

Ограничимся случаем, когда  $W_i$  — диагональные матрицы. Тогда

$$r_0 = V^{-1} \sum_{i=1}^k (W_i n, r_i) W_i n,$$

где

$$V^{-1} = \frac{1}{\det V} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^k (\omega_{22}^i n_y)^2 & -\sum_{i=1}^k \omega_{11}^i \omega_{22}^i n_x n_y \\ -\sum_{i=1}^k \omega_{11}^i \omega_{22}^i n_x n_y & \sum_{i=1}^k (\omega_{11}^i n_x)^2 \end{bmatrix},$$

$$\det V = \sum_{i=1}^k (\omega_{11}^i n_x)^2 \cdot \sum_{i=1}^k (\omega_{22}^i n_y)^2 - \left( \sum_{i=1}^k \omega_{11}^i \omega_{22}^i n_x n_y \right)^2;$$

$\omega_{11}^i, \omega_{22}^i$  — диагональные элементы  $W_i, n = (n_x, n_y)$ .

Поскольку  $n = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , то, как и в предыдущем случае, перебирая  $\varphi$  с некоторым шагом, найдем минимум в (9) с требуемой точностью.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] Cameron Reed B. // Amer. J. Phys. 1989. 57, N 7. P. 642.

Поступила в редакцию  
10.02.92

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 6

УДК 536.75

#### ЦЕПОЧКА УРАВНЕНИЙ БОГОЛЮБОВА ДЛЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ НА СВЯЗНЫХ КЛАСТЕРАХ

И. П. Базаров, П. Н. Николаев  
(кафедра квантовой статистики)

Получена система уравнений для частичных статистических операторов Боголюбова на связанных кластерах, которая дает возможность построить единую теорию возмущений для однородной и упорядоченной фаз вне зависимости от типа симметрии системы многих частиц.

Метод Боголюбова позволяет построить полную статистическую термодинамику систем многих частиц, причем для квантовых систем данный метод особенно плодотворен, поскольку из-за вычислительных трудностей сведение многочастичной задачи к задаче с меньшим числом переменных является единственным способом упрощения [1]. Однако решение квантовой цепочки уравнений сопряжено со многими сложностями как для однородной, так и для упорядоченной систем. Поэтому выбор теории возмущений должен быть достаточно эффективным, особенно в области фазовых переходов, где, как правило, скорость сходимости рядов теории возмущений значительно замедляется. С этой точки зрения построение единого способа описания двух фаз вещества с единых позиций является весьма актуальным [2].

В настоящее время большинство методов теории возмущений строится применительно к определенной фазе, а затем с использованием известных термодинамических свойств определяется кривая сосуществования двух фаз вещества [3, 4]. Решение цепочки уравнений для упорядоченных систем предполагает разбиение объема на ячейки, и в основном приближении считается, что в каждой ячейке находится по одной частице. Многочастичные заполнения ячеек в лучшем случае учитываются последовательным включением двух-, трех- и т. д. частичных заполнений. При этом одночастичное заполнение остается основным приближением [5].

В последнее время возникла необходимость расчета кластеров порядка выше, чем второй. В результате было обнаружено [1], что одночастичное заполнение ячеек, используемое в качестве основного приближения, налагает существенные ограничения на рассматриваемую модель: возникают нефизические сингулярности, обусловленные искусственным введением стенок.

Среди немногих приближений, учитывающих в нулевом порядке многочастичное заполнение ячеек, выделяется приближение самосогласованного поля с исключенным самовоздействием [1]. С точки зрения статистической термодинамики уравнение самосогласованного поля при одночастичном заполнении ячеек и уравнение самосогласованного поля с исключенным самовоздействием дают выражения для свободной энергии, отличающиеся на некоторую постоянную [1]. Достаточно давно было замечено, что к энтропийным постоянным большинства рассматриваемых систем энтропийные постоянные второго приближения ближе, чем первого [5]. Но приближение самосогласованного поля с одночастичным заполнением ячеек дает более простое обобщение на случай корреляций [1], нежели уравнение самосогласованного поля с исключенным самовоздействием. Поэтому первое приближение рассматривается гораздо чаще, чем второе.

Из изложенного выше следует, что актуальной стала задача получения разложения, использующего в качестве основного приближения приближение самосогласованного поля с исключенным самовоздействием. Для этого система операторных уравнений Боголюбова должна быть представлена в допускающем такое разложение виде. Решению данной задачи и посвящена настоящая работа.

