

В. И. ЮКАЛОВ

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ПРИ СИЛЬНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ

Исследована теория возмущений для статистических систем при отсутствии малого параметра взаимодействия. Предложена новая форма условий согласования, определяющих параметры пробного гамильтониана при итерировании нелинейных пропагаторных уравнений. В качестве примеров рассмотрены супергармоническое, полугармоническое и псевдогармоническое приближения для молекулярного кристалла.

Теория возмущений

Рассмотрим статистическую систему в пятимерном пространстве $\{y\}$,

$$y = \{x, t\}; \quad x = \{r, f\}; \quad r = \{r_i\}; \quad i = 1, 2, 3,$$

где f — координата внутренней степени свободы или индекс макроскопического состояния [1, 2] (или их комбинация).

Для краткости в дальнейшем будем использовать обозначения

$$\Phi(y_1 \dots y_n) \equiv \Phi(1 \dots n); \quad dy_1 \dots dy_n \equiv d(1 \dots n). \quad (1)$$

Допустим, неизвестно точное решение уравнения движения

$$\int G^{-1}(13) G(32) d(3) = \delta(12), \quad (2)$$

но известно решение некоторой модельной задачи

$$\int G_0^{-1}(13) G_0(32) d(3) = \delta(12). \quad (3)$$

Здесь и ниже под G подразумевается причинная функция Грина, определенная обычным образом через полевые операторы, либо аксиоматически [3]. На основании (2) и (3), введя ядро

$$K(12) = \int G_0(13) [G_0^{-1}(32) - G^{-1}(32)] d(3), \quad (4)$$

можно записать уравнение

$$G(12) = G_0(12) + \int K(13) G(32) d(3). \quad (5)$$

Нелинейное интегральное уравнение (5) можно решать различными приближенными методами [4]. Будем, например, итерировать его по схеме

$$G_n \rightarrow K_{n+1} \rightarrow G_{n+1},$$

в которой $K_n - n$ — итерированный функционал (4),

$$K_{n+1} \equiv K\{G_{n+1}^{-1}\}, \quad G_{n+1}^{-1} \equiv G^{-1}\{G_n\}.$$

Очевидно, если взаимодействие частиц достаточно сильно, то за нулевое приближение G_0 нельзя взять пропагатор свободных частиц. В качестве G_0 берется пробный триниан, параметры которого определяются из дополнительных условий. Предлагаются следующие условия согласования: средние значения операторов \mathcal{O} , соответствующих наблюдаемым величинам, вычисление с помощью $n+1$ и n итераций, совпадают, т. е.

$$\int \lim_{x_2 \rightarrow x_1} \lim_{t_{12} \rightarrow -0} \mathcal{O}(1) [G_{n+1}(12) - G_n(12)] dx_1 = 0. \quad (6)$$

Через t_{12} записана разность $t_1 - t_2$. Нужно брать столько разных равенств (6), сколько параметров содержит G_0 . Из всех возможных выбираются те операторы \mathcal{O} , средние от которых в исследуемой ситуации надо знать с наибольшей точностью. Когда левая часть (6) пропорциональна среднему числу частиц, то при переходе к термодинамическому пределу следует поделить уравнение (6) на

$$N = \pm i \int \lim_{x_2 \rightarrow x_1} \lim_{t_{12} \rightarrow -0} G(12) dx_1.$$

Останавливаясь на первом итерационном шаге и учитывая (5), вместо (6) получим

$$\int \lim_{x_2 \rightarrow x_1} \lim_{t_{12} \rightarrow -0} \mathcal{O}(1) K_1(13) G_0(32) d(3) dx_1 = 0. \quad (7)$$

Условия (7) и (8) справедливы и для равновесных и для неравновесных систем. В случае первых удобно перейти к Фурье-представлению по $\tau \equiv t - t'$,

$$\varphi(y, y') = \frac{1}{2\pi} \int \varphi(x, x', \omega) e^{-i\omega\tau} d\omega.$$

