

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

Еще раз об аналитических методах вычисления корреляционных функций в квантовой статистической физике

М.Ф. Сарры

PACS numbers: 05.30.—d

Около двух лет тому назад в журнале "УФН" была опубликована моя статья "Аналитические методы вычисления корреляционных функций в квантовой статистической физике" [1]. Недавно появилась методическая заметка "О вычислении корреляционных функций в квантовой статистической физике" Д.Н. Зубарева и Ю.Г. Рудого [2]. По словам ее авторов, хотя моя работа и "изобилует произвольными или ошибочными утверждениями", но за перо взяты их заставила все же "резкая и совершенно бездоказательная критика" мной именно метода функций Грина (ФГ). Оставляя на совести авторов выбранный ими стиль для своего печатного выступления в защиту метода ФГ, я постараюсь дать краткие и, по возможности, вполне замкнутые ответы на все их критические замечания. Вначале, однако, я считаю нужным хотя бы кратко напомнить основные моменты метода, предложенного мной в этой работе. Совсем кратко они состоят в следующем.

1. Предполагается, что для изучаемой системы можно построить базисную систему операторов $\{\hat{A}_j\}$, обычно *неполную*, но все же замкнутую (неоператорно) относительно операции коммутирования с гамильтонианом системы

$$[\hat{A}_j, H]_- = \sum_{j'=1}^n K_{jj'} \hat{A}_{j'}, \quad j = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (1)$$

Здесь все операторы базиса в общем случае имеют *разный* порядок. В случае, если все операторы *одного* порядка, в таком базисе исходная задача полностью *линеаризуется* в самом прямом смысле и поэтому ее решение оказывается *точным*, а данный операторный базис — *полным*.

2. "Насильственное" замыкание при заданном неполном наборе операторов достигается за счет подбора значений коэффициентов $K_{jj'}$ разложения (1) с помощью операторного тождества Якоби, требуя *точного* его выполнения. В случае двухоператорного базиса это тождество имеет вид

$$[\hat{A}_1, [\hat{A}_2, H]_-]_- - [\hat{A}_2, [\hat{A}_1, H]_-]_- - [[\hat{A}_1, \hat{A}_2]_-, H]_- = 0. \quad (2)$$

Подставляя сюда разложения соответствующих коммутаторов

$$[\hat{A}_1, H]_- = K_{11} \hat{A}_1 + K_{12} \hat{A}_2, \quad [\hat{A}_2, H]_- = K_{21} \hat{A}_1 + K_{22} \hat{A}_2$$

и значение взаимного коммутатора $[\hat{A}_1, \hat{A}_2]_-$, можно найти нужные значения $K_{2j'}$. Таким образом, вся приближенность решения исходной задачи "сидит" здесь, в ее К-матрице, и при этом только в ее элементах $K_{nj'}$, поскольку *всегда* разложение лишь одного последнего (n -го) коммутатора не является точным. Разложение же всех предыдущих коммутаторов *всегда* является точным по способу их построения.

3. Базис $\{\hat{A}_j\}$ строится так, что любая корреляционная функция (КФ) изучаемой системы обязательно содержит в себе хотя бы один из этих операторов. Это обстоятельство совместно с циклической неизменностью значения следа от произведения операторов (а КФ как раз и суть такие следы) и точной формулой "раздевания"

$$\hat{A}_j[\beta] = \sum_{j'=1}^n [\exp(-\beta K)]_{jj'} \hat{A}_{j'} \quad (3)$$

"одетого" базисного оператора

$$\hat{A}_j[\beta] \equiv \exp(\beta H) \hat{A}_j \exp(-\beta H)$$

позволяет сразу получить требуемую замкнутую систему из n алгебраических уравнений относительно искомых КФ по формуле

$$\langle \hat{B} \hat{A}_j \rangle = \langle \hat{A}_j[\beta] \hat{B} \rangle = \sum_{j'=1}^n [\exp(-\beta K)]_{jj'} \langle \hat{A}_{j'} \hat{B} \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (4)$$

$$\langle \dots \rangle \equiv \text{sp}[\exp(-\beta H) \dots] [\text{sp}(-\beta H)]^{-1}.$$

Если данная КФ включает в себя сразу несколько *базисных* операторов, то на ее основе можно написать столько же *независимых* уравнений.

4. В формуле (4) — основной формуле метода "одевания — раздевания" — взят случай невременных КФ, которые суть обычные статистические средние величины, характеризующие равновесные состояния системы (в этом случае ее гамильтониан не зависит явно от времени). Случай же наличия временной зависимости

М.Ф. Сарры. ВНИИЭФ, 607200, г. Арзамас-16, Нижегородская обл.
Тел. 6-27-03

Письмо в редакцию поступило 3 июня 1994 г.

