СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17 - 12131

А.М.Курбатов, Д.П.Санкович

ПРИНЦИП ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ И УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

1978

P17 - 12131

А.М.Курбатов, Д.П.Санкович

ПРИНЦИП ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ И УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Курбатов А.М., Санкович Д.П. P17 - 12131

Принцип термодинамической эквивалентности и уравнения самосогласования

Развит метод термодинамически эквивалентной аппроксимации модельных гамильтонианов, позволяющий получать аналитическое выражение для асимптотической (в термодинамическом пределе) функции свободной энергии. При этом вопрос о возможности точного в термодинамическом пределе вычисления свободной энергии исходной модельной системы связан с решением получаемых в данном подходе обобщенных уравнений самосогласования. Исследованы конкретные квантово-статистические модели: обобщенный гамильтониан БКШ, гамильтониан минимаксной задачи Н.Н.Боголюбова (мл.), модель с неполиномиальным взаимодействием Бранкова-Загребнова-Тончева, системы с парным взаимодействием.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Kurbatov A.M., Sankovic D.P. P17 - 12131

Principle of Thermodynamic Equivalency and Self-Consistent Equations

A method of thermodynamic equivalent approximation is developed which allows one to obtain the asymptotical (in the thermodynamic sense) free energy function. For this the question of the possibility to obtain an exact (in the thermodynamic sense) expression for the free energy function is connected with solution of obtained in this approach generalized self-consistent equations. The quantum statistical models were studied: generalized BCS-Hamiltonian, Hamiltonian of Bogolubov (Jr.)'s "minimax" problem, Brankov-Tonchev-Zagrebnov's model with non-polynomial interactions, some systems with pair interactions.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

I. Введение.

Одной из важнейших проблем статистической механики является рассмотрение точно решаемых модельных задач , то есть некоторых упрощенных систем многих взаимодействующих частиц, которые тем или иным способом описывают реальные закономерности. Такое рассмотрение вносит существенный вклад в наше понимание весьма сложных задач статистической механики и, в частности, полезно для обоснования используемых там приближений.

При исследовании самих модельных задач существенную роль играют точные методы, не использующие те или иные формы теории возмущений. К таким методам,в первую очередь,следует отнести метод аппроксимирующего гамильтониана, основы которого были заложены Н.Н.Боголюбовым в фундаментальных исследованиях по теории сверхтекучести /1/ и сверхпроводимости /2/. В дальнейшем, в работах Н.Н.Боголюбова (мл.)/3-6/ метод аппроксимирующего гамильтониана был развит для широкого класса модельных систем, гамильтониан взаимодействия которых построен на ограниченных по норме динамических операторах. Идеи, заложенные в этих работах, послужили основой для рассмотрения с помощью метода аппроксимирующего гамильтониана ряда других термодинамических задач: взаимодействие многочастичной системы с бозонным полем, системы с перекрестным взаимодействием и т.д.

Мы не будем подробно останавливаться на обзоре результатов этого направления, а укажем лишь наиболее существенные моменты, характерные при использовании метода аппроксимирующего гамильтониана[6].

Рассматриваемая система, описываемая гамильтонианом H, представляет собой систему тождественных частиц, взаимодействующих между собой и (или) с какими-то внешними полями. В методе аппроксимирующего гамильтониана используют разбиение H на две части:

$$H = H_0\{C\} + H_1\{C\}, \qquad (1.1)$$

причем в качестве "аппроксимирующего" гамильтониана $H_0\{C\}$, зависящего от набора C – числовых вариационных параметров $\{C\}$, обычно выбирают квадратичный по ферми (или бозе) полевым операторам или же линейный по операторам Паули гамильтониан. Параметры $\{C\}$ в таком подходе выбираются из условия абсолютного минимума функции свободной энергии, построенной по аппроксимирующему гамильтониану:

$$f[H_0\{\bar{C}\}] = \mathrm{abs}\min_{\{C\}} f[H_0\{C\}].$$

При этом для $\{C\}$ получаются уравнения, получившие название уравнений самосогласования. После этого доказывается асимптотическая близость (в смысле обычного термодинамического предельного перехода: $N \to \infty$, $V \to \infty$, $V/N = const$) свободных энергий, вычисленных по модельному и аппроксимирующему гамильтонианам. Последний этап представляет наибольшую математическую трудность и именно на этом этапе возникают ограничения на операторную структуру модельного гамильтониана.

В настоящей работе предложен метод, характерной чертой которого является перенесение трудностей исследования разности свободных энергий модельной и аппроксимирующей систем на уравнения самосогласования, которые получаются в результате требования совпадения (при $V \to \infty$) этих свободных энергий. При этом мы получаем более сложные уравнения самосогласования, но расширяем класс точно решаемых модельных систем.

2. Уравнения самосогласования и общая формулировка метода

Мы рассмотрим вопрос о возможности вычисления свободной энергии системы с помощью аппроксимирующего гамильтониана, имеющего более простую операторную форму, чем исходный гамильтониан, который мы будем называть модельным.

Пусть наша система описывается гамильтонианом

$$H = H_0 + H_1, \qquad (2.1)$$

где H_0 – свободный гамильтониан, квадратичный по операторам рождения и уничтожения (или линейный по Паули-операторам); H_1 – гамильтониан, отвечающий взаимодействию в системе.

Свободная энергия в единице объема для системы с гамильтонианом Γ определяется следующим образом:

$$f_V(\Gamma) = -\frac{\theta}{V} \ln Sp\, e^{-\beta\Gamma}, \qquad (2.2)$$

здесь $\beta^{-1} = \theta$ – температура системы; V – объем; N – число частиц;

$$n = \frac{1}{v} = \frac{N}{V}. \qquad (2.3)$$

При термодинамическом предельном переходе ($V \to \infty$, $N \to \infty$, $n = const$) имеем:

$$f(\Gamma) = \lim_{V \to \infty} f_V(\Gamma) \qquad (2.4)$$

Воспользуемся теперь известными неравенствами Голдена-Томпсона[7-8] и Боголюбова-Пайерлса[9-10]:

$$Sp(e^A e^B) \geq Sp\, e^{A+B}, \qquad (2.5)$$

$$Sp\, e^{A+B} \geq (Sp\, e^A)\, \exp\{[Sp(Be^A)][Sp\, e^A]^{-1}\}. \qquad (2.6)$$

Введем, кроме того, аппроксимирующий гамильтониан $H_0\{C\}$, зависящий от счетного семейства C-числовых параметров $\{C\}$, которые в дальнейшем мы будем называть параметрами самосогласования. Далее для удобства рассмотрим случай одного такого параметра. Тогда

$$H = H_0(C) + H_1(C) \qquad (2.7)$$

и

$$\frac{dH_0(C)}{dC} = -\frac{dH_1(C)}{dC}. \qquad (2.8)$$

С помощью (2.5) и (2.6) для системы (2.7) имеем

$$-\frac{\theta}{V} \ln\{Sp[e^{-\beta H_0(C)} e^{-\beta H_1(C)}]\} \leq f_V(H) \leq f_V[H_0(C)] + \frac{1}{V}\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)}. \qquad (2.9)$$

Величина в правой части (2.9) вычисляется довольно легко с использованием известной теоремы Вика-Блоха-де Доминисиса [11] в случае квадратичного по операторам поля гамильтониана $H_0(C)$.

Поскольку наша цель заключается в асимптотически точном вычислении свободной энергии модельной системы, то, исходя из (2.9), естественно потребовать, чтобы:

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H] = \lim_{V\to\infty}\left\{f_V[H_0(C)] + \frac{1}{V}\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)}\right\}. \qquad (2.10)$$

Таким образом, мы приходим к следующему утверждению. Если параметр самосогласования C выбран как решение уравнения (2.10), то свободная энергия $f_V[H]$ модельной системы есть $f_V[H_0(\bar{C})] + \frac{1}{V}\langle H_1(\bar{C})\rangle_{H_0(\bar{C})}$, где $\bar{C}$ и есть искомое решение (2.10). При этом $\bar{C}$ реализует абсолютный минимум правой части неравенства (2.9). Таким образом, в данном подходе вопрос о возможности точного в термодинамическом пределе вычисления свободной энергии модельной системы связан с возможностью решения уравнения самосогласования (2.10). При этом операторная структура гамильтониана H не имеет решающего значения для асимптотически точного вычисления свободной энергии по методу аппроксимирующего гамильтониана.

