

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

531.19

АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ В КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ*M.Ф. Сарры*(Всесоюзный научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
г. Арзамас-16, Нижегородская обл.)**СОДЕРЖАНИЕ**

Введение	47
1. Метод двухвременных температурных функций Грина (ФГ)	50
1.1. Аналитическая формулировка метода. 1.2. О корректном использовании "спектральной теоремы". 1.3. Аналитическое продолжение ФГ. 1.4. Метод половинных ФГ.	
1.5. О постулате затухания корреляций.	
2. Прямой алгебраический метод	56
2.1. K -матрица задачи. 2.2. Нелинейная "линеаризация". 2.3. Некоторые свойства K -матрицы. 2.4. F -матрица задачи. 2.5. Регулярность метода.	
3. Конкретные примеры	67
3.1. Модель Боголюбова. 3.2. Модель Изинга. 3.3. Модель Гейзенберга. 3.4. Модель Хаббарда. 3.5. Модель Бардина—Купера—Шриффера.	
Приложение	87
Примечание	91
Список литературы	91

Введение

Одной из главных целевых задач статистической физики является вычисление корреляционных функций (КФ) изучаемых систем, поскольку они содержат в себе всю фактически необходимую информацию о наблюдаемых их свойствах. Поэтому разработка аналитических методов вычисления КФ всегда представляла собой актуальную и весьма важную методическую задачу статистической физики.

Из более или менее простых аналитических методов, по-видимому, наиболее распространенным приемом вычисления КФ в квантовой статистической физике в настоящее время следует считать метод уравнений движения (УД) для двухвременных температурных функций Грина (ФГ), предложенный Боголюбовым и Тябликовым в 1959 г. [1]. Математическую основу этого метода составляют УД для фурье-образов ФГ по времени и так называемая "спектральная теорема", позволяющая выразить спектральную интенсивность (СИ) КФ, которая только и нужна для их полного вычисления, через граничные значения запаздывающей и опережающей ФГ при стремлении их аргумента, каковым служит комплексная энергия, к действительной оси соответственно сверху и снизу от нее. В этой теории СИ можно выразить только через граничное значение мнимой части запаздывающей либо только через

граничное значение мнимой части опережающей $\Phi\Gamma$, и поэтому в практических расчетах достаточно использовать, например, только запаздывающие двухтемпературные $\Phi\Gamma$. В техническом отношении метод Боголюбова—Тяблкова всегда оказывался намного проще всех других методов вычисления КФ в квантовой статистической физике. Однако он страдает принципиальным вычислительным недостатком — в его рамках нет систематического способа обрыва обычно бесконечной цепи УД для $\Phi\Gamma$ и, следовательно, нет внутреннего способа оценки точности выполняемого расцепления. Тем не менее этот метод получил широкое распространение как довольно простой в техническом отношении, особенно после появления обзорной статьи Зубарева [2] и стимулированных ею работ Хаббарда [3 — 5] по использованию его для количественного изучения предложенной им модели. Однако как раз широкое распространение метода двухвременных $\Phi\Gamma$ за рубежом и вскрыло (впервые) его трудности [6 — 9], которые были связаны с использованием "спектральной теоремы" этого метода в конкретных вычислениях. Истинная причина этих трудностей (они значительно позже и независимо были обнаружены и автором настоящей работы) установлена в работе автора [10] и состояла в некорректном использовании "спектральной теоремы" этого метода (кстати, такая некорректная ее трактовка, по-видимому, получила "путевку в жизнь" от той же широко цитируемой работы Зубарева [2], где приводится пример ее использования в безоговорочной (а по существу, и в некорректной) форме, см. в [2] формулу (3.28)). В той же авторской работе [10] критически рассмотрены и различные пути преодоления указанных выше трудностей в рамках метода $\Phi\Gamma$, которые были предложены различными зарубежными авторами.

Помимо отсутствия регулярности, метод $\Phi\Gamma$, при ближайшем его рассмотрении, оказывается еще и несимметричным относительно использования в нем коммутаторных (КФГ) или антисимметричных (АФГ) $\Phi\Gamma$: корректное вычисление СИ искомых КФ всегда требует вычисления АФГ [9, 10], хотя фактически имеются случаи, когда достаточно использовать лишь одни КГФ (эти случаи, однако, можно выяснить только после вычисления АФГ). Следовательно, до тех пор пока не найдено простое условие реализации таких случаев, корректное использование КФГ в этом методе для вычисления КФ всегда будет технически невыгодным, и, таким образом, выбор КФГ или АФГ для проведения практических расчетов фактически не является вопросом только удобства. В работе автора [10] найдено очень простое, но, к сожалению, только необходимое условие незамыкания метода $\Phi\Gamma$ одними лишь КФГ. При использовании АФГ метод $\Phi\Gamma$ всегда замкнут (т.е. достаточно одних лишь АФГ для вычисления СИ КФ), но вычисления оказываются громоздкими, если коммутаторы операторов задачи, с помощью которых строятся $\Phi\Gamma$, просты, и тогда их антисимметричные, следовательно, сложны.

С целью устранения этой несимметричности метода $\Phi\Gamma$ автор предложил заменить $\Phi\Gamma$ в методе УД для них на так называемые "половинные" $\Phi\Gamma$ (ПФГ) [10]: введение $\Phi\Gamma$ в метод УД для $\Phi\Gamma$ мотивировалось тем, что обеспечение правильных аналитических свойств для их фурье-образов по времени позволяет автоматически учесть и начальные условия к временному УД для $\Phi\Gamma$, чего, какказалось, трудно достичь в УД непосредственно для самих КФ. С этой точки зрения предложенная замена фактически представляет собой переход от рассмотрения УД для $\Phi\Gamma$ к рассмотрению УД непосредственно для самих КФ при сохранении всех преимуществ $\Phi\Gamma$, связанных с их аналитическими свойствами (кстати, еще и "спектральная теорема" в методе УД для ПФГ имеет предельно простой вид и поэтому просто не допускает никакой возможности некорректного ее использования).

Метод УД (для ФГ или ПФГ) работает по схеме:

- 1) с помощью не очень-то вразумительного обоснования, а то и простым волевым приемом как-то расцепляют зацепляющиеся УД для временных фурье-образов и решают получившуюся замкнутую алгебраическую систему уравнений для них;
- 2) вычисляют их скачки через действительную ось;
- 3) по этим скачкам с помощью "спектральной теоремы" вычисляют СИ искомых КФ;
- 4) совершают обратное преобразование Фурье для получения обычных КФ, используя при этом вычисленную СИ.

Для некоторых моделей (например, модель Изинга) система УД сама обрывается в силу внутренних свойств модели, но этот факт не обязательно ведет к достижению конечной цели метода УД: получаемая при этом система уравнений для искомых КФ может, тем не менее, оказаться и бесконечной. Обычно же метод УД приводит к бесконечной системе уже для самих УД, и поэтому ее приходится обрывать на первом шаге, что может приводить к разным внутренним непоследовательностям и противоречиям. Для обхода трудностей такого характера в рамках метода УД для ФГ Хьюсон и тер-Хаар [11] и независимо Дембинский [12, 13] предложили следующий окольный путь: вначале корректно проводится необходимая схема расцепления в самой КФ, соответствующей той ФГ в бесконечной цепи УД для них, где требуется разорвать звено, и потом уже с помощью "спектральной теоремы" преобразовывается эта схема расцепления КФ в корректную схему расцепления соответствующей ей ФГ. Имеются и другие причины, по которым расцепления в самих КФ вообще и всегда более приемлемы, чем расцепления в промежуточных функциях, используемых для вычисления КФ.

В 1968 г., т.е. почти десять лет спустя после появления работы Боголюбова и Тябликова [1], появилась очень важная работа Roth^(1*) [14], в которой предлагался универсальный самосогласованный метод расцепления бесконечной цепи УД для ФГ. Соображения вариационного характера в пользу этой схемы, кроме приведенных самой Roth, были высказаны еще Савадой [15] и Янгом [16]. Главный недостаток этой схемы — необходимость в дополнительных приближениях (т.е. выходящих за рамки приближений, составляющих суть схемы), которые к тому же не могут контролироваться самой схемой.

Примерно с 1980 г. автор настоящей работы начал развивать новый аналитический метод вычисления КФ в квантовой статистической физике, так же как и метод ФГ, исходящий из ее первых принципов, — так называемый "прямой алгебраический метод" (ПАМ) [17 — 22]. ПАМ, как и метод ФГ, не связан с теорией возмущений — математическую основу ПАМа составляют метод "одевания—раздевания" и прием точного самосогласования.

Метод "одевания—раздевания" (в простейшей форме этот метод использовался автором и гораздо раньше — уже в работе [23]) выполняет в ПАМе ту же роль, что и УД в методе ФГ, но дает он здесь алгебраические уравнения сразу (т.е. непосредственно) для искомых КФ (отсюда и его название — прямой алгебраический метод). Таким образом, уже метод "одевания—раздевания" полностью исчерпывает все вычислительные возможности метода УД для ФГ. Аналитическую основу метода "одевания—раздевания" составляет точная формула "раздевания", использующая F -матрицу задачи.

Аналитической основой второй части ПАМа — приема точного самосогласования — служит операторное тождество Якоби (ТЯ). Прием точно самосогласованного расцепления задачи является вполне независимым от первой

части ПАМа — метода "одевания—раздевания", и его, разумеется, можно использовать в любом другом методе вычисления КФ, в частности и в методе УД для ФГ при "линеаризации" их с помощью схемы Roth.

Главные технические и принципиальные отличия ПАМа от метода ФГ состоят в следующем:

1) ПАМ является прямым и чисто алгебраическим, т.е. в нем фигурируют только операторы, следы от их различных невременных или двухвременных произведений (т.е. обычные невременные или двухвременные КФ) и алгебраические уравнения именно для этих следов;

2) ПАМ в математическом и техническом отношении оказывается крайне простым, что придает ему исключительную ясность и большую практическую ценность;

3) ПАМ является точно самосогласованным в смысле требования точного выполнения операторного ТЯ, а поэтому и регулярным (т.е. допускающим, в принципе, возможность внутренней проверки).

ПАМ, как и метод ФГ, позволяет вычислять не только КФ, но и энергетические спектры возможных элементарных возбуждений, а следовательно, и соответствующие им плотности одночастичных энергетических состояний.

Основная цель настоящей работы — наглядно показать необычайную простоту, высокую техническую эффективность и внутренние возможности ПАМа при изучении самых разных задач статистической физики. Для пяти наиболее важных задач получены в замкнутой форме все их основные КФ. Дальнейшее использование этих выражений для КФ подчинялось требованию рассмотрения лишь частных случаев, которые допускали получение только простых аналитических решений в отношении физических свойств.

Настоящая статья основана главным образом на работах Боголюбова, Тяблникова, Зубарева, Roth и автора.

1. Метод двухвременных температурных функций Грина

1.1. Аналитическая формулировка метода. Для задания временной зависимости операторов системы в этом методе используется представление Гейзенберга

$$\hat{A}[t] \equiv \exp(iHt)\hat{A}\exp(-iHt), \quad (1.1.1)$$

и поэтому они удовлетворяют УД

$$\frac{id}{dt}\hat{A}[t] = [\hat{A}[t], H]_- = e^{iHt}[\hat{A}, H]_-e^{-iHt}, \quad (1.1.2)$$

и их средние значения

$$\langle \hat{A}[t] \rangle \equiv \text{Sp}(e^{-\beta H}\hat{A}[t])(\text{Sp}e^{-\beta H})^{-1} = \langle \hat{A} \rangle$$

от времени не зависят из-за циклической неизменности следа, а средние вида

$$\langle \hat{B}[t_2]\hat{A}[t_1] \rangle = \langle \hat{B}[t]\hat{A} \rangle, \quad t = t_2 - t_1, \quad (1.1.3)$$

представляют собой двухвременные КФ и по той же причине зависят только от разности временных моментов, в которые эти операторы взяты. Гамильтониан системы, который почти всегда удобно иметь в представлении чисел заполнения одночастичных состояний, может включать в себя химические потенциалы описываемых частиц.

Идея метода ФГ состоит в том, чтобы временной фурье-образ, или, что

то же самое, СИ,

$$\langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle_E \equiv J_{BA}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle e^{iEt} dt \quad (1.1.4)$$

обычной КФ (1.1.3) выразить через временные фурье-образы:

$$\langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_E^{\mp} \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(E') \frac{1 \mp \exp(-\beta E')}{E - E' - i\epsilon} dE' \quad (1.1.5)$$

двуухвременных температурных ФГ (КФГ или АФГ):

$$\langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle^{\mp} \equiv i\theta(-jt) \langle [\hat{B}[t], \hat{A}]_{\mp} \rangle, \quad (1.1.6)$$

практическое вычисление которых, т.е. самих (1.1.6) или их образов (1.1.5), предполагается более простым, чем прямое вычисление КФ (1.1.3) или их образов (1.1.4). Идея эта осуществляется с помощью "спектральной теоремы" метода ФГ

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} (\langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_{E+i\epsilon}^{\mp} - \langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_{E-i\epsilon}^{\mp}) &\equiv C_{\kappa} \langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_z^{\mp} = \\ &= -iJ_{BA}(E)[1 \mp \exp(-\beta E)] = \\ &= 2i \operatorname{Im} \langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_{\mp}^{\text{ret}} = -2i \operatorname{Im} \langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_{\mp}^{\text{adv}}. \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

Сами ФГ (1.1.6) или их образы (1.1.5) предполагается вычислять из УД для них. На практике обычно удобнее пользоваться УД для их образов (1.1.5):

$$E \langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_E^{\mp} = \langle [\hat{B}, \hat{A}]_{\mp} \rangle + \langle\langle [\hat{B}[t], H]_{-} | \hat{A} \rangle\rangle_E^{\mp}, \quad (1.1.8)$$

которое имеет *одинаковый* вид для запаздывающей ($j = -$) и опережающей ($j = +$) ФГ. Искомые КФ (1.1.3) вычисляются по формуле обратного преобразования Фурье

$$\langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(E) e^{-iEt} dE, \quad (1.1.9)$$

поскольку СИ теперь уже известна из "спектральной теоремы" (1.1.7). Для получения образов (1.1.5) ФГ нужна переставленная по сравнению с (1.1.9) КФ. Ее легко найти из (1.1.9), если использовать циклическую неизменность следа от произведения операторов. Это дает

$$\langle\langle \hat{A} \hat{B}[t] \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(E) e^{-i(t-i\beta)E} dE. \quad (1.1.10)$$

Формул (1.1.9) и (1.1.10) достаточно для получения (1.1.5) исходя из их определения

$$\langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle_E \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle\rangle e^{iEt} dt \quad (1.1.11)$$

как фурье-образов и определения (1.1.6) двухвременных ФГ. При этом, од-

нако, будут получаться интегралы, которые не существуют в собственном смысле. Их обычно вычисляют в обобщенном смысле Пуассона—Абеля [24]

$$\int_0^\infty f(x)dx \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^\infty f(x)e^{-\epsilon x}dx,$$

если последний предел существует. Из определений (1.1.3) и (1.1.6) видна существенная разница между КФ и ФГ — последние не определены для нулевого значения их временного аргумента, поскольку при этом значении не определена функция Хэвисайда. "Спектральную теорему" метода ФГ легко получить, используя выражение (1.1.5) и одно из частных представлений дельта-функции [25]

$$-2\pi i\delta(x) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left(\frac{1}{x + i\epsilon} - \frac{1}{x - i\epsilon} \right) \equiv C_k \left(\frac{1}{z} \right). \quad (1.1.12)$$

1.2. О корректном использовании "спектральной теоремы". Обычно формула (1.1.9) без каких-либо оговорок записывается с помощью "спектральной теоремы" (1.1.7) в форме

$$\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_k \langle \langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle \rangle_z^{\mp}}{t \mp \exp(-\beta E)} e^{-iEt} dE \quad (1.2.1)$$

(см., например, формулу (3.28) в работе [2]), которая, вообще говоря, неверна [10]. Действительно, пусть

$$H = \bar{B} \sum_f \hat{S}_f^z, \quad \bar{B} \equiv -\lambda B.$$

Тогда для КФГ из УД (1.1.8) немедленно следует

$$\langle \langle \hat{S}_f^z | \hat{S}_f^z \rangle \rangle_E^- = 0 \rightarrow C_k \langle \langle \dots \rangle \rangle_z^- = 0 \rightarrow \langle \hat{S}_f^z \hat{S}_f^z \rangle = 0,$$

хотя, например, в случае половинного спина продольная диагональная не-временная КФ равна одной четверти. Если, однако, интересоваться поперечной КФ, то формула (1.2.1) даже для случая КФГ дает точный результат

$$\langle \hat{S}_f^- \hat{S}_f^+ \rangle = [1 + \exp(-\beta \bar{B})]^{-1}.$$

Причина кроется в некорректном решении алгебраического уравнения (1.1.7) относительно СИ: формальное его решение для случая КФГ, вообще говоря, требует еще добавления слагаемого, пропорционального дельта-функции, поскольку выполняется тождество (подробнее см. п. 1 приложения)

$$[1 - \exp(\pm \beta E)]\delta(E) \equiv 0.$$

Таким образом, корректное использование "спектральной теоремы" метода ФГ для случая КФГ дает такую формулу для СИ

$$J_{BA}(E) = \text{V.p.} \frac{iC_k \langle \langle \dots \rangle \rangle_z^-}{1 - \exp(-\beta E)} + f_{BA}\delta(E),$$

которая, очевидно, тоже обращает "спектральную теорему" метода ФГ в верное тождество. Если это выражение подставить в (1.1.5), то можно получить пределы [9]

$$\lim_{E \rightarrow 0} E \langle \langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle \rangle_E^{\mp} = (1 \mp 1)f_{BA}, \quad (1.2.2)$$

т.е. точные КФГ и АФГ не допускают и допускают соответственно полюс $E = 0$, причем вычет точной АФГ в этой точке согласно (1.2.2) как раз и определяет неизвестную функцию f_{BA} при дельта-функции [9]. На практике это уточнение аналитических свойств точных ФГ оказывается очень важным еще и потому, что приближенно вычисленные ФГ, любые из них, могут допускать этот полюс. Тогда полюс у приближенно вычисленной КФГ нужно ликвидировать постановкой надлежащих для этого условий, а вычет в этом полюсе у АФГ дает коэффициент при дельта-функции в СИ. Именно предел (1.2.2) и делает несимметричным метод ФГ относительно использования АФГ или КФГ в конкретных расчетах, поскольку фактически всегда нужно точно знать значение предела (1.2.2) для АФГ, прежде чем вычислять какие-либо физические свойства изучаемой системы с помощью этих приближенно вычисленных ФГ — КФГ или АФГ. Итак, правильная форма (1.2.1) имеет вид

$$\langle \hat{B}[t] | \hat{A} \rangle = \frac{1}{2}(1 \mp 1)f_{BA} + \text{правая часть (1.2.1)}. \quad (1.2.3)$$