у искомым КФ не потребует внесения каких-либо значительных изменений в формулу (4), за исключением только преобразования типа $\beta \rightarrow \beta' = \beta + it$, поскольку временная КФ равновесного состояния системы имеет вид

$$\langle \hat{B}[t_2] \hat{A}_j[t_1] \rangle = \langle \hat{B} \hat{A}_j[t] \rangle = \langle \hat{A}_j[\beta + it] \hat{B} \rangle, \quad t \equiv t_1 - t_2.$$

Временные КФ позволяют, по крайней мере в линейном приближении, изучать и нестационарные процессы в физических системах (тогда их гамильтониан уже явно зависит от времени), поскольку все кинетические коэффициенты неравновесных систем можно в линейном приближении выразить через равновесные временные КФ, соответствующие равновесным состояниям этих систем.

Теперь уже можно перейти к анализу критических замечаний, высказанных в адрес моей работы.

1. Вначале о том, что фактически (по крайней мере, по утверждению моих оппонентов) заставило их выступить с целью "предупредить возможные недоразумения у читателей, лишь начинающих знакомство с методом ФГ".

В своей работе я просто отметил давно и всем известный принципиальный вычислительный недостаток метода ФГ — отсутствие регулярного способа обрыва обычно бесконечной цепи уравнений движения (УД) для ФГ. От себя же я добавил лишь два замечания: во-первых, в методе ФГ антикоммутаторные (АФГ) и коммутаторные (КФГ) ФГ не могут быть использованы на равных (технически!) правах; во-вторых, спектральная теорема метода ФГ на практике часто использовалась неправильно, и это, возможно, было связано с тем, что в статье Зубарева [3] даются примеры того, как надлежит использовать ее в конкретных вычислениях, но фактически используется она в этих примерах в неправильной, вообще говоря, форме (см. формулы (3.28) и (5.11) в [3]). Но эти два моих замечания вряд ли можно расценить как критику именно метода ФГ и, к тому же, резкую.

Теперь по существу этих замечаний. Что касается первого, то оно исходит не от меня — об этом все знали и до меня; более того, его фактически признают и сами мои оппоненты (см. в их ст. с. 103, абзац 3). Два других замечания действительно исходят от меня. Суть их состоит в следующем. Техническая неправомерность использования АФГ и КФГ в конкретных расчетах связана именно с корректным использованием "спектральной теоремы" метода ФГ. Эта теорема имеет вид (см. формулу (3.25) в [3])

$$G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) = -i[\exp(\omega\theta^{-1}) - \eta]J(\omega). \quad (5)$$

Математически корректное решение уравнения (5) относительно спектральной интенсивности $J(\omega)$ искомым КФ при $\eta = 1$ есть [1, 4]

$$J(\omega) = \{i[G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon)] \times \\ \times [\exp(\omega\theta^{-1}) - 1]^{-1}\} + f\delta(\omega), \quad (6)$$

т.е. имеет сингулярный член из-за условия

$$[\exp(\pm\omega\theta^{-1}) - 1]\delta(\omega) \equiv 0, \quad (7)$$

которое обеспечивает выполнение исходного уравнения (5) при подстановке в него выражения (6). В работе [5] показано, что точные АФГ и КФГ соответственно

допускают и не допускают полюс в точке $\omega = 0$, причем вычет точной АФГ в этой точке как раз и определяет неизвестную функцию f , фигурирующую в соотношении (6). Это очень важное на практике аналитическое свойство точных ФГ не было отражено ни в работах Н.Н. Боголюбова и С.В. Тябликова [6, 7], ни в работе Д.Н. Зубарева [3]. Оно важно потому, что приближенно вычисленные ФГ (а на практике только это и возможно), любые из них — АФГ или КФГ — могут допускать полюс в точке $\omega = 0$. Тогда полюс у приближенно вычисленной КФГ нужно устранить постановкой надлежащих для этого условий, а вычет в этом полюсе у АФГ даст приближенное выражение для неизвестной функции f в решении (6) (функция f не зависит от ω). Поэтому, чтобы заранее знать, как правильно написать решение (6) — с сингулярным членом или без него, всегда нужно сначала вычислить АФГ в принятом для всей задачи приближении, и, если окажется, что этого полюса нет, то не должно быть и сингулярного члена в соотношении (6). Другими словами, одни лишь КФГ, вообще говоря, не замыкают метод ФГ.

