно упростить, воспользовавшись нашей леммой.

Назовем следующий коммутатор: $[H^{(M)}_{int}, \psi_r(y)]$ и воспользуемся неприводимостью представления алгебры $\mathbb{R}$. Имеем:

$$[H^{(M)}_{int}, \psi_r(y)] = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{m,n}\int f^{(M)}_{m,n}(x_1,x_2,\dots,x_m|y_1,y_2,\dots,y_n), \tag{9}$$

$$[\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n), \psi_r(y)]\, dx_1\dots dx_m dy_1\dots dy_n.$$

Коммутатор под знаком интеграла в правой части (9) есть:

$$\psi^+_{r_1}(x_1)\psi^+_{r_2}(x_2)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n)\psi_r(y) -$$

$$-\delta_{r,r_1}\delta(x_1-y)\psi^+_{r_2}(x_2)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n) +$$

$$+\psi^+_{r_1}(x_1)\psi_r(y)\psi^+_{r_2}(x_2)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n) =$$

$$=\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n)\psi_r(y) -$$

$$-\delta_{r,r_1}\delta(x_1-y)\psi^+_{r_2}(x_2)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n) +$$

$$+\delta_{r,r_2}\delta(x_2-y)\psi^+_{r_1}(x_1)\psi^+_{r_3}(x_3)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n) -$$

$$-\psi^+_{r_1}(x_1)\psi^+_{r_2}(x_2)\psi_r(y)\psi^+_{r_3}(x_3)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n) = \dots$$

$$=\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n)\psi_r(y) +$$

$$+\sum_{j=1}^{m}(-1)^j\delta_{r,r_j}\delta(x_j-y)\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_{j-1}}(x_{j-1})\psi^+_{r_{j+1}}(x_{j+1})\dots\psi^+_{r_m}(x_m)$$

$$\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n) - (-1)^{m+n}\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n)\psi_r(y) =$$

$$=\sum_{1}^{m}(-1)^j\delta_{r,r_j}\delta(x_j-y)\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_{j-1}}(x_{j-1})\psi^+_{r_{j+1}}(x_{j+1})\dots\psi^+_{r_m}(x_m),$$

$\psi_{s_1}(y_1)\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n)$, поскольку $m+n$ – четное число. Итак, окончательно получаем:

$$[H^{(M)}_{int}, \psi_r(y)] = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{m,n}\sum_{j=1}^{m}(-1)^j\delta_{r,r_j}\int dx_1 dx_2\dots dx_m dy_1 dy_2\dots dy_n$$

$$f^{(M)}_{m,n}(x_1,x_2,\dots,x_m|y_1,y_2,\dots,y_n)\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_{j-1}}(x_{j-1})\psi^+_{r_{j+1}}(x_{j+1})\dots\psi^+_{r_m}(x_m)$$

$$\psi_{s_1}(y_1)\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n).$$

Учитывая свойство антисимметричности функции $f_{m,n}$, имеем:

$$[H^{(M)}_{int}, \psi_r(y)] = -\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{m,n}\sum_{1}^{m}\delta_{r,r_j}\int f^{(M)}_{m,n}(y,x_1,\dots,x_{m-1}|y_1,\dots,y_n), \tag{10}$$

$$\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_{j-1}}(x_{j-1})\psi^+_{r_{j+1}}(x_j)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\psi_{s_1}(y_1)\dots\psi_{s_n}(y_n)\, dx_1\dots dy_n.$$