1.3. Аналитическое продолжение ФГ. Из выражений (1.1.5) и УД (1.1.8) видно, что запаздывающую и опережающую ФГ можно объединить в одну обобщенную ФГ от комплексного аргумента

$$y(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(E) \frac{1 \mp \exp(-\beta E)}{z - E} dE. \quad (1.3.1)$$

Эта ФГ, по ее определению, совпадает с аналитическим продолжением в верхнюю полуплоскость запаздывающей ФГ, если аргумент обобщенной ФГ принимает значения верхней полуплоскости, и опережающей, если пробегаются значения нижней полуплоскости. Так определенная ФГ (1.3.1) оказывается аналитической всюду, исключая действительную ось [1]. Эта ось не входит в область ее определения, и именно на ней как раз и располагаются ее особенности (если такие будут) полюсного и неполюсного характера. Запаздывающую и опережающую ФГ, вообще говоря, нельзя рассматривать как разные ветви этой обобщенной ФГ, поскольку они не являются аналитическими продолжениями друг друга, за исключением случаев, когда ее особенностями являются только полюсы. Если же у ФГ (1.3.1) имеются особенности неполюсного характера, то это означает, что запаздывающая и опережающая ФГ имеют по меньшей мере комплексные полюсы в "чужих" полуплоскостях. При конкретных расчетах УД (1.1.8) чаще всего пишут именно для обобщенной ФГ (1.3.1), хотя, как это видно из (1.1.7), можно ограничиться использованием либо только запаздывающей, либо только опережающей ФГ. Независимо от этого выбора, УД практически придется решать приближенно. Поэтому получаемые при этом ФГ могут иметь и неправильные аналитические свойства, и тогда эти свойства следует привести в соответствие с отмеченными выше свойствами точных ФГ постановкой надлежащих дополнительных условий на полученные приближенные выражения ФГ. В этом одна из главных причин введения спектральных представлений ФГ — выражений типа (1.1.5) и (1.3.1), играющих, таким образом, роль своеобразного "прокрустова ложа" для правки приближенно вычисленных (любым возможным способом!) ФГ (обобщенной, запаздывающей, опережающей). Например, в тривиальном слу-

чае, рассмотренном в разд. 1.2, речь идет о корректном решении УД (1.1.8), которое для $\Phi\Gamma \langle\langle \hat{S}_f^- [t] | \hat{S}_f^+ \rangle\rangle_z^\mp$ имеет вид

$$(z + \lambda B) \langle\langle \hat{S}_f^- [t] | \hat{S}_f^+ \rangle\rangle_z^\mp = 1$$

относительно фигурирующей здесь $\Phi\Gamma$. Формально это уравнение решается так:

$$\langle\langle \hat{S}_f^- [t] | \hat{S}_f^+ \rangle\rangle_z^\mp = (z + \lambda B)^{-1}. \quad (1.3.2)$$

Здесь, вообще говоря, к правой части (1.3.2) надо, как и в случае решения уравнения (1.1.7) относительно СИ, добавить член $f_{S^-S^+}\delta(z + \lambda B)$, поскольку

в такое выражение для (1.3.2) удовлетворяет предыдущему уравнению. Но дельта-функция $\delta(z)$ от комплексного аргумента имеет два полюса вне действительной оси (в точках $z = \pm i\epsilon$, см. выражение (1.1.12)), где надо сделать замену $\delta(x) \rightarrow \delta(z)$ и поэтому коэффициент $f_{S^-S^+}$ при ней надо положить равным нулю. В противном случае аналитические свойства так построенной обобщенной $\Phi\Gamma$ (1.3.2) не соответствовали бы свойствам точной $\Phi\Gamma$, которая вне действительной оси не имеет особенностей. Таким образом, выражение (1.3.2) для $\Phi\Gamma$ правильно. Предельные (к действительной оси $\epsilon \rightarrow +0$) значения этой $\Phi\Gamma$, т.е. функции $1/(E + \lambda B \pm i\epsilon)$, как раз и дают запаздывающую и опережающую $\Phi\Gamma$ от действительного аргумента. Если же в расчетах использовалась только запаздывающая (опережающая) $\Phi\Gamma$, аналитически продолженная в верхнюю (нижнюю) полуплоскость, то, очевидно, слагаемого с дельта-функцией опять не должно быть, так как первая не имеет особенностей в верхней полуплоскости, а вторая — в нижней. В случае же решения уравнения (1.1.7) для СИ вопрос о включении или нет члена с дельта-функцией каждый раз надо решать с помощью (1.2.2) или (1.4.7).

1.4. Метод половинных $\Phi\Gamma$. Взамен внутренне несимметричного относительно АФГ и КФГ метода двухвременных $\Phi\Gamma$ автором предложен метод половинных $\Phi\Gamma$ (ПФГ) [10]

$$\langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle^j \equiv i\partial(-it) \langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle. \quad (1.4.1)$$

Временной фурье-образ этих ПФГ совпадает с (1.1.5), если там выражение $[1 \mp \exp(-\beta E)]$ заменить единицей. УД для ПФГ имеют вид

$$z \langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle_z = \langle\langle \hat{B} \hat{A} \rangle\rangle + \langle\langle \hat{B}[t], H \rangle\langle \hat{A} \rangle_z. \quad (1.4.2)$$

"Спектральная теорема" здесь выглядит крайне просто:

$$C_k \langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle_z = -iJ_{BA}(E), \quad (1.4.3)$$

и не требует решения относительно СИ. Обычные временные КФ вычисляются по формулам

$$\langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt} C_k \langle\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle\rangle_z dE, \quad (1.4.4)$$

$$\langle \hat{A} \hat{B}[t] \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(t-i\beta)E} C_k \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle_z dE, \quad (1.4.5)$$

которые прямо следуют из "спектральной теоремы" (1.4.3) и формул (1.1.9) и (1.1.10) соответственно. Из тождества (2.1.1) также следует связь между АФГ, КФГ и ПФГ

$$\langle \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle \rangle_E^{j+} + \langle \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle \rangle_E^{j-} = 2 \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle_E^j, \quad (1.4.6)$$

которой и обязано само название "половинных" ФГ. Из (1.4.6) немедленно получается

$$f_{BA} = \lim_{E \rightarrow 0} (E \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle_E^j). \quad (1.4.7)$$

Если все же продолжать настаивать на использовании ФГ, а не ПФГ, то это правило вычисления функции f_{BA} на практике всегда оказывается значительно проще правила (1.2.2), поскольку уже в промежуточных вычислениях, как это видно из (1.4.6), отсутствуют члены, все равно выпадающие в пределе $E \rightarrow 0$.

1.5. О постулате затухания корреляций. Здесь речь пойдет о новом физическом постулате — постулате затухания корреляций во времени, выдвинутом авторами работы [8] для преодоления трудностей метода ФГ (эти трудности фактически возникли вследствие некорректного использования спектральной теоремы метода ФГ, см. формулу (3.28) работы Зубарева [2]). Аналитически этот постулат формулируется так [8]:

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle. \quad (1.5.1)$$

Он использовался авторами [8] для определения дополнительного слагаемого в их формуле

$$\langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-iEt) dE}{1 - \exp(-\beta E)} C_k \langle \langle \dots \rangle \rangle_z + f_{BA},$$

которую можно сравнить с формулой (1.2.3). В том, что этот постулат малоэффективен для этих целей, можно легко убедиться, если взять скачок хотя бы в виде [10]

$$C_k \langle \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle \rangle_z = a\delta(E) + \sum_j a_j \delta(E - E_j),$$

чаще всего встречающееся в конкретных расчетах.

Однако более важно и интересно то, что с этим постулатом, по-видимому, связан так называемый "лебовицкий нуль" [26 — 28]. Суть "лебовицского нуля" состоит в следующем. По теории Кубо кинетические коэффициенты имеют вид [29]

$$L_{ik} = \frac{\beta}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \dot{\alpha}_k(t) \dot{\alpha}_i \rangle dt. \quad (1.5.2)$$

Эти коэффициенты Лебовиц вычисляют аналитически:

$$L_{ik} = \frac{\beta}{2} \left\langle \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha_k \dot{\alpha}_i \right) \right\rangle = \frac{\beta}{2} \lim_{|T| \rightarrow \infty} \langle (\alpha_k(T) - \alpha_k(-T)) \dot{\alpha}_i \rangle = 0 \quad (1.5.3)$$

в силу постулата (1.5.1). Сам Лебовиц, по свидетельству авторов [27] (оригинальная работа [26] труднодоступна), полагал, что величины (1.5.2) будут отличны от нуля только в термодинамическом пределе. Но это предположение Лебовица противоречит результатам расчетов кинетических коэффициентов по тем же формулам Кубо методом молекулярной динамики (ММД), где, разумеется, рассматриваются только конечные системы. Качественно различные результаты Лебовица и ММД авторы [27] объясняют тем, что Лебовиц проводит вычисления для обратимых траекторий, тогда как в ММД, где расчеты ведутся на ЭВМ, по необходимости используются траектории, лишь приближенно удовлетворяющие УД Ньютона. При этом, однако, авторы [27] не приводят ни указаний Лебовица о том, в каком именно месте цепочки (1.5.3), по его мнению, используется конечность системы (сами они тоже не высказываются по этому вопросу), ни своих указаний о том, где, по их мнению, использована Лебовицем в цепочке (1.5.3) обратимость УД. Не вдаваясь в подробное обсуждение работы [27], которая к тому же не имеет прямого отношения к методу ФГ, здесь стоит лишь обратить внимание на какую-то общую противоречивость постулата (1.5.1), который имеет более прямое отношение к методу ФГ. Действительно, точное выражение (1.1.9) вначале дифференцируется по времени, а потом интегрируется по времени от нуля до бесконечности, причем левая часть (1.1.9) при интегрировании преобразовывается с помощью (1.5.1):

$$\int_0^{\infty} \langle \hat{B}[t] \hat{A} \rangle dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \left\langle \int_0^T d\hat{B}[t] \hat{A} \right\rangle = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle.$$

Правая же часть (1.1.9) при этом вычисляется точно

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} E J_{BA}(E) dE \int_0^{\infty} \exp(-iEt) dt = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(E) dE = -\langle \hat{B} \hat{A} \rangle.$$

Итак, получается результат

$$\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle = -\langle \hat{B} \hat{A} \rangle,$$

верный лишь в частном случае $\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle = 0$. Поэтому не исключено, что истинной причиной "лебовицкого нуля" служит постулат (1.5.1). Кстати, если рассматриваемая система такова, что для нее все же выполняется постулат (1.5.1), то из последнего соотношения следует, что в такой системе не возможны не только кинетические процессы, но даже и такие равновесные свойства, как магнитный порядок (если взять $\langle \hat{S}_f^z \rangle = 0$ в модели Гейзенберга), сверхпроводимость (если взять $\langle \hat{b}_k \rangle = 0$ в модели БКШ) и т.д.

2. Прямой алгебраический метод

2.1. К-матрица задачи. Исходными объектами ПАМа являются операторы изучаемой системы и ее гамильтониан, который может включать в себя и химический потенциал, и всегда более удобно для практических рас-

чехов иметь его в представлении чисел заполнения одночастичных состояний. Предполагается, что перестановочные соотношения между операторами, т.е. либо их взаимные коммутаторы, либо их взаимные антисимметричные, заданы. Связь между коммутаторами и антисимметричными операторами дается тождеством

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = 2\hat{A}\hat{B} - [\hat{A}, \hat{B}]_\pm, \quad (2.1.1)$$

справедливым для любых линейных операторов (которые только и используются в квантовой механике).

Попарные коммутаторы любых трех линейных операторов связаны между собой одной связью — тождеством Якоби (ТЯ)

$$[1, [2, 3]_-]_- + [2, [3, 1]_-]_- + [3, [1, 2]_-]_- = 0. \quad (2.1.2)$$

Иногда более удобной может оказаться одна из смешанных, коммутаторно-антисимметричных, форм ТЯ

$$-[1, [2, 3]_-]_+ + [2, [3, 1]_+]_- + [3, [1, 2]_-]_+ = 0,$$

$$[1, [2, 3]_-]_+ - [2, [3, 1]_-]_+ + [3, [1, 2]_+]_- = 0,$$

$$[1, [2, 3]_+]_- + [2, [3, 1]_-]_+ - [3, [1, 2]_-]_+ = 0,$$

которые получаются из основного тождества (2.1.2) с помощью (2.1.1) путем последовательной замены коммутатора, не содержащего в чистом виде 1-й, 2-й и 3-й операторы, на соответствующий антисимметричный оператор.

Очень полезны на практике еще два тождества:

$$[1, 23]_\mp \equiv 2 \cdot [1, 3]_\mp + [1, 2]_- \cdot 3,$$

$$[12, 3]_\mp \equiv 1 \cdot [2, 3]_\mp \pm [1, 3]_- \cdot 2.$$

Бозовские и фермиевские операторы рождения (уничтожения) частиц в одночастичных состояниях удовлетворяют одному и тому же перестановочному соотношению

$$[\hat{A}_f^\pm, \hat{n}_f]_- = \mp \hat{A}_f^\pm \delta_{ff}, \quad \hat{n}_f \equiv \hat{A}_f^\dagger \hat{A}_f$$

с оператором чисел заполнения этих состояний.

Основным следствием циклической неизменности следа от произведения операторов является тождество

$$\langle \hat{A}_2[t] \hat{A}_1 \rangle = \begin{cases} \langle \hat{A}_1[\beta] \hat{A}_2[t] \rangle, \\ \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2[t + i\beta] \rangle, \end{cases} \quad (2.1.3)$$

которое несет главную нагрузку в методе "одевания—раздевания". Сам процесс "одевания" оператора \hat{A} представляет собой его неунитарное преобразование вида

$$\begin{aligned} \exp(\beta H) \hat{A} \exp(-\beta H) &\equiv \hat{A}[\beta] = \\ &= \hat{A} - \beta [\hat{A}, H]_- + \frac{\beta^2}{2!} [[\hat{A}, H]_-, H]_- - \dots \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

и осуществляется, например, так:

$$\langle \hat{B} \hat{A}_j \rangle = \begin{cases} \langle \hat{A} \hat{B} [-\beta] \rangle, \\ \langle \hat{A}_j [\beta] \hat{B} \rangle; \end{cases} \quad (2.1.5)$$

здесь и далее, для кратности, вместо $\hat{A} [\mp i\beta]$ пишется $\hat{A} [\pm \beta]$.

Согласно УД (1.1.2) эволюция оператора во времени фактически определяется его коммутатором с гамильтонианом системы. Поэтому даже соотношения между самим коммутатором и его явным значением обычно называют УД.

Если в изучаемой системе найдется оператор \hat{A} такой, что для него выполняются два условия

$$[\hat{A}, H]_- = \hat{B} \hat{A}, [\hat{B}, H]_- = 0, \quad (2.1.6)$$

то по отношению к нему система является операторно-колебательной. Очень важен случай, когда \hat{B} в (2.1.6) является неоператорной величиной, т.е. $\hat{B} = B$. Тогда \hat{A} называется "собственным" оператором системы. В частности, все операторы, коммутирующие с гамильтонианом системы, являются "собственными" для нее. Но особенно важны "собственные" операторы с ненулевыми "собственными" значениями, поскольку именно они рождают и уничтожают элементарные возбуждения системы [30, 31]. Средние значения таких "собственных" операторов с необходимостью обращаться в нуль:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} [\beta] \rangle = \exp(-\beta B) \langle \hat{A} \rangle = 0.$$

Практически важных неоперативно-колебательных систем нет, и фактически приходится иметь дело с неоператорно-колебательными системами более общего вида

$$[\hat{A}_j, H]_- = \sum_{j'=1}^n K_{jj'} \hat{A}_{j'}. \quad (2.1.7)$$

Приемлемый выход из (2.1.7), по крайней мере в нулевом приближении, мог бы состоять в том, чтобы найти способ построения максимально укороченного разложения — двучленного, т.е. нужно было бы найти двумерный операторный базис, замкнутый относительно операции коммутирования с гамильтонианом системы.

Как известно [32], такое разложение будет единственным, если совокупность операторов, по которой идет разложение, является линейно-независимой системой. Линейные операторы в конкретном базисе представляются в виде матриц. Множество же матриц образует линейное пространство [33]. Поэтому определения понятий линейной зависимости (независимости) матриц, а следовательно, и линейных операторов совпадает с определением соответствующих понятий для векторов линейного пространства.

Если K -матрицу удалось каким-либо способом найти, то это позволит "линеаризовать" любую задачу квантовой статистической физики:

1) диагонализируя ее, можно получить "собственные" операторы изучаемой системы и их собственные значения, дающие спектры возможных элементарных ее возбуждений;

2) в методе УД для двухвременных температурных ФГ точное УД (1.1.8) можно будет "линеаризовать" заменой коммутатора второй ФГ на разложение (2.1.7);

3) то же можно сделать и в точном УД для (1.4.2);

4) наконец, в методе "одевания—раздевания" можно будет "одетый" опе-

ратор (2.1.5) "раздеть", т.е. получить точную сумму ряда (2.1.4) в замкнутой форме в виде линейной комбинации "голых" операторов базиса разложения с помощью F -матрицы задачи

$$\hat{A}_j[\beta] = \sum_{j'=1}^n F_{jj'}(\beta; K) \hat{A}_{j'}. \quad (2.1.8)$$

При этом наиболее просто "раздеваются" операторы, удовлетворяющие соотношению (2.1.6):

$$\hat{A}[\beta] = \exp(-\beta \hat{B}) \hat{A}. \quad (2.1.8')$$

В настоящее время для вычисления K -матрицы наиболее известна самосогласованная схема Roth, которая задалась целью унифицировать расцепление УД в методе ФГ путем подходящей "линеаризации" самих УД. Она предложила вычислять K -матрицу через две промежуточные матрицы E и N по схеме

$$\langle [\hat{A}_j, H]_-, \hat{A}_{j'}^+ \rangle_{\mp} \equiv E_{jj'} = \sum_{j''} K_{jj''} \cdot \langle [\hat{A}_{j''}, A_{j'}^+] \rangle_{\mp} \equiv \sum_{j''} K_{jj''} N_{j''j'}, \quad (2.1.9)$$

здесь $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение статистическое или квантовомеханическое по основному состоянию изучаемой системы. В этой схеме матрицы E и N оказываются самосопряженными, а K -матрица может и не быть таковой, но предполагается (явно или неявно), что ее всегда можно в рамках схемы (2.1.9) вычислить точно (если, разумеется, матрица N невырожденная). На практике, однако, схема (2.1.9), как правило, не позволяет получать "считабельные" величины для всех $E_{jj'}$ без дополнительных приближений в них самих, т.е. без внесения дополнительной и почти неконтролируемой ошибки в искомую K -матрицу, что сразу же лишает схему не только внутренне присущей ей регулярности, но даже и ее самосогласованности. Фактически самым важным положительным моментом схемы Roth оказывается матричное равенство

$$NK^+ = KN, \quad (2.1.10)$$

следующее из (2.1.9), но оно, по-видимому, не было замечено ею. Кстати, из соотношения (2.1.10) прямо следует любопытное преобразование подобия

$$K^+ = N^{-1}KN, \quad (2.1.11)$$

которое полезно для дальнейшего иметь в виду.

