Март 1993 г. Том 163, № 3

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

О ВЫЧИСЛЕНИИ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ В КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Д.Н. Зубарев, *Ю.Г. Рудой*

(Математический институт РАН, Научное издательство «Большая Российская Энциклопедия», Москва)

(Статья поступила 2.10.92 г., после доработки 16.12.92 г.)

1. Вычисление зависящих от времени (динамических) или равновесных (статических) корреляционных функций является одной из важнейших задач квантовой статистической физики. Для ее решения существует ряд методов, из которых наиболее простым и удобным представляется метод двухвременных запаздывающих и опережающих функций Грина, введенных в 1959 г. Боголюбовым и Тябликовым [1] (см. также обзор [2]). С помощью этого метода единым образом решаются многие задачи как равновесной, так и неравновесной статистической механики [3—7], в том числе вычисление термодинамических характеристик системы, кинетических коэффициентов, а также обобщенных восприимчивостей.

Основная трудность, возникающая при использовании метода функций Грина, состоит в необходимости выбора способа обрыва (расцепления) бесконечной цепочки уравнений движения для все более усложняющихся функций Грина. Подобная процедура, разумеется, неоднозначна за исключением тех случаев, когда в задаче имеется явный малый параметр (например, в гидродинамической или высокочастотной области), причем процедура расцепления вполне эквивалентна процедуре отбора существенных диаграмм при использовании метода диаграммных разложений [8].

Значительный интерес в статистической физике представляют задачи, в которых система испытывает фазовый переход (например, ферромагнетик в моделях Изинга или Гейзенберга). При построении решения во всей области температур какой-либо единый малый параметр вообще отсутствует, и расцепление проводится эвристическим путем (таково, например, приближение Тябликова [1—4] в задаче о ферромагнетике Гейзенберга). Оправданием подобного расцепления или его многочисленных модификаций (см., например, Дополнение к [4] и [6]) может служить лишь получение разумных аппроксимаций во всем диапазоне температур и полей, достаточно точное выполнение правил сумм и, возможно, других дополнительных физических условий. К их числу относится, например, наличие бесщелевых голдстоуновских мод для вырожденных систем, конечность значения критической температуры для систем с фазовым переходом, выполнение требований симметрии для корреляционных функций и т.п.

К сожалению, какие-либо способы априорного выбора конкретного вида расцепления, равно как и его математически строгое обоснование (или по крайней мере, аккуратная оценка его точности) в настоящее время отсутствуют. Тем не менее, существует ряд достаточно разработанных приближенных методов, позволяющих последовательно и однозначно учитывать вклад высших приближений при вычислении функций Грина. Во всех этих методах необходимо использовать обрыв на том или ином шаге уже не исходной, как в ранних работах (см. [1, 2]), а соответствующим образом перестроенной цепочки уравнений для функций Грина. С этой целью в настоящее время успешно применяются различные варианты операций проектирования, позволяющие перестроить цепочку уравнений для функций Грина таким образом, что каждое уравнение цепочки на последующем шаге описывает эволюцию в пространстве, ортогональном динамическим переменным, входящим в предыдущие уравнения. При этом уравнения перестроенной цепочки связывают функции Грина, неприводимые относительно предыдущих функций более низкого порядка. Это существенно упрощает построение приближений для двухвременных запаздывающих и опережающих функций Грина и практически заменяет диаграммный метод, ус-

© Д.Н. Зубарев, Ю.Г. Рудой 1993

пешно применяемый, например, для причинных функций Грина при $T = 0$ или для мацубаровских функций Грина при $T \neq 0$ (см. [8]).

2. Одним из наиболее часто применяемых методов, основанных на введении проекционных операторов, является метод Мори [9, 10], который непосредственно для двухвременных функций Грина применялся в работах [11, 12]. Характерной особенностью этих методов является усложняющаяся с каждым шагом временная зависимость корреляционных функций через спроектированные, или приведенные, операторы эволюции. Однако в рамках метода Мори такая зависимость остается нерасшифрованной явно, что приводит к необходимости дополнительных аппроксимаций. В работах Церковникова [13—15] был развит альтернативный метод построения цепочек уравнений для функций Грина, основанный на дифференцировании по двум временам, в целом эквивалентный методу Мори, но раскрывающий в явном виде действие приведенных операторов эволюции. Метод Церковникова развит в двух полностью эквивалентных друг другу вариантах: для энергетического E-представления [13,14] и для временного t - представления [15] (примеры применения см. в [17]); подробности вывода и примеры применения практически более удобного E-представления можно найти соответственно в [14] и [16].

