Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1962

И. П. БАЗАРОВ

АСИМПТОТИЧЕСКИ ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛЬНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА В ТЕОРИИ КРИСТАЛЛА

Показано, что можно асимптотически точно удовлетворить всей цепочке уравнений для функций Грина, построенных на основе введенного в работе [1] модельного гамильтониана для кристалла.

В работе [1] было указано, что, если в гамильтониане динамической системы бесспиновых частиц с бинарным взаимодействием

$$H = \sum_k T(k)\, a_k^+ a_k + \frac{1}{2V} \sum_{k,k',g} \lambda(q)\, a_{k+q}^+ a_k a_{k'}^+ a_{k'+q} \tag{1}$$

или

$$H = \sum_k T(k)\, a_k^+ a_k + \frac{1}{2V} \sum_q \lambda(q)\, \rho_q \rho_{-q}, \tag{2}$$

где k — импульс, $T(k) = \frac{k^2}{2m} - \mu$, a_k^+ и a_k — операторы порождения и исчезновения частиц, μ — химический потенциал, $\lambda(q)$—Фурье-компонент потенциальной энергии $\Phi(r)$ взаимодействия между частицами (в (1) принимается $\Phi(0) = 0$), $\rho_q = \sum_k a_{k+q}^+ a_k$—Фурье-компонент квантовой плотности, V — объем системы из N-частиц (суммирование ведется по всевозможным k, k', q),

вектор q принимает не квазинепрерывные, а дискретные значения, соответствующие периодам обратной решетки кристалла

$$\vec{q} = 2\pi (m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3), \tag{3}$$

где $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ — основные векторы обратной решетки, m_1, m_2, m_3—целые числа ($|m| \leqslant \mathrm{const}$),

то получающийся при этом модельный гамильтониан кристалла позволяет получить асимптотически точное решение (при $N \to \infty$, $V \to \infty$, $\frac{N}{V} = \mathrm{const}$).

В настоящей работе мы хотим установить это методом функций Грина, как об этом было сказано в [1].

Запишем модельный гамильтониан кристалла (2) с дискретным q в виде

$$H = H_0 + H_1,$$

$$H_0 = \sum_k T(k) a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum_{k,q} \lambda(q) (c_q a_k^+ a_{k+q} + c_q^* a_{k+q}^+ a_k) - \frac{V}{2} \sum_q \lambda(q) c_q c_q^*,$$

$$H_1 = \frac{1}{2V} \sum_q \lambda(q) (a_{k+q}^+ a_k - c_q(k)) (a_{k'}^+ a_{k'+q} - c_q^*(k')),$$

где

$$c_q = \frac{1}{V} \langle \rho_q \rangle_0 = \frac{1}{V} \sum_k c_q(k),$$

$$c_q(k) = \langle a_{k+q} a_k \rangle_0, \; c_q^* = c_{-q},$$

а $\langle \ldots \rangle_0$ означает среднее значение соответствующей величины по ансамблю с гамильтонианом H_0.

Уравнение движения для оператора $a_k(t)$ в гейзенберговском представлении при модельном гамильтониане (1) с дискретным q будет

$$i \frac{da_k}{dt} = T(k) a_k + \frac{1}{2} \sum \lambda(q) (\beta_q a_{k+q} + \beta_{-q} a_{k-q}) + \frac{1}{2V} \sum_q \lambda(q) a_k \left(\beta_q = \frac{1}{V} \rho_q = \frac{1}{V} \sum_k a_{k+q}^+ a_k \right), \tag{4}$$

а уравнение движений для $a_k(t)$ при гамильтониане H_0

$$i \frac{da_k}{dt} = T(k) a_k + \frac{1}{2} \sum_q \lambda(q) (c_q a_{k+q} + c_{-q} a_{k-q}).$$

