СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4 - 8434

Н.Н.Боголюбов /мл./, А.М.Курбатов

О МЕТОДЕ КАНОНИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Р4 - 8434

Н.Н.Боголюбов /мл./, А.М.Курбатов

О МЕТОДЕ КАНОНИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Боголюбов Н.Н. (мл.), Курбатов А.М. Р4 - 8434

О методе канонических преобразований в статистической физике

Рассматриваются обобщенные канонические преобразования в применении к проблеме диагонализации гамильтониана общего вида для системы ферми-частиц. Исследуются секулярные уравнения, возникающие при диагонализации рассматриваемого гамильтониана, и соотношения ортонормированности, обеспечивающие канонический характер таких преобразований.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1974

P4 - 8434

Bogolubov N.N. (Jr.), Kurbatov A.M.

Note on the Canonical Transformation Method in Statistical Physics

The generalized canonical transformation as applied to the problem of diagonalization of the Fermi-system Hamiltonian is considered in the general form. The secular equations, which arise under diagonalization of Hamiltonian and the orthonormality relations which confirm the canonical character of the considered transformations are studied.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

При изучении модельных систем статистической физики важное значение имеет задача о нахождении собственных значений исследуемого гамильтониана, т.е. проблема его диагонализации. Для квадратичных форм, построенных на основе c - чисел, процедура диагонализации разработана [I]. Нахождение явного вида соответствующего унитарного преобразования для операторных форм в большинстве случаев представляет собой сложную задачу.

Исследования многочастичных систем статистической физики стимулировали создание метода так называемых канонических преобразований [2], являющегося одним из наиболее эффективных подходов к данной проблеме. Это обусловливает широкое применение u, v-преобразований при изучении конкретных модельных систем и объясняет интерес к методу канонических преобразований как к самостоятельной проблеме.

В данной работе рассматриваются математические аспекты задачи о диагонализации гамильтониана, представленного общей квадратичной формой из операторов вторичного квантования фермиевского типа. Приведение к диагональному виду квадратичных форм по бозе-операторам подробно рассмотрено в монографии С.В.Тябликова [3].

В предлагаемой работе рассматривается гамильтониан вида

$$H = \sum_{\nu,\nu'} A_{\nu\nu'} a^+_\nu a_{\nu'} + \frac{1}{2}\sum_{\nu,\nu'} B_{\nu\nu'} a^+_\nu a^+_{\nu'} + \frac{1}{2}\sum_{\nu\nu'} B^*_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'} \qquad (1)$$

где a^+_ν, a_ν представляют собой ферми-операторы рождения и уничтожения соответственно и, следовательно, удовлетворяют антикоммутационным соотношениям:

$$a^+_\nu a_{\nu'} + a_{\nu'} a^+_\nu = \delta_{\nu\nu'},$$
$$a^+_\nu a^+_{\nu'} + a^+_{\nu'} a^+_\nu = 0, \qquad (2)$$

а $(A_{\nu\nu'})$ и $(B_{\nu\nu'})$ – матрицы порядка $\ell \times \ell$, т.е. индексы суммирования в (I), пробегают значения от 1 до ℓ.

Для того, чтобы квадратичная форма (I) была эрмитова, следует потребовать, чтобы выполнялись условия самосопряженности для матрицы $(A_{\nu\nu'})$:

$$A^*_{\nu\nu'} = A_{\nu'\nu}, \qquad (1a)$$

и условия антисимметричности для матрицы $(B_{\nu\nu'})$:

$$B_{\nu\nu'} = -B_{\nu'\nu}. \qquad (1б)$$

Суть метода канонических преобразований для данной задачи заключается в том, что ферми-операторы a^+_ν, a_ν выражаются при помощи некоторого линейного преобразования через новые операторы α^+_ω, α_ω (также фермиевского

типа) таким образом, чтобы гамильтониан (I) был приведен к диагональному виду:

$$H_0 = \sum_\omega E_\omega \alpha^+_\omega \alpha_\omega + const. \qquad (3)$$

Отметим здесь, что с физической точки зрения замена операторов при помощи канонических преобразований означает переход от описания системы взаимодействующих частиц к описанию системы квазичастиц, взаимодействие между которыми **не учитывается**. Таким образом, гамильтониан (3) описывает систему независимых элементарных возбуждений/4/, при этом постоянный вклад в (3) отвечает энергии основного состояния.