Здесь понимается определенный интеграл в интервале $(-\infty, +\infty)$. При этом

$$K(x, x', \omega) = \int G_0(x, x'', \omega) [G_0^{-1}(x'', x', \omega) - G^{-1}(x'', x', \omega)] dx'',$$

$$N = \pm \frac{i}{2\pi} \int \lim_{x' \rightarrow x} \lim_{\tau \rightarrow +0} G(x, x', \omega) e^{i\omega\tau} d\omega dx,$$

а (7) принимает вид

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \int G_0(x', x, \omega) \mathcal{O}(x) K_1(x, x', \omega) e^{i\omega\tau} d\omega dx dx' = 0. \quad (8)$$

Оператор $\mathcal{O}(x)$ — тот же, что и $\mathcal{O}(y)$.

Условия согласования

Проследим, как упрощаются условия согласования (8) в некоторых частных случаях.

Пусть G_0 разлагается по волновым функциям,

$$G_0(x, x', \omega) = \sum_n G_n(\omega) \psi_n(x) \psi_n^*(x'), \quad (9)$$

В разложении (9) n — полный набор индексов, характеризующих волновые функции; верхний знак — для бозе, нижний — для Ферми-систем;

$$G_n(\omega) = \frac{1 \pm n(\omega_n)}{\omega - \omega_n + i0} \mp \frac{n(\omega_n)}{\omega - \omega_n - i0},$$

$$n(\omega) = (e^{\beta\omega} \mp 1)^{-1}.$$

С использованием обозначений

$$\Delta(x, x', \omega) = G_0^{-1}(x, x, \omega) - G_1^{-1}(x, x', \omega),$$

$$\Delta_{mn}(\omega) = \int \psi_m^*(x) \Delta(x, x', \omega) \psi_n(x') dx dx', \quad (10)$$

$$O_{mn} = \int \psi_m^*(x) O(x) \psi_n(x) dx,$$

уравнение (8) преобразуется к

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \int e^{i\omega\tau} \sum_{mn} G_m(\omega) G_n(\omega) O_{mn} \Delta_{nm}(\omega) d\omega = 0. \quad (11)$$

Теперь $N = \sum_n n(\omega_n)$. При переходе от (8) к (11) необходимо соблюдать осторожность, помня о том, что

$$\lim_{x' \rightarrow x} G(x, x', \omega) = \pm \lim_{x' \rightarrow x} G(x', x, -\omega).$$

Положим, (10) не зависит от частоты ω ,

$$\Delta(x, x', \omega) = \Delta(x, x'), \quad (12)$$

следовательно, от нее не зависит и $\Delta_{mn}(\omega) \equiv \Delta_{mn}$. Замечая, что

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \int e^{i\omega\tau} G_m(\omega) G_n(\omega) d\omega = \pm 2\pi i \frac{n(\omega_m) - n(\omega_n)}{\omega_n - \omega_m},$$

из (11) находим

$$\sum_{mn} O_{mn} \frac{n(\omega_m) - n(\omega_n)}{\omega_n - \omega_m} \Delta_{nm} = 0. \quad (13)$$

Допустим, собственные функции оператора $O(x)$ совпадают с $\psi_n(x)$,

$$O(x) \psi_n(x) = O_n \psi_n(x).$$

Тогда $O_{mn} = \delta_{mn} O_n$, а так как

$$\lim_{m \rightarrow n} \frac{n(\omega_m) - n(\omega_n)}{\omega_n - \omega_m} = \beta n^2(\omega_n) e^{\beta\omega_n},$$

то (13) приводится к форме

$$\sum_n \mathcal{O}_n n^2 (\omega_n) e^{\beta \omega_n} \Delta_{nn} = 0. \quad (14)$$

Обратим внимание на то, что для интеграла

$$I_{mn}(\tau) = \int e^{i\omega\tau} G_m(\omega) \mathcal{G}_n(\omega) d\omega$$

предельные переходы $m \rightarrow n$, $\tau \rightarrow +0$ некоммутативны:

$$\lim_{m \rightarrow n} \lim_{\tau \rightarrow +0} I_{mn}(\tau) = \pm 2\pi i n^2 (\omega_n) e^{\beta \omega_n},$$

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} \lim_{m \rightarrow n} I_{mn}(\tau) = \mp \infty.$$

Смысл имеет лишь первая последовательность пределов, что естественно, поскольку первоначально задается уравнение движения, значит и $\Delta(x, x', \omega)$, а уже потом для условий согласования подбираются операторы $\mathcal{Q}(x)$.