Основной результат метода проектирования в формулировке Церковникова для E-представления состоит в следующем. Пусть физическая система описывается гамильтонианом H и так называемыми базисными операторами A_l и B_l (каждый из которых для конкретной физической задачи может быть представлен строкой или столбцом). Для большинства систем, рассматриваемых в квантовой статистической механике, справедлива бесконечная система операторных уравнений движения ($\hbar = 1$), определяющая последовательность операторов возрастающей сложности A_n и B_n ($n = 1, 2,...$)

$$\begin{aligned} i\dot{A}_n &= [A_n, \mathscr{H}]_- = \omega(n, n)A_n + U(n, n+1)A_{n+1}, \\ -i\dot{B}_n^+ &= [\mathscr{H}, B_n]_- = B_n^+ v^+(n, n) + \\ &\quad + B_{n+1}^+ V^+(n+1, n). \end{aligned} \tag{1}$$

Матрица $\omega(n, n)$ (и, соответственно, $v^+(n, n)$) связывает оператор $i\dot{A}_n$ с оператором A_n (соответственно, $-i\dot{B}_n^+$ с B_n^+ и описывает «свободную эволюцию» системы; матрица $U(n, n+1)$ (соответственно, $V^+(n+1, n)$), связывающая оператор $i\dot{A}_n$ с оператором A_{n+1} (соответственно, $-i\dot{B}_n^+$ с оператором B_{n+1}^+), учитывает влияние «взаимодействия».

Основным объектом изучения в квантовой статистической механике являются временные корреляционные функции $\langle A(t)|B^+(t')\rangle$ или тесно связанные с ними функции Грина

$$\langle\langle A(t)|B^+(t')\rangle\rangle = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\langle A(t)|B^+(t')\rangle$$

(см., например, [1—8]), где $\langle ...\rangle$ означает усреднение по каноническому (или большому каноническому) ансамблю Гиббса, $\theta(t-t')=1$ при $t>t'$ $\theta(t-t')=0$ при $t<t'$, а под $\langle A(t)|B^+(t')\rangle$ понимается одна из билинейных комбинаций, построенных на операторах $A(t)$, $B^+(t')$:

$$\begin{aligned} \langle A(t)|B^+(t')\rangle^K &= \frac{i}{\hbar}\int_t^\infty \langle [A(t_1), B^+(t')]_-\rangle dt_1, \\ \langle A(t)|B^+(t')\rangle^T &= \int_0^\beta \langle A(t)B^+(t' + i\hbar\tau)\rangle d\tau, \\ \langle A(t)|B^+(t')\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle [A(t), B^+(t')]_\eta\rangle, \\ \langle A(t)|B^+(t')\rangle &= \langle A(t)B^+(t')\rangle \text{ или } \langle B^+(t')A(t)\rangle. \end{aligned} \tag{2}$$

Соответствующими функциями Грина для различных способов выбора $\langle A(t)|B^+(t')\rangle$ в (2) служат соответственно функция релаксации Кубо; скалярное произведение, определяющее изотермическую восприимчивость при $t' = t$, запаздывающая или опережающая (анти) коммутаторная ($\eta = \pm 1$) функция Грина; причинная функция Грина. Уравнения движения для всех этих функций Грина основаны на (1) и имеют одинаковый вид (различие состоит лишь в форме начального условия $\langle A|B^+\rangle$. Поскольку в равновесном случае все средние величины $\langle A(t)|B^+(t')\rangle$ зависят лишь от разности времен $t - t'$, удобно перейти в E-представление и получить согласно [13] уравнение Дайсона для фурье-образа $\langle\langle A_1|B_1^+\rangle\rangle_E$ функции Грина, построенной на базисных операторах A_1 й, B_1^+ (обобщение на случай функций Грина $\langle\langle A_n|B_n^+\rangle\rangle_E$ при $n > 1$ см. в [14]):

$$\begin{aligned} &(E - \omega(1,1) - U(1,2)\langle A_2|B_1^+\rangle\langle A_1|B_1^+\rangle^{-1} - \\ &\quad - U(1,2)\langle\langle A_2|B_2^+\rangle\rangle_E^{(1)} V^+(2,1)\langle A_1|B_1^+\rangle^{-1}) \times \\ &\quad \times \langle\langle A_1|B_1^+\rangle\rangle_E = \langle A_1|B_1^+\rangle. \end{aligned} \tag{3}$$