Рассмотрим систему  $N$  одинаковых одноатомных молекул, находящихся в макроскопическом объеме  $V$  при температуре  $T$ . Силы взаимодействия между молекулами считаем центральными (обобщение на случай более сложных систем очевидно). Положение  $i$ -й молекулы ( $i = \overline{1, N}$ ) определяется заданием вектора  $q_i$  с декартовыми координатами  $q_i^1, q_i^2, q_i^3$ . Потенциал взаимодействия двух молекул равен  $\Phi(i, j) = \Phi(|q_i - q_j|)$ , а гамильтониан системы

$$H = \sum_{1 \leq i \leq N} H(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|q_i - q_j|),$$

где  $H(i)$  — оператор индивидуальной энергии  $i$ -й частицы:

$$H(i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{1 \leq \alpha \leq 3} \frac{\partial^2}{\partial q_i^{\alpha 2}} + U(q_i),$$

$U(q_i)$  — потенциал внешнего поля.

Для данной системы операторные уравнения Боголюбова имеют вид

$$i\hbar \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = [H_s(1, 2, \dots, s), \rho_s(1, 2, \dots, s)] + \\ + (N-s) \text{Sp}_{s+1} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s} \Phi(i, s+1), \rho_{s+1}(1, 2, \dots, s+1) \right], \quad (1)$$

где

$$H_s(1, 2, \dots, s) = \sum_{1 \leq i \leq s} H(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi(i, j),$$

а  $\rho_s(1, 2, \dots, s)$  —  $s$ -частичный оператор, удовлетворяющий условиям нормировки

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \text{Sp}_1 \rho_1(1) = 1,$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N-s} \text{Sp}_{s+1} \rho_{s+1}(1, 2, \dots, s+1) = \rho_s(1, 2, \dots, s).$$

Система (1) представляет собой цепочку операторных уравнений для  $\rho_1, \dots, \rho_s, \dots$ , позволяющую находить их приближенно независимо от полного оператора плотности  $\rho_N$ .

Осуществив разбиение нашей системы на  $N$  одинаковых ячеек. Положение  $i$ -й частицы относительно ячейечной системы определим вектором  $q_i^{k_i}$ , где  $k_i$  — номер ячейки, в которой находится  $i$ -я частица. В этом случае система уравнений (1) представима в форме

$$i\hbar \frac{\partial \rho_s(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s)}{\partial t} = \\ = [H_s(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s), \rho_s(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s)] + \\ + (N-s) \sum_{k_{s+1}} \text{Sp}_{s+1} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s} \Phi(i, k_i; s+1, k_{s+1}), \right. \\ \left. \rho_{s+1}(1, k_1; 2, k_2; \dots; s+1, k_{s+1}) \right]. \quad (2)$$

Здесь  $\text{Sp}_{k_{s+1}}$  берется по  $(s+1)$ -й частице, находящейся в ячейке  $k_{s+1}$ .

Введем представление о связанных кластерах:  $k$ -частичным связным кластером называется кластер, состоящий из  $k$  ячеек, каждая из которых имеет по крайней мере с одной из  $k$  ячеек данной совокупности общую границу размерности  $(d-1)$ , где  $d$  — размерность пространства. Двухчастичный связный кластер состоит из двух соседних ячеек вне зависимости от размерности пространства (рис. 1). При разбиении си-



Рис. 1



Рис. 2

стемы на одинаковые ячейки в одномерной системе существует один тип трехчастичного связного кластера (рис. 2). Количество типов связных кластеров в случае  $d=2, 3$  зависит и от способа разбиения. Так, в гексагональной двумерной системе (рис. 3) существует три типа связных кластеров (рис. 4), в трехмерной гранецентрированной системе — четыре (рис. 5).

Далее будем считать, что связный кластер  $n$ -го порядка содержит  $n$  частиц. Когда система  $n$  частиц находится в совокупности  $\{n_k\}$  связанных кластеров ( $\sum_k kn_k = n$ ,  $n_k$  — число кластеров, содержащих по  $k$  частиц каждый), то мы имеем систему связанных кластеров, содержащую  $n$  частиц.