Из неравенств (2.9) следует, что проблему термодинамической эквивалентности модельного и аппроксимирующего гамильтониана можно сформулировать также следующим образом:

$$f_V[H_0(C)] + \frac{1}{V}\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)} \underset{V\to\infty}{=} -\frac{\theta}{V}\ln Sp\left[e^{-\beta H_0(C)} e^{-\beta H_1(C)}\right]. \qquad (2.11)$$

Уравнение типа (2.11) применялось при формулировке вариационного принципа Фейнмана [12] и в квантовой теории поля в методе "прямолинейных траекторий" [13]. В данном подходе (2.11) имеет смысл достаточного условия для аппроксимирующего гамильтониана и "вариационных" параметров самосогласования, которое, как показано в данной работе, для ряда классов модельных задач обеспечивает асимптотическое совпадение свободных энергий модельной и аппроксимирующей систем.

Уравнение (2.11) можно переписать в следующем виде, в котором отмеченная выше связь (2.11) с вариационным принципом Фейнмана становится очевидной:

$$\langle e^{-\beta H_1(C)}\rangle_{H_0(C)} = e^{-\beta\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)}}. \qquad (2.12)$$

Запишем (2.10) в более удобной для дальнейших вычислений форме. Обозначим

$$\chi(C) \equiv Sp\, e^{-\beta H} / Sp\, e^{-\beta H_0(C)},$$

где $C \to H_0(C)$ и $C \to H_1(C)$ – линейные отображения пространства $\mathbb{C}$ в пространство самосопряжённых операторов, действующих в $\mathcal{H}(V)$. Для $\chi(C)$ можно записать следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{d\chi(C)}{dC} = \beta \left\langle \frac{dH_0(C)}{dC} \right\rangle_{H_0(C)} \chi(C). \qquad (2.13)$$

Принимая во внимание начальное условие

$$\chi(C=0) \equiv \chi(0) = Sp\, e^{-\beta H} / Sp\, e^{-\beta H_0(0)}, \qquad (2.14)$$

решение (2.13) можно представить в виде

$$\ln \frac{Sp\, e^{-\beta H}}{Sp\, e^{-\beta H_0(C)}} = \ln \frac{Sp\, e^{-\beta H}}{Sp\, e^{-\beta H_0(0)}} + \beta \int_0^C \left\langle \frac{dH_0(\tau)}{d\tau} \right\rangle_{H_0(\tau)} d\tau, \qquad (2.15)$$

и уравнение самосогласования (2.10) принимает следующий вид:

$$-\frac{\theta}{V}\ln \frac{Sp\, e^{-\beta H}}{Sp\, e^{-\beta H_0(0)}} = \frac{1}{V}\int_0^C \left\langle \frac{dH_0(\tau)}{d\tau} \right\rangle_{H_0(\tau)} d\tau + \frac{1}{V}\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)}. \qquad (2.16)$$

Из (2.9), (2.10) и (2.16) мы видим, что наш метод даёт асимптотически точное решение, то есть уравнение самосогласования (2.10) имеет решение при $V\to\infty$, если выполнено следующее условие:

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V}\langle e^{-\beta H_1(0)}\rangle_{H_0(0)} = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V} e^{-\beta\langle H_1(0)\rangle_{H_0(0)}}. \qquad (2.17)$$

<u>Замечание</u>. Часто мы будем иметь дело со случаем, когда

$$\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)} = 0$$

при любых C. Это достигается перенормировкой свободного гамильтониана в H. В этом случае (2.16) будет иметь решение, реализующее минимум правой части в (2.9) при выполнении условия

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\langle e^{-\beta H_1(0)}\rangle_{H_0(0)} = 0. \qquad (2.18)$$

Итак, мы получили общую схему определения свободной энергии системы с помощью метода уравнений самосогласования. Следует отметить то обстоятельство, что в таком подходе нет никаких ограничений на операторную природу H_0 и H_1 (за исключением требования существования соответствующих средних и свободных энергий). Поэтому таким методом можно рассматривать и модельные гамильтонианы, построенные на неограниченных по норме операторах, например бозевские системы с парным взаимодействием.

3. Модельная система типа БКШ

Рассмотрим модельный гамильтониан следующего вида[5]:

$$H = \mathcal{T} - 2V\mathcal{J}\mathcal{J}^+ , \qquad (3.1)$$

где

$$\mathcal{T} = \sum_p T(p)\, a_p^+ a_p\ , \quad \mathcal{J} = \frac{1}{2V}\sum_p \lambda(p)\, a_p^+ a_{-p}^+ , \qquad (3.2)$$

a_p и a_p^+ –операторы уничтожения и рождения фермионов в состоянии с импульсом и спином $p=(\vec{p},\sigma)$.

Построим аппроксимирующий гамильтониан

$$H_0(C) = \mathcal{T} - 2VC\mathcal{J}^+ - 2VC^*\mathcal{J} + 2VCC^* . \qquad (3.3)$$

Тогда, в соответствии с идеей метода аппроксимирующего гамильтониана[6]

$$H_1(C) \equiv H - H_0(C) = -2V(\mathcal{J}-C)(\mathcal{J}^+ - C^*), \qquad (3.4)$$

$$\frac{dH_0(C)}{dC} = -\frac{dH_1(C)}{dC} = 2V(C^* - \mathcal{J}^+),$$

$$\frac{dH_0(C)}{dC^*} = -\frac{dH_1(C)}{dC^*} = 2V(C - \mathcal{J}) .$$

Соответственно

$$\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)} = -2V\langle \mathcal{J}\mathcal{J}^+\rangle_{H_0(C)} + 2VC\langle \mathcal{J}^+\rangle_{H_0(C)} +$$

$$+ 2VC^*\langle \mathcal{J}\rangle_{H_0(C)} - 2VCC^*$$

и

$$\int_0^C \left\langle \frac{dH_0(t)}{dt}\right\rangle_{H_0(t)} dt = \int_0^C 2V t^* dt - 2V\int_0^C \langle \mathcal{J}\rangle_{H_0(t)} dt =$$

$$= 2VCC^* - 2V\int_0^C \langle \mathcal{J}\rangle_{H_0(t)}\, dt.$$

Вычислим теперь величину $\langle e^{-\beta H_1(0)}\rangle_{H_0(0)}$,входящую в уравнение самосогласования (2.17)

$$\langle e^{-\beta H_1(0)}\rangle_{H_0(0)} = \langle e^{-\beta H_1}\rangle_{\mathcal{T}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\langle H_1^n\rangle_{\mathcal{T}} ,$$

где введены обозначения:

$$H_1 = -\frac{1}{2V}\sum_{p,q}\lambda(p)\lambda^*(q)\, a_p^+ a_{-p}^+ a_{-q} a_q ;$$

и

$$H_1^n = \left[-\frac{1}{2V}\right]^n \sum_{\substack{p_1,p_2,\dots,p_n;\\ q_1,q_2,\dots,q_n}} \lambda(p_1)\dots\lambda^*(q_n)\, a_{p_1}^+ a_{-p_1}^+ \dots a_{-q_n} a_{q_n} .$$

Используя теорему Вика-Блоха-де Доминисиса, искомое среднее под знаком суммирования в бесконечном ряде для $\langle e^{-\beta H_1}\rangle_{\mathcal{T}}$ можно представить в виде:

$$\langle H_1^n\rangle_{\mathcal{T}} = \left(-\frac{1}{2}\right)^n \frac{1}{V^n} \sum_{\substack{p_1,p_2,\dots,p_n;\\ q_1,q_2,\dots,q_n}} \lambda(p_1)\dots\lambda(p_n)\lambda^*(q_1)\dots\lambda^*(q_n)\times$$

$$\times\langle a_{p_1}^+ a_{-p_1}^+ a_{-q_1} a_{q_1}\dots a_{p_n}^+ a_{-p_n}^+ a_{-q_n} a_{q_n}\rangle_{\mathcal{T}} =$$

$$=\left(-\frac{1}{2}\right)^n \frac{1}{V^n}\sum_{p_1,p_2,\dots,p_n} \lambda(p_1)\dots\lambda^*(p_n)\, \langle a^+_{p_1} a_{p_1}\rangle_T \times\dots$$

$$\dots \langle a^+_{p_n} a_{p_n}\rangle_T \langle a^+_{-p_1} a_{-p_1}\rangle_T \dots \langle a^+_{-p_n} a_{-p_n}\rangle_T$$ + все перестановки.