Массовый оператор в левой части (3) выражается через неприводимую часть (по отношению к исходной функции Грина) $\langle\langle A_n|B_n^+\rangle\rangle_E$, имеющую вид:

$$\begin{aligned} \langle\langle A|B^+\rangle\rangle_E^{(1)} &\equiv \langle\langle A|B^+\rangle\rangle_E - \\ &- \langle\langle A|B_1^+\rangle\rangle_E \langle\langle A_1|B_1^+\rangle\rangle_E^{-1} \langle\langle A_1|B^+\rangle\rangle_E; \end{aligned} \tag{4}$$

очевидно, любой оператор A или B^+, линейно выражающийся через операторы A_1 и B_1^+ соответственно, не дает вклада в (4), т.е.

$$\langle\langle A_1|B^+\rangle\rangle_E^{(1)} = \langle\langle A|B_1^+\rangle\rangle_E^{(1)} = 0 \tag{5}$$

при любых A и B^+. Таким образом, соотношение (4)

фактически осуществляет проектирование или, что то же, выделение неприводимой части по базисным операторам A_1, B_1^+, что равносильно иной формулировке утверждения о переходе в подпространство, ортогональное исходным базисным операторам.

3. Из уравнений (3) — (5) очевидно, что максимально возможным вкладом в массовый оператор в случае линеаризованного по операторам A_1 или B_1^+ уравнения движения (2) (независимо от конкретного способа подобной линеаризации и выбора коэффициентов в нем) является так называемое обобщенное приближение Хартри — Фока (ОПХФ), имеющее согласно (3) вид

$$\langle\langle A_1|B_1^+\rangle\rangle_E \approx \langle A_1|B_1^+\rangle[E-(\omega(1,1)+U(1,2)\times \times\langle A_2|B_1^+\rangle\langle A_1|B_1^+\rangle^{-1})]^{-1}. \quad (6)$$

Иными словами, из уравнений (3) — (5) следует, что любая попытка выхода из рамки ОПХФ с помощью линеаризованных уравнений движения для базисных операторов A_1, B_1^+ даст заведомо нулевой результат.

Построение приближений, отличных от ОПХФ, возможно лишь на основе построения каких-либо нетривиальных аппроксимаций для функции Грина $\left\langle\left\langle A_2\middle|B_2^+\right\rangle\right\rangle_E^{(1)}$, определяющей массовый оператор и имеющей, очевидно, более высокий порядок, чем исходная функция $\left\langle\left\langle A_1\middle|B_1^+\right\rangle\right\rangle_E$. Последовательная процедура построения соответствующей бесконечной цепочки уравнений для неприводимых функций Грина произвольных порядков с возрастающей степенью неприводимости изложена в [13, 14], а примеры ее применения — в [16].

Заметим, что приближенные выражения для функции Грина $\left\langle\left\langle A_1\middle|B_1^+\right\rangle\right\rangle_E$ (или, соответственно, для спектра элементарных возбуждений) вида (6) в скалярном случае ранее предлагались многими авторами, в том числе Л. Рот [18], Плакидой [19], Калашниковым и Фрадкиным [20], Тахир — Кели и Джареттом [21], а также Уоллесом [22]. Авторы [18 — 22] использовали различные физические подходы: в [18, 19] применялся метод функций Грина, в [20, 21] — метод спектральной интенсивности с точным учетом ее низших моментов, в [22] проводилась эффективная линеаризация уравнений движения вида (2). Общий итог этих и ряда других работ состоит в том, что выражения ОПХФ вида (6) являются максимально возможными в рамках идеи об «одночастичной» линеаризации без расширения исходного базиса операторов. В них полностью учтено влияние среднего поля системы на эффективный спектр свободных (без учета взаимодействий друг с другом и затухания) квазичастиц, моделирующих данную систему.