Представляется уместным здесь отметить, что вместо "полной" схемы Roth (2.1.9) можно, и с тем же успехом, ввести "половинную" схему (что находится в полной аналогии с уже отмеченной выше возможностью введения "половинных" ФГ)

$$\langle [\hat{A}_j, H]_-, \hat{A}_{j'}^+ \rangle \equiv \bar{E}_{jj'} = \sum_{j''} K_{jj''} \langle \hat{A}_{j''}, \hat{A}_{j'}^+ \rangle \equiv \sum_{j''} K_{jj''} \bar{N}_{j''j'}, \quad (2.1.12)$$

где матрицы \bar{E} и \bar{N} также являются самосопряженными. Поэтому при положительной определенности матрицы N таковой будет и матрица \bar{N} системы. Из определения (2.1.12) прямо следует матричное равенство

$$\bar{N}K^+ = KN, \quad (2.1.13)$$

вполне аналогичное равенство (2.1.10).

Точно самосогласованную схему вычисления K -матрицы можно получить следующим образом. Пусть для простоты и ясности изложения рассматривается двухоператорный случай разложения (2.1.7) — наиболее важное и особенно часто реализуемое на практике *расчетное* приближение. Коммутатор какого-либо одночастичного оператора \hat{A} рассматриваемой системы с ее гамильтонианом можно, как правило, намеренно представить в виде *точного* разложения

$$[\hat{A}_1, H]_- = K_{11} \hat{A}_1 + K_{12} \hat{A}_2, \quad (2.1.14)$$

где коэффициенты K_{11} и K_{12} известны по его построению. Разложение это, исключая лишь некоторые редкие специальные случаи, будет нелинейным (смысл понятия "нелинейное УД" поясняется ниже). Коммутатор второго оператора этого разложения предлагается уже "насилино" уложить в точный операторный базис первого коммутатора

$$[\hat{A}_2, H]_- = K_{21} \hat{A}_1 + K_{22} \hat{A}_2, \quad (2.1.15)$$

а неизвестные теперь коэффициенты K_{21} и K_{22} вычислять из условия *точного* выполнения операторного ТЯ. Оно, как известно, накладывает одну, вообще говоря, операторную же связь на попарные коммутаторы любых трех линейных операторов, и поэтому его использование в разложении (2.1.15) представляется не только естественным и наиболее подходящим приемом, но, по-видимому, даже и просто незаменимым. На практике это осуществляется подстановкой разложений типа (2.1.14), (2.1.15) в тождество (2.1.2) для устранения или, по крайней мере, некоторого сужения произвола, допускаемого при требовании выполнения "насильтвенного" разложения (2.1.15).

Если двухоператорный базис задан в общем виде \hat{A}_1 и \hat{A}_2 , то возможны только две тройки операторов для использования ТЯ. Это суть тройки \hat{A}_1, \hat{A}_2, H и $\hat{A}_1, \hat{A}_2^+, H$. Прямым следствием использования первой тройки является результат

$$[[\hat{A}_1, \hat{A}_2]_-, H]_- = (\text{Sp } K)[\hat{A}_1, \hat{A}_2]_-,$$

т.е. коммутатор базисных операторов оказывается "собственным" оператором с "собственным" значением в виде следа K -матрицы. Использование же второй тройки приводит к матричным условиям (2.1.10) и (2.1.13) [19]. В особо важном на практике двухоператорном случае, когда обе матрицы N и \bar{N} оказываются вещественными, таковой будет и K -матрица. Тогда матричные условия (2.1.10) и (2.1.13) приводят к двум простым формулам для неизвестных элементов K -матрицы [19]

$$K_{21} = K_{12} \frac{N_{12} \bar{N}_{22} - \bar{N}_{12} N_{22}}{\bar{N}_{11} N_{12} - N_{11} \bar{N}_{12}}, \quad (2.1.16)$$

$$K_{22} = K_{11} + K_{12} \frac{\bar{N}_{11} N_{22} - N_{11} \bar{N}_{22}}{\bar{N}_{11} N_{12} - N_{11} \bar{N}_{12}}. \quad (2.1.17)$$

Здесь тривиальный случай, когда обе матрицы N и \bar{N} оказываются диагональными, исключен.

При рассмотрении конкретных задач (см., например, ниже рассмотрение задачи БКШ) существенно разных троек даже в случае двухоператорного ба-

зиса может оказаться гораздо больше: фактически на практике ТЯ оказывается поистине незаменимым инструментом для извлечения большого числа точных аналитических соотношений, внутренне присущих задаче, но далеко не очевидных с первого (и даже не первого) взгляда, а потому и остающихся в "тени" при других подходах.

2.2. Нелинейная "линеаризация". Процедуру получения явных разложений типа (2.1.14), (2.1.15) обычно называют линеаризацией исходной задачи. Тогда данную процедуру следовало бы назвать точной линеаризацией. Однако настоящую схему правильнее назвать схемой точного самосогласования, поскольку истинная линеаризация предполагает сохранение в правых частях лишь линейных по какому-либо признаку их членов. Таким признаком, по-видимому, наиболее разумно считать частичный порядок оператора, фигурирующего слева, в коммутаторе. Но тогда такие представления в предлагаемом методе в общем случае нельзя будет назвать линеаризованными, поскольку на практике операторный базис, вообще говоря, состоит из операторов разного порядка; в противном случае разложение первого коммутатора не может, вообще говоря, быть точным. Поэтому разложения типа (2.1.14), (2.1.15) фактически содержат в себе нечто большее, чем истинно линеаризованные УД.

Близость решений таких нелинейных УД к точному решению исходной задачи зависит от способа, используемого при фактическом вычислении K_{21} и K_{22} , но сам способ всегда должен допускать практическую возможность проведения *точного* самосогласования до конца. В противном случае сразу теряется его регулярность, если она, разумеется, была присуща ему хотя бы принципиально. Именно это и происходит со схемой Roth на практике: здесь невозможно провести все вычисления точно до конца ("точно", разумеется, в рамках этой схемы), хотя эта схема в принципиальном плане и является регулярной (последняя связана с возможностью постепенного расширения операторного базиса) и в вариационном смысле дает наилучшее решение для УД на собственные значения

$$[\hat{A}, H]_- = \omega \hat{A},$$

если собственный оператор \hat{A} искать в виде разложения

$$\hat{A} = \sum_j a_j \hat{A}_j$$

по операторному базису, фигурирующему в разложении (2.1.7) [14 — 16]. В то же время добиться обеспечения точного выполнения ТЯ, по-видимому, всегда можно, и поскольку основное матричное условие (2.1.10) схемы Roth является и одним из следствий ТЯ [19], то решение, полученное с помощью ТЯ, не может уступать решению, которое в принципе можно было бы получить из схемы Roth.

Здесь представляется не лишенной смысла постановка вопроса о принципиальной возможности получения *точного* решения исходной задачи в рамках *конечного* операторного базиса, например двухоператорного, хотя прямые и формально точные вычисления приводят, как и всегда в задаче многих тел, к базису бесконечной мерности. Правомерность постановки такого вопроса связана с двумя фактами:

1) Энергию взаимодействующих частиц можно выразить в виде точной формулы, используя лишь одночастичную ФГ (см., например, [34] для случая

основного состояния и [35] для случая конечной температуры); правда, до сих пор нет аналогичной формулы для энергии через одночастичную матрицу плотности;

2) Можно ввести модельную систему невзаимодействующих электронов, находящуюся во внешнем локальном поле, для которой ее энергия и электронная плотность совпадают с таковыми для той же системы, но с включенным взаимодействием. Это утверждение составляет суть так называемой "теории функционала электронной плотности", которая основана на теореме Хохенберга и Кона [36] для основного состояния. В случае конечных температур аналогичная теорема для термодинамического потенциала доказана Мерманным [37].

В первом случае, разумеется, остается неизвестная точная одночастичная $\Phi\Gamma$, во втором — точный вид функционала электронной плотности, но в случае с операторным разложением коммутаторов неясна даже принципиальная возможность конечности таких разложений, не говоря уже о способе вычисления коэффициентов таких конечных разложений (если, разумеется, они возможны в принципе), который бы обеспечил получение *точного* решения.

Выбор первого коммутатора (2.1.14) изучаемой системы невозможно сделать однозначным, но это не есть специфический недостаток именно этой схемы — эта неоднозначность присутствует в той или иной форме всегда в теории многих взаимодействующих тел. Действительно, при попытке использовать математически корректно "работающие" методы решения классических (т.е. простейших, изначальных) задач в задачах, относящихся к системам многих взаимодействующих тел, от этих методов фактически остаются лишь одни их прежние (классические) названия. Так обстоит дело, например, с методом $\Phi\Gamma$ в теории многих тел, который проник сюда из теории линейных дифференциальных уравнений, где классическая $\Phi\Gamma$ удовлетворяет именно линейному УД, тогда как в теории многих тел УД для "здесьних" $\Phi\Gamma$ существенно нелинейны (если, разумеется, явно учитывается взаимодействие тел системы). Так обстоит дело и с теорией возмущений (кстати, по-видимому, наиболее удовлетворительном с математической точки зрения методе приближенного решения задач систем многих взаимодействующих тел): в классической теории решения уравнений этим методом нулевое приближение всегда однозначно определено, поскольку способ выбора его содержится в самом методе, тогда как в теории многих тел разбиение гамильтониана изучаемой задачи на невозмущенную (нулевое приближение) и возмущающую части далеко не однозначная операция (а различные возможные варианты такого разбиения далеко не равнозначны с точки зрения эффективности и корректности вычисления конкретных физических свойств изучаемой системы), и название "нулевого" приближения здесь оправдывается лишь тем, что оно допускает (по самому смыслу разбиения), как и в случае классической теории, точное решение "нулевой" задачи. В этом плане все выдержано и в приеме точной "линеаризации" — в качестве операторного базиса здесь всегда выбирается точный базис первого коммутатора, т.е. нулевое приближение является точным.

2.3. Некоторые свойства K -матрицы. Действительные части полюсов $\Phi\Gamma$ в методе УД для $\Phi\Gamma$ дают, как известно [2, 35], энергию возможных элементарных возбуждений изучаемой системы. Затухание возбуждений, связанное с наличием взаимодействия в системе, дается при этом мнимой частью соответствующего комплексного полюса. Эту микроскопическую

информацию можно получить и непосредственно из K -матрицы — она содержится в ее собственных значениях. Действительно, если K -матрица допускает диагонализацию с помощью преобразования подобия

$$(S^{-1}KS)_{jj'} = (K')_{j'} \delta_{jj'},$$

что, как известно из теории матриц [38 — 40], возможно лишь в случаях, когда исходная матрица обладает особыми свойствами — является либо самосопряженной, либо унитарной, либо симметричной, либо, наконец, у нее все собственные значения различны, то, переходя к новым операторам

$$\hat{A}_j \rightarrow \hat{A}'_j \equiv \sum_{j'} [S^{-1}]_{jj'} \hat{A}_{j'},$$

можно видеть, что эти новые операторы окажутся "собственными":

$$[\hat{A}'_j, H]_- = K' \hat{A}'_j,$$

и, следовательно, величины K'_j как раз и дадут спектры возможных элементарных возбуждений системы [30, 31].

Собственные значения K -матрицы n -го порядка вычисляются из векового уравнения

$$\det(\lambda - K) \equiv D(\lambda) = \lambda^n - E_1 \lambda^{n-1} + E_2 \lambda^{n-2} - \dots + (-1)^n E_n = 0; \quad (2.3.1)$$

здесь E_p — сумма главных миноров p -го порядка K -матрицы. Число таких миноров равно C_n^p . Стоит помнить, что $E_1 = \text{Sp } K$, $E_n = \det K$, а характеристические многочлены $\det(\lambda - K)$ и $\det(K - \lambda)$ связаны соотношением

$$\det(K - \lambda) = (-1)^n \det(\lambda - K).$$

В случае K -матрицы второго порядка уравнение (2.3.1) имеет вид

$$\lambda^2 - T\lambda + D = 0,$$

и тогда собственные значения равны:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} (T \pm R) \equiv E_k^{I,II}. \quad (2.3.2)$$

Имея спектры возможных элементарных возбуждений, в принципе, можно вычислить и соответствующие им плотности энергетических одночастичных состояний, если исходить из их определения

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \int_{\omega_k} \frac{d\mathbf{k}}{|\omega_k|} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt - e^{iEt} \int_{\omega_k} \frac{d\mathbf{k}}{|\omega_k|} e^{-itE_{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

где ω_k — собственно ячейка (т.е. первая зона Бриллюэна), $|\omega_k|$ — ее объем.

В случае матрицы третьего порядка вековое уравнение (2.3.1) примет такой вид:

$$\lambda^3 - T\lambda^2 + E_2 \lambda - D = 0. \quad (2.3.4)$$

Выписывать формулы для собственных значений (а следовательно, и для спектров возможных элементарных возбуждений) в общем виде в этом случае нецелесообразно из-за их громоздкости. При необходимости их проще получить из (2.3.4) для каждого конкретного случая.

При не очень сильном предположении об "известной" матрице N — ее положительной определенности, можно получить важный результат — в таком случае все собственные значения K -матрицы должны быть действительными величинами [41], т.е. в такой системе затухание полностью отсутствует. Действительно, вполне очевидны следующие элементарные преобразования

$$K - \lambda = N^{1/2}(N^{1/2}EN^{-1/2} - \lambda)N^{-1/2}$$

уравнения (2.1.12), записанного в матричной форме

$$E = KN \rightarrow K = NEN^{-1},$$

которые показывают, что вековое уравнение для K -матрицы совпадает с таким уравнением для самосопряженной матрицы $N^{-1/2}EN^{-1/2}$, поскольку E — самосопряженная матрица.

Из матричных соотношений (2.1.10) и (2.1.13), путем поочередного взятия определителя и следа, прямо следует вполне общий результат — определитель и след K -матрицы всегда должны быть действительными величинами, если только определитель матрицы N (тогда обязательно и $\det N$) отличен от нуля.

2.4. F -матрица задачи. Принципиальное значение имеет тот факт, что для разложения (2.1.7) при любом конечном числе его членов легко найти точный вид F -матрицы "раздевания", которая фигурирует в разложении (2.1.8). Поэтому сам метод "одевания—раздевания" является точным аналитическим методом вычисления КФ, и все приближения, если таковые были сделаны при решении задачи, "сидят" только в ее K -матрице. Аналитически метод "одевания—раздевания" формулируется предельно просто. Действительно, пусть "одетый" оператор (2.1.5) "раздет" по формуле (2.1.8), причем K -матрица известна из разложения (2.1.7). Тогда метод "одевания—раздевания" позволяет немедленно получить точную и замкнутую алгебраическую систему уравнений непосредственно для искомых КФ по следующей схеме:

1) вначале "голый" оператор "одевают" по схеме (2.1.5), используя циклическую неизменность следа от произведения операторов, которая выражается соотношениями (2.1.3);

2) затем "одетый" оператор немедленно "раздевают", используя формулу "раздевания" (2.1.8), что дает

$$\langle \hat{B}\hat{A}_j \rangle = \langle \hat{A}_j | \beta | \hat{B} \rangle = \sum_{j'} F_{jj'}(\beta; K) \langle \hat{A}_{j'} | \hat{B} \rangle. \quad (2.4.1)$$

Это соотношение и представляет собой систему алгебраических уравнений относительно искомых КФ, поскольку матричные элементы $F_{jj'}$ будут известны, если известны матричные элементы $K_{jj'}$, фигурирующие в разложении (2.1.7). Система уравнений (2.4.1), разумеется, всегда будет конечной и замкнутой, если конечно разложение (2.1.7).

Случай наличия временной зависимости у искомых КФ, очевидно, не требует внесения каких-либо дополнительных изменений в этот метод их вычисления, за исключением преобразования β в β' .

Для случая двухоператорного разложения (2.1.14) — (2.1.15), т.е. для случая K -матрицы второго порядка, F -матрица имеет вид [18, 19]

$$F = \exp(-\beta K) = \exp\left(-\frac{1}{2}\beta T\right) \left[\frac{T - 2K}{R} \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}\beta R\right) + \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}\beta R\right) \right], \quad (2.4.2)$$

и поэтому ее матричные элементы суть

$$\exp\left(\frac{1}{2}\beta T\right) F_{11} = \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}\beta R\right) + Q \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}\beta R\right),$$

$$\exp\left(\frac{1}{2}\beta T\right) F_{12} = -2R^{-1}K_{12} \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}\beta R\right),$$

$$\exp\left(\frac{1}{2}\beta T\right) F_{21} = -2R^{-1}K_{21} \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}\beta R\right),$$

$$\exp\left(\frac{1}{2}\beta T\right) F_{22} = \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}\beta R\right) - Q \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}\beta R\right).$$

Для этой матрицы легко непосредственно найти и ее след

$$\operatorname{Sp} F = 2 \exp\left(-\frac{1}{2}\beta T\right) \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}\beta R\right). \quad (2.4.3)$$

В этих формулах приняты обозначения

$$T \equiv \operatorname{Sp} K, Q \equiv (K_{22} - K_{11})R^{-1}, R \equiv ((K_{11} - K_{22})^2 + 4K_{12}K_{21})^{1/2}.$$

Чтобы читателю уже на этом этапе составить четкое представление о технико-вычислительной эффективности метода "одевания—раздевания", вполне достаточно вычислить какую-либо КФ неоператорно-колебательной системы (таковыми являются все системы, которые не учитывают взаимодействие в явном виде) любым из уже известных ему способов и настоящим методом. Еще можно посмотреть в [18] очень подробное сравнительное вычисление всех КФ модели Изинга методом УД для ФГ (ПФГ) и методом "одевания—раздевания".