Здесь учтено, что в силу выбора T в виде (3.2):

$$\langle a^+_p a_q\rangle_T \sim \delta_{pq}, \quad \langle a_p a_q\rangle_T = 0 .$$

Таким образом:

$$\langle e^{-\beta H_1}\rangle_T = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!}\left(-\frac{1}{2}\right)^n \frac{1}{V^n}\sum_{\{P\}}(-1)^{S_P}\prod_{i=1}^{n}\langle a^+_{p_i} a_{p_i}\rangle_T$$

и в силу замечаний п.I мы видим, что данная величина есть независящая от объема V постоянная.

Таким образом, в данной модели уравнение самосогласования принимает вид:

$$-\beta\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)} = -2\beta V\int_0^C \langle J\rangle_{H_0(t)}\,dt + 2\beta V C C^* + const$$

или

$$2\beta V\left[\langle JJ^+\rangle_{H_0(C)} - C^*\langle J\rangle_{H_0(C)}\right] = const. \qquad (3.5)$$

Решение этого уравнения ищем в виде

$$C = C_0 + \frac{1}{V}C_1 , \qquad (3.6)$$

где C_0 и C_1 не зависят от объема V. Тогда из (3.5) находим

$$C_0 = \langle J\rangle_{H_0(C)}, \quad C_1 = \frac{1}{2\beta}\ln\langle e^{-\beta H_1}\rangle_T\left[\langle J\rangle_{H_0(C)}\right]^{-1}. \qquad (3.7)$$

Совершая термодинамический предельный переход, имеем

$$C = \langle J\rangle_{H_0(C)} . \qquad (3.8)$$

Уравнение (3.8) есть известное уравнение самосогласования для данной модели[5], реализующее минимум $f[H_0(C)]$. Заметим, что при этом C величина $\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)} = 0$.
Б дальнейшем мы будем пользоваться одним приемом, который продемонстрируем на исследуемой в этом параграфе модели.

Построим $H_0(C)$ следующим образом:

$$H_0(C) = T - 2VCJ^+ - 2VC^*J + 2VCC^* + K(C),$$

при этом

$$H_1(C) = H - H_0(C) = -2V(J-C)(J^+-C^*) - K(C).$$

Постоянную $K=K(C)$ найдем из условия: $\langle H_1(C)\rangle_{H_0(C)} = 0$,

то есть

$$K = -2V\langle JJ^+\rangle_{H_0(C)} + 2VC\langle J^+\rangle_{H_0(C)} + 2VC^*\langle J\rangle_{H_0(C)} - 2VCC^* .$$

Тогда

$$\langle e^{-\beta H_1(0)}\rangle_{H_0(0)} = e^{\beta K(0)}\langle e^{-\beta H_1}\rangle_T = e^{\beta\langle H_1\rangle_T}\langle e^{-\beta H_1}\rangle_T .$$

Можно показать, что в термодинамическом пределе последнее выражение не дает вклада в уравнение самосогласования, и таким образом опять получить уравнение самосогласования в виде (3.8).

Совершенно аналогично можно рассмотреть модельный гамильтониан Лубана[14] для бозе-газа и получить известное уравнение самосогласования (см. также[15]).

4. Модельная система с положительными и отрицательными константами связи. Принцип "минимакса"

Из общей схемы предложенного метода следует, что для термодинамически точного вычисления свободной энергии модельной системы необходимо минимизировать правую часть исходного неравенства Боголюбова-Пайерлса (2.6) или (2.9) и проверить выполнимость условия самосогласования (2.17) в термодинамическом пределе. При этом подходе вид гамильтониана взаимодействия определяется только возможностью получить самосогласованное решение, но не зависит от положительности или отрицательности констант взаимодействия. В случае же потенциалов взаимодействия определенного знака метод можно значительно упростить и прийти к известному условию "минимакса" Н.Н.Боголюбова (мл.)/16/.

Рассмотрим следующую модельную систему/16/:

$$H = T_0 + 2V \sum_{\alpha=1}^{r} g_\alpha J_\alpha J_\alpha^+ - 2V \sum_{\alpha=r+1}^{r+s} g_\alpha J_\alpha J_\alpha^+ . \tag{4.1}$$

Здесь на операторы T_0, J_α наложены определенные требования, связанные с ограниченностью норм операторов J_α /16/.

В частном случае

$$J_\alpha = \frac{1}{2V} \sum_p \lambda_\alpha(p)\, a_p^+ a_{-p}^+ , \quad \lambda_\alpha(-p) = -\lambda_\alpha(p); \tag{4.2}$$

$$T_0 = \sum_p \left(p^2/2m - \mu \right) a_p^+ a_p \tag{4.3}$$

мы имеем аналог системы типа БКШ с константами разных знаков

$g_\alpha > 0 , \ \forall \alpha \in [1, r+s]$.

Введем теперь оператор

$$T = T_0 - 2V \sum_{\alpha=1}^{r+s} g_\alpha J_\alpha J_\alpha^+ . \tag{4.4}$$

Тогда исходный гамильтониан (4.1) примет вид

$$H_0(C) = T - 2V \sum_{\alpha=1}^{r+s} g_\alpha \left(C_\alpha J_\alpha^+ + C_\alpha^* J_\alpha - C_\alpha C_\alpha^* \right) . \tag{4.5}$$

Запишем теперь форму аппроксимирующего гамильтониана:

$$H = T - 2V \sum_{\alpha=1}^{r+s} g_\alpha J_\alpha J_\alpha^+ . \tag{4.6}$$

С учетом (2.9) имеем

$$f[H] = \lim_{V\to\infty} f_V[H] = f[H_0(\bar{C})] = \lim_{V\to\infty} f_V[H_0(\bar{C})], \tag{4.7}$$

где $\{\bar{C}\}$ определяются из уравнения самосогласования

$$C_\alpha = \langle J_\alpha \rangle_{H_0(C)} . \tag{4.8}$$

При этом

$$f[H] = \min_{\{C\}} f[H_0\{C\}] . \tag{4.9}$$

Далее

$$H_0\{C,S\} = T_0 + 4V \sum_{\alpha=1}^{r} g_\alpha \left(S_\alpha J_\alpha^+ + S_\alpha^* J_\alpha - S_\alpha S_\alpha^* \right) -$$
$$- 2V \sum_{\alpha=1}^{r+s} g_\alpha \left(C_\alpha J_\alpha^+ + C_\alpha^* J_\alpha - C_\alpha C_\alpha^* \right). \tag{4.10}$$

Учитывая положительность констант связи ($g_\alpha > 0$) и выпуклость функции свободной энергии, имеем:

$$f_V[H_0\{C\}] \geq f_V[H_0\{C,S\}]. \tag{4.11}$$

Применяя неравенство (2.9) и (4.11), получаем:

$$f[H_0\{\bar{C}\}] = f[H_0\{\bar{C},\bar{S}\}], \tag{4.12}$$

где $\bar{S}$ есть решение, реализующее $\max_{\{S\}} f[H_0\{C,S\}]$.