В рамках данного исследования используется каноническое преобразование следующего вида:

$$a_\nu = \sum_\omega \{ u_{\nu\omega} \alpha_\omega + v_{\nu\omega} \alpha^+_\omega \},$$
$$a^+_\nu = \sum_\omega \{ u^*_{\nu\omega} \alpha^+_\omega + v^*_{\nu\omega} \alpha_\omega \}, \qquad (4)$$

введенное в работе/5/ в качестве обобщения канонических преобразований, использовавшихся при создании микроскопической теории сверхпроводимости/6/ для получения надлежащей модификации теории возмущений/7/.

В формуле (4) $u_{\nu\omega}$, $v_{\nu\omega}$ – произвольные функции, связанные соотношениями ортонормированности

$$\sum_\omega \{ u_{\nu\omega} u^*_{\nu'\omega} + v_{\nu\omega} v^*_{\nu'\omega} \} = \delta_{\nu\nu'},$$
$$\sum_\omega \{ u_{\nu\omega} v_{\nu'\omega} + u_{\nu'\omega} v_{\nu\omega} \} = 0, \qquad (5)$$

которые легко получить, требуя, чтобы операторы a_ν^+, a_ν сохранили фермиевский характер.

Требуя, соответственно, чтобы введенные этим преобразованием (4) операторы $\alpha_\omega^+, \alpha_\omega$ удовлетворяли фермиевским перестановочным соотношениям, можно получить, используя обратное преобразование (см. формулу 33 в) данной статьи), соотношения ортонормированности вида:

$$\sum_\nu \{u^*_{\nu\omega} u_{\nu\omega'} + v^*_{\nu\omega} v_{\nu\omega'}\} = \delta_{\omega\omega'},$$
$$\sum_\nu \{u^*_{\nu\omega} v_{\nu\omega'} + v_{\nu\omega} u^*_{\nu\omega'}\} = 0. \quad (5a)$$

Эти соотношения обеспечивают канонический характер рассматриваемого преобразования/7/.

Каноническое преобразование (4) представляет собой эффективный метод исследования для различных многочастичных задач/4/ и нашло широкое применение в квантовой теории магнетизма /3/ и ядерной физике/8/.

Для получения уравнений, которым удовлетворяют u, v-функции, можно использовать уравнения движения для рассматриваемых ферми-амплитуд. При этом для гамильтониана (I) уравнения движения имеют вид

$$i\frac{da_\nu}{dt} = \sum_{\nu'} A_{\nu\nu'} a_{\nu'} + \sum_{\nu'} B_{\nu\nu'} a^+_{\nu'},$$
$$-i\frac{da^+_\nu}{dt} = \sum_{\nu'} A^*_{\nu\nu'} a^+_{\nu'} + \sum_{\nu'} B^*_{\nu\nu'} a_{\nu'}, \quad (6)$$

а для гамильтониана (3) соответственно

$$i\frac{d\alpha_\omega}{dt} = E_\omega \alpha_\omega,$$
$$-i\frac{d\alpha^+_\omega}{dt} = E_\omega \alpha^+_\omega. \quad (7)$$

Совершая каноническое преобразование ферми-амплитуд a^+_ν, a_ν в уравнениях (6) в соответствии с формулами (4) и учитывая (7), получим

$$\sum_\omega \{u_{\nu\omega} E_\omega \alpha_\omega - v_{\nu\omega} E_\omega \alpha^+_\omega\} = \quad (8)$$
$$= \sum_{\nu',\omega} \{A_{\nu\nu'} u_{\nu'\omega} \alpha_\omega + A_{\nu\nu'} v_{\nu'\omega} \alpha^+_\omega\} + \sum_{\nu',\omega} \{B_{\nu\nu'} u^*_{\nu'\omega} \alpha^+_\omega + B_{\nu\nu'} v^*_{\nu'\omega} \alpha_\omega\}.$$