Сама F -матрица очень просто выражается через K -матрицу (см. приложения 1 и 2 в работе автора [20]):

$$F(\beta; K) = \exp(-\beta K). \quad (2.4.4)$$

Отсюда следует важная на практике формула [42]

$$\det F = \exp(-\beta \operatorname{sp} K). \quad (2.4.5)$$

В общем случае для следа F -матрицы нет столь простой формулы, как для ее определителя (2.4.5), но интегральное представление через след вспомогательной матрицы $(z - K)^{-1}$ можно написать так:

$$\operatorname{Sp} F = \operatorname{Sp} e^{-\beta K} = \frac{1}{2\pi i} \oint dz e^{-\beta z} \operatorname{Sp}\left(\frac{1}{z - K}\right); \quad (2.4.6)$$

здесь контур интегрирования окружает все собственные значения K -матрицы, которые должны оставаться слева при его обходе. Это интегральное представление, которое, кстати, может оказаться полезным и при непосредственном вычислении статистической суммы, т.е. следа оператора $\exp(-\beta H)$, следует из общей формулы [43]

$$F = e^{-\beta K} = \frac{1}{2\pi i} \oint dz e^{-\beta z} \frac{1}{z - K}, \quad (2.4.7)$$

полученной с помощью теории вычетов для случая экспоненциальной функции от матричного аргумента (см. приложение). Как показывает опыт фактических вычислений, эта формула дает наиболее простой путь получения матричных элементов F -матрицы:

$$F_{jj'} = (e^{-\beta K})_{jj'} = \frac{1}{2\pi i} \oint dz e^{-\beta z} \left(\frac{1}{z - K} \right)_{jj'}, \quad (2.4.8)$$

и особенно ценна в случае операторного базиса третьего и более высокого порядка. В двухоператорном приближении вспомогательная матрица есть

$$(z - K)^{-1} \equiv K^{-1}(z) = D(z) \begin{pmatrix} z - K_{22} & K_{12} \\ K_{21} & z - K_{11} \end{pmatrix},$$

$$D(z) = z^2 - Tz + D \equiv \det(z - K) \equiv \det K(z) = \det(K - z).$$

В трехоператорном приближении она такова:

$$D(z)K^{-1}(z) =$$

$$= \begin{pmatrix} \left| \begin{array}{c} z - K_{22} - K_{32} \\ -K_{23}z - K_{33} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{c} K_{12}K_{32} \\ K_{13}K_{33} - z \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{c} -K_{12}z - K_{22} \\ -K_{13} - K_{23} \end{array} \right| \\ \left| \begin{array}{c} K_{21}K_{31} \\ K_{23}K_{33} - z \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{c} z - K_{11} - K_{31} \\ -K_{13}z - K_{33} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{c} K_{11} - zK_{21} \\ K_{13}K_{23} \end{array} \right| \\ \left| \begin{array}{c} -K_{21} - K_{31} \\ z - K_{22} - K_{32} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{c} K_{11} - zK_{31} \\ K_{12}K_{32} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{c} z - K_{11} - K_{21} \\ -K_{12}z - K_{22} \end{array} \right| \end{pmatrix};$$

здесь

$$D(z) = z^3 - z^2 T + z E_2 - D \equiv \det(z - K) \equiv \det K(z) = -\det(K - z),$$

$$E_2 = K_{11}K_{22} - K_{12}K_{21} + K_{11}K_{33} - K_{13}K_{31} + K_{22}K_{33} - K_{23}K_{32}.$$

На практике обращение заданной матрицы выполняется в три приема:

1) выписывается матрица $K(z)$, транспонированная к $K(z)$;

2) каждый элемент $K_{jj'}(z)$ заменяется его алгебраическим дополнением;

3) полученной таким действием матрице приписывается множитель $1/D(z)$, где $D(z)$ — определитель матрицы $K(z)$.

Из (2.4.5) немедленно следует, что определитель F -матрицы будет вещественным. Наконец, легко показать, что в этом случае вещественным будет и след F -матрицы, поскольку из (2.4.4) и (2.1.11) вытекает, что преобразование подобия (2.1.11) справедливо и для нее, а следовательно, ее след действительно будет вещественным.

2.5. Регулярность метода. Формально регулярность (т.е. возможность проведения внутренней проверки) ПАМа следует из его точной самосогласованности. Действительно, если метод точно самосогласован с помощью какого-либо универсального аналитического условия (именно таковым и является ТЯ), например, в двухоператорном базисе, то, в принципе, можно

исходный базис расширить до трехоператорного и снова обеспечить точное самосогласование с помощью того же условия, поскольку оно универсально. При этом первое УД остается без изменений, второе УД намеренно представляется в виде точного разложения уже по трем операторам, первые два из которых составляли базис для двухоператорного разложения, третье УД укладывается в этот трехоператорный базис, являющийся точным для первых двух УД по построению, с помощью ТЯ.

В случае неоператорных разложений (например, разложение произвольного вектора состояния по неполному базису), постепенное аналогичное расширение неполного базиса приводит к строго монотонному стремлению к точным результатам, соответствующим разложению по полному базису. Это утверждение составляет содержание "теоремы разделения" Хиллераса—Ундергейма—Мак-Дональда (см., например, с. 47 в книге [44]). Того же результата разумно ожидать и в случае операторных разложений, поскольку они, в конце концов, являются лишь другой записью той же процедуры решения уравнения Шредингера.

Таким образом, при желании (или необходимости) можно уточнить физические результаты точного двухоператорного самосогласования, т.е. в принципиальном плане предлагаемая схема точной "линеаризации" допускает и регулярный способ оценки точности выбранного операторного приближения, чего нет не только в методе УД для двухвременных температурных ФГ (именно это и является его принципиальным вычислительным недостатком), но даже и в конструктивной схеме Roth (из-за отсутствия практической возможности точного вычисления E -матрицы этой схемы).

3. Конкретные примеры

3.1. Модель Боголюбова. Для исследования основного и наиболее низколежащих возбужденных состояний слабо неидеального бозе-газа Боголюбов предложил использовать гамильтониан [34]

$$H = \frac{1}{2} N^2 V_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} H_{\mathbf{k}},$$

$$H_{\mathbf{k}} \equiv (\varepsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}}) \hat{n}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} NV_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+), \quad (3.1.1)$$

который допускает точное аналитическое решение. Оно обычно строится с помощью канонического преобразования исходных операторов к новым и приведено привести к диагональному виду форму (3.1.1). Применение же ПАМа к этой задаче оказывается выгодным вдвойне, поскольку основные УД с самого начала здесь оказываются линейными, т.е. для (3.1.1) легко вычислить точную K -матрицу и потому полностью отпадает надобность в наиболее сложной и трудоемкой части ПАМа — приеме точного самосогласования. Итак, основные УД здесь имеют вид

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, H_{\mathbf{k}}]_- = \omega_0 \hat{a}_{\mathbf{k}} + \omega_1 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+,$$

$$[\hat{a}_{-\mathbf{k}}^+, H_{\mathbf{k}}]_- = -\omega_1 \hat{a}_{\mathbf{k}} - \omega_0 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+,$$

где введены обозначения Киттеля [34]

$$\omega_0 \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega_1, \quad \varepsilon_{-\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad V_{-\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}}, \quad V_{\mathbf{k}}^* = V_{\mathbf{k}}.$$

Таким образом, K -матрица имеет вид

$$K = \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ -\omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix}.$$

Здесь стоит еще раз подчеркнуть, что, несмотря на то, что даже точный вид

еще и проведения канонического преобразования, тоща как ПАМ при известной K -матрице позволяет сразу же вычислить все нужные КФ с помощью метода "одевания—раздевания". Вначале, однако, можно извлечь возможные спектры (2.3.2) и по ним уже найти соответствующие им плотности одночастичных энергетических состояний (2.3.3). Спектр в данном случае имеет вид

$$E_{\mathbf{k}} = (\omega_0^2 - \omega_1^2)^{1/2},$$

а интеграл (2.3.3) для плотности состояний не вычисляется в элементарных функциях. С помощью формулы (2.4.1) легко написать алгебраические уравнения для любых КФ. Так, для основных КФ эти уравнения имеют вид

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} [\beta] \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle = F_{11} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle + F_{12} \langle \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle,$$

K -матрицы задачи известен, тем не менее метод Боголюбова все же требует $\langle a_{-\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ \rangle = \langle a_{-\mathbf{k}}^+ [\beta] a_{\mathbf{k}}^+ \rangle = F_{21} \langle a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ \rangle + F_{22} \langle a_{-\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ \rangle$.

Теперь отсюда легко найти диагональную КФ

$$\langle \hat{n}_{\pm \mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{2K_{11}}{R} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{4} \beta R \right) - 1 \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{\omega_0}{E_{\mathbf{k}}} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}} \right) - 1 \right]. \quad (3.1.2)$$

В связи с формулами для средних чисел заполнения полезно иметь в виду тождество

$$\frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{th} \frac{x}{2} \right) \equiv (e^x + 1)^{-1},$$

$$\frac{1}{2} \left(\operatorname{cth} \frac{x}{2} - 1 \right) \equiv (e^x - 1)^{-1}.$$

Недиагональная КФ равна

$$\langle \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle = \frac{K_{21}}{R} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{4} \beta R \right) = \frac{K_{21}}{2E_{\mathbf{k}}} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}} \right).$$

Общая зависимость числа частиц конденсата от температуры получается из (3.1.2) и выглядит так:

$$N_0 \equiv N - \sum_{\mathbf{k} \neq 0} n_{\mathbf{k}}, \quad \frac{N_0}{N} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{\omega_0}{E_{\mathbf{k}}} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}} \right).$$

Для случая идеального бозе-газа эта формула дает

$$\frac{N_0}{N} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \beta \epsilon_{\mathbf{k}} \right). \quad (3.1.3)$$

Критическая температура идеального бозе-газа определяется из условия того,

чтобы ниже ТП левая часть (3.1.3) оказалась конечной величиной:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \operatorname{cth} \left(\frac{1}{2} \beta \varepsilon_{\mathbf{k}} \right) = 3.$$

3.2. Модель Изинга. Известную модель Изинга в операторах спиновых отклонений удобно свести к выражению в операторах рождения и уничтожения фиктивных фермионов на узлах [18, 20]

$$H = \bar{B} \sum_f \hat{n}_f - \frac{J}{2} \sum_{f,j} \hat{n}_f \hat{n}_j, \quad \bar{B} \equiv \lambda B + \frac{zJ}{2}. \quad (3.2.1)$$

Удобно еще ввести оператор \hat{O}_k ($k = 0, 1, 2, \dots, z$), который есть сумма C_z^k произведений по k операторов \hat{n}_j , взятых из числа z операторов чисел заполнения узлов j ($j = 1, 2, \dots, z$), ближайших к рассматриваемому узлу f . Использование \hat{O}_k позволяет заметно сократить число неизвестных КФ, а следовательно, и уравнений для них, исключая лишь случай одномерной модели (например, 8 вместо 10 для случая квадратной решетки и 12 вместо 18 для случая ПК-решетки), поскольку теперь могут быть только КФ вида $\langle \hat{O}_k \rangle$ и $\langle \hat{n}_f \hat{O}_k \rangle$.

Первое УД для (3.2.1) есть

$$[\hat{a}_f, H]_- = \bar{B} \hat{a}_f - J \hat{O}_1 \hat{a}_f \equiv \bar{B} \hat{a}_f - J \hat{d}_f^{(1)}. \quad (3.2.2)$$

Поэтому коммутатор k -го порядка имеет вид

$$[\hat{d}_f^{(k)}, H]_- = (\bar{B} - k + 1) \hat{d}_f^{(k-1)} - k J \hat{d}_f^{(k)}.$$

Таким образом, в базисе $\hat{a}_f \hat{O}_k \equiv \hat{d}_f^{(k)}$ легко вычисляется точная K -матрица. Однако она не позволяет вычислять КФ вида $\langle \hat{O}_k \rangle$, и поэтому получаемая для КФ $\langle \hat{n}_f \hat{O}_k \rangle$ система уравнений будет незамкнутой.

Возвращаясь снова к УД (3.2.2)

$$[\hat{a}_f, H]_- = K_{11} \hat{a}_f + K_{12} \hat{d}_f \quad (3.2.3)$$

придется второе УД записать так:

$$[\hat{d}_f, H]_- = K_{21} \hat{a}_f + K_{22} \hat{d}_f \quad (3.2.4)$$

а коэффициенты K_{21} и K_{22} найти по формулам (2.1.16), (2.1.17), для чего в базисе \hat{a}_f и \hat{d}_f надо вычислить матрицы N и \bar{N} :

$$N_{11} \equiv \langle [\hat{a}_f, \hat{a}_f^\dagger]_+ \rangle = 1,$$

$$N_{12} \equiv \langle [\hat{a}_f, \hat{d}_f^\dagger]_+ \rangle = \langle \hat{O}_1 \rangle = N_{21},$$

$$N_{22} \equiv \langle [\hat{d}_f, \hat{d}_f^\dagger]_+ \rangle = \langle \hat{O}_1^2 \rangle,$$

$$\begin{aligned}\bar{N}_{11} &\equiv \langle \hat{a}_f \hat{a}_f^+ \rangle = 1 - \langle \hat{n}_f \rangle, \\ \bar{N}_{12} &\equiv \langle \hat{a}_f \hat{d}_f^+ \rangle = \langle (1 - \hat{n}_f) \hat{O}_1 \rangle = \bar{N}_{21}, \\ \bar{N}_{22} &\equiv \langle \hat{d}_f \hat{d}_f^+ \rangle = \langle (1 - \hat{n}_f) \hat{O}_1^2 \rangle.\end{aligned}\quad (3.2.5)$$

Можно заметить, что эти матрицы второго порядка являются соответствующими левыми верхними "углами" тех же матриц в базисе $\hat{d}_f^{(k)}$, т.е. матриц

$$\begin{aligned}N_{nm} &\equiv \langle [\hat{O}_{n-1} \hat{a}_f, \hat{O}_{m-1} \hat{a}_f^+] \rangle = \langle \hat{O}_{n-1} \hat{O}_{m-1} \rangle, \\ \bar{N}_{nm} &\equiv \langle \hat{O}_{n-1} \hat{O}_{m-1} \hat{a}_f \hat{a}_f^+ \rangle = \langle (1 - \hat{n}_f) \hat{O}_{n-1} \hat{O}_{m-1} \rangle,\end{aligned}$$

тоща как K -матрица (3.2.3), (3.2.4), как будет видно из последующих формул (3.2.6), (3.2.7), уже не является таковой для K -матрицы в том же базисе.

Подставляя матричные элементы (3.2.5) в формулы (2.1.16), (2.1.17), можно получить

$$K_{21} = 2J \frac{\langle \hat{n}_f \hat{O}_2 \rangle \langle \hat{O}_1 \rangle - \langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle \langle \hat{O}_2 \rangle}{\langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle - \langle \hat{n}_f \hat{O}_2 \rangle}, \quad (3.2.6)$$

$$K_{22} = \bar{B} - J - 2J \frac{\langle \hat{n}_f \hat{O}_2 \rangle - \langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle}{\langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle - \langle \hat{n}_f \hat{O}_2 \rangle}. \quad (3.2.7)$$

В эти выражения входят четыре КФ разных типов:

$$\langle \hat{O}_1 \rangle, \langle \hat{O}_2 \rangle, \langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle, \langle \hat{n}_f \hat{O}_2 \rangle.$$

Эти КФ можно вычислить, если методом "одевания—раздевания" рассмотреть такие КФ:

$$\langle \hat{n}_f \rangle, \langle \hat{a}_f \hat{d}_f \rangle, \langle \hat{d}_f \hat{d}_f^+ \rangle.$$

Вторая из этих трех КФ дает два независимых уравнения, поскольку в нее входят два разных базисных оператора.

Итак, первая КФ дает уравнение

$$\langle \hat{n}_f \rangle \equiv \langle \hat{a}_f^+ \hat{a}_f \rangle = \langle \hat{a}_f [\beta] \hat{a}_f^+ \rangle = F_{11} \langle \hat{a}_f \hat{a}_f^+ \rangle + F_{12} \langle \hat{d}_f \hat{a}_f^+ \rangle;$$

$$\langle \hat{a}_f^+ \hat{d}_f \rangle = \langle \hat{d}_f [\beta] \hat{a}_f^+ \rangle = F_{21} \langle \hat{a}_f \hat{a}_f^+ \rangle + F_{22} \langle \hat{d}_f \hat{a}_f^+ \rangle.$$

Отсюда находятся обе КФ:

$$\langle \hat{n}_f \rangle = \frac{F_{11} + \langle \hat{O}_1 \rangle F_{12} + \det F}{1 + \text{sp } F + \det F},$$

$$\langle \hat{a}_f^+ \hat{d}_f \rangle \equiv \langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle = \frac{(1 + F_{11}) \langle \hat{O}_1 \rangle - F_{21}}{1 + \text{sp } F + \det F}.$$

Аналогично и для других КФ:

$$\begin{aligned}\langle \hat{a}_f^+ \hat{d}_f \rangle &= \langle \hat{a}_f [\beta] \hat{a}_f^+ \hat{O}_1 \rangle = F_{11} \langle \hat{a}_f \hat{a}_f^+ \hat{O}_1 \rangle + \\ &+ F_{12} \langle \hat{d}_f \hat{a}_f^+ \hat{O}_1 \rangle = F_{11} \langle \hat{a}_f \hat{d}_f^+ \rangle + F_{12} \langle \hat{d}_f \hat{d}_f^+ \rangle,\end{aligned}$$

$$\langle \hat{d}_f^+ \hat{d}_f \rangle \equiv \langle \hat{n}_f \hat{O}_1^2 \rangle = \langle \hat{d}_f [\beta] \hat{d}_f^+ \rangle = F_{21} \langle \hat{a}_f \hat{d}_f^+ \rangle + F_{22} \langle \hat{d}_f \hat{d}_f^+ \rangle.$$

Эти уравнения приводят к выражениям

$$\langle \hat{n}_f \hat{O}_1 \rangle = \frac{(F_{11} + \det F) \langle \hat{O}_1 \rangle + F_{12} \langle \hat{O}_1^2 \rangle}{1 + \text{Sp } F + \det F},$$

$$\langle \hat{d}_f \hat{d}_f^+ \rangle \equiv \langle (1 - \hat{n}_f) \hat{O}_1^2 \rangle = \frac{(1 + F_{11}) \langle \hat{O}_1^2 \rangle - F_{21} \langle \hat{O}_1 \rangle}{1 + \text{Sp } F + \det F}.$$

3.3. Модель Гейзенберга. Метод УД в приложении к модели Гейзенберга с широко известным расцеплением УД, предложенным Тябликовым [35], позволяет достаточно просто вычислить намагниченность системы, но наталкивается на большие трудности при попытке вычисления теплоемкости [45]. Это связано с тем, что в схеме Тябликова вычислению поддается только поперечная КФ, а для вычисления внутренней энергии в рамках этого же метода нужно еще знать и продольную КФ. Оказывается, эту трудность можно обойти, если прибегнуть к так называемому продольному приближению ХФ в гамильтониане Гейзенберга [46]. Это приближение, как показано в [46], точно соответствует приближению Тябликова в случае ФМ-варианта модели Гейзенберга и приближению Гинсбурга—Файна [47] в случае АФМ ее варианта.