Таким образом, окончательно получаем известный принцип "минимакса" для модельного гамильтониана (4.1) :

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H] = \min_{\{C\}} \max_{\{S\}} f[H_0\{C,S\}], \tag{4.13}$$

где

$$f[H_0\{C,S\}] = \lim_{V\to\infty} f_V[H_0\{C,S\}]. \tag{4.14}$$

Отметим, что в предлагаемом подходе этот принцип можно распространить и на системы с неограниченными по норме операторами.

5. Модель с неполиномиальным взаимодействием

В работах /17/,/18/ в развитие метода Н.Н.Боголюбова (мл.) изучался широкий класс модельных систем с полиномиальным и неполиномиальным взаимодействием. При этом с помощью метода мажорационных оценок Н.Н.Боголюбова (мл.)/6/ удалось показать термодинамическую эквивалентность/19/ исходного модельного и специальным образом построенного аппроксимирующего гамильтониана. В этом параграфе показано, как работает метод уравнений самосогласования для таких моделей.

Рассмотрим модельный гамильтониан следующего вида /18/:

$$H_N = T_N - N\varphi(A_N) - hNA_N. \tag{5.1}$$

Оператор $\varphi(A_N)$ можно определить методами спектральной теории /20/. Будем предполагать, что функция $\varphi(x)$ определена на сегменте $[-M, M]$ действительной оси $R^{(1)}$ и имеет ограниченную вторую производную:

$$\left| \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} \right| \leqslant K, \quad x \in [-M, M]. \tag{5.2}$$

Не ограничивая общности, можно считать, что выполнены следующие условия:

$$\varphi(0) = \varphi'(0) = 0. \tag{5.3}$$

Построим теперь форму аппроксимирующего гамильтониана:

$$H_N^{(0)}(c) = T_N - hNA_N - N\varphi(c) - N\varphi'(c)(A_N - c) + K(c). \tag{5.4}$$

Тогда

$$H_N^{(1)}(c) \equiv H - H_N^{(0)}(c) = -N\int_{-M}^{+M} dE_\lambda \frac{1}{2}\varphi''(\xi_\lambda)(\lambda - c)^2 - K(c), \tag{5.5}$$

где мы использовали спектральное представление для $\varphi(A_N)$ и разложение в ряд Тейлора для $\varphi(x)$ вблизи $x = c$. Здесь $K(c)$ –неоператорная функция, выбираемая из условия:

$$\langle H_N^{(1)}(c) \rangle_{H_N^{(0)}(c)} = 0 \quad \text{при любых } c. \tag{5.6}$$

Гамильтониан $H_N^{(1)}(c)$ можно представить и в таком виде:

$$H_N^{(1)}(c) = N\varphi(c) - N\varphi(A_N) + N\varphi'(c)A_N - Nc\varphi'(c) - K(c). \tag{5.7}$$

Тогда, следуя нашему методу:

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ n=const}} f[H_N] = \lim_{\substack{N\to\infty \\ n=const}} f[H_N^{(0)}(\bar c)], \text{ если} \tag{5.8}$$

$\bar c$ мы выбираем из условия:

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ n=const}} \langle e^{-\beta H_N^{(1)}(c)} \rangle_{H_N^{(0)}(c)} = 1 \tag{5.9}$$

При этом $\bar c$ должно быть решением уравнения для определения $\min\limits_{\{c\}} f[H_N^{(0)}(c)]$, то есть:

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ n=const}} \frac{\partial}{\partial c} f[H_N^{(0)}(c)] = 0. \tag{5.10}$$

Решим уравнение (5.10) :

$$\frac{\partial}{\partial c} f[H_N^{(0)}(c)] = \frac{1}{N} \left\langle \frac{\partial H_N^{(0)}(c)}{\partial c} \right\rangle_{H_N^{(0)}(c)} = 0, \tag{5.11}$$

$$\frac{\partial H_N^{(0)}(c)}{\partial c} = -N\varphi'(c) - N\varphi''(c)(A_N - c) + N\varphi'(c) +$$

$$+ K'(c) = K'(c) - N\varphi''(c)(A_N - c), \tag{5.12}$$

$$\left\langle \frac{\partial H_N^{(0)}(c)}{\partial c} \right\rangle_{H_N^{(0)}(c)} = K'(c) + Nc\varphi''(c) - N\varphi''(c)\langle A_N \rangle_0, \tag{5.13}$$

где использовано следующее обозначение:

$$\langle \ldots \rangle_0 = \frac{Sp \ldots \exp\{-\beta[T_N - hNA_N - N\varphi'(c)A_N]\}}{Sp \exp\{-\beta[T_N - hNA_N - N\varphi'(c)A_N]\}}. \tag{5.14}$$

Таким образом, c выбираем как решение уравнения:

$$N\varphi''(c)\left[\langle A_N \rangle_0 - c\right] = K'(c); \tag{5.15}$$

для того чтобы доказать термодинамическую эквивалентность систем с гамильтонианами (5.I) и (5.4) , надо показать, что при $\bar{C}$, удовлетворяющем уравнению (5.I5), т.е. реализующему $\min f[H_N^{(0)}(C)]$, справедливо условие:

$$\Delta_N \equiv \langle e^{-\beta H_N^{(1)}(0)} \rangle_{H_N^{(0)}(0)} \xrightarrow[n=const]{N\to\infty} const. \qquad (5.16)$$

При этом уравнение самосогласования для данной задачи будет выполнено в термодинамическом пределе; $\bar{C}$ определится из (5.I5) и при этом $\bar{C}$ гамильтонианы (5.II) и (5.4) будут термодинамически эквивалентны.

Поскольку $K(C)$ - C-числовая функция, то:

$$\Delta_N = \langle e^{-\beta H_N^{(1)}(0)} \rangle_{T_N - hNA_N}$$

и

$$H_N^{(1)}(0) = -N\varphi(A_N) - K(0) = -N\int_{-M}^{M} dE_\lambda \frac{1}{2}\varphi''(\rho_\lambda)\lambda^2 - K(0). \quad (5.17)$$

Соответственно, $K(C)$ в силу (5.6) и (5.7) имеет вид:

$$K(C) = N\varphi(C) - N\langle\varphi(A_N)\rangle_{H_N^{(0)}(C)} + N\varphi'(C)\langle A_N\rangle_{H_N^{(0)}(C)} - NC\varphi'(C). \quad (5.18)$$

Тогда, учитывая (5.3), имеем

$$K(0) = -N\langle\varphi(A_N)\rangle_{H_N^{(0)}(0)} = -N\langle\varphi(A_N)\rangle_{T_N - hNA_N}.$$

Таким образом, окончательно получим для $H_N^{(1)}(0)$:

$$H_N^{(1)}(0) = N\langle\varphi(A_N)\rangle_{T_N - hNA_N} - N\varphi(A_N), \qquad (5.19)$$

и искомая величина Δ_N есть:

$$\Delta_N = \langle \exp\{-\beta[N\langle\varphi(A_N)\rangle_{T_N-hNA_N} - N\varphi(A_N)]\}\rangle_{T_N-hNA_N}, \quad (5.20)$$

$$\Delta_N = e^{-\beta N\langle\varphi(A_N)\rangle_{T_N-hNA_N}} \langle e^{\beta N\varphi(A_N)} \rangle_{T_N-hNA_N}. \quad (5.21)$$