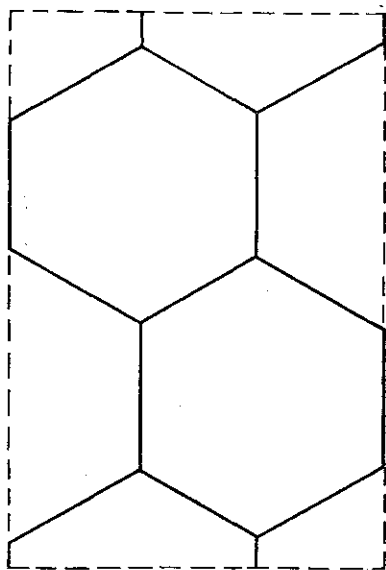


Рис. 3

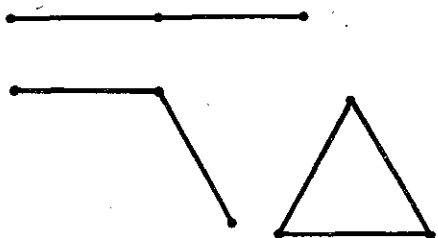


Рис. 4

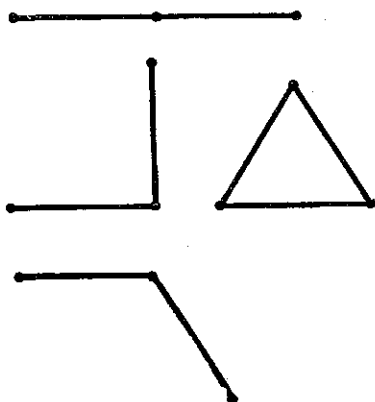


Рис. 5

Если  $s$  частиц заполняют  $s_1$  ячеек, причем  $s - s_1 = m > 0$ ,  $m$  можно считать эффективным числом незанятых ячеек. Согласно следствиям теории равновесных флуктуаций эти свободные ячейки с наибольшей вероятностью входят в состав связанного кластера  $s$ -го порядка. То есть естественно искать  $\rho_s(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s)$  в виде

$$\rho_s(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s) = \sum_{j_2, \dots, j_s} P_{sj_2 \dots j_s} \rho_{sj_2 \dots j_s}(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s), \quad (3)$$

где  $\rho_{sj_2 \dots j_s}$  — некоторые новые операторы, определенные на системе связанных кластеров, имеющих вакансии в ячейках  $j_2, \dots, j_s$ ;  $P_{sj_2 \dots j_s}$  — весовая функция вклада  $s$ -частичного связанного кластера (или системы связанных кластеров), а суммирование по  $j_2, \dots, j_s$  осуществляется по всем возможным вариантам связанных кластеров, имеющих вакансии в ячейках  $j_2, \dots, j_s$ . Вид  $P_{sj_2 \dots j_s}$  определяется характером задачи. Очевидно,

$$\sum_{j_2, \dots, j_s} P_{sj_2 \dots j_s} = 1.$$

Подставляя (3) в (2), имеем цепочку операторных уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \partial \rho_{sj_2 \dots j_s}(1, k_1; 2, k_2; \dots, s, k_s) / \partial t = \\ = [H_s(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s), \rho_{sj_2 \dots j_s}(1, k_1; 2, k_2; \dots; s, k_s)] + \\ + (N-s) \sum_{k_{s+1}} \sum_{j_{s+1}} \text{Sp} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s} \Phi(i, k_i; s+1, k_{s+1}), \right. \\ \left. \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}(1, k_1; 2, k_2; \dots; s+1, k_{s+1}) \right] P_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}} / P_{sj_2 \dots j_s}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для решения системы уравнений (4) необходимо выделить главную часть, допускающую решение в виде того или иного варианта теории возмущений. Для решеточной системы естественно переписать (4) в виде

$$\begin{aligned} i\hbar \partial \rho_{sj_2 \dots j_s}(1, k_1; \dots; s, k_s) / \partial t = \\ = [H_{sj_2 \dots j_s}^{k_1 \dots k_s}, \rho_{sj_2 \dots j_s}(1, k_1; \dots; s, k_s)] + \\ + (N-s) \sum_{j_{s+1}} \sum_{k_{s+1}} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s} \Phi_{i_2 \dots i_{s+1}}^{k_1 \dots k_{s+1}}(i, k_i; s+1, k_{s+1}), \right. \\ \left. \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}(1, k_1; \dots; s+1, k_{s+1}) \right] P_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}} / P_{sj_2 \dots j_s} + \\ + \sum_{\substack{k_{s+1} \neq k_1, \dots, k_s \\ k_{s+1} \neq j_2, \dots, j_s}} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s} \Phi_{k_{s+1}}(i, k_i), \sum_{j_{s+1}} \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}^{k_{s+1}} \right. \\ \left. (1, k_1; \dots; s, k_s) P_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}} / P_{sj_2 \dots j_s} - \rho_{sj_2 \dots j_s}(1, k_1; \dots; s, k_s) \right], \end{aligned} \quad (5)$$

