Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 2 — 1970

УДК 531

Н. Н. БОГОЛЮБОВ (мл.), А. С. ШУМОВСКИЙ

ВЫЧИСЛЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ В СЛУЧАЕ МОДЕЛИ ТИРРИНГА

Для модели Тирринга доказано асимптотическое равенство свободных энергий модельного и «аппроксимирующего» гамильтонианов.

В свое время Н. Н. Боголюбовым, Д. Н. Зубаревым и Ю. А. Церковниковым был сформулирован приближенный прием, позволяющий исследовать модельные системы теории сверхпроводимости, основанный на введении «аппроксимирующих» гамильтонианов, и приводились основания, позволяющие считать, что полученное решение обладает асимптотической точностью в процессе предельного перехода статистической механики $V \to \infty$ [1, 2]. В этих работах рассматривался модельный гамильтониан типа БКШ, для которого строилось асимптотически точное решение. Однако строгое обоснование результатов этих работ представляет существенные математические трудности.

Для некоторых специальных моделей теории сверхпроводимости в последнее время удалось провести строгое обоснование асимптотической точности получаемых результатов [3, 4, 5, 6, 7]. В частности, такое обоснование оказалось возможным провести в случае квазиспиновой модельной системы Тирринга.

Рассматриваемый в настоящей работе модельный гамильтониан Тирринга [8] и [9] имеет вид

$$H = \sum_{p=1}^{\Omega} \varepsilon_p (1 - \sigma_p^z) - \frac{2T_c}{\Omega} \sum_{p=1}^{\Omega} \sigma_p^- \sum_{p'=1}^{\Omega} \sigma_{p'}^+, \tag{1}$$

где $\sigma_p^{\pm} = \frac{1}{2} (\sigma_p^x \pm i\sigma_p^y)$ и σ_p^x, σ_p^y, σ_p^z — спиновые операторы Паули.

Через Ω обозначается число пар Купера, величина пропорциональная объему системы.

Будем рассматривать более общий гамильтониан

$$H = \varepsilon - \Omega z z^+. \tag{2}$$

Если операторы ε и z имеют вид

$$\varepsilon = \sum_{p=1}^{\Omega} \varepsilon_p (1 - \sigma_p^z), \quad z = \frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p=1}^{\Omega} \sigma_p^-, \tag{3}$$

то гамильтониан (2) сводится к исходному модельному гамильтониану (1).

Операторы ε и z, взятые в форме (3), удовлетворяют очевидным дополнительным условиям

$$\|z\| \leqslant \sqrt{2T_c}, \quad \|[\varepsilon, z]\| \leqslant k, \quad \|[z^+, z]\| \leqslant \frac{2T_c}{\Omega}, \tag{4}$$

где через $\|...\|$ обозначается норма соответствующих операторов и $k = \mathrm{const}$ при $\Omega \to \infty$.

В соответствии с методом Н. Н. Боголюбова [1] тождественно представим модельный гамильтониан следующим образом: $H = H_B + H'$. «Аппроксимирующий» гамильтониан H_B выберем в форме

$$H_B = \sum_{p=1}^{\Omega} \varepsilon_p (1 - \sigma_p^z) - \sqrt{2T_c} \sum_{p=1}^{\Omega} (\sigma_p^+ \langle \sigma^- \rangle_B + \langle \sigma^+ \rangle_B \sigma_p^-) + \Omega \langle \sigma^- \rangle_B \langle \sigma^+ \rangle_B. \tag{5}$$

При таком выборе H_B для остаточного гамильтониана получаем

$$H' = -\Omega \left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p=1}^{\Omega} \sigma_p^- - \langle \sigma^- \rangle_B \right) \left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p'=1}^{\Omega} \sigma_{p'}^+ - \langle \sigma_p^+ \rangle_B \right). \tag{6}$$

Здесь через $\langle \sigma^\pm \rangle_B$ обозначена комплексная постоянная (не зависящая от p), которую мы определяем из условия минимальности функции

$$f_{H_B}(\langle \sigma^\pm \rangle_B) = -\frac{\theta}{\Omega} \ln \mathrm{Sp}\, e^{-H_B/\theta}. \tag{7}$$

Мы получаем

$$\langle \sigma^+ \rangle_B = \frac{\mathrm{Sp}\, \sigma^+ e^{-H_B/\theta}}{\mathrm{Sp}\, e^{-H_B/\theta}}. \tag{8}$$

Гамильтониан H_B легко можно диагонализовать и непосредственно вычислить свободную энергию на величину числа пар. В соответствии с идеями работ [1] и [2] приближенное значение f_{H_B} «реальной» свободной энергии f_H определяется из задачи на экстремум

$$f_{H_B} = \min f_{H_B}(\langle \sigma^\pm \rangle_B).$$

Мы должны показать, что разность $f_{H_B} - f_H$ стремится к нулю при $\Omega \to \infty$. Заметим, что при $\Omega \to \infty$ величина f_{H_B} является конечной.