Итак, если доказать, что $\Delta_N \xrightarrow{N\to\infty} const$, то будет получен искомый результат. В случае модели типа БКШ, рассмотренной в § 3, мы имеем явный вид $\varphi(A_N)$ и условие для Δ_N получается непосредственным расчетом с помощью статистической теоремы Вика. Попробуем в данном случае написать условие на средние от операторов $\varphi(A_N)$, при котором (5.2I) будет константой, например, равной I. Докажем также, что при этом уравнение самосогласования примет вид /I8/:

$$C = \langle A_N\rangle_0 . \qquad (5.22)$$

Рассмотрим для этого вместо (5.4) следующий аппроксимирующий гамильтониан:

$$H_N^{(0)}(C) = T_N - hNA_N - N\varphi(C) - N\varphi'(C)(A_N - C). \qquad (5.23)$$

Тогда

$$H_N^{(1)}(C) = -N\int_{-M}^{M} dE_\lambda \frac{1}{2}\varphi''(\rho_\lambda)(\lambda - C)^2. \qquad (5.24)$$

При этом, конечно $H_N = H_N^{(0)}(C) + H_N^{(1)}(C).$

Тогда с помощью спектрального представления для $\varphi(A_N)$ можно заметить, что если выполнено условие

$$\langle A_N^2\rangle_0 = \langle A_N\rangle_0^2 \qquad (5.25)$$

при $\bar{C} = \langle A_N\rangle_0$, то уравнение самосогласования

$$-\beta\langle H_N^{(1)}(C)\rangle_0 = \ln\langle e^{-\beta H_N^{(1)}(C)}\rangle_0$$

имеет место; в этом случае:

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ n=const}} f[H_N] = \lim_{\substack{N\to\infty \\ n=const}} f[H_N^{(0)}(\bar{C})]. \qquad (5.26)$$

При получении (5.26) учтено,что при $c=\bar{c}$, удовлетворяющем условию $c=\langle A_N\rangle_0$, имеем:

$$K(\bar{c})=K'(\bar{c})=0, \qquad (5.27)$$

поскольку

$$K'(c)=-Nc\varphi''(c)+N\varphi''(c)\langle A_N\rangle_0+N\varphi'(c)\beta N\varphi''(c)\langle A_N^2\rangle_0-$$

$$-N\varphi'(c)\beta N\varphi''(c)\langle A_N\rangle_0^2-\beta N^2\varphi''(c)\langle\varphi(A_N)A_N\rangle_0+$$

$$+\beta N^2\varphi''(c)\langle\varphi(A_N)\rangle_0\langle A_N\rangle_0\to 0$$ при $c=\langle A_N\rangle_0$ и

выполнены условия (5.25).

При этом условие (5.16) также выполняется.Таким образом, получен результат работы /18/.

В качестве примера рассмотрим статистическую систему изинговского типа с постоянным обменным взаимодействием бесконечного радиуса, находящегося во внешнем поле h .

$$H_N=-\frac{J}{2N}\sum_{i,j=1}^{N}\sigma_i^z\sigma_j^z-\mu h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^z, \qquad (5.28)$$

$$\sigma_i^z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}_i, \quad J>0. \qquad (5.29)$$

Вводя оператор $A_N^z\equiv 1/N\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^z$,мы видим,что (5.30)
(5.28) можно записать в виде:

$$H_N=-\frac{1}{2}JN\left[A_N^z\right]^2-\mu h N A_N^z. \qquad (5.31)$$

Поэтому к (5.31) можно применить отмеченную в этом параграфе процедуру, где

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}Jx^2, \qquad (5.32)$$

$$H_N^{(0)}(c)=-N(\mu h+Jc)A_N^z+\frac{1}{2}JNc^2 \qquad (5.33)$$

Определяя $\bar{c}$ из условия:

$$c=\operatorname{th}\frac{\mu h+Jc}{\theta}, \qquad (5.34)$$

можно доказать,что при этом

$$\langle (A_N^z)^2\rangle_0=\langle A_N^z\rangle_0^2,$$

и тогда для свободной энергии в термодинамическом пределе имеем

$$\lim_{N\to\infty} f[H_N]=\lim_{N\to\infty} f[H_N^{(0)}(\bar{c})]. \qquad (5.35)$$

В работе /18/ рассмотрены некоторые другие примеры систем описанного в этом параграфе типа.

6. Уравнения самосогласования в системах с парным взаимодействием

В предыдущих параграфах мы рассмотрели модельные системы с факторизованным взаимодействием (модель типа БКШ, модель с неполиномиальным взаимодействием). Интересно выяснить вопрос о границах применимости развитого нами метода, основанного на принципе термодинамической эквивалентности /19/, в более реалистических системах парного взаимодействия бозонов или фермионов (или тех и других).

Для рассмотрения таких систем нам понадобится установить справедливость достаточного условия самосогласования (2.17) в случае набора параметров самосогласования $\{C_\alpha\}_{\alpha\in A}$. Мы будем предполагать, что аппроксимирующий гамильтониан $H_0\{C_\alpha\}$ линейно зависит от параметров $\{C_\alpha\}_{\alpha\in A}$,то есть имеет вид:

$$H_0\{C_\alpha\}=T_0+\sum_{\alpha\in A}C_\alpha A_\alpha. \qquad (6.1)$$

В этом случае также можно доказать, что при выполнении условия (2.17) уравнение самосогласования (2.10) имеет решение,реализующее абсолютный минимум правой части неравенства (2.9). Для этого достаточно рассмотреть

$$H_0(t,\{C_\alpha\}) = T_0 + t\sum_{\alpha\in A} C_\alpha A_\alpha, \quad 0\le t\le 1, \qquad (6.2)$$

получить дифференциальное уравнение относительно t для $\chi(t,\{C_\alpha\})$ и воспользоваться теоремой о среднем на сегменте $t\in[0,1]$.

Рассмотрим теперь систему бесспиновых частиц с гамильтонианом вида

$$H = \tilde H_0 + \tilde H_1 , \qquad (6.3)$$

где

$$\tilde H_0 = \sum_p \tilde T(p)\, a_p^+ a_p ;\quad \tilde H_1 = \frac{1}{2V}\sum_{p,q,k} v(k)\, a_p^+ a_q^+ a_{p+k} a_{q-k};\quad v(k)=v(-k).$$

Запишем гамильтониан (6.3) через операторы плотности:

$$\sum_{p,q,k} v(k)\, a_p^+a_q^+a_{p+k}a_{q-k} = \sum_{p,q,k} v(k)\, a_p^+ a_{p+k} a_q^+ a_{q-k} -$$

$$-\sum_{p,q,k} v(k)\,\Delta(q-p-k)\, a_p^+ a_{q-k} = \sum_k v(k)\sum_p a_p^+a_{p+k}\sum_q a_q^+a_{q-k} - N\sum_k v(k).$$

Введём оператор плотности числа частиц:

$$\rho_k = \frac{1}{2V}\sum_p a_p^+ a_{p+k}. \qquad (6.4)$$

Тогда

$$\tilde H_1 = 2V\sum_k v(k)\,\rho_k^+\rho_k - \frac{N}{2V}\sum_k v(k).$$

Из определения (6.4) следует, что:

$$\text{а) } \rho_p^+ = \rho_{-p}, \qquad \text{б) } [\rho_p,\rho_q]=0. \qquad (6.5)$$

Кроме того, в силу определения фурье-образа потенциала парного взаимодействия $v(p)$ имеем:

$$\frac{1}{V}\sum_p v(p) = \frac{\Phi(0)}{(2\pi)^n},$$

где $\Phi(0)$ -потенциал парного взаимодействия бозе-частиц при $|r_1-r_2| = 0$, n -размерность системы. Таким образом, исходный гамильтониан H можно записать в виде:

$$H = H_0 + H_1 , \qquad (6.6)$$

где

$$H_0=\sum_k T(k)\,a_k^+a_k;\quad H_1 = 2V\sum_k v(k)\,\rho_k^+\rho_k;\quad T(k)=\tilde T(k) - \frac{\Phi(0)}{(2\pi)^n}.$$

Построим теперь аппроксимирующий гамильтониан

$$H_0\{C\} = H_0 + 2V\sum_p v(p)(C_p\rho_p^+ + C_p^*\rho_p) - 2V\sum_p v(p)\,C_p^*C_p, \qquad (6.7)$$

$$H_1\{C\} \equiv H - H_0\{C\} = 2V\sum_p v(p)(\rho_p - C_p)(\rho_p^+ - C_p^*). \qquad (6.8)$$

Ясно, что в силу бозевского характера рассматриваемой системы $C_p^* = C_{-p}$. Следовательно:

$$H_0\{C\} = H_0 + 2V\sum_p v(p)(C_p\rho_{-p} + C_{-p}\rho_p) - 2V\sum_p v(p)\,C_p C_{-p} =$$

$$= H_0 + 4V\sum_p v(p)\,C_p\rho_p^+ - 2V\sum_p v(p)\,C_pC_{-p},$$

где мы учли свойства (6.5) и чётность фурье-образа потенциала $v(k)$.