Здесь важно применение именно причинных гриновских функций. Для запаздывающих гринианов равенство (11) при справедливости (12) превращается в тождество вследствие того, что для них $\lim_{\tau \rightarrow +0} I_{mn}(\tau) \equiv 0$.

Если $n(\omega_n)$ быстро убывает с ростом n , то в сумме (14) можно оставить конечное число слагаемых. Оставив одно первое слагаемое с $n=0$, получим условие согласования

$$\int \psi_0^*(x) \Delta(x, x') \psi_0(x') dx dx' = 0. \quad (15)$$

Пример применения

Рассмотрим применение предложенных условий согласования на примере немагнитного локализованного (гриновская функция представляется суммой по узлам $G = \sum G_a$) кристалла, который описывается псевдохартриевским (приближение Хартри с эффективным потенциалом) уравнением [5, 6] (классический аналог см. в работе [7]). В этом случае выражение (10) имеет вид

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}' \omega) = [V_1(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Среднее поле

$$V_1(\mathbf{r}) = \int \rho(\mathbf{r}') \sum_a \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{a}) d\mathbf{r}',$$

где \mathbf{a} — решеточный вектор, является функционалом от псевдопотенциала Φ , включающего в себя парную корреляцию частиц. Подстановка вместо Φ потенциала взаимодействия голых частиц, как известно [8], чаще всего приводит к расходящимся величинам. Нулевому приближению соответствует потенциал изотропного гармонического осциллятора

$$V_0(\mathbf{r}) = u_0 + m_0 \omega_0^2 (\mathbf{r} - \mathbf{a})^2 / 2; \quad u_0 = \omega \sum_b \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{b}).$$

Здесь ω — число частиц на элементарную ячейку:

$$\omega = \int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{nlm} n(\omega_{nl}),$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{nlm} n(\omega_{nl}) |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2,$$

$$\omega_{nl} = u_0 + \omega_0 \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) - \mu.$$

За исходную модель можно было бы взять ангармонический осциллятор [9, 10], но это скорее всего привело бы к неоправданному усложнению расчетов и потому вряд ли рационально.

Для определения единственного пробного параметра ω_0 будем исходить из условия согласования (14) с единичным оператором \mathcal{O} :

$$\sum_{nlm} n^2(\omega_{nl}) e^{\beta \omega_{nl}} \Delta_{nlm} = 0, \quad (16)$$

$$\Delta_{nlm} = \int |\psi_{nlm}(\mathbf{r} - \mathbf{a})|^2 [V_1(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \quad (17)$$

Среднее

$$\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle_{nlm} = \int |\psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

для $\varphi = r^2$ нетрудно найти по теореме вириала, что дает

$$\langle r^2 \rangle_{nlm} = \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) / m_0 \omega_0.$$

Так как $n(\omega_{nl})$ быстро уменьшается при увеличении n, l , то возможно ограничиться одним слагаемым из (16) с $n=l=0$, что эквивалентно (15). Для ω_0 получается уравнение

$$\omega_0 = 4 (\Phi_0 - u_0) / 3,$$

$$\Phi_s = \omega \sum_b \int |\psi_0(\mathbf{r})|^2 |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \Phi(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{b}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}',$$

причем

$$\omega = n(E_0 - \mu) \quad E_0 = u_0 + \frac{3\omega_0}{2}.$$

Поскольку при вычислении гармонической частоты ω_0 учитываются ангармонизмы всех порядков без исключения (псевдопотенциал Φ не разлагается в тейлоровский ряд), подобное приближение можно назвать супергармоническим. Обычно же потенциал взаимодействия разлагается в ряд по отклонениям от узлов.