Приравнивая коэффициенты при α^+_ω и α_ω, можно написать систему четырех уравнений, каждое из которых представляет собой систему ℓ - уравнений для u, v - функций:

$$E_\omega u_{\nu\omega} = \sum_{\nu'} \{A_{\nu\nu'} u_{\nu'\omega} + B_{\nu\nu'} v^*_{\nu'\omega}\}, \quad (9.1)$$

$$-E_\omega v_{\nu\omega} = \sum_{\nu'} \{A_{\nu\nu'} v_{\nu'\omega} + B_{\nu\nu'} u^*_{\nu'\omega}\}, \quad (9.2)$$

$$-E_\omega v^*_{\nu\omega} = \sum_{\nu'} \{A^*_{\nu\nu'} v^*_{\nu'\omega} + B^*_{\nu\nu'} u_{\nu'\omega}\}, \quad (9.3)$$

$$E_\omega u^*_{\nu\omega} = \sum_{\nu'} \{A^*_{\nu\nu'} u^*_{\nu'\omega} + B^*_{\nu\nu'} v_{\nu'\omega}\}. \quad (9.4)$$

Следует отметить, что только два уравнения системы (9) являются независимыми.

Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать лишь два уравнения системы (9.I) – (9.4), например (9.I) и (9.3), на которые в дальнейшем будем ссылаться как на систему (9).

Для того, чтобы представить уравнения (9) в более компактном виде, введем комбинированный индекс

$$\mu = (\nu, \rho) \quad , \quad \rho = 1;2,$$
$$\lambda = (\omega, \rho) \quad , \quad \rho = 1;2$$

и матрицу вида

$$(\mathcal{U}_{\mu\mu'}) = \begin{pmatrix} (A_{\nu\nu'}) & (B_{\nu\nu'}) \\ (-B^*_{\nu\nu'}) & (-A^*_{\nu\nu'}) \end{pmatrix} , \qquad (10)$$

самосопряженную : $\mathcal{U}^+ = \mathcal{U}$, поскольку матрицы $(A_{\nu\nu'})$ и $(B_{\nu\nu'})$ подчинены условиями (Ia) – (Iв).

Рассмотрим 2ℓ – мерное линейное пространство векторов

$$V^{(\omega)} = \begin{pmatrix} \vdots \\ u_{\nu\omega} \\ \vdots \\ v^*_{\nu\omega} \\ \vdots \end{pmatrix} , \qquad (10a)$$

$$\omega = 1, 2, \ldots, \ell.$$

В пространстве векторов $V^{(\omega)}$ систему (9) можно представить как матричное уравнение вида

$$\mathcal{U} V^{(\omega)} = \varepsilon_\omega V^{(\omega)} \qquad (II)$$

и свести, таким образом, систему (9) к задаче на собственные значения (II).

Определим далее в пространстве векторов $V^{(\omega)}$ оператор перестановки P следующим образом:

$$P \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ u_{\nu\omega} \\ \vdots \\ v^*_{\nu\omega} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v^*_{\nu\omega} \\ \vdots \\ u_{\nu\omega} \end{pmatrix},$$

т.е. действие оператора P сводится к перестановке координат специального вида.

Очевидно, что

$$P^2 = 1 \quad , \quad P = P^* .$$

Это преобразование может быть представлено в матричной форме:

$$P_{\mu\mu'} = \Delta_{\rho\rho'} \, \delta_{\nu\nu'} , \qquad (I2)$$

причем $\Delta_{\rho\rho'}$ определено следующим образом:

$$\Delta_{\rho\rho'} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Отметим, что для матрицы $P_{\mu\mu'}$, симметрической и вещественной, выполняется равенство

$$P \cdot \mathcal{U} \cdot P = -\mathcal{U}^* . \qquad (I3)$$

При изучении системы уравнений (9) существенную роль имеет

Лемма I. Пусть $\mathbb{C}^{2\ell}$ – эвклидово пространство линейных комплексных 2ℓ – мерных векторов