В данном случае достаточное условие аппроксимации (2.I7), очевидно, не выполняется и поэтому применение метода аппроксимирующего гамильтониана в модели неидеального бозе-газа является приближённым способом, основанным на вариационном принципе Фейнмана. Однако если предположить, что исходная система (6.I) содержит только сумму конечного числа мод бозонного поля, то видим, что достаточное условие (2.I7) становится справедливым и в термодинамическом пределе аппроксимирующий гамильтониан (6.7) эквивалентен исходному гамильтониану. Параметры самосогласования при этом выбираются из условия

$$C_p = \langle\rho_p\rangle_{H_0\{C\}}, \qquad (6.9)$$

реализующего абсолютный минимум правой части неравенства (2.9) в случае аппроксимирующего гамильтониана (6.7). Полученный результат находится в соответствии с результатом работы [21] и может быть использован при описании кристаллического состояния системы. В общем случае бесконечного числа мод бозонного поля используемое нами вариационное приближение приводит к обобщению известного результата, полученного с использованием функций Грина в приближении самосогласованного поля Хартри-Фока. В самом деле, аппроксимирующий гамильтониан в виде (6.7) физически означает замену системы с парным взаимодействием между частицами на систему идеальных частиц, находящихся во внешнем самосогласованном поле, фурье-образ потенциала которого $v(p)C_p$ зависит от параметра самосогласования C_p, определяемого из уравнения самосогласования, которое с учётом (2.8) можно переписать в виде

$$\left< \frac{\partial H_1\{C\}}{\partial C_p} \right>_{H_0\{C\}} = \frac{\partial}{\partial C_p} \left< H_1\{C\} \right>_{H_0\{C\}} . \qquad (6.10)$$

В случае конечного числа мод (6.10) принимает вид (6.9), которое на языке функций Грина /21/ означает, что использовано приближение самосогласованного поля для двухчастичной функции Грина:

$$\mathcal{D}_2(t, x_1, x_2; x_1', x_2) \equiv \left< \psi^+(t, x_1') \psi^+(t, x_2) \psi(t, x_2) \psi(t, x_1) \right> =$$

$$= \left< \psi^+(t, x_1') \psi(t, x_1) \right> \left< \psi^+(t, x_2) \psi(t, x_2) \right> = \qquad (6.11)$$

$$= \mathcal{D}_1(t, x_1, x_1') \, \mathcal{D}_1(t, x_2, x_2) .$$

При этом возникающий самосогласованный потенциал Хартри-Фока

$$\mathcal{U}(\vec{z}_1) = \int \phi(\vec{z}_1 - \vec{z}_2) \mathcal{D}_1^{(0)}(\vec{z}_1, \vec{z}_2) d\vec{z}_2 , \qquad (6.12)$$

записанный в импульсном представлении совпадает с нашим самосогласованным потенциалом $\nu(p) C_p$, где C_p определяется из условия (6.9).

Таким образом, мы видим, что использование вариационного принципа Фейнмана и принципа термодинамической эквивалентности приводит в первом приближении (при учёте только парных корреляций между частицами, что фактически означает замену уравнения самосогласования (6.10) на (6.9)) к известному методу самосогласованного поля Хартри-Фока. В случае конечного числа мод бозонного поля данный метод даёт асимптотически точный результат.

Гамильтониан $H_0\{\bar{C}_p\}$ можно диагонализовать /22/ с помощью обобщённого канонического $u-v$ -преобразования Боголюбова /23/

$$b_p = \sum_k u_{pk} a_k + v_{pk} a_k^+ \qquad . \qquad (6.13)$$

В нашем случае можно положить либо $u_{pk} = 0$, либо $v_{pk} = 0$.
После преобразования (6.13) аппроксимирующий гамильтониан примет вид:

$$H_0\{\bar{C}\} = \sum_p E(p; \{\bar{C}_p\}) b_p^+ b_p + E_0\{\bar{C}_p\} \quad . \qquad (6.14)$$

где $E_0\{\bar{C}_p\}$ - с -числовая величина.

Спектр $E(p; \{\bar{C}_p\})$ есть решение соответствующего характеристического уравнения для системы $u-v$ -коэффициентов в (6.13) /23/ с учётом уравнения самосогласования (6.9) или (6.10).

Отметим, что случай ферми-системы с парным взаимодействием можно рассмотреть совершенно аналогично. Отличие будет сотоять в характере спектра $E(p; \{\bar{C}_p\})$, возникающем при учёте антикоммутационных соотношений для фермиевских операторов.

Применим теперь схему уравнений самосогласования к модельной системе электронов проводимости, взаимодействующих с кристаллической решёткой. При этом кулоновское отталкивание между электронами явным образом не учитывается и динамическая система характеризуется гамильтонианом Фрёлиха /24/::

$$H = \sum_{\vec{k}, s} T(k) a_{\vec{k},s}^+ a_{\vec{k},s} + \sum_{\vec{q}} \omega(q) b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + H_{int}^{(Fr)} , \qquad (6.15)$$

$$H_{int}^{(Fr)} = \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec{k}, \vec{q}; s} \sqrt{\omega(q)} \left(a_{\vec{k},s}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},s} b_{\vec{q}}^+ + c.c. \right) ; \qquad (6.16)$$

здесь $T(k)$ -энергия индивидуального электрона, $\omega(q)$ -фононная энергия, g -константа связи, V -объём системы. Операторы рождения и уничтожения $a_{\vec{p},s}^+ a_{p,s}$; $b_{\vec{q}}^+, b_{\vec{q}}$ описывают электроны и фононы и подчиняются каноническим антикоммутационным и каноническим коммутационным соотношениям соответственно.

Рассмотрим следующий оператор:

$$C_{\vec{p}} = b_{\vec{p}} + \frac{g}{\sqrt{2V\omega(p)}} \sum_{\vec{k}, s} a_{\vec{k},s}^+ a_{\vec{p}+\vec{k},s} . \qquad (6.17)$$

Этот оператор, как и его сопряженный $C_{\vec{p}}^+$, является оператором в гильбертовом пространстве и, кроме того, как это легко установить, удовлетворяет каноническим коммутационным соотношениям:

$$[C_{\vec{p}}, C_{\vec{q}}] = 0 \; ; \quad [C_{\vec{p}}, C_{\vec{q}}^+] = \Delta(\vec{p} - \vec{q}) .$$

Кроме того, заметим, что:

$$\left\| \left[a_{\vec{p},s} , \frac{g}{\sqrt{2V}} (\omega(p))^{-1/2} \sum_{\vec{k}, s} a_{\vec{k},s}^+ a_{\vec{q}+\vec{k},s} \right] \right\| = \frac{g}{\sqrt{2V\omega(p)}} \left\| a_{\vec{p}+\vec{q},s} \right\| \xrightarrow[V \to \infty]{} 0 . \qquad (6.18)$$

Из (6.18) естественно предположить, что при термодинамическом предельном переходе ($V \to \infty$, $N/V = const$) оператор

$$\rho_{\vec p} = \frac{g}{\sqrt{2V\omega(p)}} \sum_{\vec k, s} a^+_{\vec k, s}\, a_{\vec p + \vec k, s} \qquad (6.19)$$

ведёт себя как C -число и поэтому изометрический оператор $\mathcal{U}$, совершающий каноническое преобразование (6.17), ($\mathcal{U}$ существует в силу того, что для $C_{\vec p}$ и $C^+_{\vec p}$ существует вакуумный вектор Φ_0 и $C_{\vec p}, C^+_{\vec p}$ -неприводимы, что непосредственно следует из их определения (6.17)) переводит гамильтониан H в термодинамически эквивалентный ему гамильтониан /22/.