ФМ-вариант модели Гейзенберга есть [35]

$$H = -\lambda B \sum_f \hat{S}_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f,f'} I_{ff'} (\hat{S}_f^+ \hat{S}_{f'}^- + \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+), \quad I_{ff'} > 0.$$

Продольное приближение ХФ имеет вид [46]

$$H''_{X\Phi} = -\kappa \sum_f \hat{S}_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f,f'} I_{ff'} \hat{S}_f^+ \hat{S}_{f'}^- = -\kappa \hat{S}_0^z - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{k}}^+ \hat{S}_{-\mathbf{k}}^-, \quad (3.3.1)$$

здесь введены обозначения

$$\kappa \equiv \lambda B + J_0 \langle \hat{S}_f^z \rangle, \quad J_0 \equiv \sum_{f-f'} I_{f-f'}.$$

Из (3.3.1) сразу видно, что для вычисления внутренней энергии этой системы достаточно знать только поперечную КФ и намагниченность. Для вычисления поперечной КФ нужен коммутатор

$$[\hat{S}_f^{\pm}, H''_{X\Phi}]_- = \pm \kappa \hat{S}_f^{\pm} \mp \hat{S}_f^z \sum_{f'} I_{f-f'} \hat{S}_{f'}^{\pm}. \quad (3.3.2)$$

При последовательном проведении продольного приближения ХФ оператор продольной компоненты в (3.3.2) следует заменить его средним значением, т.е. нужно использовать коммутатор

$$[\hat{S}_{\mathbf{k}}^{\pm}, H''_{X\Phi}]_- = \pm (\kappa - \langle \hat{S}_f^z \rangle J_{\mathbf{k}}) \hat{S}_{\mathbf{k}}^{\pm} \equiv \pm \xi_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{k}}^{\pm}, \quad (3.3.3)$$

где введены такие обозначения:

$$\xi_{\mathbf{k}} \equiv \lambda B + J_0 (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) \langle \hat{S}_f^z \rangle, \quad \gamma_{-\mathbf{k}} = \gamma_{\mathbf{k}} \equiv J_0 J_0^{-1}.$$

На основании (3.3.3) и имея в виду формулу (2.1.8'), можно сразу получить

поперечную КФ

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{k}}^{\pm} \hat{S}_{\mathbf{k}'}^{\pm} \rangle = \pm N^{1/2} \frac{\hat{2} \langle S_f^z \rangle \delta_{-\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{1 - \exp(\mp \beta \xi_{\mathbf{k}})}.$$

Поскольку коммутатор (3.3.3) обращается в нуль справа от ТП, то продольное приближение ХФ позволяет вести рассмотрение задачи только слева от нее. Это замечание относится и к АФМ-варианту модели Гейзенберга. Если использовать еще связь

$$\hat{S}_f^z = \hat{S}_f^+ \hat{S}_f^- - \frac{1}{2} \rightarrow \langle \hat{S}_f^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{S}_{\mathbf{k}}^+ \hat{S}_{\mathbf{k}}^- \rangle - \frac{1}{2}, \quad (3.3.4)$$

можно построить всю термодинамику гейзенберговского ферромагнетика в этом приближении (полностью совпадающем с приближением Тябликова).

АФМ-вариант модели Гейзенберга удобно взять в виде [34]

$$H = -\lambda B \left(\sum_{f_1} \hat{S}_{f_1}^z + \sum_{f_2} \hat{S}_{f_2}^z \right) - \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2} I_{f_1 f_2} (2 \hat{S}_{f_1}^z \hat{S}_{f_2}^z + \hat{S}_{f_1}^+ \hat{S}_{f_2}^- + \hat{S}_{f_2}^+ \hat{S}_{f_1}^-), \quad I_{f_1 f_2} < 0.$$

Продольное приближение ХФ для этого гамильтониана имеет вид [46]

$$H''_{X\Phi} = -\kappa_1 \sum_{f_2} \hat{S}_{f_2}^z - \kappa_2 \sum_{f_1} \hat{S}_{f_1}^z - \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2} I_{f_1 f_2} (\hat{S}_{f_1}^+ \hat{S}_{f_2}^- + \hat{S}_{f_2}^+ \hat{S}_{f_1}^-), \quad (3.3.5)$$

где введено обозначение

$$\kappa_i \equiv \lambda B + J_0 \langle \hat{S}_{f_i}^z \rangle, \quad i = 1, 2.$$

Гамильтониан (3.3.5) приводит к коммутаторам

$$\begin{aligned} [S_1^{\pm}(\mathbf{k}), H''_{X\Phi}]_- &= \mp \kappa_2 \hat{S}_1^{\pm}(\mathbf{k}) \mp J_{\mathbf{k}} \langle \hat{S}_{f_1}^z \rangle \hat{S}_2^{\pm}(\mathbf{k}), \\ [\hat{S}_2^{\pm}(\mathbf{k}), H''_{X\Phi}]_- &= \mp \kappa_1 \hat{S}_2^{\pm}(\mathbf{k}) \mp J_{\mathbf{k}} \langle \hat{S}_{f_2}^z \rangle \hat{S}_1^{\pm}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

Здесь второе УД получается из первого заменой $1 \geq 2$. Имея в виду коммутаторы

$$[\hat{S}_{\mathbf{k}}^z, \hat{S}_{\mathbf{k}'}^{\pm}]_- = \pm \hat{S}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^{\pm}, \quad [\hat{S}_{\mathbf{k}}^{\pm}, \hat{S}_{\mathbf{k}'}^{\mp}]_- = \pm 2 \hat{S}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^z$$

и решеточные преобразования

$$S_f^z = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{k}}^z e^{-i\mathbf{k}f}, \quad \hat{S}_f^{\pm} = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{k}}^{\pm} e^{\mp i\mathbf{k}f},$$

с помощью УД (3.3.6) можно легко вычислить поперечные КФ методом "одевания—раздевания". Связь же (3.3.4) позволит затем вычислить намагниченность подрешеток. Внутренняя энергия АФМ вычисляется из (3.3.5), если предварительно выполнить решеточное преобразование Фурье. Это приближение полностью совпадает с теорией Гинзбурга—Файна [47].

3.4. Модель Хаббарда. Здесь будет рассмотрена обобщенная (вырожденная) модель Хаббарда, которая отличается от обычной (невырожден-

ной) модели Хаббарда лишь возможными значениями спинового индекса операторов — теперь он может принимать более двух значений. Наиболее важное применение эта модель находит в теории переходных металлов, где с ее помощью можно достаточно просто учесть вырождение 3d-уровней атомов этих металлов [48]. В этом случае спиновый индекс будет принимать десять значений, т.е. 3d-электроны рассматриваются как фермионы со спином (9/2) и, следовательно, их энергия в зоне будет вырождена не только по истинному спину, но и по магнитному квантовому числу.

Итак, рассматривается модель

$$H = \sum_{j,j',\nu} t_{jj'} \hat{C}_{j\nu}^+ \hat{C}_{j'\nu} + \frac{I}{2} \sum_j \hat{N}_j (\hat{N}_j - 1); \quad (3.4.1)$$

здесь введено обозначение

$$\hat{N}_j \equiv \sum_{\nu} \hat{n}_{j\nu} = \sum_{\nu} \hat{C}_{j\nu}^+ \hat{C}_{j\nu}.$$

Выражение (3.4.1), разумеется, переходит в обычную (невырожденную) модель Хаббарда, если индекс ν будет принимать только два значения. Физическое обоснование этого варианта модели Хаббарда, т.е. (3.4.1), — в том, что "расстояние" между полосами, соответствующими атомам с разным числом 3d-электронов, в общем случае, много больше (эти "расстояния" порядка десятков эВ), чем ширины самих этих полос (они в общем случае не более десяти эВ [4]).

1) Из одноэлектронного коммутатора

$$[\hat{C}_{j\nu}, H]_- = \sum_{j'} t_{jj'} \hat{C}_{j'\nu} + I \hat{N}_j \hat{C}_{j\nu} \equiv \sum_{j'} t_{jj'} \hat{C}_{j'\nu} + I \hat{d}_{j\nu}$$

видно, что удобнее иметь дело с решеточными фурье-образами операторов

$$\hat{C}_{\mathbf{k}\nu} \equiv \frac{1}{N^{1/2}} \sum_j e^{i\mathbf{k}j} \hat{C}_{j\nu},$$

т.е. с коммутатором

$$[\hat{C}_{\mathbf{k}\nu}, H]_- = t_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} + I \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \equiv K_{11} \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} + K_{12} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}. \quad (3.4.2)$$

Тоша второй, трехэлектронный коммутатор надо разложить по этому базису:

$$[\hat{d}_{\mathbf{k}\nu}, H]_- = K_{21} \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} + K_{22} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}, \quad (3.4.3)$$

а коэффициенты разложения вычислить по формулам (2.1.16), (2.1.17), поскольку K -матрица оказывается вещественной. Теперь осталось вычислить матрицы N и \hat{N} , чтобы иметь возможность воспользоваться формулами (2.1.16), (2.1.17). Непосредственные вычисления дают

$$[\hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^{\pm}, \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^{\mp}]_+ = \frac{1}{N} \sum_j (\hat{N}_j - \hat{n}_{j\nu}) \equiv \hat{\gamma}_{\nu}, \quad (3.4.4)$$

$$[\hat{d}_{\mathbf{k}\nu}, \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+]_+ = \frac{1}{N} \sum_j (\hat{N}_j - \hat{n}_{j\nu})^2 \equiv \kappa_{\nu}$$

при очевидном условии

$$[\hat{C}_{\mathbf{k}\nu}, \hat{C}_{\mathbf{k}'\nu'}^+]_+ = \delta_{\mathbf{kk}'} \delta_{\nu\nu'},$$

которое следует из условия выполнения подобных антисимметрических соотношений в координатном пространстве. Здесь стоит обратить внимание на тот факт, что антисимметрические (3.4.4) оказались независящими от квазимпульса. Усредненные значения этих операторов равны

$$\begin{aligned} \gamma_\nu &= \langle \hat{N}_j - \hat{n}_{j\nu} \rangle = n - n_\nu, \\ \kappa_\nu &= \langle (\hat{N}_j - \hat{n}_{j\nu})^2 \rangle, \\ \langle \hat{N}_j \rangle &= \sum_\nu \langle \hat{n}_{j\nu} \rangle = \sum_\nu n_\nu = n. \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

Итак, N -матрица этого варианта модели Хаббарда имеет вид

$$\begin{aligned} N_{11} &= \langle [\hat{C}_{\mathbf{k}\nu}, \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+]_+ \rangle = 1, \\ N_{12} &= \langle [\hat{C}_{\mathbf{k}\nu}, \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+]_+ \rangle = \gamma_\nu = N_{21}, \\ N_{22} &= \langle [\hat{d}_{\mathbf{k}\nu}, \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+]_+ \rangle = \kappa_\nu. \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

Методом "одевания—раздевания" легко вычислить и \bar{N} -матрицу. Удобнее вначале вычислить \bar{N}_{11} и \bar{N}_{21} . Для этого надо рассмотреть систему

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle &= \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} [\beta] \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle = F_{11} \langle 1 - \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle + F_{12} \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle, \\ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+ \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \rangle &= \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} [\beta] \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle = F_{21} \langle 1 - \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle + F_{22} \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle. \end{aligned}$$

Решая эти уравнения, с учетом второго антисимметрического оператора (3.4.6) можно получить

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle &= (F_{11} + \gamma_\nu F_{12} + \det F)(1 + \text{Sp } F + \det F)^{-1}, \\ \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \hat{C}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle &\equiv \bar{N}_{21} = [(1 + F_{11})\gamma_\nu - F_{21}](1 + \text{Sp } F + \det F)^{-1}, \\ 1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle &= (1 + F_{22} - \gamma_\nu F_{12})(1 + \text{Sp } F + \det F)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

Теперь остается вычислить \bar{N}_{12} и \bar{N}_{22} из уравнений

$$\begin{aligned} \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \rangle &= \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} [\beta] \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle = F_{21} \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle + F_{22} \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle, \\ \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} \rangle &= \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} [\beta] \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle = F_{11} \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle + F_{12} \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle. \end{aligned}$$

Эти уравнения с учетом третьего антисимметрического оператора (3.4.6) дают

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\nu} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle &\equiv \bar{N}_{12} = [(1 + F_{22})\gamma_\nu - \kappa_\nu F_{12}](1 + \text{Sp } F + \det F)^{-1}, \\ \langle \hat{d}_{\mathbf{k}\nu} \hat{d}_{\mathbf{k}\nu}^+ \rangle &\equiv \bar{N}_{22} = [(1 + F_{11})\kappa_\nu - \gamma_\nu F_{21}](1 + \text{Sp } F + \det F)^{-1}. \end{aligned}$$

Из первого соотношения (3.4.7) легко получить главную двухузельную КФ

$$\langle \hat{C}_{j\nu}^+ \hat{C}_{j'\nu'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(j-j')} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(j-j')} \frac{F_{11} + \gamma_\nu F_{12} + \det F}{1 + \text{Sp } F + \det F}, \quad (3.4.9)$$

поскольку при наличии трансляционной инвариантности КФ диагональны по квазимпульсу:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A}_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^+ \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{jj'} e^{i(\mathbf{k}j - \mathbf{k}'j')} \langle \hat{A}_j \hat{B}_{j'}^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')j'} \sum_{j=j'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')j'} \langle \hat{A}_j \hat{B}_{j'}^+ \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')j'} \langle \hat{A}_j \hat{B}_{j'}^+ \rangle_{\mathbf{k}} = \langle \hat{A}_j \hat{B}_{j'}^+ \rangle_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.\end{aligned}$$

Аналогично получается и двухузельная КФ более высокого порядка $\langle \hat{C}_{j\nu} \hat{d}_{j\nu}^+ \rangle$, если использовать первое выражение из (3.4.8). Далее, поскольку

$$\begin{aligned}\langle \hat{C}_{j\nu} \hat{d}_{j\nu}^+ \rangle &\equiv \langle \hat{C}_{j\nu} \hat{C}_{j\nu}^+ \hat{N}_j \rangle = n - \langle \hat{N}_j \hat{n}_{j\nu} \rangle, \\ \langle \hat{N}_j^2 \rangle &= \sum_{\nu} \langle \hat{N}_j \hat{n}_{j\nu} \rangle,\end{aligned}$$

то можно вычислить и главную одноузельную КФ

$$\langle \hat{N}_j (\hat{N}_j - 1) \rangle = 9n - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu} \frac{(1 + F_{22})\gamma_{\nu} - \chi_{\nu} F_{12}}{1 + \text{Sp } F + \det F}. \quad (3.4.10)$$

Теперь легко вычислить по второй формуле (3.4.5) и величину

$$\chi_{\nu} = n_{\nu} + 8n - \sum_{\nu} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{(1 + F_{22})\gamma_{\nu} - \chi_{\nu} F_{12}}{1 + \text{Sp } F + \det F} \right]_{\nu} (1 - 2\delta_{\nu\nu}). \quad (3.4.11)$$

Наконец, полезно привести соотношение

$$N_{11}K_{21} + N_{12}(K_{22} - K_{11}) - N_{22}K_{12} = 0, \quad (3.4.12)$$

(где в качестве N -матрицы может быть взята любая из двух матриц N и \bar{N}), к которому сводятся матричные равенства (2.1.10) и (2.1.13) в случае, когда фигурирующие в них матрицы вещественны, в явном виде:

а) для N -матрицы (3.4.12) примет вид

$$K_{21} = \chi_{\nu} K_{12} + \gamma_{\nu} (K_{11} - K_{22}); \quad (3.4.13)$$

б) для \bar{N} -матрицы (3.4.12) примет вид

$$(1 + F_{22})K_{21} = (1 + F_{11})\chi_{\nu} K_{12} + [(1 + F_{22})\gamma_{\nu} - \chi_{\nu} F_{12}](K_{11} - K_{22}). \quad (3.4.14)$$

Определитель системы (3.4.13), (3.4.14) не совпадает с определителем $N_{11}N_{12} - N_{11}\bar{N}_{12}$, поскольку в уравнении (3.4.14) сокращен член $\gamma_{\nu} F_{12} K_{21} = \gamma_{\nu} F_{21} K_{12}$. Кстати, формулы (2.1.16), (2.1.17) как раз и получены из (3.4.12). Выражения для $\bar{N}_{12} = \bar{N}_{21}$ имеют разный вид, но фактически они тождественны.