Начнем с рассмотрения вспомогательной задачи с гамильтонианом, содержащим члены с источниками пар

$$\Gamma = H - \Omega (\nu z + \nu^* z^+). \tag{9}$$

Ясно, что при $\nu = 0$ гамильтониан (9) сводится к исходному модельному гамильтониану (1). Построим для Γ «аппроксимирующий» гамильтониан тем же путем, что и для H

$$\Gamma_B = H_B - \Omega (\nu z + \nu^* z^+) \tag{10}$$

или в явном виде

$$\Gamma_B = \sum_{p=1}^{\Omega} \varepsilon_p (1 - \sigma_p^z) - \sqrt{2T_c} \sum_{p=1}^{\Omega} [\sigma_p^+ (\langle\sigma^-\rangle_B + \nu^*) +$$

$$+ \sigma_p^- (\langle\sigma^+\rangle_B + \nu)] + \Omega \langle\sigma^-\rangle_B \langle\sigma^+\rangle_B.$$

Очевидно $\Gamma' = H'$.

Применяя технику мажорирования, мы получим оценку для разности $F_{\Gamma_B} - F_\Gamma$, выраженную через корреляционные средние от величины типа (6). Для этого введем вспомогательный «промежуточный» гамильтониан в соответствии с идеями работы [6]

$$\Gamma^\alpha = \Gamma_B + \alpha\Gamma'. \tag{11}$$

Заметим, что постоянная $<\sigma^\pm>_B$ не должна зависеть от параметра α.

Рассмотрим свободную энергию для «промежуточного» гамильтониана

$$f_{\Gamma^\alpha}(\langle\sigma^\pm\rangle_B) = -\frac{\theta}{\Omega} \ln \mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma^\alpha/\theta}.$$

Продифференцируем это выражение по α дважды:

$$\frac{\partial}{\partial\alpha} f_{\Gamma^\alpha}(\langle\sigma^\pm\rangle_B) = \frac{1}{\Omega} \frac{\mathrm{Sp}\,\Gamma' e^{-\Gamma^\alpha/\theta}}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma^\alpha/\theta}},$$

иначе говоря

$$\frac{\partial}{\partial\alpha} f_{\Gamma^\alpha}(\langle\sigma^\pm\rangle_B) = \frac{1}{\Omega} \langle\Gamma'\rangle_\alpha\,^{1}.$$

Для второй производной получаем

$$\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} f_{\Gamma^\alpha}(\langle\sigma^\pm\rangle_B) = -\frac{1}{\theta\Omega} \frac{1}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma^\alpha/\theta}} \int_0^1 \mathrm{Sp}\,[A e^{-\frac{a\Gamma^\alpha}{\theta}} A e^{-\frac{(1-a)\Gamma^\alpha}{\theta}}]\, da,$$

где

$$A = \Gamma' - \langle\Gamma'\rangle_\alpha.$$

Будем использовать матричное представление, в котором гамильтониан Γ^α диагонален, тогда

$$\frac{\partial^2 f_{\Gamma^\alpha}(\langle\sigma\pm\rangle_B)}{\partial\alpha^2} = -\frac{1}{\theta\Omega} \frac{1}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma^\alpha/\theta}} \int_0^1 \sum_{n,m} |A_{nm}|^2 \exp\left\{-\frac{E_m^\alpha - E_n^\alpha}{\theta} a - \frac{E_n^\alpha}{\theta}\right\} da \leqslant 0.$$

Здесь $A_{nm}^* = A_{mn}$.

Отсюда следует, что первая производная свободной энергии должна убывать с ростом параметра α.

Затем мы можем записать

$$f_{\Gamma_B}(\langle\sigma^\pm\rangle_B) - f_\Gamma = -\int_0^1 \frac{\partial f_{\Gamma^\alpha}(\langle\sigma^\pm\rangle_B)}{\partial\alpha}\, d\alpha = -\int_0^1 \frac{\langle\Gamma'\rangle_\alpha}{\Omega}\, d\alpha \geqslant 0. \tag{12}$$

[1] Для простоты записи усреднение по гамильтониану Γ^α обозначаем $<\ldots>_\alpha$.