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_{2\ell} \end{pmatrix},$$

в котором введено скалярное произведение согласно правилу

$$(\xi, \eta) = \sum_{\alpha=1}^{2\ell} \xi_\alpha^* \eta_\alpha . \qquad (I4)$$

Пусть, далее, в $\mathbb{C}^{2\ell}$ действуют самосопряженные матрицы $\mathcal{U}$ и P, удовлетворяющие условиям

$$P^2 = 1 , \quad P\mathcal{U}P = -\mathcal{U}^* . \qquad (I5)$$

Тогда для уравнения

$$\mathcal{U}\,V^{(\omega)} = \varepsilon_\omega V^{(\omega)}, \quad \omega = 1,2,\ldots,\ell \qquad (I6)$$

справедливы следующие утверждения:

I) если вектор ξ из $\mathbb{C}^{2\ell}$ удовлетворяет уравнению

$$\mathcal{U}\xi = \varepsilon \xi , \qquad (I7)$$

то комплексно сопряженный ему вектор ξ^* будет удовлетворять уравнению

$$\mathcal{U}P\xi^* = -\varepsilon P\xi^* . \qquad (I8)$$

2) Матрица $\mathcal{U}$ имеет ℓ линейно независимых собственных векторов $\{V^{(\omega)}\}$, $\omega = 1,2,\ldots,\ell$, которым отвечают неотрицательные собственные значения ε_ω, $\omega = 1,2,\ldots\ell$. При этом совокупность векторов $\{V^{(\omega)}\}$, $\{PV^{*(\omega)}\}$ образует ортонормированный базис в $\mathbb{C}^{2\ell}$.

Доказательство. Будем рассматривать общий случай, когда среди собственных значений ε_ω задачи (I6) имеются как отличные от нуля, так и нулевые. Следует отметить, что величины ε_ω являются вещественными числами как собственные значения самосопряженного оператора $\mathcal{U}$. Выпишем уравнение, эрмитово сопряженное к (I6):

$$\mathcal{U}^+\xi^* = \varepsilon\xi^* ,$$

и перепишем его в соответствии с условием (I7) в виде

$$-P\mathcal{U}P\xi^* = \varepsilon\xi^* .$$

Учитывая требования (I5), окончательно получим

$$\mathcal{U}P\xi^* = -\varepsilon P\xi^* .$$

Таким образом, если ξ является собственным вектором матрицы $\mathfrak{A}$, отвечающим собственному значению ε, то вектор $P\xi^*$ представляет собой собственный вектор матрицы $\mathfrak{A}$, отвечающий собственному значению $(-\varepsilon)$.

Доказательство леммы существенно упрощается в случае ненулевых собственных значений задачи (I6). Действительно, для собственных векторов

$$V^{(1)}, V^{(2)}, \dots, V^{(q)},$$

отвечающих положительным собственным значениям $(q < \ell)$, легко построить вектора

$$P\overset{*}{V}^{(1)}, P\overset{*}{V}^{(2)}, \dots, P\overset{*}{V}^{(q)},$$

собственные значения которых отрицательны.

Вектора первой группы $(\varepsilon_j > 0,\ j = 1, 2, \dots, q)$ всегда можно выбрать взаимно ортогональными, и, соответственно, любые два вектора $V^{(s)}$ и $P\overset{*}{V}^{(s)}$ (при $1 \leq s \leq q$) ортогональны друг к другу как собственные вектора самосопряженного оператора, отвечающие различным собственным значениям $\mathfrak{A}$. В соответствии с определением скалярного произведения (I4) и при помощи соотношений ортонормированности можно показать, что

$$(V^{(\omega)}, V^{(\omega)}) = 1, \quad 1 \leq \omega \leq q,$$

а, следовательно,

$$(P\overset{*}{V}^{(\omega)}, P\overset{*}{V}^{(\omega)}) = 1.$$

Приведенные свойства изучаемых матриц дают возможность простого доказательства леммы в случае ненулевых собственных значений.

Рассмотрим более общий случай, когда среди собственных чисел матрицы $\mathfrak{A}$ существуют как отличные от нуля, так и нулевые. Тогда для этих нулевых собственных значений найдутся нетривиальные вектора η, для которых

$$\mathfrak{A}\eta = 0 \qquad (I9)$$

и которые образуют линейное многообразие M_η размерности: $\dim M_\eta = 2\ell - 2q$.