2) Для модели (3.4.1) можно рассмотреть атомный предел

$$H = t_0 \sum_{\nu} \hat{n}_{j\nu} + \frac{I}{2} \sum_j \hat{N}_j (\hat{N}_j - 1), \quad (3.4.15)$$

который определяется заменой $t_{jj'} \rightarrow t_0 \delta_{jj'}$, где

$$t_0 \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}$$

— среднее значение $\epsilon_{\mathbf{k}}$ в зоне. Для модели (3.4.15), как и в модели Изинга, можно найти точный вид K -матрицы, если в качестве базиса взять операторы $\hat{N}_j^k \hat{C}_{j\nu}, 1, 2, \dots, 10$:

$$[\hat{N}_j^k \hat{C}_{j\nu}, H]_- = t_0 \hat{N}_j^{k-1} \hat{C}_{j\nu} + I \hat{N}_j^k \hat{C}_{j\nu}. \quad (3.4.16)$$

В случае, когда спиновый индекс принимает только два значения, система УД (3.4.16) замыкается уже на втором шаге:

$$\begin{aligned} [\hat{C}_{j\sigma}, H]_- &= t_0 \hat{C}_{j\sigma} + I \hat{d}_{j\sigma}, \quad \hat{d}_{j\sigma} \equiv \hat{n}_{j-\sigma} \hat{C}_{j\sigma}, \\ [\hat{d}_{j\sigma}, H]_- &= (t_0 + I) \hat{d}_{j\sigma}. \end{aligned}$$

В этом случае эту K -матрицу легко получить и по общим формулам (2.1.16), (2.1.17) с помощью матриц N и \hat{N} .

3) В этом пункте K -матрица

$$K = \begin{pmatrix} t_k & I \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} = I \begin{pmatrix} t_k/I & 1 \\ K_{21}/I & K_{22}/I \end{pmatrix},$$

соответствующая разложениям (3.4.2), (3.4.3), где

$$t_k \equiv \sum_{j-j'} t_{jj'} \exp[i\mathbf{k}(j-j')]$$

и $t_{jj'}$ — энергия перехода электрона с узла j на узел j' , будет заменена на предельную $I \rightarrow \infty$, т.е. на матрицу

$$K_{\text{пред}} = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ K_{21}/I & K_{22}/I \end{pmatrix}. \quad (3.4.17)$$

Здесь предполагается, что оставленные отношения остаются конечными в этом пределе, а первое отношение обращается в нуль. Решения, получаемые с помощью (3.4.17), будут локальными, поскольку полностью выпадает зависимость от квазимпульса из-за принятия $K_{11} = 0$. Физически этот случай соответствует замене полосы на уровень (атомный предел), а математически — замене оператора $[(1/N) \sum_{\mathbf{k}}]$ единицей. Первым аналитическим следствием

чисто локального приближения является равенство

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\nu} \rangle = \langle \hat{n}_{j\nu} \rangle = n_{\nu}.$$

Основная польза от этого приближения — это возможность, и опять-таки лишь для некоторых частных случаев, провести аналитические выкладки до конца, что, в свою очередь, позволит весьма наглядно проследить роль вырождения неспинового происхождения в возникновении магнитного порядка. Для этого нужно будет сравнивать решения невырожденного и вырожденного вариантов, причем первый получается из второго простой заменой

$$n_{\nu} \rightarrow n_{\sigma}, \quad \gamma_{\nu}, \chi_{\nu} \rightarrow n_{-\sigma}. \quad (3.4.18)$$

F -матрица (2.4.5), которая соответствует рассматриваемому пределу (3.4.17), имеет вид

$$F(\beta; K) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{K_{22}}{R}\right) & -\frac{I}{R} \\ -\frac{K_{21}}{R} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{K_{22}}{R}\right) \end{pmatrix} e^{1/2\beta(R-K_{22})}. \quad (3.4.19)$$

Одновременно упрощается и соотношение (3.4.13):

$$K_{21} = K_{12}\kappa_\nu - K_{22}\gamma_\nu, \quad K_{12} = I.$$

Матрица (3.4.19) имеет только два нетривиальных вида:
первый соответствует условию

$$R \equiv I \left[\left(\frac{K_{22}}{I} \right)^2 + 4 \left(\frac{K_{21}}{I} \right) \right]^{1/2} = K_{22} \equiv \frac{\kappa_\nu}{\gamma_\nu} I \neq 0,$$

второй — условию

$$R \pm K_{22} > 0.$$

Здесь будут рассмотрены только первый и частный случай второго, когда $K_{22} = 0$.

Итак, если принять первое условие, то K -матрица примет вид

$$K_\nu = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & \kappa_\nu/\gamma_\nu \end{pmatrix}, \quad K_\sigma = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

и поэтому

$$F_\nu(\pm \beta) = \begin{pmatrix} 1 & \mp \gamma_\nu/\kappa_\nu \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_\sigma(\pm \beta) = \begin{pmatrix} 1 & +1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для этой F -матрицы формула (3.4.11) приводит к любопытному равенству $\kappa_\nu = \gamma_\nu$, а формула (3.4.9) для средних значений дает

$$2n_\sigma = 1 - n_{-\sigma}, \quad 2n_\nu = 1 - \gamma_\nu.$$

Эти уравнения имеют только симметричные решения $n_{-\sigma} = n_\sigma = 1/3$ и $n^- = n^+ = 5/11$ соответственно, и эти решения возможны только при одном значении $n = n_{-\sigma} + n_\sigma = 2/3$ и $n = n^- + n^+ = 10/11$ соответственно (здесь $n^\pm \equiv \sum_\nu n_\nu^\pm$).

Если принять второе условие, то K -матрица примет такой вид:

$$K_\nu = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \kappa_\nu & 0 \end{pmatrix}, \quad K_\sigma = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ n_{-\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

и поэтому

$$F_\nu(\pm \beta) = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ \kappa_\nu F_{12} & F_{11} \end{pmatrix}.$$

Теперь формула (3.4.9) дает уравнение

$$\langle \hat{n}_p \rangle = n_\nu = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_\nu}{\chi_\nu^{1/2}} \right). \quad (3.4.20)$$

Для невырожденного случая оно примет вид

$$2n_\sigma = 1 - n_{-\sigma}^{1/2}$$

и имеет только симметричное решение $n_{-\sigma} = n_\sigma = 1/4$ для $n = 1/2$. Для вырожденного случая в уравнение (3.4.20) входят две неизвестные величины — n_ν и χ_ν , и надо решать систему

$$2n_\nu = 1 - \frac{\gamma_\nu}{\chi_\nu^{1/2}},$$

$$2\chi_\nu = 2\gamma_\nu + \sum_{\nu'} (\gamma_{\nu'} - \chi_{\nu'}^{1/2})(1 - 2\delta_{\nu\nu'}).$$

Второе уравнение этой системы получается из (3.4.11), переписанного в более симметричном виде

$$\chi_\nu = \gamma_\nu + \frac{1}{N} \sum_k \sum_{\nu'} \left(\frac{\gamma F_{11} + \chi F_{12} + \gamma \det F}{1 + \text{Sp } F + \det F} \right)_{\nu'} (1 - 2\delta_{\nu\nu'}). \quad (3.4.21)$$

Второе уравнение этой системы можно упростить:

$$\chi_\nu = \chi_\nu^{1/2} + \frac{1}{2} \sum_{\nu'} (\gamma_{\nu'} - \chi_{\nu'}^{1/2}) = \chi_\nu^{1/2} - \sum_{\nu'} \gamma_{\nu'} n_{\nu'} (1 - 2n_{\nu'})^{-1}, \quad (3.4.22)$$

если использовать выражение для χ_ν из первого уравнения

$$\chi_\nu^{1/2} = \gamma_\nu (1 - 2n_\nu)^{-1}.$$

Теперь (3.4.22) можно переписать так:

$$(1 - n_\nu) n_\nu + (1 - 2n_\nu)^2 \sum_{\nu'} \frac{\gamma_{\nu'} n_{\nu'}}{1 - 2n_{\nu'}} = (1 - n) n,$$

или так:

$$(1 - 2n_\nu)^2 = (1 - 2n)^2 (1 - 4q)^{-1} \equiv Q, \quad (3.4.23)$$

$$q \equiv \sum_{\nu'} \gamma_{\nu'} n_{\nu'} (1 - 2n_{\nu'})^{-1}.$$

Квадратное относительно n_ν уравнение (3.4.23) имеет решение

$$n_\nu^{I,II} = \frac{1}{2} \left(1 \pm Q^{1/2} \right). \quad (3.4.24)$$

Физически наиболее интересен случай, когда эти корни неотрицательны и различны, т.е. когда $0 < Q \leq 1$. Величину Q можно вычислить из уравнения

$$(1 - 2n)^2 Q^{-1} = 1 - 4q = 1 - 4 \left[\frac{(n - n_\nu^I) n_\nu^I}{1 - 2n_\nu^I} p + \frac{(n - n_\nu^{II}) n_\nu^{II}}{1 - 2n_\nu^{II}} (10 - p) \right],$$

которое есть определение Q по (3.4.23). Подставляя сюда корни (3.4.24), можно получить уравнение для Q в виде

$$\begin{aligned} Q^2(20n - 19)^2 - 2Q(1 - 2n)^2(20n - 19) + (1 - 2n)^4 = \\ = [(1 - 2n)^2 + Q^2 + 2Q(1 - 2n)](10 - 2p)^2Q, \end{aligned} \quad (3.4.25)$$

которое в общем случае является кубическим. В двух случаях оно переходит в квадратное, и именно они будут рассмотрены. Первый случай соответствует $n = 1/2$, и тогда (3.4.25) примет вид

$$Q^{1/2} = 9(10 - 2p)^{-1} \rightarrow Q = 81(10 - 2p)^{-2}, \quad 1 \leq p < 5.$$

Это значение Q при $1 \leq p < 5$ дает только один неотрицательный корень по (3.4.24). Второй случай соответствует условию $p = 5$. Тогда правая часть (3.4.25) обращается в нуль и для Q получается квадратное уравнение, которое имеет один кратный корень:

$$Q = (1 - 2n)^2(20n - 19)^{-1}.$$

Схематически зависимость $Q(n)$ показана на рис. 1. Таким образом, условию $0 < Q \leq 1$ удовлетворяют значения $(19/20) < n \leq 5$. Поскольку еще рассматривается случай $p_2 = p_1 = 5$, то должно удовлетворяться также условие

$$p_1 n_{\nu}^I + p_2 n_{\nu}^{II} = n \rightarrow 5(n_{\nu}^I + n_{\nu}^{II}) = n,$$

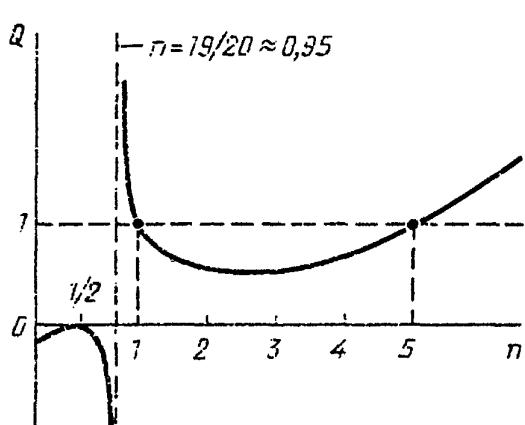


Рис. 1

откуда следует $n = 5$ и потому $Q = 1$. При этом корни (3.4.24) суть $n_{\nu}^I = 1$; $n_{\nu}^{II} = 0$. Схемы заполнения одноэлектронных состояний (приводятся только физически различные по магнитному моменту схемы) показаны на рис. 2. Три другие возможные схемы получаются зеркальным отражением левых и правых частей этих схем относительно их

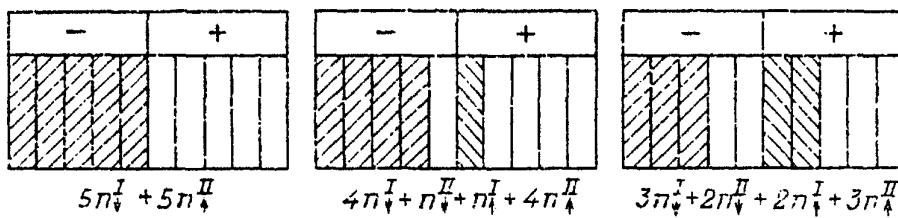


Рис. 2

линии раздела "минус-плюс" с последующей заменой знаков $\langle + \rangle \rightleftharpoons \langle - \rangle$. На конец, стоит отметить, что в этом случае главная одноузельная КФ (3.4.10) равна

$$\langle \hat{N}_j(\hat{N}_j - 1) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\nu} (\gamma_{\nu} - \kappa_{\nu}).$$

3.5. Модель Бардина — Купера — Шиффера (БКШ). Здесь ПАМ применен к модельному гамильтониану БКШ. При этом, чтобы крайне

не усложнять и без того оказывающуюся достаточно сложной фактическую реализацию приема точной ее "линеаризации", здесь с самого начала будет рассмотрен только случай локального взаимодействия электронов (в координатном представлении такой потенциал имеет вид, пропорциональный дельта-функции, — контактное взаимодействие). Такой потенциал, что также чрезвычайно важно, позволяет провести точное самосогласование до конца, и поэтому локальная модель БКШ является исключительно важной для демонстрации ПАМа. К тому же окончательные аналитические результаты задачи БКШ для щели, критической температуры и т.д. обычно приводятся для случая потенциала именно такого вида.

Модельный гамильтониан БКШ имеет вид [31]

$$\bar{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}'}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \quad (3.5.1)$$

Операторы $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\pm}$ подчиняются довольно сложным перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}]_- &= 0, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}}^2 = 0, \\ [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^+]_- &= (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}} - \hat{n}_{-\mathbf{k}}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \\ [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^+]_+ &= 1 - (\hat{n}_{\mathbf{k}} - \hat{n}_{-\mathbf{k}})^2. \end{aligned}$$

Из последнего антисимметрического соотношения видно, что эти операторы можно, при желании, подчинить смешанным бозевско-фермиевским перестановочным соотношениям, если ограничиться рассмотрением таких конфигураций электронной системы, в которых любые два парных одноэлектронных состояния одновременно либо заняты, либо свободны. Такое подчинение не было бы лишено смысла, поскольку (3.5.1) не смешивает подобные конфигурации с конфигурациями, содержащими и наполовину заполненные парные одноэлектронные состояния. Здесь, однако, это условие не будет вводиться.

В контактном приближении (3.5.1) примет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) + \frac{V}{N} \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta}, \quad (3.5.2)$$

и именно этот гамильтониан всюду в дальнейшем будет использоваться. Он получен из (3.5.1) путем замен

$$\sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} \equiv \hat{\Delta}, \quad V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rightarrow \frac{V}{N}, \quad V^* = V,$$

где N — число ячеек в рассматриваемом образце.

Как оказывается [30, 31, 34], результаты оригинальной теории БКШ можно очень просто получить, если точные УД

$$\begin{aligned} [\hat{C}_{\mathbf{k}}, H]_- &= \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}} + \frac{V}{N} \hat{C}_{-\mathbf{k}}^+ \hat{\Delta} = (\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{V}{N}) \hat{C}_{\mathbf{k}} + \frac{V}{N} \hat{\Delta} \hat{C}_{-\mathbf{k}}^+, \\ [\hat{C}_{-\mathbf{k}}^+, H]_- &= \frac{V}{N} \hat{\Delta}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}}^+ \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

линеаризовать по схеме Валатина

Решение этой системы дает

$$\langle \hat{n}_{\pm k} \rangle = \frac{1 + F_{11}}{1 + \text{Sp } F + \det F} = \frac{1 + F_{11}}{2 + \text{Sp } F} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{K_{11}}{E_k} \text{th} \left(\frac{1}{2} \beta E_k \right) \right], \quad (3.5.11)$$

$$\langle \hat{b}_k \rangle = F_{12} (2 + \text{Sp } F)^{-1}. \quad (3.5.12)$$

Из (3.5.12) прямо следует уравнение для щели

$$1 = - \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \text{th} \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}} \right) \quad (3.5.13)$$

и уравнение для критической температуры

$$1 = - \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \text{th} \left(\frac{1}{2} \beta \epsilon_{\mathbf{k}} \right). \quad (3.5.14)$$

Эти уравнения полностью совпадают с уравнениями теории БКШ. Методом "одевания—раздевания" очень просто вычислить и другие КФ, например, такие:

$$\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle = |\Delta|^2 + \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2 \approx |\Delta|^2, \quad (3.5.15)$$

$$\langle \hat{n}_k \hat{n}_{-k} \rangle - \langle \hat{n}_k \rangle \langle \hat{n}_{-k} \rangle = \frac{F_{12}}{2 + \text{Sp } F} \frac{F_{21}}{2 + \text{Sp } F} = b_k b_k^* = |b_k|^2.$$

В точно самосогласованном подходе первое уравнение из точной системы (3.5.3) остается без изменений:

$$[\hat{C}_k, H]_- = \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{C}_k + \frac{V}{N} \hat{C}_{-k}^+ \hat{\Delta} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{C}_k + \frac{V}{N} \hat{D}_k \equiv K_{11} \hat{C}_k + K_{12} \hat{D}_k, \quad (3.5.16)$$

а коэффициенты разложения трехэлектронного коммутатора

$$[\hat{D}_k, H]_- = K_{21} \hat{C}_k + K_{22} \hat{D}_k \quad (3.5.17)$$

по точному базису первого коммутатора находятся с помощью ТЯ (2.1.2).

Свойства симметрии (3.5.7) K -матрицы, в схеме Валатина взятые непосредственно из разложений (3.5.4), (3.5.5), здесь устанавливаются из общих аналитических соображений, поскольку разложение (3.5.17) теперь неизвестно. Первая строка из (3.5.5) справедлива, разумеется, и здесь.