В интеграле правой части (10) сделаем следующую линейную замену переменных:

$$z_j = x_j - y, \quad j=1,2,\dots,m-1, \tag{11}$$

$$z_1' = y_1, \quad z_j' = y_j - y_1, \quad j=2,3,\dots,n. \tag{12}$$

Тогда получим в силу свойств $f^{(M)}_{m,n}$:

$$[H^{(M)}_{int}, \psi_r(y)] = -\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{m,n}\sum_{1}^{m}\delta_{r,r_j}\int f^{(M)}_{m,n}(0,x_1-y,\dots,x_{m-1}-y|,$$

$$|0,y_2-y_1,\dots,y_n-y_1)\psi^+_{r_1}(x_1)\dots\psi^+_{r_{j-1}}(x_{j-1})\psi^+_{r_{j+1}}(x_j)\dots\psi^+_{r_m}(x_m)\times$$

$$\cdot \psi_{s_1}(y_1)\,\psi_{s_2}(y_2)\dots\psi_{s_n}(y_n)\,dx_1\dots dx_{m-1}\,dy_1\dots dy_n =$$

$$= -\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{m,n}\sum_{j=1}^{m}\delta_{r,r_j}\,f_{m,n}^{(M)}(0,z_1,\dots,z_{m-1}|0,z_2',\dots,z_n'),$$

$$\psi_{r_1}^{+}(y+z_1)\dots\psi_{r_{j-1}}^{+}(y+z_{j-1})\,\psi_{r_{j+1}}^{+}(y+z_j)\dots\psi_{r_m}^{+}(y+z_{m-1}), \tag{I3}$$

$$\psi_{s_1}(z_1')\,\psi_{s_2}(z_2'+z_1')\dots\psi_{s_n}(z_n'+z_1')\,dz_1\dots dz_{m-1}\,dz_1'\dots dz_n'.$$

При получении (I3) учтено, что якобиан преобразования (II)-(I2)

$$\mathcal{D} = \det\left\| \frac{\partial(y_j)}{\partial(z_k')} \right\| = 1. \tag{I4}$$

Рассмотрим одно слагаемое в (I3).

$$[H_{int}^{(M)},\psi_r(y)]_{(m,n,j)} = -\lim_{V\to\infty}\int dz_2'\dots dz_n'\int\delta_{r,r_j}\,dz_1\dots dz_{m-1},$$

$$f_{m,n}^{(M)}(0,z_1,\dots,z_{m-1}|0,z_2',\dots,z_n')\,\psi_{r_1}^{+}(y+z_1)\dots\psi_{r_{j-1}}^{+}(y+z_{j-1}), \tag{I5}$$

$$\psi_{r_{j+1}}^{+}(y+z_j)\dots\psi_{r_m}^{+}(y+z_{m-1})\frac{1}{V}\int\psi_{s_1}(z_1')\dots\psi_{s_n}(z_1'+z_n')\,dz_1'.$$

Оператор $\int dz_1\dots dz_{m-1}\,f_{m,n}^{(M)}(0,z_1,\dots,z_{m-1}|0,z_2',\dots,z_n')$

$$\psi_{r_1}^{+}(y+z_1)\dots\psi_{r_{j-1}}^{+}(y+z_{j-1})\,\psi_{r_{j+1}}^{+}(y+z_j)\dots\psi_{r_m}^{+}(y+z_{m-1})$$

есть ограниченный оператор для всякого z_j' , $j = 2,3,\dots,n$, норма которого стремится к нулю при больших $|z_j'|, j=2,3,\dots,n$. Поэтому, при использовании неприводимого представления алгебры $\mathbb{R}$, мы можем, в соответствии с леммой, заменить последний фактор в (I5) C – числовой функцией $\varphi(z_2',z_3',\dots,z_n')$ (n –четно). Тогда получаем:

$$[H_{int}^{(M)},\psi_r(y)]_{(m,n,j)} = -\delta_{r,r_j}\int f_{m,n}^{(M)}(0,z_1,\dots,z_{m-1}|0,z_2',\dots,z_n'),$$

$$\varphi(z_2',\dots,z_n')\,\psi_{r_1}^{+}(y+z_1)\dots\psi_{r_{j-1}}^{+}(y+z_{j-1})\,\psi_{r_{j+1}}^{+}(y+z_j)\dots \tag{I6}$$

$$\dots\psi_{r_m}^{+}(y+z_{m-1})\,dz_1\dots dz_{m-1}\,dz_2'\dots dz_n'.$$

Введем далее

$$C_{(m,n,j)}^{(1)}(z_1,\dots,z_{m-1}) \equiv \int f_{m,n}^{(M)}(0,z_1,\dots,z_{m-1}|0,z_2',\dots,z_n'), \tag{I7}$$