Как известно, обычное приближение среднего поля предполагает проведение процедуры линеаризации уже на стадии исходного гамильтониана, а не первого уравнения движения, как в ОПХФ.

Позднее Савада [23] подтвердил высказанное в [24] предположение о том, что спектр ОПХФ является при этом наилучшим в вариационном смысле и обеспечивает минимум функционала свободной энергии в данном классе решений (применительно к ферромагнетику Гейзенберга это показано в работе [25]; следует, однако, обратить внимание на содержащуюся в работах [26, 27] дискуссию о применимости «точного» ОПХФ вблизи точки Кюри).

4. В связи с изложенными выше результатами вызывает недоумение появившаяся недавно в журнале УФН работа Сарры [28], в которой, на наш взгляд, имеются серьезные недостатки как методического, так и результативного характера. Для вычисления корреляционных функций в [28] формулируется так называемый (по терминологии автора) »прямой алгебраический метод» (ПАМ), якобы свободный от каких-либо неоднозначностей и «волевых решений», допускающий «точное самосогласование» и «нелинейную линеаризацию» исходных уравнений движения, да и к тому же, по словам автора, обладающий «от начала до конца» математической строгостью.

Возможно, этой работе, изобилующей произвольными или ошибочными утверждениями, вообще не следовало бы придавать серьезного значения, оставив ее на совести ее автора и рецензентов. Однако работа [28] опубликована в уважаемом нами журнале и содержит резкую, но совершенно бездоказательную критику метода функций Грина, о развитии и современном состоянии которого автор, очевидно, не имеет адекватного представления.

В частности, например, за отсутствие в этом методе «вразумительного» обоснования метода расцеплений, хотя все подобные методы могут быть априорно обоснованы лишь в контексте теории возмущений при наличии явного малого параметра, а при его отсутствии — лишь по самосогласованности результатов.

В связи с этим мы считаем полезным предупредить возможные недоразумения у читателей, лишь начинающих знакомство с методом функций Грина, поскольку за внешним наукообразием, обилием формул и многословием они могут не сразу разобраться в принципиальных заблуждениях автора работы [28].

Прежде всего «метод ПАМ» и его результаты по существу не являются оригинальными, а полностью эквивалентны хорошо известному приближению ОПХФ, полученному не только в работе Л. Рот [18], на которую ссылается автор [28], но и независимо в

ряде других работ [19—27] (см. п. 3). Это приближение оказывается иногда вполне достаточным для адекватного описания системы на уровне так называемых теорий первого порядка (их подробный сравнительный анализ на примере ферромагнетика в модели Гейзенберга см. в обзоре Рудого в [6]). Однако даже в этом приближении имеется значительная степень неоднозначности вычисления правой части (6), особенно в системах с нетривиальными кинематическими свойствами операторов (например, спиновых — см. [17] и Дополнение к [4]); тем более неправомерно, как это делает автор [28], пытаться выдавать ОПХФ за «истину в последней инстанции». Автор работы [28] наивно полагает, что с помощью тех или иных технических ухищрений (например, тождества Якоби для коммутаторов) ему удастся «загнать в прокрустово ложе» неких эффективных частот (или матрицы K в обозначениях [28]) практически всю существенную динамическую и кинематическую информацию о любой системе с сильным взаимодействием. Это, разумеется, далеко не так, в чем автор [28] мог бы легко убедиться, дав себе труд ознакомиться с литературой [4—17]; в частности, в работе [17] на примере ферромагнетика в модели Гейзенберга показана принципиальная необходимость учета наряду с ОПХФ вклада массового оператора из (3). Правда, автор [28] вскользь отмечает необходимость расширения базиса операторов и в своей схеме, но нигде не пытается реализовать эту идею.