Если использовать тройку $1 = \hat{C}_{-k}$, $2 = \hat{D}_k$, $3 = H$, то можно из (2.1.2) получить

$$[\hat{\Delta}, H]_- = K_{12} (\hat{n}_k - \hat{n}_{-k}) \hat{\Delta} + T \hat{\Delta},$$

если же использовать тройку $1 = \hat{C}_k$, $2 = \hat{D}_{-k}$, $3 = H$, то получится другой результат:

$$[\hat{\Delta}, H]_- = -K_{12} (\hat{n}_k - \hat{n}_{-k}) \hat{\Delta} + T \hat{\Delta}.$$

Из этих двух равенств следуют два новых

$$(\hat{n}_k - \hat{n}_{-k}) \hat{\Delta} = 0 \rightarrow K_{21}(-k) = -K_{21},$$

$$[\hat{\Delta}, H]_- = T \hat{\Delta} \rightarrow T = 0 \rightarrow K_{22} = -K_{11},$$

$$\begin{aligned} [\hat{C}_k, H]_- &\approx \epsilon_k \hat{C}_k + \frac{V}{N} \langle \hat{\Delta} \rangle \hat{C}_{-k}^+ \equiv K_{11} \hat{C}_k + K_{12} \hat{C}_{-k}^+, \\ [\hat{C}_{-k}^+, H]_- &\approx \frac{V}{N} \langle \hat{\Delta}^+ \rangle \hat{C}_k - \epsilon_k \hat{C}_{-k}^+ \equiv K_{21} \hat{C}_k + K_{22} \hat{C}_{-k}^+. \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

К этой системе УД полезно добавить еще два УД

$$\begin{aligned} [\hat{C}_{-k}, H]_- &\approx \epsilon_k \hat{C}_{-k} - \frac{V}{N} \Delta \hat{C}_k^+ \equiv K_{11}(-k) \hat{C}_{-k} + K_{12}(-k) \hat{C}_k^+ = \\ &= K_{11} \hat{C}_{-k} - K_{12} \hat{C}_k^+, \\ [\hat{C}_k^+, H]_- &\approx -\frac{V}{N} \Delta^* \hat{C}_{-k} - \epsilon_k \hat{C}_k^+ \equiv \\ &\equiv K_{21}(-k) \hat{C}_{-k} + K_{22}(-k) \hat{C}_k^+ = -K_{21} \hat{C}_{-k} + K_{22} \hat{C}_k^+, \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

точные выражения которых имеют вид

$$\begin{aligned} [\hat{C}_{-k}, H]_- &= \epsilon_k \hat{C}_{-k} - K_{12} \hat{C}_k^+ \hat{\Delta} = \frac{K_{11} \hat{C}_{-k} - K_{12} \hat{D}_{-k}}{(K_{11} + K_{12}) \hat{C}_{-k} - K_{12} \hat{\Delta} \hat{C}_k^+}, \\ [\hat{C}_k^+, H]_- &= -\epsilon_k \hat{C}_k^+ - \frac{V}{N} \hat{\Delta}^+ \hat{C}_{-k}^+ = \frac{-K_{11} \hat{C}_k^+ - K_{12} \hat{D}_k^+}{(K_{11} + K_{12}) \hat{C}_k^+ + K_{12} \hat{C}_{-k} \hat{\Delta}^+}. \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

Из сравнения (3.5.3) с (3.5.6) видно, что в рассматриваемой задаче имеют место свойства симметрии

$$\begin{aligned} K_{11}(-k) &= K_{11}(k) \equiv K_{11}, \quad K_{12}(-k) = -K_{12}, \\ K_{21}(-k) &= -K_{21}, \quad K_{22}(-k) = K_{22}. \end{aligned} \quad (3.5.7)$$

Итак, K -матрица гамильтониана (3.5.2), линеаризованная по схеме Валатина, имеет вид

$$K = \begin{pmatrix} \epsilon_k & \frac{V}{N} \Delta \\ K_{12}^* & -K_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.5.8)$$

Собственные значения этой матрицы дают энергетические спектры возможных элементарных возбуждений. Для возбуждений с положительной энергией этот спектр имеет вид

$$E_k = \left[\epsilon_k^2 + \left(\frac{V}{N} \right)^2 |\Delta|^2 \right]^{1/2}. \quad (3.5.9)$$

Теперь методом "одевания—раздевания" легко получить основное уравнение теории БКШ для щели $|\Delta|^2$. Для этого нужно вычислить КФ $\langle \hat{b}_k \rangle$. Используя (3.5.4), (3.5.5), можно последовательно писать

$$\begin{aligned} \langle \hat{b}_k \rangle &= \langle \hat{C}_{-k} \hat{C}_k \rangle = \langle \hat{C}_k [\beta] \hat{C}_{-k} \rangle = F_{11} \langle \hat{C}_k \hat{C}_{-k} \rangle + F_{12} \langle \hat{C}_{-k}^+ \hat{C}_{-k} \rangle, \\ \langle \hat{C}_{-k} \hat{C}_{-k}^+ \rangle &= \langle \hat{C}_{-k}^+ [\beta] \hat{C}_{-k} \rangle = F_{21} \langle \hat{C}_k \hat{C}_{-k} \rangle + F_{22} \langle \hat{C}_{-k}^+ \hat{C}_{-k} \rangle. \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

т.е. K -матрица опять, как и в схеме Валатина, оказывается бесследной.

Таким образом, для полного завершения плана проведения точного самосогласования осталось найти вид лишь элемента K_{21} искомой K -матрицы.

Проще всего это сделать, если ввести N -матрицу

$$N_{11} \equiv \langle [\hat{C}_k, \hat{C}_k^+] \rangle_+ = 1,$$

$$N_{12} \equiv \langle [\hat{C}_k, \hat{D}_k^+] \rangle_+ = n_{-k} = N_{21},$$

$$N_{22} \equiv \langle [\hat{D}_k, \hat{D}_k^+] \rangle_+ = \langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle + \langle \hat{n}_{-k} \sum_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}'} - \hat{n}_{-\mathbf{k}'}) \rangle + n_{-k}$$

и использовать формулу (3.4.12). Это даст

$$K_{21} = K_{12} \langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle + (2K_{11} + K_{12})n_{-k} + \langle \hat{n}_{-k} \sum_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}'} - \hat{n}_{-\mathbf{k}'}) \rangle K_{12}. \quad (3.5.18)$$

Здесь стоит отметить, что если ТЯ (2.1.2) записать для тройки $1 = \hat{C}_k$, $2 = \hat{D}_k^+$, $3 = H$, то можно путем сравнения получившегося результата с (3.5.18) получить любопытное равенство

$$\langle [\hat{n}_{-k}, H]_- \rangle = 0.$$

Если же ТЯ записать для тройки $1 = \hat{C}_{-k}$, $2 = \hat{D}_{-k}^+$, $3 = H$ и полученный результат сравнить с равенством, аналогичным (3.5.18), но полученным для \bar{N} -матрицы, в которой проведена замена $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, то можно получить

$$\langle [\hat{n}_k, H]_- \rangle = 0,$$

которое, впрочем, прямо следует из предыдущего, поскольку (3.5.2) инвариантно относительно $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, если $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$, что предполагается. Последние два равенства ведут к действительности КФ

$$\langle \hat{b}_k^+ \hat{\Delta} \rangle = \langle \hat{\Delta}^+ \hat{b}_k \rangle \equiv \langle \hat{b}_k^+ \hat{\Delta} \rangle^*.$$

Итак, окончательный вид K -матрицы в точно самосогласованной схеме таков:

$$K = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{(3.5.18)} & \frac{V}{N} \\ 0 & -K_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.5.19)$$

Теперь вместо (3.5.9) получается спектр

$$E_{\mathbf{k}} = \left[\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \left(\frac{V}{N} \right)^2 \langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle \right]^{1/2}, \quad (3.5.20)$$

и щелевая КФ вычисляется из двух уравнений

$$\langle \hat{D}_k^+ \hat{C}_k \rangle = \langle \hat{C}_k [\beta] \hat{D}_k^+ \rangle = F_{11} \langle \hat{C}_k \hat{D}_k^+ \rangle + F_{12} \langle \hat{D}_k \hat{D}_k^+ \rangle,$$

$$\langle \hat{D}_k^+ \hat{D}_k \rangle = \langle \hat{D}_k [\beta] \hat{D}_k^+ \rangle = F_{21} \langle \hat{C}_k \hat{D}_k^+ \rangle + F_{22} \langle \hat{D}_k \hat{D}_k^+ \rangle.$$

Она оказывается равной

$$\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle \equiv \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{\Delta}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}}^2 + A_{\mathbf{k}} F_{12} (2 + \text{Sp } F)^{-1}], \quad (3.5.21)$$

$$A_{\mathbf{k}} \equiv \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}} [1 - \sum_{\mathbf{k}'} (\hat{n}_{\mathbf{k}'} - \hat{n}_{-\mathbf{k}'} - 1)] \rangle + \langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle. \quad (3.5.22)$$

Формула (3.5.11) по внешнему виду фактически остается неизменной и здесь:

$$\langle \hat{n}_{\pm \mathbf{k}} \rangle = \frac{1 + F_{11} + n_{\pm \mathbf{k}} F_{12}}{2 + \text{Sp } F} \approx \frac{1 + F_{11}}{2 + \text{Sp } F},$$

но величина E_k берется по (3.5.20). Выражение (3.5.22) можно привести к виду

$$A_{\mathbf{k}} = \langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle + (1 - n) N n_{\mathbf{k}}, \quad (3.5.23)$$

где N — число узлов образца, а n — электронная концентрация

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle) = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}, \quad (3.5.24)$$

физические значения которой для рассматриваемой модели (s-зона) заключены в отрезке $0 \leq n \leq 2$. При получении (3.5.23) использованы КФ

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle &= n_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}} + \frac{F_{12} F_{21}}{(2 + \text{Sp } F)^2} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}, \\ \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}'} \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle &= n_{-\mathbf{k}'} n_{-\mathbf{k}} + (1 - n_{-\mathbf{k}}) n_{-\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}, \\ \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle &= F_{11} (2 + \text{Sp } F)^{-1}. \end{aligned}$$

Вторая формула из (3.5.15) и здесь сохраняется, но теперь $F_{21} \neq F_{12}^*$, поскольку $K_{21} \neq K_{12}^*$, и поэтому эта КФ теперь не равна $|b_k|^2$.

Итак, основное уравнение (3.5.21) для щели теперь имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle [1 - \sum_{\mathbf{k}} F_{12} (2 + \text{Sp } F)^{-1}] &= \\ = \sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}}^2 + (1 - n) N n_{\mathbf{k}} F_{12} (2 + \text{Sp } F)^{-1}]. \end{aligned} \quad (3.5.25)$$

Структура этого уравнения коренным образом отличается от структуры валинского уравнения (3.5.12), которое можно переписать так:

$$\Delta [1 - \sum_{\mathbf{k}} \bar{F}_{12} (2 + \text{Sp } F)^{-1}] = 0, \quad F_{12} = \Delta \bar{F}_{12}. \quad (3.5.26)$$

Действительно, в этом уравнении нельзя прямо положить $\Delta = 0$ с целью вычисления ТП: здесь вначале необходимо выйти влево из окрестности ТП и лишь потом сократить обе части этого уравнения на, теперь уже по предположению, $\Delta \neq 0$ и только после этого получить уравнение для изучения поведения щели в зависимости от температуры, молчаливо предполагая при этом, что оно же годится и в самой окрестности ТП, а потому, наконец, годится это уравнение и для определения даже самой ТП путем формального требования $\Delta = 0$. На то, что это может быть и не так, как раз и указывает отме-

ченная невозможность прямого зануления щели в истинно исходном уравнении для нее, т.е. в уравнении (3.5.26), обе части которого содержат в виде множителя сам этот параметр Δ . Напротив, уравнение (3.5.25) вполне допускает простое зануление щели $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle$ с целью прямого получения самой ТП, поскольку его структура такова, что оно вообще не нуждается в предварительном выходе влево из окрестности ТП. Кроме того, это уравнение естественным образом дает два соотношения для поведения щели в зависимости от температуры: одно для самой окрестности ТП, другое для всего остального интервала температур, левее этой окрестности. Этот факт является следствием интересного аналитического свойства уравнения (3.5.25): его левая часть пропорциональна N^2 , а правая — N . Поэтому слева, но вне окрестности ТП (где $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle \neq 0$) от (3.5.25) остается только левая его часть, а в самой окрестности ТП и вплоть до самой ТП включительно — правая его часть. Левая часть (3.5.25) после сокращения на $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle \neq 0$ приведет к БКШ-зависимости щели $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle$ от температуры. Правая же часть (3.5.25)

$$\sum_{\mathbf{k}} [n_{\mathbf{k}}^2 + (1 - n)Nn_{\mathbf{k}}F_{12}(2 + \text{Sp } F)^{-1}] = 0 \quad (3.5.27)$$

дает новую зависимость щели $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle$ от температуры в окрестности ТП. Эту зависимость можно переписать так:

$$1 = -\frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{2}{n} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{VE_{\mathbf{k}}} \text{th} \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}} \right) + n - 1 \right] \frac{\text{th}(\beta E_{\mathbf{k}}/2)}{2E_{\mathbf{k}}}. \quad (3.5.28)$$

Отсюда прямым занулением щели (поскольку оно как раз и справедливо в самой окрестности ТП) получается уравнение для определения и самой ТП

$$1 = -\frac{\bar{V}}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \text{th} \left(\frac{1}{2} \beta \epsilon_{\mathbf{k}} \right), \quad \bar{V} \equiv 2V \frac{n-1}{n+1}, \quad (3.5.29)$$

которое по внешнему виду совпадает с уравнением (3.5.14) схемы Валатина. Однако в уравнении (3.5.29) потенциал другой.

Левая часть (3.5.25), определяющая зависимость $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle(T)$ вне окрестности ТП, имеет решения только при $V < 0$ и $0 \leq n \leq 2$. Уравнение же (3.5.29), справедливое только внутри окрестности ТП, при $V < 0$ имеет решения для $1 < n \leq 2$; при $n \leq 1$ в этом случае решений нет, но для $n < 1$ и $V > 0$ решение есть, хотя физический смысл этого случая не ясен.

Поскольку уравнение (3.5.14) имеет решение [49]

$$t_c = 1,44W \exp \frac{1}{\rho V}, \quad (3.5.30)$$

где W — полуширина s-зоны, то решение (3.5.29) представится так ($|V| \equiv U$):

$$T_c = 1,44W \exp \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\rho U} \frac{n+1}{n-1} \right) = t_c \exp \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\rho U} \frac{n-3}{n-1} \right), \quad n > 1. \quad (3.5.31)$$

Зависимость ТП от π показана на рис. 3. Для случая $n = 1$ все же имеется вполне определенное значение ТП — нулевое при любом знаке V . Это широко известный результат для s-зоны в моделях Хаббарда, Гейзенберга [51], но для задачи БКШ он, по-видимому, получен впервые. Из графика зависимости

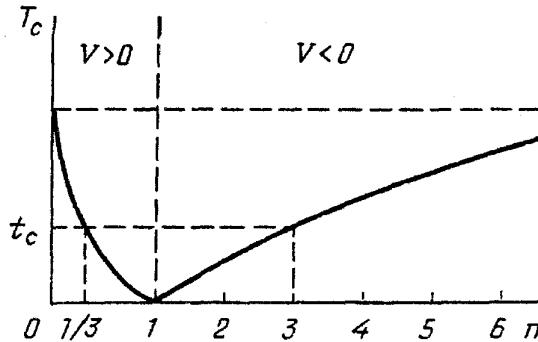


Рис. 3

невырожденную модель Хаббарда

$$H = \sum_{j,j'} t_{jj'} \hat{C}_{j\sigma}^+ \hat{C}_{j'\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{j,\sigma} \hat{n}_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \quad (3.5.32)$$

(она получается из (3.4.1), если индекс v принимает всего два значения), причем бытует мнение, что она представляет собой координатную запись модели БКШ (3.5.2). Это не так. Эти модели соотносятся точно так же, как и разложения Бриллюэна—Вигнера и Рэлея—Шредингера: при решении задачи (3.5.2), например, по обычной схеме теории возмущений вклады от возмущения исчезнут во всех порядках в термодинамическом пределе, тогда как в задаче (3.5.32) они останутся конечными. Действительно, гамильтониан Хаббарда (3.5.32) в квазимпульсном представлении имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} t_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{Q}, \sigma} \hat{C}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+ \hat{C}_{\mathbf{k}_2\sigma} \hat{C}_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}_1-\sigma}^+ \hat{C}_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}_2-\sigma}.$$

Отсюда можно извлечь гамильтониан БКШ (3.5.2), но нужно учесть только одно, нулевое, значение квазимпульса передачи $\mathbf{Q} = 0$:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} t_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}_2}.$$

Обратный переход здесь в координатное представление дает (3.5.32), но с множителем $(1/N)$ перед одноузельной частью (при таком переходе надо помнить, что в модели Хаббарда принято $U_{jj'} = U\delta_{jj'}$).

Здесь представляется уместным сделать такое замечание. В настоящее время фактически еще не предложен математически корректный способ описания перехода из "нормального" состояния в "ненормальное" (магнитное, сверхпроводящее, сверхтекущее) состояние. Поэтому, исходя из решения задачи, поставленной для "нормального" состояния, пока не удается получить решение, которое описывало бы переход в "ненормальное" состояние и само это состояние. Тогда пока остается нужду попытаться превратить в добродетель, обратив направленность своего изучения. Гамильтониан БКШ как раз это и имеет в виду — он исходит из "ненормального" состояния. Поэтому анализ его решения следует проводить, начав с нижайших температур, и далее двигаться направо, к более высоким. Только такое рассмотрение и допускает уравнение (3.5.26) оригинальной теории БКШ. Поэтому в этой теории в качестве ТП может выступать только температура *исчезновения щели*, т.е. эта температура описывает переход только из "ненормального" состояния в "нор-

ТП от n видно, что высокие ТП могут быть связаны со случаями $n > 3$, что возможно, например, если s -состояния заменить на $3d$ -состояния, при этом предполагается, что структура формулы (3.5.31) в основном сохранится, как это фактически имеет место в недиагональном приближении ХФ для невырожденной ($0 \leq n \leq 2$) и вырожденной ($0 \leq n \leq 10$) моделяй Хаббарда [49]. Кстати, в связи с ВТСП в последнее время стали широко привлекать

мальное". Отличительное же свойство (3.5.25) состоит в том, что оно может "работать" в обе стороны, т.е. оно годится и для описания собственно перехода из "нормального" состояния в "ненормальное", хотя само это уравнение получено из постановки задачи для "ненормального" состояния. Поэтому оно позволяет ввести еще и понятие температуры *появления щели*, и она в данном случае совпадает с температурой ее исчезновения, поскольку при движении справа налево в уравнении (3.5.25) сперва существует только его правая часть (так как здесь по предположению $\langle \hat{\Delta}^+ \hat{\Delta} \rangle \equiv 0$). Движение же справа налево в уравнении (3.5.26) вообще невозможно, так как оно при этом имеет вид $0 = 0$. В принципе, температуры $T_c^<$ и $T_c^>$ могли бы и не совпадать, что могло бы тогда означать возможность существования переохлажденного "нормального" Е перегретого "ненормального" состояний, а истинная T_c лежала бы где-то между ними.