$$\varphi(z_2',z_3',\dots,z_n')\,dz_2'\,dz_3'\dots dz_n'.$$

Тогда имеем для монома (m,n,j) полного коммутатора следующее представление:

$$[H_{int}^{(M)},\psi_r(y)]_{(m,n,j)} =$$

$$= -\delta_{r,r_j}\int C_{(m,n,j)}^{(1)}(z_1,\dots,z_{m-1})\,\psi_{r_1}^{+}(y+z_1)\dots\psi_{r_m}^{+}(y+z_{m-1})\,dz_1\dots dz_{m-1}. \tag{I8}$$

Совершенно аналогично мы определим коммутатор $H_{int}^{(M)}$ с $\psi_r^{+}(y)$. Получим оператор степени $n-1$. Поэтому в неприводимом представлении исходный модельный гамильтониан $H_{int}^{(M)}$ может быть заменен хорошо определенным аппроксимирующим гамильтонианом $H_{int}^{(M)}(\{C\})$ следующего вида:

$$H_{int}^{(M)}(\{C\})^{(m,n)} = \int C_m^{(1)}(z_1,\dots,z_{m-1})\,\psi_{r_1}^{+}(y+z_1)\dots\psi_{r_m}^{+}(y+z_{m-1})\,\psi_r^{+}(y)\,dy\,\times \tag{I9}$$

$$\times dz_1\dots dz_{m-1} + \int C_n^{(2)}(z_1,\dots,z_{n-1})\,\psi_{s_1}(y+z_1)\dots\psi_{s_n}(y+z_{n-1})\,\psi_s(y)\,dy\,dz_1\dots dz_{n-1}.$$

В случае $m=2,\ n=2$ мы имеем известный результат теории БКШ сверхпроводимости /2,5,I/. В общем случае формула (I9) совпадает с результатом работы /I/, полученным для каждого объема с использованием методики пространства трансляционно-инвариантных функций. Неизвестные C –числовые функции $C_m^{(1)}$

и $C_n^{(2)}$ определяются с помощью леммы как средние по вакууму аппроксимирующего гамильтониана:

$$\overline{Q} = \langle \Psi_0 \mid Q(x) \mid \Psi_0 \rangle . \tag{20}$$

Например, для φ имеем:

$$\varphi(z_2', z_3', \dots, z_n') = \langle \Psi_0 \mid \psi_{s_n}(z_n') \dots \psi_{s_3}(z_3') \psi_{s_2}(z_2') \psi_{s_1}(0) \mid \Psi_0 \rangle . \tag{21}$$

Итак, в нашем подходе мы получим результат, совпадающий с общей идеей метода аппроксимирующего гамильтониана. Уравнения для определения неизвестных C -числовых функций (20) соответствуют уравнениям молекулярного поля в традиционных моделях с парным взаимодействием, изученным в /4/. Заметим, что мы рассмотрели один из вариантов разбиения исходного взаимодействия на "кластеры". Произвольное разбиение исследуется аналогично.

Пользуясь случаем, авторы выражают глубокую благодарность Н.Н.Боголюбову за обсуждение работы и Н.Н.Боголюбову (мл.) и Д.Я. Петрине за многократные обсуждения данной темы и постоянное внимание к работе.

Авторы искренне признательны С.С.Хоружему за обсуждение результатов работы.

Литература.

1. Н.Н.Боголюбов (мл.), Д.Я.Петрина. ТМФ, 33, № 2 (1977).
2. N.N.Bogolubov. Physica, 26, 51 (1960).
3. G.Wentzel. Phys. Rev., 120, 1572 (1960).
4. Н.Н.Боголюбов (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов, "Наука", М., 1974.
5. R.Haag. Nuovo Cimento, vol. XXV, N 2 (1962).
6. Д.Я.Петрина. ТМФ, 4, №3 (1970).

Рукопись поступила в издательский отдел
26 декабря 1978 года.