Основной вклад в интеграл (17) вносит область вблизи $\mathbf{r} = \mathbf{a}$, поэтому разумно воспользоваться разложением

$$\Phi(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{b}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \partial_{\mathbf{a}\mathbf{b}}^n(\mathbf{r}, 0) \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{b}), \quad (18)$$

$$\partial_{\mathbf{a}\mathbf{b}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{i=1}^3 \left(r_i \frac{\partial}{\partial a_i} + r'_i \frac{\partial}{\partial b_i} \right).$$

Ограничиваясь вторым порядком указанного разложения и принимая во внимание следующие свойства:

$$\int r_i \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0, \quad \int r_i r_j \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{ij} \int r_i^2 \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$\sum_{m=-l}^{+l} \langle r_i^2 \rangle_{n'm} = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle_{nlm}$$

и обозначения

$$\Phi_h = \omega \sum_{\mathbf{a}} \langle \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{r} + \mathbf{b}) \rangle_0,$$

$$\omega_h^2 = \frac{\omega}{3m_0} \sum_{\mathbf{a}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial a_i^2} \langle \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{r} + \mathbf{b}) \rangle_0,$$

находим из (15) частоту

$$\omega_0 = \frac{1}{3} [2(\Phi_h - u_0) + \sqrt{4(\Phi_h - u_0)^2 + 9\omega_h^2}].$$

в полугармоническом приближении. Оставляя в разложении (18) $n+1$ слагаемое, мы получили бы полуангармоническое приближение n -го порядка (по определению).

Если при преобразовании (17) воспользоваться тем, что функция $\psi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{a})$ резко убывает в среднем при удалении от узла $\mathbf{r}=\mathbf{a}$ и разлагать псевдопотенциал, то логично разлагать его по обеим координатам:

$$\Phi(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{r}' + \mathbf{b}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \partial_{ab}^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{b}). \quad (19)$$

Введем обозначения

$$\omega_1^2 = \frac{\omega}{3m_0} \sum_{\mathbf{b}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial a_i^2} \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{b}),$$

$$\omega_2^2 = \frac{\omega}{3m_0} \sum_{\mathbf{b}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial b_i^2} \Phi(\mathbf{a}, \mathbf{b}),$$

$$r_0^2 = \frac{1}{\omega} \sum_{nl} n(\omega_{nl}) \langle r^2 \rangle_{nlm}.$$

Во втором порядке разложения (19) уравнение (16) содержит величину

$$\frac{2}{m_0} \sum_m \Delta_{nlm} = [\omega_1^2 - (2l+1)\omega_0^2] \langle r^2 \rangle_{nlm} + (2l+1)\omega_2^2 r_0^2.$$

Данное приближение, идентичное псевдогармоническому, в простейшем случае $n=l=0$, когда

$$r_0^2 = \langle r^2 \rangle_0 = 3/2m_0 \omega_0.$$

дает

$$\omega_0 = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} \quad (20)$$

Учет $n+1$ члена в сумме (19) привел бы к псевдоангармоническому приближению n -го порядка.

Для разностного потенциала $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, так как $\omega_1 = \omega_2$, то, на основании (20), $\omega_0 = \omega_1 \sqrt{2}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Юкалов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 11, № 1, 68, 1970.
2. Юкалов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., 12, № 5, 527, 1971.
3. Юкалов В. И. «Теоретическая и математическая физика», 17, 422, 1973.
4. Приближенное решение операторных уравнений. М., 1969.
5. Юкалов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., 13, № 5, 566, 1972.
6. Юкалов В. И. «Труды Университета дружбы народов», 59, 91, 1972.
7. Zubov V. I., Terletsy I. P. «Ann. Physik.», 24, 97, 1970.
8. Тябликов С. В. ЖЭТФ, 20, 16, 1950.
9. Bender S. M., Wu T. T. «Phys. Rev.», D 7, 1620, 1973.
10. Lu P., Wald S., Young B. «Phys. Rev.», D 7, 1701, 1973.

Поступила в редакцию
15.5 1974 г.

Кафедра
теоретической физики