В соответствии с вышесказанным попробуем искать форму аппроксимирующего гамильтониана для исходного гамильтониана (6.15) в следующем виде:

$$H_0(\lambda; f) = \sum_{\vec p} T(p)\, a^+_{\vec p} a_{\vec p} + \sum_{\vec p} \omega(p)\, b^+_{\vec p} b_{\vec p} + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec k, \vec q} \sqrt{\omega(q)} \left(a^+_{\vec k} a_{\vec k + \vec q} \lambda^*_{\vec q} + c.c. \right) - \sum_{\vec p} f_{\vec p}\, b^+_{\vec p} - c.c., \qquad (6.20)$$

$f_{\vec p}$ и $\lambda_{\vec p}$ - неизвестные пока C -числовые функции, которые мы определим ниже из специальных соображений (спиновые индексы для простоты опущены).

Диагонализуем квадратичную по бозе-операторам форму аппроксимирующего гамильтониана. Совершим каноническое преобразование:

$$b_{\vec k} = \beta_{\vec k} + \chi_{\vec k} . \qquad (6.21)$$

Тогда бозевская часть гамильтониана (6.20) примет вид:

$$\sum_{\vec k} \omega(k)\, b^+_{\vec k} b_{\vec k} - \sum_{\vec k} f_{\vec k}\, b^+_{\vec k} - c.c. = \sum_{\vec k} \omega(k)\, \beta^+_{\vec k} \beta_{\vec k} + \sum_{\vec k} \omega(k)\, \chi^*_{\vec k} \chi_{\vec k} - \sum_{\vec k} f_{\vec k} \chi^*_{\vec k} - \sum_{\vec k} f^*_{\vec k} \chi_{\vec k} + \sum_{\vec k} \omega(k)\, \beta^+_{\vec k} \chi_{\vec k} + \sum_{\vec k} \omega(k)\, \beta_{\vec k} \chi^*_{\vec k} - \sum_{\vec k} f_{\vec k} \beta^+_{\vec k} - \sum_{\vec k} f^*_{\vec k} \beta_{\vec k}$$

Выберем теперь $\chi_{\vec k}$ из условия:

$$\sum_{\vec k} \left[\omega(k) \chi_{\vec k} - f_{\vec k} \right] \beta^+_{\vec k} = 0$$

или

$$\chi_{\vec k} = f_{\vec k}\, \omega^{-1}(k). \qquad (6.22)$$

Тогда имеем для $H_0^{(B)}(\lambda)$:

$$H_0^{(B)}(\lambda) = \sum_{\vec q} \omega(q)\, \beta^+_{\vec q} \beta_{\vec q} - \sum_{\vec q} \frac{|f_{\vec q}|^2}{\omega(q)}. \qquad (6.23)$$

Мы будем предполагать, что

$$\sum_{\vec q} |f_{\vec q}|^2\, \omega^{-1}(q) < \infty . \qquad (6.24)$$

Тогда линейное каноническое преобразование (6.21) станет собственным, и оператор (6.23) будет представлять собой квадратичную нормальную форму /22/.

Совершая каноническое преобразование (6.21) в исходном модельном гамильтониане (6.15), получаем:

$$H = \sum_{\vec k} T(k)\, a^+_{\vec k} a_{\vec k} + \sum_{\vec q} \omega(q)\, \beta^+_{\vec q} \beta_{\vec q} + \sum_{\vec q} f_{\vec q} \beta^+_{\vec q} + \sum_{\vec q} f^*_{\vec q} \beta_{\vec q} - \sum_{\vec q} \frac{|f_{\vec q}|^2}{\omega(q)} + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec k, \vec q} \sqrt{\omega(q)} \left(a^+_{\vec k} a_{\vec k + \vec q} \beta^+_{\vec q} + a^+_{\vec k + \vec q} a_{\vec k} \beta_{\vec q} \right) + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec k, \vec q} \frac{1}{\sqrt{\omega(q)}} \left(f^*_{\vec q} a^+_{\vec k} a_{\vec k + \vec q} + f_{\vec q} a^+_{\vec k + \vec q} a_{\vec k} \right). \qquad (6.25)$$

В соответствии с общей идеей метода уравнений самосогласования строим "остаточный" гамильтониан $H_1(\lambda)$:

$$H_1(\lambda) \equiv H - H_0(\lambda) = \sum_{\vec q} \left(f_{\vec q} \beta^+_{\vec q} + f^*_{\vec q} \beta_{\vec q} \right) + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec k, \vec q} \sqrt{\omega(q)} \times \left(a^+_{\vec k} a_{\vec k + \vec q} \beta^+_{\vec q} + a^+_{\vec k + \vec q} a_{\vec k} \beta_{\vec q} \right) + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec k, \vec q} \left[\frac{f^*_{\vec q}}{\sqrt{\omega(q)}} - \lambda^*_{\vec q} \sqrt{\omega(q)} \right] a^+_{\vec k} a_{\vec k + \vec q} + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec k, \vec q} \left[\frac{f_{\vec q}}{\sqrt{\omega(q)}} - \lambda_{\vec q} \sqrt{\omega(q)} \right] a^+_{\vec k + \vec q} a_{\vec k}. \qquad (6.26)$$

Воспользуемся теперь свободой в выборе параметра $f_{\vec q}$. Выберем его из следующего условия:

$$f_{\vec{q}} = \omega(q)\,\lambda_{\vec{q}} \qquad (6.27)$$

(При этом (6.24) должно по-прежнему выполняться!) При таком выборе мы получаем следующие выражения для $H_0(\lambda)$ и $H_1(\lambda)$:

$$H_0(\lambda) = \sum_{\vec{k}} T(k)\, a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \omega(q)\, \beta^+_{\vec{q}} \beta_{\vec{q}} - \sum_{\vec{k}} \omega(k)\, \lambda^*_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}} + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \sqrt{\omega(q)}\left(\lambda^*_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}+\vec{q}} + \lambda_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}+\vec{q}} a_{\vec{k}}\right), \qquad (6.28)$$

$$H_1(\lambda) = \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \sqrt{\omega(q)}\left(a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}+\vec{q}}\, \beta^+_{\vec{q}} + c.c.\right) + \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}}\, \omega(k)\, \beta^+_{\vec{k}} + c.c. \qquad (6.29)$$

Воспользуемся теперь идеей метода уравнений самосогласования и вариационным принципом Фейнмана. Отметим сначала, что для любых $\lambda_{\vec{p}}$ справедливо следующее соотношение:

$$\langle H_1(\lambda) \rangle_{H_0(\lambda)} = 0. \qquad (6.30)$$

Последнее условие следует непосредственно из (6.28) и (6.29). Таким образом, уравнения самосогласования в нашей исходной модели принимают вид:

$$\left\langle \frac{\partial H_0(\lambda)}{\partial \lambda_{\vec{p}}} \right\rangle_{H_0(\lambda)} = 0, \qquad \left\langle \frac{\partial H_0(\lambda)}{\partial \lambda^*_{\vec{p}}} \right\rangle_{H_0(\lambda)} = 0. \qquad (6.31)$$

