УДК 531.19

А. С. ШУМОВСКИЙ

О ВЫБОРЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЕТОДЕ АППРОКСИМИРУЮЩИХ ГАМИЛЬТОНИАНОВ Н. Н. БОГОЛЮБОВА (МЛ.)

Как известно, одной из наиболее плодотворных идей в теории фазовых переходов явилось предположение Ван-дер-Ваальса о дальнодействующем характере взаимодействия между частицами. Именно эта идея легла в основу теории эффективного поля Вейса [1, 2], до настоящего времени являющейся одним из главных расчетных методов в задачах магнетизма [3], и целого ряда других теорий (подробнее см. обзор Уленбека [4]). Однако строгое с математической точки зрения решение задач, содержащих дальнодействие, удалось получить сравнительно недавно. Особенно плодотворным здесь оказался метод аппроксимирующих гамильтонианов (МАГ) Н. Н. Боголюбова (мл.) [5], справедливый для широкого класса модельных систем статистической механики. Отметим, что в указанных модельных системах взаимодействие выбиралось либо как факторизующееся дальнодействие [6], либо функцией вида const/Ω [7], где Ω — число частиц в системе.

Очевидный интерес представляет изучение задач с дальнодействием, не сводящимся к этим двум случаям, например со взаимодействием типа потенциала Каца [8]. В этой связи в настоящей работе мы покажем, что МАГ может быть распространен на случай систем с достаточно произвольным дальнодействующим взаимодействием.

Рассмотрим класс модельных систем, зафиксированный в [6]. Модельный гамильтониан запишем в виде

$$H = H_\Omega - 2 \sum_{n<m} J_{nm} \Lambda_n \Lambda_m^+, \quad (\forall n,\ m\ J_{nm} \geqslant 0), \tag{1}$$

где n, $m = 1, 2, \ldots, \Omega$, H_Ω — эрмитов оператор в Ω-мерном гильбертовом пространстве, удовлетворяющий условию термодинамической аддитивности

$$|\, \theta \ln \operatorname{Sp} e^{-H_\Omega/\theta}\, | \leqslant \mathrm{const}\, \Omega \tag{2}$$

и Λ_n — ограниченные операторы, удовлетворяющие условиям

$$\left\| \left[\sum_n \Lambda_n,\ \sum_n \Lambda_n^+ \right] \right\| \leqslant \mathrm{const}\Omega, \quad \|\, [H_\Omega,\ \Lambda_n]\, \| \leqslant \mathrm{const}, \tag{3}$$

где $\| \ldots \|$ — норма соответствующего оператора. Так как полная энергия системы является аддитивной функцией состояния, существуют две возможности: либо на суммирование во втором члене в (1) наложено какое-либо дополнительное условие, обеспечивающее правильную асимптотику по Ω (например, суммирование ведется по ближайшим соседям), либо суммирование ведется по всем n и m, но тогда J_{nm} должно иметь вид $J_{nm} = \Omega^{-1} \gamma_{nm}$, где γ_{nm} — ограниченная величина. На рассмотрении этого второго случая, соответствующего дальнодействию, мы и остановимся.

Прежде всего симметризуем гамильтониан (1). Имеем

$$H = H_\Omega + J(0)\, \Omega\, \| \Lambda \|^2 - \sum_{n,m} J_{nm} \Lambda_n \Lambda_m, \tag{4}$$

где $J(0)$ — значение J_{nm} при $n=m$. В рассматриваемом случае дальнодействия второй член в (4) имеет порядок const и вносит в термодинамику системы вклад порядка $o(\Omega^{-1})$. Поэтому им можно пренебречь, и ниже, говоря о гамильтониане (4), мы будем иметь в виду только вклады первого и третьего членов.

Действуя в рамках МАГ, определим для (4) аппроксимирующий гамильтониан

$$H^{(0)} = H_{\Omega} - \Omega^{-1} \sum_{n,m} \gamma_{nm} (\Lambda_n C^* + \Lambda_n^+ C - |C|^2), \tag{5}$$

где C — комплексное c-число, определяемое из вариационного принципа Н. Н. Боголюбова [5] как среднее от оператора Λ_m по гамильтониану (5). В силу указанного вариационного принципа имеет место неравенство

$$0 \leqslant f_{\Omega}^{(0)} - f_{\Omega} \leqslant \Omega^{-1} < H^{(1)} >_{H}, \tag{6}$$

где f_{Ω} и $f_{\Omega}^{(0)}$ — плотности свободной энергии систем (4) и (5) соответственно, $<\ldots>_H$ — среднее по гамильтониану (4) и $H^{(1)} = H - H^{(0)}$. Сделаем теперь следующее предположение A: пусть двойной ряд $\sum\limits_{n=1,\, m=1}^{n=\Omega,\, m=\Omega} \gamma_{nm}$ асимптотически при $\Omega \to \infty$ расходится не быстрее, чем Ω^2.