Диагонализуя гамильтониан H_0 с помощью линейного канонического преобразования $a_k = \sum_\nu \varphi_{k\nu} \alpha_\nu$ с новыми ферми-амплитудами α_ν и ортогональными функциями $\varphi_{k\nu}$, мы получаем (см. [1]) для функций $\varphi_\nu = \sum_k \varphi_{k\nu} e^{ikx}$ уравнение с самосогласованным потенциалом $V(x)$

$$T\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \varphi_\nu(x) + V(x) \varphi_\nu(x) = E(\nu) \varphi_\nu(x),$$

$$V(x) = \frac{1}{2} \sum_q \lambda(q) (c_q e^{-ikx} + c_{-q} e^{iqx}), \tag{5}$$

$$H_0 = \sum_\nu E(\nu) \alpha_\nu^+ \alpha_\nu + U, \qquad U = \text{const}.$$

Решение уравнения (5) имеет вид

$$\varphi_\nu(x) = e^{i(\nu, x)} u_\nu(x),$$

где функция $u_\nu(x)$ периодична в ритме решетки

$$u_\nu(x) = \sum_q A_{q,\nu} e^{i(q,x)},$$

так что

$$\varphi_\nu(x) = \sum_q A_{q,x} e^{i(\nu+q,x)} \quad \text{и} \quad \varphi_{k\nu} = \sum_q A_{q,\nu} \delta(\nu + q - k).$$

Поэтому при $k - k' \neq q$ выражение

$$\langle a_k^+ a_{k'} \rangle_0 = \sum_\nu \varphi_{k\nu}^* \varphi_{k'\nu} \langle \alpha_\nu^+ \alpha_\nu \rangle_0$$

равно нулю

и

$$\langle a_k^+ a_{k'} \rangle = 0, \tag{6}$$

где q — периоды обратной решетки, определяемые из (3).

Рассмотрим теперь двухвременные (запаздывающие или опережающие) функции Грина [2], построенные для модельного гамильтониана H, вида

$$\Gamma(t - t') = \langle\langle A(t); \quad B(t') \rangle\rangle, \tag{7}$$

где A и B представляют собой произведения операторов порождения и исчезновения частиц

$$A(t) = \ldots a_{k_j}(t) \ldots a_{k_s}^+(t) \ldots,$$

$$B(t') = \ldots a_{k_p}(t') \ldots a_{k_r}^+(t') \ldots$$

Уравнение для (7) будет

$$i \frac{\partial \Gamma}{\partial t} = \delta(t - t') \langle [A(t); \quad B(t')] \rangle + \langle\langle i \frac{dA}{dt}; B(t') \rangle\rangle$$

или

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle\langle \ldots a_{k_j}(t) \ldots a_{k_s}^+(t) \ldots; \quad \ldots a_{k_p}(t') \ldots a_{k_r}^+(t') \ldots \rangle\rangle =$$

$$= \delta(t - t') \langle [\ldots a_{k_j}(t) \ldots a_{k_s}^+(t) \ldots; \quad \ldots a_{k_p}(t') \ldots a_{k_r}^+(t') \ldots] \rangle +$$

$$+ \sum_j \langle\langle \ldots i \frac{da_{k_j}}{dt} \ldots a_{k_s}^+(t) \ldots; \quad \ldots a_{k_p}(t') \ldots a_{k_r}^+(t') \ldots \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_s \langle\langle \ldots a_{k_j}(t) \ldots i \frac{da_{k_s}^+}{dt} \ldots; \quad a_{k_p}(t') \ldots a_{k_r}^+(t') \ldots \rangle\rangle. \tag{8}$$

Подставляя сюда вместо $i \frac{da_{k_j}}{dt}$ его значение из уравнения движения (4) $\left(\text{то же и относительно } i \frac{da_{k_s}^+}{dt}\right)$, получим в правой части (8) двухвременные функции Грина более высокого порядка, чем исходная. Составляя для них уравнение типа (8), получим цепочку зацепляющихся уравнений для функций Грина.

Покажем, что можно удовлетворить всей этой цепочке уравнений с точностью до членов порядка $\frac{1}{V}$, если в выражении (7) производить усреднение не по гамильтониану H, а по гамильтониану H_0.