Далее проинтегрируем очевидное неравенство

$$\langle \Gamma' \rangle_\alpha \geqslant \langle \Gamma' \rangle_\Gamma$$

по параметру α в пределах от 0 до 1. Получаем

$$f_{\Gamma_B}(\langle \sigma^{\pm} \rangle_B) - f_\Gamma \leqslant \frac{1}{\Omega} \langle \Gamma' \rangle_\Gamma. \tag{13}$$

Соединяя неравенства (12) и (13) и подставляя вместо Γ' выражение (6), получаем справедливое при любом значении постоянной $\langle \sigma^{\pm} \rangle_B$ неравенство

$$0 \leqslant f_{\Gamma_B}(\langle \sigma^{\pm} \rangle_B) - f_\Gamma \leqslant \Big\langle \left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p=1}^{\Omega} \sigma_p^- - \langle \sigma^- \rangle_B \right) \times$$

$$\times \left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p'=1}^{\Omega} \sigma_{p'}^+ - \langle \sigma^+ \rangle_B \right) \Big\rangle_\Gamma .$$

В частности, оно справедливо и при том $\langle \sigma^{\pm} \rangle_B$, при котором функция $f_{\Gamma_B}(\langle \sigma^{\pm} \rangle_B)$ имеет минимум. Получаем окончательно

$$0 \leqslant f_{\Gamma_B} - f_\Gamma \leqslant \Big\langle \left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p=1}^{\Omega} \sigma_p^- - \langle \sigma^- \rangle_B \right) \left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p'=1}^{\Omega} \sigma_{p'}^+ - \langle \sigma^+ \rangle_B \right) \Big\rangle_\Gamma . \tag{14}$$

Попытаемся показать асимптотическую малость среднего в правой части (14). Принимая во внимание идею статьи [6], мы выразим правую часть (14) через

$$\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial \nu \partial \nu^*} = -\frac{\theta}{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial \nu \partial \nu^*} \ln \operatorname{Sp} e^{-\Gamma/\theta}.$$

Выполняя дифференцирование, получим

$$\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial \nu \partial \nu^*} = -\frac{\Omega}{\theta} \frac{1}{\operatorname{Sp} e^{-\Gamma/\theta}} \int_0^1 \operatorname{Sp} \{ B e^{-a\Gamma/\theta} B^+ e^{-(1-a)\Gamma/\theta} \} \, da,$$

где

$$B = \frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega} \sum_{p=1}^{\Omega} \sigma_p^- - \langle \sigma^- \rangle_B .$$

Обращаясь к матричному представлению, в котором гамильтониан Γ диагонализуется, получаем

$$\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial \nu \nu^*} = -\frac{\Omega}{\operatorname{Sp} e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} \frac{|B_{nm}|^2}{E_n - E_m} (e^{-E_m/\theta} - e^{-E_n/\theta}) \leqslant 0.$$

Для того чтобы получить интересующие нас оценки, воспользуемся неравенством Гельдера для сумм. Имеем

$$\frac{\Omega}{\operatorname{Sp} e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} |B_{nm}|^2 | e^{-E_m/\theta} - e^{-E_n/\theta} | \leqslant \frac{\Omega}{\operatorname{Sp} e^{-\Gamma/\theta}} \times$$

$$\times \sum_{n,m}\left(\frac{|B_{nm}|^2 |e^{-E_m/\theta}-e^{-E_n/\theta}|}{|E_n-E_m|}\right)^{2/3} \sum_{n,m}(|B_{nm}|^2 |e^{-E_m/\theta}-e^{-E_n/\theta}||E_n-E_m|^2)^{1/3}.$$

После простого преобразования получаем

$$\frac{\Omega}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} |B_{nm}|^2 |e^{-E_m/\theta}-e^{-E_n/\theta}||E_n-E_m|^2 =$$

$$= \Omega < [[\Gamma, z]_-, [\Gamma, z]_-^{\pm}]_+ > \leqslant 2\Omega k_1^2,$$

где из условий (4) имеем

$$k_1 = k + 2T_c(|\nu| + \sqrt{2T_c}).$$

Таким образом получаем

$$\frac{\Omega}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} |B_{nm}|^2 |e^{-E_m/\theta}-e^{-E_n/\theta}| \leqslant (2k_1^2\Omega)^{1/3}\left(-\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial\nu\partial\nu^*}\right)^{2/3}.$$