Отметим, что если некоторый вектор η принадлежит M_η, то и $P\eta^*$ принадлежит M_η.

Действительно, если

$$\mathfrak{A}\eta = 0,$$

то

$$\mathfrak{A}^+\eta^* = 0$$

и на основании формулы (I5)

$$P\mathfrak{A}P\eta^* = 0.$$

Следовательно,

$$\mathfrak{A}P\eta^* = 0$$

и $P\eta^* \in M_\eta$.

Построим в M_η ортонормированную систему векторов следующим образом. Выберем произвольный орт $\eta^{(1)}$. Тогда вектор

$$\bar{\eta}^{(1)} \equiv \eta^{(1)} + P\overset{*}{\eta}{}^{(1)}$$

в соответствии с вышесказанным может быть нулевым. В этом случае вектор

$$\xi^{(1)} = i\,\eta^{(1)}$$

будет удовлетворять соотношению

$$\xi^{(1)} = P\overset{*}{\xi}{}^{(1)} . \qquad (20)$$

Если же $\bar{\eta}^{(1)} \neq 0$, то в качестве вектора $\xi^{(1)}$, удовлетворяющего соотношению (20), можно выбрать $C\cdot\bar{\eta}^{(1)}$, где константа C определена так*):

$$C = \{\|\bar{\eta}^{(1)}\|\}^{-1},$$

отлична от нуля и конечна.

Построим вектор $\eta^{(2)}$, ортогональный к $\xi^{(1)}$:

$$(\eta^{(2)}, \xi^{(1)}) = 0 . \qquad (2I)$$

Тогда и вектор $P\overset{*}{\eta}{}^{(2)}$ будет ортогонален к $\xi^{(1)}$, т.к.

---

*) Норма в $\mathbb{C}^{2l}$ вводится стандартным образом (и обозначается, как обычно, $\|\dots\|$):

$$\|\xi\| = \{(\xi, \xi)\}^{1/2} .$$

$$(P\overset{*}{\eta}{}^{(2)}, \xi^{(1)}) = (\overset{*}{\eta}{}^{(2)}, P\xi^{(1)}) =$$

$$= (P\overset{*}{\xi}{}^{(1)}, \eta^{(2)}) = (\xi^{(1)}, \eta^{(2)}) = 0 .$$

Теперь уже для вектора

$$\bar{\eta}^{(2)} \equiv \eta^{(2)} + P\overset{*}{\eta}{}^{(2)}$$

можно найти вектор $\xi^{(2)}$, равный или $i\,\eta^{(2)}$ (в случае $\bar{\eta}^{(2)} = 0$), или $\{\|\bar{\eta}^{(2)}\|\}^{-1}\bar{\eta}^{(2)}$ (случай $\bar{\eta}^{(2)} \neq 0$), который (по построению) будет ортогонален $\xi^{(1)}$ и будет удовлетворять соотношению типа(20):

$$\xi^{(2)} = P\overset{*}{\xi}{}^{(2)} .$$

Таким способом на многообразии M_η можно построить ортонормированную систему векторов (четной размерности $2m = 2l - 2q$):

$$\xi^{(1)}, \ \dots, \ \xi^{(2m)},$$

каждый из которых будет обладать свойством

$$P\overset{*}{\xi}{}^{(j)} = \xi^{(j)}, \quad j = 1, \dots, 2m . \qquad (20a)$$

Из них можно построить две ортонормированные (по построению) группы векторов: $\{X^{(k)}\}$ и $\{Y^{(k)}\}$ (где $k = 1, \dots, m$) в соответствии с правилами

$$X^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\left\{\xi^{(2k-1)} + i\,\xi^{(2k)}\right\} \qquad (22a)$$

и

$$Y^{(K)}=P\overset{*}{X}^{(K)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\xi^{(2K-1)}-i\,\xi^{(2K)}\right\}\text{.(22в)}$$

Нетрудно видеть: любой вектор первой группы ортогонален к векторам второй группы, для произвольного s $(1 \leq s \leq m)$ справедливо

$$(X^{(s)}, Y^{(s)}) = (X^{(s)}, P\overset{*}{X}^{(s)}) = 0. \qquad (23)$$

Следовательно, можно построить полную ортонормированную систему векторов:

$$\left\{X^{(1)}, \ldots, X^{(m)}, P\overset{*}{X}^{(1)}, \ldots, P\overset{*}{X}^{(m)}\right\}.$$

Следует отметить тот очевидный факт, что все вектора из этой совокупности, как отвечающие нулевым собственным значениям, ортогональны ко всем собственным векторам, отвечающим отличным от нуля собственным числам (для задачи (I6)), как положительным, так и отрицательным.