5. В заключение укажем на вопиюще грубую ошибку, наглядно демонстрирующую уровень математической культуры работы [28]. В рамках стандартной модели БКШ, для которой строго доказано существование асимптотически точного решения [7], автору [28] удалось получить некое новое уравнение для критической точки, физический смысл которого, по словам автора [28], не ясен. Согласно этому уравнению, сверхпроводимость в модели БКШ якобы возможна не только при потенциале притяжения, но и при потенциале отталкивания в некотором диапазоне электронной концентрации. Нетрудно, однако, видеть, что этот «результат» связан просто с ошибками в оценках входящих в ОПХФ коммутаторов, а именно, с игнорированием роли термодинамического предельного перехода $N \to \infty$, $V \to \infty$, N/V = const и одновременным удержанием в уравнении (3.5.25) работы [28] членов различных порядков по параметру $1/N$. Разумеется, правильный результат дает лишь уравнение (3.5.26) работы [28], совпадающее с давно и хорошо известным (см.. например, [8]). “Новое” уравнение (3.5.27) (и следующие из него уравнения (3.5.28) и (3.5.29)) есть просто результат указанного выше недоразумения, которое автор [28] почему-то называет “интересным физическим свойством” уравнения (3.5.25), а также совершенно некорректных рассуждений, расположенных между формулами (3.5.26) и (3.5.27), на основании которых члены $\sim N^2$ отбрасываются по сравнению с членами $\sim N$.

Заметим, что в других приведенных примерах результаты автора работы [28] хотя и не ошибочны, но не выходят за рамки в целом хорошо известных результатов ОПХФ, что лишь доказывает несостоятельность претензий автора [28] на создание им нового метода вычисления корреляционных функций в квантовой статистической физике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Боголюбов З.З., Тябликов С.В. // *ДАН СССР.* ***1959.*** *Т. 126. С. 53.*
2. *Зубарев Д.Н.* // **УФН. I960.** Т. 71. С. 71.
3. *Бонч-Бруевич В.Л,, Тябликов С.В.* Метод функций Грина в статистической механике. М.: физматгиз, 1961.
4. *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. 2-е изд., М.: Наука, 1975.
5. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
6. Статистическая физика и квантовая теория поля / Под редакцией Н.Н. Боголюбова. М.: Наука, 1973.
7. *Боголюбов Н.Н.* Избранные труды. Т. 3. Киев: Наукова думка, 1971.
8. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962.
9. *Mori H.* // Progr. Theor. Phys. **1965. V.** 33. P. 423.
10. *Tokuyama M., Mori H.* // Progr. Theor. Phys. 1976. V. 55. C 411.
[11]. *Ichianagi M.* // J. Phys. Soc. Japan. 1972. V. 32. P. 64
12. *Saraswati D.K.* // Can. J. Phys. 1976. V. 54. P. 26.
13. *Церковников Ю.А.* // ДАН СССР. **1962.** Т. 143. С. 832.
14. *Церковников Ю.А.* // ТМФ. 1981. Т. 49. С. 219.
15. *Церковников Ю.А.* // ТМФ. **1971. Т.** 7. **С.** 250.
16. *Церковников Ю.А,* // ТМФ. **1990. Т.** 85. С. 124, 258.
17. *Рудой Ю.Г., Церковников Ю.А.* // ТМФ. 1973. Т. 14. С. 102 Т. 15. С. 388; **1974.** Т. 19. С. 252.
18. *Roth L.M.* // Phys. Rev. Lett. **1968.** V. 20. P. 1431.
19. *Плакида Н.М.* // ТМФ. 1970. Т. 5. С. 147; 1972. Т. 12. С. 135
20. *Калашников О.К., Фрадкин КС.* // ЖЭТФ. 1968. Т. 55. С. 607,1845.
[21] *Tahir-Kheli R.A., Jarrett H.S.* //Phys-Rev. 1969. V. 180. P. 544, *JarrettH.S.* // Ibidem. V. Bl. P. 3163.
22. *Wallace D.C.* // Phys. Rev. 1966. V. 152. P. 247.
23. *Sawada K.* // Progr. Theor. Phys. 1970. V. 43. P. 1199.
24. *Young R.A.* // Phys. Rev. **1969.** V. 184. P. 601.
25. *Oguchi A.* // Progr. Theor. Phys. 1970. V. 44. P. 1548; 1971. V. 46. P. 63.
26. *Mubayi V., LangeR.V.* // Phys. Rev. 1969. V.178. F. 882.
27. *Kenan R.P.* // Phys. Rev. 1970. V. Bl. P. 3205.
28. *Сарры М.Ф.* // **УФН. 1991. Т.** 161. С. 47.