Следует заметить, что

$$\frac{\Omega}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} |B_{nm}|^2 e^{-E_n/\theta} \leqslant \theta \frac{\Omega}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} \frac{|B_{nm}|^2}{E_n-E_m}(e^{-E_m/\theta}-e^{-E_n/\theta}) +$$

$$+ \frac{\Omega}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} |B_{nm}|^2 |e^{-E_n/\theta}-e^{-E_m/\theta}|,$$

но, как нетрудно видеть

$$\frac{\Omega}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} \sum_{n,m} |B_{nm}|^2 e^{-E_n/\theta} = \Omega \frac{\mathrm{Sp}\, BB^+ e^{-\Gamma/\theta}}{\mathrm{Sp}\, e^{-\Gamma/\theta}} = \Omega \langle BB^+\rangle_\Gamma =$$

$$= \Omega \left\langle\left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega}\sum_{p=1}^{\Omega}\sigma_p^- - \langle\sigma^-\rangle_B\right)\left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega}\sum_{p'=1}^{\Omega}\sigma_{p'}^+ - \langle\sigma^+\rangle_B\right)\right\rangle_\Gamma.$$

Таким образом, мы получаем искомую оценку

$$\left\langle\left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega}\sum_{p=1}^{\Omega}\sigma_p^- - \langle\sigma^-\rangle_B\right)\left(\frac{\sqrt{2T_c}}{\Omega}\sum_{p'=1}^{\Omega}\sigma_{p'}^+ - \langle\sigma^+\rangle_B\right)\right\rangle_\Gamma \leqslant$$

$$\leqslant -\frac{\theta}{\Omega}\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial\nu\partial\nu^*} + \frac{(2k_1^2)^{1/3}}{\Omega^{2/3}}\left(-\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial\nu\partial\nu^*}\right)^{2/3}. \tag{15}$$

Заметим, что второй член в правой части (15) возник в результате некоммутативности гамильтониана Γ с операторами z и z^+.

Подставим полученную оценку в неравенство (14):

$$0 \leqslant f_{\Gamma_B} - f_\Gamma \leqslant \frac{\theta}{\Omega}\left(-\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial\nu\partial\nu^*}\right) + \frac{(2k_1^2)^{1/3}}{\Omega^{2/3}}\left(-\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial\nu\partial\nu^*}\right)^{2/3}.$$

Если бы мы располагали сведениями об ограниченности второй производной свободной энергии, наша задача была бы уже решена. На самом деле в нашем распоряжении более тривиальные неравенства:

$$\left|\frac{\partial f_\Gamma}{\partial\nu}\right| \leqslant \sqrt{2T_c}, \qquad \left|\frac{\partial f_\Gamma}{\partial\nu^*}\right| \leqslant \sqrt{2T_c}$$

(следствия условий (4)), и нам придется воспользоваться некоторым искусственным приемом.

Прежде всего введем вместо ν, ν^* соответствующие полярные координаты $\nu=re^{i\varphi}$ и заметим, что $f_\Gamma(\nu, \nu^*)$ зависит только от модуля $r=\sqrt{\nu\nu^*}$, но не зависит от фазы φ.

В новых переменных получаем

$$\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial\nu\partial\nu^*}=\frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2 f_\Gamma}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial f_\Gamma}{\partial r}\right). \tag{16}$$

Обозначим $\Delta(r)=f_{\Gamma_B}-f_\Gamma$. Тогда имеет место следующее неравенство

$$|\Delta(r)|\leqslant|\Delta(r)-\Delta(\xi)|+|\Delta(\xi)|\leqslant\left|\frac{\partial\Delta}{\partial r}\right||r-\xi|+|\Delta(\xi)|, \tag{17}$$

где

$$r+l\leqslant\xi\leqslant r+2l$$

и

$$\Delta(\xi)=\frac{\int\limits_{r+l}^{r+2l} r\Delta(r)dr}{\frac{1}{2}\left[(r+2l)^2-(r+l)^2\right]}. \tag{18}$$

Очевидно,

$$\left|\frac{\partial\Delta}{\partial r}\right|\leqslant 4\sqrt{2T_c}. \tag{19}$$

Таким образом,

$$\left|\frac{\partial\Delta}{\partial r}\right||r-\xi|\leqslant 8l\sqrt{2T_c}. \tag{20}$$

Выражение $\Delta(\xi)$ может быть мажорировано из формул (18) и (15). После несложных вычислений получаем оценку для рассматриваемой разности

$$|\Delta(r)|\leqslant 8\sqrt{2T_c}\,l+2\frac{\theta}{\Omega}\frac{\sqrt{2T_c}}{l}+\frac{(4\sqrt{2T_c}k_1)^{2/3}}{l^{2/3}\Omega^{2/3}}.$$