где  $H_{sj_2 \dots j_s}^{k_1 \dots k_s}$  определяется соотношением

$$H_{sj_2 \dots j_s}^{k_1 \dots k_s} = H_s + \sum_{1 \leq i \leq s} \sum_{\substack{k_{s+1} \neq j_2, \dots, j_s \\ k_{s+1} \neq k_1, \dots, k_s}} \Phi_{k_{s+1}}(i, k_i),$$

$\Phi_{k_{s+1}}(i, k_i)$  — некоторая функция, характеризующая суммарное влияние частиц, находящихся в ячейке  $k_{s+1}$ , на частицу с координатой  $q_i^{k_i}$ , находящуюся в ячейке  $k_i$ ;

$$\begin{aligned} \Phi_{i_2 \dots i_{s+1}}^{k_1 \dots k_{s+1}}(i, k_i; s+1, k_{s+1}) = \\ = \begin{cases} \Phi(i, k_i; s+1, k_{s+1}) - \Phi_{k_{s+1}}(i, k_i) - \\ - \Phi_{k_i}(s+1, k_{s+1}) + \Phi_{k_i k_{s+1}} \text{ при } k_{s+1} \neq k_1, \dots, k_s, k_{s+1} \neq j_2, \dots, j_s, \\ \Phi(i, k_i; s+1, k_{s+1}) \text{ во всех остальных случаях,} \end{cases} \end{aligned}$$

$\Phi_{k_i k_{s+1}}$  — постоянные, не зависящие от координат частиц, а определяемые лишь расстояниями между ячейками  $k_i$  и  $k_{s+1}$ .

В систему (5) входят новые операторы  $\rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}^{k_{s+1}}(1, k_1; \dots; k_s)$ , определяемые соотношениями

$$\rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}^{k_{s+1}}(1, k_1; \dots; s, k_s) = \text{Sp}_{k_{s+1}} \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}(1, k_1; \dots; s+1, k_{s+1}).$$

Они удовлетворяют в свою очередь системе уравнений, получаемой из системы (5) применением к ней операции  $\text{Sp}_{k_{s+1}}$  (естественно, для  $s >$

$> 1$ ):

$$\begin{aligned}
 & i \hbar \partial \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1} k_{s+1}}(1, k_1; \dots; s, k_s) / \partial t = \\
 & = [H_{s j_2 \dots j_s}^{k_1 \dots k_s}, \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1} k_{s+1}}(1, k_1; \dots; s, k_s)] + \\
 & + \text{Sp}_{k_{s+1}} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s} \Phi_{j_2 \dots j_{s+1}}^{k_1 \dots k_{s+1}}(i, k_i; s+1, k_{s+1}), \right. \\
 & \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}(1, k_1; \dots; s+1, k_{s+1}) \Big] + \\
 & + \sum_{k_{s+2}} \sum_{j_{s+2}} \text{Sp}_{k_{s+2}} \text{Sp}_{k_{s+1}} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s+1} \Phi_{j_2 \dots j_{s+2}}^{k_1 \dots k_{s+2}}(i, k_i; s+2, k_{s+2}), \right. \\
 & \rho_{s+2 j_2 \dots j_{s+2}}(1, k_1; \dots; s+2, k_{s+2}) \Big] P_{s+2 j_2 \dots j_{s+2}} / P_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}} + \\
 & + \sum_{\substack{k_{s+2} \neq k_1, \dots, k_{s+1} \\ k_{s+2} \neq j_2, \dots, j_{s+1}}} \left[ \sum_{1 \leq i \leq s+1} \Phi_{k_{s+2}}(i, k_i), \sum_{j_{s+2}} (P_{s+2 j_2 \dots j_{s+2}} / P_{s+1 j_2 \dots j_{s+1}}) \times \right. \\
 & \times \rho_{s+2 j_2 \dots j_{s+2} k_{s+2} k_{s+1}}(1, k_1; \dots; s, k_s) - \rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1} k_{s+1}}(1, k_1; \dots; s, k_s) \Big].
 \end{aligned} \tag{6}$$

В последнюю систему входят операторы

$$\begin{aligned}
 & \rho_{s+2 j_2 \dots j_{s+2} k_{s+2} k_{s+1}}(1, k_1; \dots; s, k_s) = \\
 & = \text{Sp}_{k_{s+1}} \text{Sp}_{k_{s+2}} \rho_{s+2 j_2 \dots j_{s+2}}(1, k_1; \dots; s+2, k_{s+2}).
 \end{aligned}$$

Для них система уравнений получается аналогичным образом, как и для операторов  $\rho_{s+1 j_2 \dots j_{s+1} k_{s+1}}$ . В результате имеем искомую систему уравнений (5), (6) и т. д.