Для этого подставим в левую часть уравнения (8) вместо $\Gamma(t - t')$ функцию $\Gamma_0(t - t')$, построенную для гамильтониана H_0, и в правой части (8) будем производить усреднение по H_0. Тогда равенство (8) будет выполняться с точностью до членов порядка $\frac{1}{V}$. При таком усреднении первый член правой части уравнения (8) переходит в соответствующий член для уравнения функции Грина $\Gamma_0(t-t')$, а один из членов первой суммы правой части (8) с учетом (4) будет иметь вид

$$\ll \dots T(k_j)\,a_{k_j} + \frac{1}{2}\sum_q \lambda(q)\,(\beta_q a_{k_{j+q}} + \beta_{-q} a_{k_{j-q}}) +$$

$$+ \frac{1}{2V}\sum_q \lambda(q)\,a_{k_j}\dots a^+_{k_s}(t)\dots;\quad a_{k_p}(t')\dots a^+_{k_r}(t')\dots \gg_0.$$

Используя при усреднении теорему Вика и учитывая (6) (согласно которому спаривание $\langle a_{k_1} a_{k_2}\rangle_0$ отлично от нуля только при $k_2-k_1=0$ и равно $c_q(k)= = \langle a^+_{k+q} a_k\rangle_0$), получим

$$\ll \dots T(k_j)\,a_{k_j} + \frac{1}{2}\sum_q \lambda(q)\,(c_q a_{k_{j+q}} +$$

$$+ c_{-q} a_{k_{j-q}})\dots a^+_{k_s} t\dots;\quad \dots a_{k_p}(t')\dots a^+_{k_r}(t')\dots \gg_0 +$$

$$+ \frac{1}{2V} \ll \dots \sum_q \lambda(q)\,c_q(k_j)\dots a^+_{k_s}(t)\dots;\quad \dots a_{k_p}(t')\dots a^+_{k_r}(t')\dots \gg_0.$$

Первый член суммы совпадает с соответствующим членом в уравнении для функции Грина $\Gamma_0(t-t')$, если использовать уравнение движения для оператора a_{k_j} при гамильтониане H_0, второй же член при дискретном q имеет порядок $\frac{1}{V}$. Аналогичный вид имеют и члены второй правой части уравнения (8), если производить в нем усреднение по гамильтониану H_0.

Таким образом, функция Грина представляет собой асимптотически точное (при $N\to\infty$, $V\to\infty$, $\frac{N}{V}=\mathrm{const}$) решение уравнения (8) для функции Грина $\Gamma(t-t')$. Иначе говоря, все функции Грина для гамильтониана H и гамильтониана H_0 при $V\to\infty$ совпадают, и, следовательно, эти гамильтонианы асимптотически эквивалентны.

Поэтому при вычислении термодинамического потенциала статистической системы с гамильтонианом H частью $H_1 = H - H_0$ с точностью до членов порядка $\frac{1}{V}$ можно пренебречь, и, следовательно, выражение для потенциала $z = \theta \ln \operatorname{sp} e^{-H^0/\theta}$ является асимптотически точным при $V\to\infty$. Цепочка уравнений для функций Грина (8) в предельном случае $V\to\infty$ становится замкнутой, так как в правой части уравнения для $\Gamma_0(t-t')$ содержатся те же функции Грина, что и $\Gamma_0(t-t')$.

Таким образом, модельная задача может быть асимптотически точно решена при $V\to\infty$, $N\to\infty$, $\frac{N}{V}=\mathrm{const}$: каких-либо приближений при расцеплении цепочки уравнений для функции Грина в этом случае делать не приходится, оно осуществляется асимптотически точно.

В заключение выражаю глубокую благодарность академику Н. Н. Боголюбову за плодотворные дискуссии и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Базаров И. П. ДАН СССР, **140**, 85, 1961.
2. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. ДАН СССР, **126**, 53, 1959.

Поступила в редакцию
29. 12 1961 г.

Кафедра
статистической физики и механики