Поэтому, дополняя рассмотренную в первой части доказательства систему собственных векторов задачи (I6) $\{V^{(1)}, V^{(2)}, \ldots, V^{(\omega)}\}$, собственные числа которых положительны, векторами

$$\left\{V^{(q+1)}, \ldots, V^{(\ell)}\right\},$$

которые выбираются согласно правилу

$$V^{(q+1)} = X^{(1)}, \ldots, V^{(\ell)} = X^{(m)},$$

приходим к ортонормированной системе векторов $\{V^{(\omega)}\}$, $(\omega = 1, 2, \ldots, \ell)$, являющейся решением уравнения (I6) и отвечающей неотрицательным собственным числам $\mathcal{E}_\omega$. При этом совокупность векторов $\{V^{(\omega)}\}$ и $\{P\overset{*}{V}^{(\omega)}\}$ образует ортонормированный базис в $\mathbb{C}^{2\ell}$.

Таким образом, лемма I доказана. В применении к конкретным задачам, например, для системы уравнений (9), используемых при диагонализации гамильтониана вида (I), эта лемма утверждает существование однозначного решения системы (9). Кроме того, методика построения полной ортонормированной системы векторов $\{V^{(\omega)}\}_{\mathcal{E}_\omega}$ в рамках доказательства предложенной леммы представляет возможность выделения правильной ветви спектра собственных чисел E_ω для задачи вида (9).

При исследовании проблемы диагонализации квадратичных форм из операторов вторичного квантования специальный интерес представляет вопрос: удовлетворяют ли получаемые из системы уравнений (9) коэффициенты соответствующего канонического преобразования (4) соотношениям ортонормированности вида (5). С помощью леммы I можно получить ответ на этот вопрос. Для простоты рассмотрения предполагаем неотрицательность спектра $(E_\omega \geq 0)$, а для удобства введем комбинированный индекс

$$\lambda = (\omega, 1),$$

$$\lambda' = (\omega, 2),$$

и обозначения

$$\mathcal{V}^{(\omega,1)} = \mathcal{V}^{(\omega)},$$
$$\mathcal{V}^{(\omega,2)} = P\overset{*}{\mathcal{V}}{}^{(\omega)}$$

по аналогии с обозначениями леммы I, в соответствии с которой система векторов $\{\mathcal{V}^{(\lambda)}\}$, где λ пробегает $2m$ значений, является ортонормированной системой:

$$\left(\mathcal{V}^{(\lambda)}, \mathcal{V}^{(\lambda')}\right) = \delta_{\lambda\lambda'}. \tag{24}$$

Введем в рассмотрение матричные компоненты векторов $\mathcal{V}^{(\lambda)}$:

$$\mathcal{V}^{(\lambda)} = (\ldots\ \mathcal{V}_{\mu\lambda}\ \ldots),$$

и перепишем соотношения (24) в матричной форме:

$$\sum_{\mu} \mathcal{V}^{*}_{\mu\lambda} \mathcal{V}_{\mu\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}. \tag{24a}$$

По условиям леммы

$$\mathcal{V}^{*}_{\mu\lambda} = \mathcal{V}_{\lambda\mu}, \tag{25}$$

т.е.

$$\mathcal{V}^{+} = \mathcal{V},$$

и

$$\sum_{\lambda} \mathcal{V}_{\mu\lambda} \mathcal{V}^{*}_{\lambda\mu'} = \delta_{\mu\mu'}. \tag{25a}$$

Запишем это условие унитарности в виде

$$\sum_{\lambda} \mathcal{V}_{\mu\lambda} \mathcal{V}^{*}_{\mu'\lambda} = \delta_{\mu\mu'}. \tag{26}$$