Определим теперь входящие в систему (5), (6), ... неизвестные функции. В качестве  $P_{s j_2 \dots j_s}$  выберем как наиболее простой вариант

$$P_{s j_2 \dots j_s} = 1/m_s,$$

где

$$m_s = \begin{cases} \text{число возможных значений множества вакансий, когда } t \neq 0 \\ 1, & \text{когда } t = 0 \end{cases}$$

$$(t = \sum_{2 \leq i \leq s} j_i).$$

Здесь мы полагаем, что при отсутствии вакансий индекс  $j_i = 0$ . При сложной структуре твердых тел из соображений симметрии  $P_{s j_2 \dots j_s}$  может быть выбрано в более общем виде.

Выбор функций  $\Phi_i(j, k_j)$  и  $\Phi_{k_j k_j}$  естественно осуществлять таким образом, как это делается в [1].

Нами получена система уравнений (5), (6), ..., структура которых позволяет решить их (например, в предположении малости корреляционных интегралов [1]) как для однородных, так и для упорядоченных структур. При этом многочастичное заполнение ячеек эффективно

учитывается для операторов первых порядков ( $s=1, 2, \dots$ ) через члены теории возмущений высших порядков. В данном случае конкретный вид теории возмущений не изменится при изменении типа симметрии, а разложение для операторов определяется выбором основного приближения, которое естественно взять исходя из типа симметрии.

Описание единым образом однородной и упорядоченной фаз дает возможность исследовать фазовые переходы. При этом проведенные нами расчеты (будут опубликованы позже) показали, что использование в качестве основного приближения решения уравнения самосопряженного поля с исключенным самовоздействием уже при учете корреляций первого порядка позволяет описать как однородную, так и упорядоченную фазы, а также фазовый переход между ними.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bazarov I. P., Nikolaev P. N. Theory of many-particle systems. N. Y., 1989. [2] Yukalov V. I. // Physical Reports. A Review Section of Physical Letters. 1991. 208, N 6. P. 395. [3] Ландау Л. Д., Лифшиц И. М. Статистическая физика. Ч. 1. М. 1976. С. 277—288. [4] Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. М., 1983. С. 117—119. [5] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., 1961.

Поступила в редакцию  
19.02.92

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 6

УДК 530.12;531.51;539.12.17

## ОДНОРОДНЫЕ ИЗОТРОПНЫЕ КОСМОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В 6-МЕРНОЙ ТЕОРИИ КАЛУЦЫ—КЛЕЙНА

Ю. С. Владимиров, Америко Пераса Альварес \*

(кафедра теоретической физики)

Найдены точные однородные изотропные открытые космологические решения уравнений Эйнштейна 6-мерной теории Калуцы—Клейна. Дан их анализ и проведение сравнения с аналогичными космологическими решениями в 5-мерной теории Калуцы—Клейна и с 4-мерной космологической моделью Фридмана.

В настоящее время большое внимание уделяется исследованиям многомерных геометрических теорий Калуцы—Клейна [1, 2]. При этом преследуются две основные цели: во-первых, это получение многомерных геометрических моделей объединенной теории физических взаимодействий и, во-вторых, использование дополнительных геометрических скалярных полей для описания возможных изменений фундаментальных физических констант. Большая часть работ посвящена объединению физических взаимодействий. Анализировались возможности моделей различной размерности: от пяти до одиннадцати и более. В частности, в работах нашей группы [3, 4] было показано, что в рамках 6-мерной теории удастся объединить эйнштейновскую теорию гравитации с моделью электрослабых взаимодействий Вайнберга—Салама. В русле второго направления исследований — учета эффектов многомерного скаляризма — ранее были найдены точные 5-мерные сферически-симметричные решения 5-мерных уравнений Эйнштейна, а также 5-мерные однородные изотропные космологические модели [5, 6].

\* Стипендиат Национального Совета по науке и технологии Мексики (CONACYT).