В этих формулах l имеет произвольное положительное значение. Выбираем l из условия

$$8\sqrt{2T_c}\,l=\frac{(4\sqrt{2T_c}\,k_1)^{2/3}}{l^{2/3}\Omega^{2/3}},$$

откуда

$$l=\frac{k_1^{2/5}}{2\Omega^{2/5}(2T_c)^{1/10}}.$$

Таким образом получаем

$$0\leqslant f_{\Gamma_B}-f_\Gamma\leqslant\frac{4\left[2T_c\left(k+2T_c\left(|\nu|+\sqrt{2T_c}\right)\right)\right]^{2/5}}{\Omega^{2/5}}+\frac{4\theta(\sqrt{2T_c})^{6/5}}{\Omega^{3/5}\left[k+2T_c\left(|\nu|+\sqrt{2T_c}\right)\right]^{2/5}}. \tag{21}$$

Из выражения (21) видно, что при конечном Ω обе функции f_{Γ_B} и f_Γ непрерывны по ν. Поэтому мы можем положить здесь $\nu=0$ и получить

$$0\leqslant f_{H_B}-f_H\leqslant\frac{4\left[2T_c\left(k+2T_c\sqrt{2T_c}\right)\right]^{2/5}}{\Omega^{2/5}}+\frac{4\theta(\sqrt{2T_c})^{6/5}}{\Omega^{3/5}\left(k+2T_c\sqrt{2T_c}\right)^{2/5}}. \tag{22}$$

Из (22) видно, что разность $f_{H_B}-f_H$ стремится к нулю при $\Omega\to\infty$ как для нулевых температур, так и для температур бо́льших нуля.

Найдем асимптотически точное выражение для свободной энергии рассматриваемой модели. Такой величиной, как было показано выше, является (7).

Так как гамильтониан H_B представляет собой форму из спиновых операторов Паули, мы можем записать

$$f_{H_B}=-\frac{\theta}{\Omega}\ln \operatorname{Sp} e^{-\frac{1}{\theta}\sum\limits_{p=1}^{\Omega}(\sigma_p^{z'}M+N)}.$$

Производя простые вычисления, получаем

$$f_{H_B}=-\frac{\theta}{\Omega}\ln\prod_{p=1}^{\Omega}(e^{-M/\theta}+e^{M/\theta})\,e^N,$$

где

$$M=\sqrt{\varepsilon_p^2+8T_c\,|\langle\sigma^-\rangle_B|^2}.$$

Представляя комплексный параметр $\langle\sigma^-\rangle_B$ обычным путем

$$\langle\sigma^-\rangle_B=Re^{i\Phi},$$

получаем из уравнения (8)

$$\frac{2T_cR}{\Omega}\sum_{p=1}^{\Omega}\frac{\operatorname{th}\frac{1}{\theta}\sqrt{\varepsilon_p^2-8T_cR^2}}{\sqrt{\varepsilon_p^2-8T_cR^2}}=R, \tag{23}$$

откуда легко можно определить R.

Для вырожденной модели ($\varepsilon_p=\text{const}$), рассмотренной Тиррингом в работе (9), выражение для свободной энергии принимает вид

$$f=-\theta\ln 2-\theta\ln\operatorname{ch}\frac{\varepsilon_p}{\theta}+\varepsilon_p. \tag{24}$$

Полученный результат совпадает с решением для модели с отталкиванием.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., Церковников Ю. А. ДАН СССР, **117**, 788, 1958.
2. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., Церковников Ю. А. ЖЭТФ, **39**, 120, 1960.
3. Боголюбов Н. Н. Препринт Р-511. Дубна, 1960.
4. Bogoliubov N. N. Physica, **26**, 51, 1960.
5. Тареева Е. Е. Реферат канд. диссертации. МИАН, 1965.
6. Боголюбов Н. Н. (мл.) «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 1, 94, 1966.
7. Bogoljubov N. N. (jun) Physica, **32**, 933, 1966.
8. Thirring W., Wherl A. Com. Math. Phys., **4**, 303, 1967.
9. Thirring W. Preprint, Institute for Teoretical physics university of Vienna Austria, 1968.
10. Боголюбов Н. Н. (мл.) Препринт ИТФ, 68—65, Киев, 1969.

Поступила в редакцию
19.5 1969 г.

Кафедра
квантовой статистики