Воспользуемся введенной ранее матрицей $\mathcal{U}$ в следующих обозначениях вида:

$$\mathcal{V}_{(\nu,1);(\omega,1)} = \mathcal{U}_{\nu\omega}, \tag{27}$$
$$\mathcal{V}_{(\nu,2);(\omega,1)} = \vartheta^{*}_{\nu\omega}.$$

Тогда соответственно

$$\mathcal{V}_{(\nu,1);(\omega,2)} = \vartheta_{\nu\omega}, \tag{27a}$$
$$\mathcal{V}_{(\nu,2);(\omega,2)} = \mathcal{U}^{*}_{\nu\omega}.$$

Полагая

$$\lambda = (\omega,1), \quad \lambda' = (\omega',1),$$

$$\mu = (\nu,1), \quad \mu' = (\nu,2),$$

перепишем соотношение ортогональности (24a) в виде

$$\sum_{\nu} \left\{ \mathcal{V}^{*}_{\nu,1;\omega,1} \mathcal{V}_{\nu,1;\omega',1} + \mathcal{V}^{*}_{\nu,2;\omega,1} \mathcal{V}_{\nu,2;\omega',1} \right\} = \delta_{\omega\omega'}. \tag{28}$$

Учитывая формулы (27) – (27a), получим:

$$\sum_{\nu} \left(\mathcal{U}^{*}_{\nu\omega} \mathcal{U}_{\nu\omega'} + \vartheta_{\nu\omega} \vartheta_{\nu\omega'} \right) = \delta_{\omega\omega'}. \tag{28a}$$

Аналогично, полагая

$$\lambda = (\omega, 1) \;, \quad \lambda' = (\omega', 2),$$

$$\mu = (\nu, 1) \;, \quad \mu' = (\nu, 2)$$

и учитывая, как и прежде, формулы (27) - (27а), можно получить

$$\sum_{\nu} (u^{*}_{\nu\omega} v_{\nu\omega'} + v_{\nu\omega} \cdot u^{*}_{\nu'\omega}) = 0. \qquad (29)$$

Таким образом, из общих соображений при помощи леммы I получены соотношения ортонормированности (5) - (5а), утверждающие канонический характер[9] преобразований (4), используемых при диагонализации квадратичной формы из ферми-операторов вида (I).

Сопряженные к (5) соотношения ортонормированности, т.е. соотношения (5а), можно получить, полагая в формуле (24а)

$$\mu = (\nu, 1) \;, \quad \mu' = (\nu', 1),$$

$$\lambda = (\omega, 1) \;, \quad \lambda = (\omega, 2),$$

что дает

$$\sum_{\omega} \{ V_{\nu,1;\omega,1} V^{*}_{\nu',1;\omega,1} + V_{\nu,1;\omega,2} V^{*}_{\nu',1;\omega,2} \} = \delta_{\nu\nu'},$$

или окончательно:

$$\sum_{\omega} \{ u_{\nu\omega} u^{*}_{\nu'\omega} + v_{\nu\omega} v^{*}_{\nu'\omega} \} = \delta_{\nu\nu'}. \qquad (30)$$

Соответствующий выбор параметров в формуле (24а)

$$\mu = (\nu, 1) \;, \quad \mu' = (\nu', 2) \;,$$

$$\lambda = (\omega, 1) \;, \quad \lambda = (\omega, 2) \;,$$

приводит к соотношениям

$$\sum_{\omega} \{ u_{\nu\omega} v_{\nu'\omega} + v_{\nu\omega} u_{\nu'\omega} \} = 0. \qquad (31)$$

В качестве иллюстрации возможного применения леммы I рассмотрим вопрос о получении выражений для вводимых преобразованием (4) новых ("квазичастичных"[8]) ферми-амплитуд α^{+}_{ω}, α_{ω} через первоначальные ферми-амплитуды a^{+}_{ν}, a_{ν}.