Наконец, о самом результате рассмотрения задачи БКШ точно самосогласованным методом. Этот результат, конечно, проще всего не принять уже хотя бы потому, что он отличается от оригинального результата БКШ, который общепринято считать даже точным (в термодинамическом пределе). Но в данном случае, по мнению автора, невозможно столь просто отмахнуться от него лишь на этом основании, по крайней мере, по двумя причинам. Во-первых, в этом подходе нет каких-либо неоднозначностей и (или) волевых действий — проводится некая новая, от начала и до конца математически точная процедура. Во-вторых, задачи статистической физики могут допускать и несколько точных решений, и наиболее простой и известный такой пример — это задача Хартри—Фока. Поэтому автору представляется не только правомочным, но даже и целесообразным опубликование такого результата.

Приложение

1. В теоретических расчетах свойств систем многих тел часто приходится проводить в качестве промежуточного этапа преобразование Фурье по времени, поскольку оно обычно приводит к алгебраическим уравнениям вида

$$\Phi(E)\varphi(E) = F(E) \quad (\text{П.1})$$

относительно неизвестной функции $\Psi(E)$. Формальное решение таких уравнений находится просто:

$$\Phi(E) = \frac{F(E)}{\varphi(E)}. \quad (\text{П.2})$$

Однако это решение не является, вообще говоря, полным, поскольку уравнение (П.1) будет столь же хорошо удовлетворяться и решением другого вида

$$F(E) = \frac{F}{\varphi} + A(E)\delta(\varphi(E)), \quad (\text{П.3})$$

если учесть тождество

$$\varphi(E)(\delta\varphi(E)) \equiv 0, \quad (\text{П.4})$$

имеющее место в предположении существования нулей у $\varphi(E)$ при некоторых значениях $E = E_j$, $j = 1, 2, \dots$. Таким образом, наиболее полным решением уравнения (П.1) следует считать решение вида (П.3) и именно им всегда

нужно пользоваться. В этом решении фигурирует некоторая неизвестная функция $A(E)$, конкретный вид ее обычно можно установить на основании аналитических свойств функции $\Phi(E)$ в плоскости комплексных энергий. Функции энергетического представления обычно являются промежуточными, и они участвуют в получении окончательных результатов под знаком интеграла. Кстати, соотношения, содержащие дельта-функцию, т.е. типа (П.3), обязательно предполагают последующее интегрирование по независимой переменной ее аргумента.

Интегрирование соотношений типа (П.3) наиболее удобно проводить в плоскости комплексных энергий, используя теорию вычетов. Поскольку в практических расчетах $\varphi(E)$ чаще всего имеет только простые нули, то в этом случае, как хорошо известно [25], дельта-функцию можно конкретизировать так:

$$\delta(\varphi) = \sum_{j=1}^n \delta(E - E_j) |\varphi'(E_j)^{-1}|^{-1}, \quad \varphi(E_j) \equiv \varphi_j = 0. \quad (\text{П.5})$$

Учитывая это выражение и аналитически продолжая в плоскость комплексных энергий все функции соотношения (П.3), для чего достаточно всюду сделать замену $E \rightarrow z$ (поскольку функция от комплексной переменной $z = x + iy$ является аналитической, если она зависит от x и y только в такой комбинации, т.е. если она является функцией лишь одной независимой переменной z), можно приступить к его интегрированию по теории вычетов. Особенности подынтегральных функций при этом будут складываться из нулей $\varphi(E_j)$, расположенных на оси действительных энергий в точках $E = E_j$ с вычетами F_j/φ'_j , и особенностей дельта-функции $\delta(E - E_j)$, которые расположены в плоскости комплексных энергий в точках $z_j = E_j \pm ie$ (см. формулу (1.1.12) для дельта-функции). Теперь обычно делаются еще два предположения, которые почти всегда оправдываются на практике. Во-первых, если и есть дополнительные к уже отмеченным выше особенности у функций F/φ и $A\delta(\varphi)$ в целом, то они полюсного характера. Во-вторых, фактически всегда линию интегрирования вдоль действительных энергий можно замкнуть либо в верхней, либо в нижней полуплоскости комплексных энергий, т.е. так, чтобы вклад от этих полуокружностей исчезал бы при $|z| \rightarrow \infty$. Сами контуры, используемые при интегрировании, показаны на рис. 4.

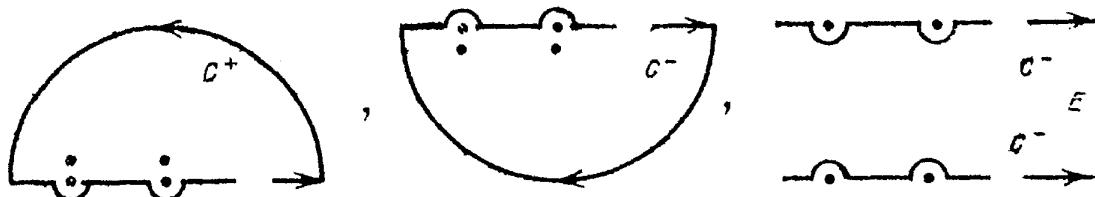


Рис. 4

Итак, интеграл от соотношения (П.3) равен

$$\begin{aligned} \int_{C^\pm} \Phi(z) dz &= \int_{C^\pm} \left(\frac{F(z)}{\varphi(z)} + A(z)\delta(\varphi(z)) \right) dz = \\ &= \pm 2\pi i \sum_j \left(\frac{F_j}{\varphi'_j} \pm \frac{1}{2\pi i} \frac{A_j}{|\varphi'_j|} \right) = \sum_j \frac{1}{\varphi'_j} \left(\pm 2\pi i F_j + \frac{\varphi'_j}{|\varphi'_j|} A_j \right). \quad (\text{П.6}) \end{aligned}$$

С другой стороны, беря интегралы лишь вдоль E -оси $\equiv \bar{C}^\pm$, можно получить

$$\int_{\bar{C}^\pm} \frac{F(z)}{\varphi(z)} dz = \text{V.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(E)}{\varphi(E)} dE \pm \pi i \sum_j \frac{F_j}{\varphi'_j}, \quad (\text{П.7})$$

и этот результат должен быть равен предыдущему, если вклад по большим дугам исчезает. Такое приравнивание дает значение интеграла вдоль E -оси в смысле главного значения по Коши

$$\text{V.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{F(E)}{\varphi(E)} \right] dE = \sum_j \frac{1}{\varphi'_j} \left(\pm \pi i F_j + \frac{\varphi'_j}{|\varphi'_j|} A_j \right). \quad (\text{П.8})$$

В заключение этого пункта приложения представляется полезным обратить внимание на такой факт. Для производной от дельта-функции в литературе встречаются (порознь) два выражения

$$x\delta'(x) = -\delta(x), \quad \frac{\delta(x)}{x} = -\delta'(x), \quad (\text{П.9})$$

которые вне связи с предыдущим материалом этого приложения могли бы показаться идентичными. Однако если иметь в виду тождество (П.4), то из первой формулы (П.9) следует не вторая, а более общая

$$\delta'(x) = -\frac{\delta(x)}{x} + \text{const} \cdot \delta(x) \quad (\text{П.10})$$

из-за тождества $x\delta(x) \equiv 0$. Поэтому важно выяснить, какая из двух формул (П.9) является исходной; если таковой является первая, то вторая формула неверна, если же вторая, то тогда верна и первая. Прямое дифференцирование общепринятого выражения [25]

$$\delta(x) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (\text{П.11})$$

неожиданным образом приводит к двум разным выражениям

$$\begin{aligned} \delta'(x) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{2x\epsilon}{(x^2 + \epsilon^2)^2} = \\ &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left\{ \frac{\frac{2x\epsilon}{x^4 + 2x^2\epsilon^2}}{\frac{2x\epsilon}{(x^2 + 2ix\epsilon)(x^2 - 2ix\epsilon)}} \right\} = -\frac{1}{x} \times \begin{cases} \sqrt{2}\delta(x), \\ \delta(x), \end{cases} \end{aligned}$$

где в первом случае отброшен член ϵ^4 , а во втором в каждом из сомножителей — член ϵ^2 . Поскольку из этого результата однозначно следует формула

$$\begin{aligned} x\delta'(x) &= -\sqrt{2} \delta(x), \\ &= -\delta(x), \end{aligned} \quad (\text{П.12})$$

то легко проверить, какая из этих двух формул соответствует основному смыслу соотношений, содержащих дельта-функцию и ее производные: интеграл от обеих частей любого такого соотношения должен давать один и тот же результат. Этому условию удовлетворяет вторая формула (П.12). Итак, имен-

но вторая формула из (П.2) является исходной, и поэтому (П.10) следует отбросить. Наконец, стоит еще отметить, что из двух формул (П.9) практически большую ценность представляет вторая, так как она позволяет трудно интегрируемую функцию $\delta(x)/x$ заменить на легко интегрируемую (по частям) функцию $\delta'(x)$, а формулы (П.9) правильнее записать так:

$$\frac{\delta(x)}{x} = -\delta'(x) \Rightarrow x\delta'(x) = -\delta(x). \quad (\text{П.13})$$

2. Оператор $\hat{B} \equiv f(\hat{A})$ считается функцией оператора \hat{A} , если их собственные значения связаны той же функциональной зависимостью, что и сами операторы, т.е.

$$\hat{B}\Psi_n = B_n\Psi_n = f(A_n)\Psi_n, \quad (\text{П.14})$$

где $\hat{\Psi}_n$ — общая собственная функция этих операторов. При этом функция $f(\hat{A})$ от операторного аргумента \hat{A} имеет смысл (определен) лишь для тех собственных значений A_n оператора \hat{A} , для которых имеет смысл (определен) функция $f(A_n)$ от неоператорного аргумента A_n .

Производная оператора по неоператорному аргументу, от которого он явно зависит, определяется обычным образом:

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial p} \equiv \lim_{p' \rightarrow p} \frac{\hat{A}(p') - \hat{A}(p)}{p' - p}. \quad (\text{П.15})$$

Согласно этому определению произведение операторов дифференцируется по тому же правилу, по которому дифференцируется произведение неоператорных величин, но с сохранением исходного порядка расположения этих операторов в их произведении при его дифференцировании.

В квантовой теоретической физике далеко не все функциональные зависимости от операторов (даже из формально допустимых) встречаются одинаково часто. Наиболее важной и часто встречающейся является экспоненциальная зависимость от оператора. Например, именно так строится статистический оператор — основной оператор квантовой статистической физики. Поэтому имеет прямой смысл получить формулу для производной

$$\frac{\partial f(\hat{A}(\lambda))}{\partial \lambda} = \frac{\partial \hat{B}(\lambda)}{\partial \lambda} \quad (\text{П.16})$$

от такого оператора по параметру, когда зависимость $f(\hat{A})$ является экспоненциальной:

$$\hat{B}(\lambda) \equiv \exp(\beta \hat{A}(\lambda)). \quad (\text{П.17})$$

В литературе именно для этого случая (и для справочных целей) приводятся малоудобные и несимметричные выражения в виде "левой" и "правой" производной (см. с. 329 в книге [52]).

Можно прямым вычислением убедиться в справедливости вспомогательной формулы

$$\frac{\partial \hat{A}^n(\lambda)}{\partial \lambda} = \sum_{m=1}^n \hat{A}^{m-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} \hat{A}^{n-m}, \quad (\text{П.18})$$

которая дает правило дифференцирования степенной функции от операторного аргумента, который, в свою очередь, является функцией от неоператор-

ногого аргумента λ . Теперь, используя (П.18), уже легко получить исходную формулу дифференцирования экспоненциальной функции

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \exp(\beta \hat{A}(\lambda)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \sum_{m=1}^n \hat{A}^{m-1} \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} \hat{A}^{n-m}. \quad (\text{П.19})$$

Если $\frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda}$ перестановочна с \hat{A} , то отсюда прямо следует обычная формула

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \exp(\beta \hat{A}) = \beta e^{\beta \hat{A}} \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} = \beta \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} e^{\beta \hat{A}}. \quad (\text{П.20})$$

В квантовой статистике очень часто приходится дифференцировать не сам статистический оператор, а лишь его след. Поскольку же значение следа не изменяется при циклических перестановках в произведении операторов, заключенных под его знаком, то в этом случае можно не обращать внимания на, вообще говоря, неперестановочность оператора и его производной и записывать производную (П.19) сразу в виде (П.20). В качестве важного в приложениях примера можно получить аналог теоремы Фейнмана для термодинамического потенциала. В квантовой механике теорема Фейнмана имеет вид [53]

$$\frac{\partial U}{\partial \lambda} \equiv \frac{\partial}{\partial \lambda} \int \Psi^* H \Psi d\mu = \int \Psi^* \frac{\partial H}{\partial \lambda} \Psi d\mu. \quad (\text{П.21})$$

Термодинамический потенциал есть [52]

$$\beta \Omega = -\ln \text{Sp}\{\exp[-\beta(H + \mu \hat{N})]\}, \quad (\text{П.22})$$

и тогда в квантовой статистике теорема Фейнмана примет вид

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \rangle, \quad (\text{П.23})$$

где $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение.

ПРИМЕЧАНИЕ

Φ Широко распространенный перевод фамилии Roth как Рот сильно искажает ее английское произношение. Поэтому подобные фамилии разумнее вообще не коверкать русским переводом (транслитерацией).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В.// ДАН СССР. 1959. Т. 126. С. 53.
2. Зубарев Д.Н.//УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
3. Hubbard J.// Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1963. V. 276. P. 238.
4. Hubbard J.//Ibidem. 1964. V. 277. P. 237.
5. Hubbard J.// Ibidem. V. 281. P. 401.
6. Stevens W.H., Toombs G.A.// Proc. Phys. Soc. 1965. V. 85. P. 1307.
7. Fernandez I.F., Gerseh H.A.// Ibidem. 1967. V. 91. P. 505.
8. Callen H., Swendsen R.H., Jahir-Kheli R.A.// Phys. Lett. Ser. A. 1967. V. 25. P. 505.
9. Ramos I.G., Gomes A.A.// Nuovo Cimento. Ser. A. 1971. V. 3. P. 441.
10. Сарры М.Ф.// Изв. вузов СССР. Сер. "Физика". 1980. № 7. С. 80.
- [11] Hewson A.C., ter Haar D.// Phys. Lett 1963. V. 6. P. 136.
12. Dembinski S.T.//Can J. Phys. 1968. V. 46. P. 1021.
13. Dembinski S.T.//Ibidem. P. 1502.
14. Roth L.M.// Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. P. 1431.
15. Sawada K.// Prog. Theor. Phys. 1970. V. 43. P. 1199.
16. Young R.A.// Phys. Rev. 1969. V. 184. P. 601.
17. Сарры М.Ф.// Изв вузов СССР. Сер. "физика". 1983. № 12. С. 114.
18. Сарры М.Ф.// Вопр. атом, науки и техники. Сер. "Теоретическая и прикладная физика". 1986. Вып. 1. С. 13.

19. *Сарпы М.Ф.*// Ibidem. 1987. Вып. 1. С. 10.
20. *Сарпы М.Ф.*// Ibidem. Вып. 2. С. 57.
- [21] *Сарпы М.Ф.*// Ibidem. 1988. Вып. 2. С. 28.
22. *Сарпы М.Ф.*// Ibidem. 1989. Вып. 1. С. 40.
23. *Сарпы М.Ф.*// ТМФ. 1977. Т. 31. № 3. С. 365.
24. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. II. — М.: Наука, 1966.
25. *Маделунг Э.* Математический аппарат физики. — М.: Физматгиз, 1961.
26. *Lebowitz J.L.*// Statistical Mechanics: New Concepts, New Problems, New Applications. — Univ. of Chicago Press, 1972.
27. *Норман Г.Э., Полок Л.С.*// ДАН СССР. 1982. Т. 263. С. 337.
28. *Сарпы М.Ф.*// Изв. вузов СССР. Сер. "Физика". 1986. № 5. С. ПО.
29. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. — М.: Наука, 1971.
30. *Пайнс Д.* Элементарные возбуждения в твердых телах. — М.: Мир, 1965.
31. *Шриффер Д.* Теория сверхпроводимости. — М.: Наука, 1970.
32. *Румер Ю.Б., Фет А.И.* Теория унитарной симметрии. — М.: Наука, 1970.
33. *Ли Цзун-дао.* Математические методы в физике. — М.: Мир, 1965.
34. *Киттель Ч.* Квантовая теория твердых тел. — М.: Наука, 1967.
35. *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. — М.: Наука, 1975.
36. *Hohenberg P., Kohn W.*// Phys. Rev. Ser. B. 1964. V. 136. P. 864.
37. *Mermin N.D.*// Ibidem. Ser. A. 1965. V. 137. P. 1441.
38. *Ланкастер П.* Теория матриц. — М.: Наука, 1982.
39. *Гантмахер Ф.Р.* Теория матриц. — М.: Наука, 1988.
40. *Хорн Р., Джонсон Ч.* Матричный анализ. — М.: Мир, 1989.
41. *Roth L.*// Phys. Rev. 1969. V. 184. P. 451.
42. *Фейнман Р.* Статистическая механика. — М.: Мир, 1975.
43. *Сарпы М.Ф.*// ТМФ. 1979. Т. 41, №. 2. С. 285.
44. *Мак-Вини Р., Сатклиф Б.* Квантовая механика молекул. — М.: Мир, 1972.
45. *Кашеев В.Н.* Термодинамика ферромагнетики вблизи точки Кюри. — Рига: Зинатне, 1966.
46. *Сарпы М.Ф.*// Изв. вузов СССР. Сер. "Физика". 1980. № 12. С. 62.
47. *Гинзбург В.Л., Файн В.М.*// ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1323.
48. *Сарпы М.Ф.* Кандидатская диссертация. — ВНИИЭФ, 1973.
49. *Сарпы М.Ф.*// [18]. — 1989. Вып. 4. С. 30.
50. *Сарпы М.Ф.*// ФТГ. 1991.
- [51] *Изюмов Ю.А., Плакида Н.М., Скрябин Ю.Н.*// УФН. 1989. Т. 159. С. 621.
52. *Киржнци Д.А.* Полевые методы теории многих частиц. — М.: Госатомиздат, 1963.
53. *Feynman R.P.*// Phys. Rev. 1939. V. 56. P. 340.
54. *Ландау Л.Д., Лишиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. I. — М.: Наука, 1976.

Статья поступила 18.04.91 г.