Покажем, что предположение A является достаточным условием термодинамической эквивалентности (в смысле МАГ) систем (4) и (5). Для этого определим вспомогательный гамильтониан Г соотношением (4), заменяя γ_{nm} на $\bar{\gamma} = \lim\limits_{\Omega \to \infty} \left(\Omega^{-2} \sum\limits_{n,m} \gamma_{nm} \right)$. В силу A указанный предел существует. Очевидно, аппроксимирующий гамильтониан $\Gamma^{(0)}$ для Г получается из (5) при той же замене и имеет место аналогичное (6) неравенство

$$0 \leqslant f_{\Omega}^{(0)} [\Gamma^{(0)}] - f_{\Omega} [\Gamma] \leqslant -\Omega^{-2} < \Gamma^{(1)} >_{\Gamma}, \tag{7}$$

где $\Gamma^{(1)} = \Gamma - \Gamma^{(0)}$. Кроме того, определим разность $T = \Gamma - H$ и $T^{(0)} = \Gamma^{(0)} - H^{(0)}$. По аналогии с (6) имеем

$$\begin{gathered} -\Omega^{-1} < T >_H \leqslant f_{\Omega} - f_{\Omega} [\Gamma] \leqslant -\Omega^{-1} < T >_{\Gamma}, \\ -\Omega^{-1} < T^{(0)} >_{H^{(0)}} \leqslant f_{\Omega}^{(0)} - f_{\Omega}^{(0)} [\Gamma_{\Omega}^{(0)}] \leqslant -\Omega^{-1} < T^{(0)} >_{\Gamma^{(0)}}. \end{gathered} \tag{8}$$

Комбинируя неравенства (6)—(8), нетрудно получить оценку

$$0 \leqslant f_{\Omega}^{(0)} - f_{\Omega} \leqslant f_{\Omega}^{(0)} [\Gamma^0] - f_{\Omega} [\Gamma] - \Omega^{-1} < T^{(0)} >_{\Gamma^{(0)}}. \tag{9}$$

Заметим, что $T^{(0)}$ имеет ту же операторную структуру, что и (5) с заменой γ_{nm} на $\bar{\gamma} - \gamma_{nm}$. В силу А $\forall \varepsilon > 0\, \exists \Omega_{\varepsilon} : \forall n,\ m \geqslant \Omega_{\varepsilon} \to |\bar{\gamma} - \gamma_{nm}| < \varepsilon$. Поэтому второй член в правой части (9) сходится к нулю при $\Omega \to \infty$. Что касается разности $f_{\Omega}^{(0)} [\Gamma^{(0)}] - f_{\Omega} [\Gamma]$, то (имея в виду, что гамильтонианы Г и $\Gamma^{(0)}$ в силу (2) и (3) удовлетворяют всем условиям теорем, сформулированным в [6] она может быть оценена величиной $\varepsilon_{\Omega}(\theta)$, сходящейся к нулю при $\Omega \to \infty$ равномерно по отношению к $\theta \in [0, \theta_0]$. Здесь θ_0 — произвольная фиксированная температура.

Таким образом, мы строго показали, что системы (4) и (5) термодинамически эквивалентны, т. е. определяют одинаковые предельные плотности свободной энергии, при выполнении условия A. Укажем, что условие A согласуется с известным условием Лебовица—Пенроуза [9], предложенным для случая потенциала Каца [8] в модели Изинга. Подчеркнем, что приведенное в [9] доказательство было ограничено рамками модели Изинга и проводилось на физическом уровне строгости, т. е. основывалось главным образом на интуиции [8].

В настоящей работе предположение A строго доказано в качестве достаточного условия существования точного решения в рамках МАГ для широкого класса систем с гамильтонианами типа (1), (4). Заметим, что все до сих пор рассматривавшиеся в МАГ задачи являются частными случаями указанного класса модельных систем.

В заключение отметим, что исходя из условия (2) и используя очевидное неравенство

$$\mathrm{Sp}\, e^{-\frac{1}{\theta}(A+B)} \leqslant \mathrm{Sp}\,(e^{-\frac{1}{\theta}A}\, e^{-\frac{1}{\theta}B}),$$

можно показать, что $\lim\limits_{\Omega\to\infty} f_{\Omega}^{(0)} = f_{\infty}^{(0)}$ существует на любом компактном множестве значений температуры θ и внешних параметров ν рассматриваемой системы. Тогда, очевидно, из сказанного выше следует: $f_{\Omega} \rightrightarrows f_{\infty}^{(0)}$ на указанном множестве.

Автор благодарен проф. Н. Н. Боголюбову (мл.) за внимание к работе и поддержку и И. К. Кудрявцеву за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Weiss P. „Journ. Phys. et Rad.“, 1907, 6, 667.
2. Смарт Дж. Эффективное поле в теории магнетизма. М., 1968.
3. Jongh L. J. de, Miedema A. R. „Adv. in Phys.“, 1974, 23, 1.
4. Уленбек Г. «Успехи физ. наук», 1971, 103, 275.
5. Боголюбов Н. Н. (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов. М., 1974.
6. Боголюбов Н. Н. (мл.), Шумовская А. Г., Шумовский А. С. «Теор. и мат. физика», 1976, 29, 388.
7. Brankov J. G., Shumovsky A. S., Zagrebnov V. A. „Physica“, 1974, 78, 183.
8. Кас М. In. Statistical Physics. Phase transitions and Superfluidity. N. Y., 1968.
9. Lebovitz J. L., Penrose O. „J. Math. Phys.“, 1966, 7, 98.

Кафедра
квантовой статистики

Поступила в редакцию
21.03.78