(6.31) получены в соответствии с изложенным выше методом из условия минимизации свободной энергии, построенной по аппроксимирующему гамильтониану (6.28). Из (6.28) имеем

$$\frac{\partial H_0(\lambda)}{\partial \lambda_{\vec{p}}} = -\omega(p)\,\lambda^*_{\vec{p}} + \frac{g}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\omega(p)}\, a^+_{\vec{p}+\vec{k}} a_{\vec{k}}.$$

Тогда условия (6.31) принимают вид:

$$\lambda_{\vec{p}} = +\frac{g}{\sqrt{2V}}\, \omega^{-1/2}(p) \sum_{\vec{k}} \langle a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}+\vec{p}} \rangle_{H_0(\lambda)}, \qquad \lambda^*_{\vec{p}} = +\frac{g}{\sqrt{2V}}\, \omega^{-1/2}(p) \sum_{\vec{k}} \langle a^+_{\vec{k}+\vec{p}} a_{\vec{k}} \rangle_{H_0(\lambda)}. \qquad (6.32)$$

Сравнивая условия самосогласования (6.32) с соображениями, приведёнными выше относительно операторов $\beta_{\vec{p}}, \beta^+_{\vec{p}}$ (см. формулу (6.19)), мы видим, что форма аппроксимирующего гамильтониана (6.28) подбирается таким образом, что исходная и аппроксимирующая системы становятся термодинамически эквивалентными (с учётом выполнимости вариационного принципа Фейнмана).

Для того чтобы доказать термодинамическую эквивалентность гамильтонианов (6.15) и(6.28) при выборе параметров самосогласования $\lambda_{\vec{p}}, \lambda^*_{\vec{p}}$ из условия (6.32), достаточно, как это было доказано выше, показать, что

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \ln \left\langle e^{-\beta H_1(\lambda_p = 0)} \right\rangle_{H_0(\lambda_p \neq 0)} = 0. \qquad (6.33)$$

Здесь мы учли, что в данном случае выполнено условие (6.30). Разложим величину в левой части (6.33) в ряд:

$$\left\langle e^{-\beta H_1(0)} \right\rangle_{H_0(0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle H_1^n \rangle_{H_0(0)}. \qquad (6.34)$$

Используя явный вид операторов $H_1(0)$ и $H_0(0)$, нетрудно заметить, что усреднения по электронным и фононным переменным проводятся независимо и все $\langle H_1^n \rangle_{H_0} = 0$ при n -нечётных. При чётных n зависимость от объёма каждого члена в ряде (6.34) имеет следующий вид:

$$\langle H_1^n \rangle_{H_0} \sim V^{n/2}. \qquad (6.35)$$

Например, в этом можно убедиться непосредственно для членов $\langle H_1^2 \rangle_{H_0}$ и $\langle H_1^4 \rangle_{H_0}$:

$$\langle H_1^2 \rangle_{H_0} = \frac{g^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1,\vec{q}_1\\ \vec{k}_2,\vec{q}_2}} \sqrt{\omega(q_1)\omega(q_2)} \left\langle \left(b^+_{\vec{q}_1} a^+_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_1+\vec{q}_1} + c.c.\right)\left(b^+_{\vec{q}_2} a^+_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2+\vec{q}_2} + c.c.\right) \right\rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{g^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1,\vec{q}_1\\ \vec{k}_2,\vec{q}_2}} \sqrt{\omega(q_1)\omega(q_2)} \Big[\langle b^+_{\vec{q}_1} b_{\vec{q}_2} \rangle_{H_0^{(B)}} \langle a^+_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_1+\vec{q}_1} a^+_{\vec{k}_2+\vec{q}_2} a_{\vec{k}_2} \rangle_{H_0^{(F)}} + \langle b_{\vec{q}_1} b^+_{\vec{q}_2} \rangle_{H_0^{(B)}} \langle a^+_{\vec{k}_1+\vec{q}_1} a_{\vec{k}_1} a^+_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2+\vec{q}_2} \rangle_{H_0^{(F)}} \sim$$

$$\sim V \qquad ,$$

что сразу следует из теоремы Вика и того, что усреднение берётся по диагональным гамильтонианам. Аналогично можно показать, что $\langle H_1^4\rangle_{H_0} \sim V^2$. Доказательство для произвольного чётного n проводится по индукции. Исходя из свойств (6.30) и (6.35), предполагая сходимость ряда (6.34), можно показать, что существует такая постоянная A , что:

$$\langle e^{-\beta H_1(0)}\rangle_{H_0(0)} \leq e^{A\sqrt{V}}, \qquad (6.36)$$

где $A>0$ не зависит от объёма V . Отсюда сразу следует выполнимость соотношения (6.33).

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность профессору Н.Н.Боголюбову (мл.) за постоянное внимание к работе, а также всем участникам семинара сектора теории конденсированного состояния ЛТФ ОИЯИ за полезные дискуссии.

Литература

I Н.Н.Боголюбов.Изв.АНСССР,Сер. физ.,т.II, 77-90(I947).

2 N.N.Bogolubov. Physica, 26, 51 (1960).

3 Н.Н.Боголюбов(мл.). УМЭ,I7, № 3(I965).

4 Н.Н.Боголюбов(мл.).Вестник МГУ, № I(I966).

5 N.N.Bogolubov (Jr.). Physica, 32, 933-944 (1966).

6 Н.Н.Боголюбов(мл.).Метод исследования модельных гамильтонианов, "Наука",М., I974.

7 S.Golden, Phys. Rev., B137, 1127-1128 (1965).

8 C.Thompson, J.M.P., 6, 1812-1813 (1965).

9 N.N.Bogolubov, Phys. Abh. SU., 6, 1; 6, 113; 6, 229 (1962) (in German).

IO R.Pierls, Proc. Camb. Phil. Soc., 32, 477-481 (1936).

II C.Bloch, C. de Dominicis, Nucl. Phys. 7, 459, 1958. M.Gaudin, Nucl. Phys. 15, 89, 1960.

I2 Р.Фейнман, Статистическая механика, "Мир", М., I975.

I3 С.П.Кулешов,В.А.Матвеев, А.Н.Сисакян,М.А.Смондырев, А.Н.Тавхелидзе. ЭЧАЯ, 5, 3, I974.

I4 M.Luban, Phys. Rev., 128, 965 (1962).

I5 Ч.Дж.Петик, Д. тер Хаар, Труды Международного симпозиума по проблеме многих тел и физике плазмы, "Наука", М., I967.

I6 Н.Н.Боголюбов(мл.)ОИЯИ, Р2-4I75,Дубна (I968); ИТФ, 68-8I,Киев(I968); Ядерная физика,I0,вып.2, 425(I969).

I7 P.A.J.Tindemans and H.W.Capel, Physica, 72, 433; 75, 407 (1974); A79, 478 (1975);
L.W.J. den Ouden, H.W.Capel and J.H.H.Perk, "Systems with separable many-particle interactions", Preprint of Institut-Lorentz voor theoretische natuurkunde, Rijksuniversiteit, Leiden, 1976.

I8 J.G.Brankov,N.S.Tonchev and V.A.Zagrebnov,Annals of Physics 107,82(1977).

I9 G.Wentzel, Phys.Rev.,120,1572,(1960)

20 Н.Данфорд, Д.Шварц, Линейные операторы,II, М., ИЛ, I962.

2I Н.Н.Боголюбов (мл.), Б.И.Садовников, Некоторые вопросы статистической механики, М., "Высшая школа", I975.

22 Ф.А.Березин, Метод вторичного квантования, М., "Наука", I965.
С.В.Тябликов, Методы квантовой теории магнетизма, М., "Наука", I965.
Н.Н.Боголюбов (мл.), А.М.Курбатов, ОИЯИ, Р4-8403, Дубна (I974)

23 Н.Н.Боголюбов, УФН 67, вып.4 (I959).

24 H.Fröhlich,Phys.Rev.79,845(1950);Proc.Roy.Soc.,London,A215, 1291(1952)

Рукопись поступила в издательский отдел
26 декабря I978 года.