В рамках предложенной леммы I и по аналогии с предыдущим рассмотрением введем вектор X вида

$$X = V \xi \;,$$

так что в соответствии с леммой

$$\xi = V^{+} X \;.$$

Или в матричной форме:

$$X_{\mu} = \sum_{\lambda} V_{\mu\lambda} \cdot \xi_{\lambda} \qquad (32)$$

и

$$\xi_{\lambda} = \sum_{\mu} V^{+}_{\lambda\mu} X_{\mu} = \sum_{\mu} V^{*}_{\mu\lambda} X_{\mu}. \qquad (32а)$$

Конкретизируя в формуле (32) введенный комбинированный индекс

$$\lambda = (\omega, 1) \quad ; \quad (\omega, 2) \quad ,$$
$$\mu = (\nu, 1) \ ,$$

получим:

$$X_{\nu 1} = \sum_{\omega} \{ V_{\lambda 1; \omega 1} \xi_{\omega,1} + V_{\nu 1; \omega,2} \xi_{\omega,2} \} \ ,$$

или с учетом формул (27) - (27а):

$$X_{\nu 1} = \sum_{\omega} (u_{\nu\omega} \xi_{\omega 1} + v_{\nu\omega} \xi_{\omega 2}) \ .$$

Выбор

$$X_{\nu 1} = a_\nu \ ; \ \xi_{\omega 1} = \alpha_\omega \ ; \ \xi_{\omega 2} = \alpha^+_\omega \tag{33}$$

приводит к известным формулам (4):

$$a_\nu = \sum_{\omega} \{ u_{\nu\omega} \alpha_\omega + v_{\nu\omega} \alpha^+_\omega \} \ . \tag{33а}$$

Соответственно, полагая

$$\mu = (\nu, 1) \quad ; \quad (\nu, 2) \quad ,$$
$$\lambda = (\omega, 1)$$

и используя формулу (32а), получим:

$$\xi_{\omega 1} = \sum_{\nu} \{ V^*_{\nu 1; \omega 1} X_{\nu 1} + V^*_{\nu 2; \omega 1} X_{\nu 2} \} \ ,$$

откуда выбор параметров в соответствии с формулой (33) и учет формул (27) - (27а) позволяет получить требуемую

формулу:

$$\alpha_\omega = \sum_{\nu} \{ u^*_{\nu\omega} a_\nu + v_{\nu\omega} a^+_\nu \} \ . \tag{33в}$$

Таким образом, при помощи леммы I получены правильные "обратные" (к преобразованиям (4)) преобразования, выражающие ферми-амплитуды α^+_ω, α_ω через первоначальные операторы a^+_ν, a_ν. В качестве следствия леммы I в общем виде выведены соотношения ортонормированности (30) - (3I), обеспечивающие канонический характер рассматриваемых преобразований. Для конкретного вида канонических преобразований эти соотношения совпадают с непосредственно вычисляемыми соотношениями ортонормированности (5) - (5а).

В заключение авторы приносят глубокую благодарность Н.Н.Боголюбову за постановку задачи и полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. И.М.Гельфанд. Лекции по линейной алгебре. Москва, "Наука", 1971.

2 Н.Н.Боголюбов. Journ. of Phys., 9, 23, 1947; Изв. АН СССР. Сер.физ., 11, 77, 1947;

Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ЖЭТФ, 19, 256, 1949;

Н.Н.Боголюбов, В.В.Толмачев, Д.В.Ширков. Новый метод в теории сверхпроводимости. Изд. АН СССР, Москва, 1958.

3. С.В.Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма, "Наука", Москва, 1965.

4. А.С.Давыдов. Квантовая механика, "Наука", Москва, 1973.

5. Н.Н.Боголюбов. ДАН СССР, 119, 52, 1958.

6. Н.Н.Боголюбов. Препринт ОИЯИ, Р-94, Дубна, 1957; ЖЭТФ, 34, 58, 1958.

7. Н.Н.Боголюбов.УФН, 67, 4, 1959.

8. В.Г.Соловьев. Теория сложных ядер."Наука",Москва,1971. А.Г.Ситенко, В.Н.Тарковский. Лекции по теории ядра. Атомиздат, Москва, 1972.

9. Ф.А.Березин. Метод вторичного квантования. "Наука", Москва, 1965.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 декабря 1974 года.