2. Теперь о критике Д.Н. Зубаревым и Ю.Г. Рудым предложенного мной метода — "прямого алгебраического метода" (ПАМ) вычисления КФ в квантовой статистической физике. Существо критики именно ПАМ фактически сводится к утверждениям о том, что он, во-первых, не является оригинальным, а, по существу эквивалентен известной схеме Roth [8]; во-вторых, он не позволяет в принципе выйти за рамки ОПХФ (обобщенное приближение Хартри–Фока); в-третьих, и несмотря на все это, я выдаю ПАМ за метод, позволяющий получать результаты, претендующие на "истину в последней инстанции". Все эти утверждения моих оппонентов не соответствуют действительности. Во-первых, что касается "истин в последней инстанции", то таких утверждений и даже просто таких выражений в моей работе вообще нет.

Во-вторых, то, что ПАМ не эквивалентен схеме Roth, должно быть "видно" даже неспециалисту в этих вопросах: схема Roth призвана лишь унифицировать расщепление бесконечной цепи УД для ФГ в методе ФГ — она не дает самих УД для ФГ, она лишь дополняет метод УД универсальным рецептом расщепления. Только комбинация метода ФГ со схемой Roth дает вполне замкнутый метод вычисления КФ; без универсального рецепта расщепления метод ФГ остается внутренне незамкнутым и, по существу, не является законченным методом вычисления КФ в квантовой статистической физике.

ПАМ же дает как сами УД (и при этом сразу для искомым КФ, а не для каких-либо промежуточных функций типа ФГ в методе ФГ), так и универсальный способ их расщепления, т.е. ПАМ является внутренне замкнутым методом вычисления КФ. От метода ФГ ПАМ отличается не только своей внутренней замкнутостью, но и исключительной математической и технической простотой: здесь нет дифференциальных уравнений, нет спектральных преобразований и связанной с ними спектральной теоремы метода ФГ, здесь не приходится вычислять скачки через действительную ось функций от комплексных переменных, здесь, наконец, не нужно вычислять никакие интегралы Фурье — здесь сразу пишутся алгебраические уравнения для искомым КФ.

Рецепт расщепления ПАМ базируется на строгом математическом соотношении — операторном тожде-

стве Якоби и потому тоже отличается от схемы Roth, которая, по существу, является произвольным, хотя и универсальным действием: она предлагает брать коммутатор или антикоммутатор от обеих частей разложения (1) с операторами, эрмитово-сопряженными операторам $\{\hat{A}_j\}$, с последующим усреднением полученных соотношений:

$$\begin{aligned} \langle [\hat{A}_j, H]_-, \hat{A}_{j'}^+ \rangle_{\mp} &\equiv E_{jj'} = \sum_{j''} K_{jj''} \langle [\hat{A}_{j''}, \hat{A}_{j'}^+]_{\mp} \equiv \\ &\equiv \sum_{j''} K_{jj''} N_{j''j'} . \end{aligned} \quad (8)$$

Если N -матрица имеет обратную, то из (8) можно найти искомую K -матрицу $E = KN \rightarrow K = EN^{-1}$ через "известные" E - и N -матрицы. Здесь стоит отметить, что Roth не дает рецепта построения базисной системы операторов $\{\hat{A}_j\}$.

3. Теперь о самом физическом приближении. В ПАМ оно зависит от трех факторов. Во-первых, — от способа расщепления: использовать ли для этого схему Roth, тождество Якоби или что-то другое. Во-вторых, — от операторов, выбранных в качестве операторного базиса для решения задачи. В-третьих, — от мерности используемого базиса: его увеличение даже на единицу сразу дает выход за рамки предшествующего приближения. Поэтому утверждения Д.Н. Зубарева и Ю.Г. Рудого о том, что ПАМ не позволяет выйти за рамки ОПХФ представляется, по меньшей мере, странным.

4. Наконец, об ошибке, якобы допущенной мной при рассмотрении модели БКШ. Во-первых, критика Д.Н. Зубаревым и Ю.Г. Рудым этого результата ничего нового по существу вопроса не содержит по сравнению с той оценкой его же, которую я сам дал там же, в конце рассмотрения этой модели. Во-вторых, в том, что я намеренно оставил в уравнении для щели, полученном мной, два члена разного порядка по N — числу ячеек во взятом куске вещества, нет никакой ошибки: как хорошо известно всем, рассчитывающим свойства больших систем из первых принципов, *нельзя* в ответах сразу ограничиваться только ведущими членами, имея в виду *неизбежный*, в конце концов, переход к статистическому пределу. Вот простой пример. В разложении Бриллюэна–Вигнера для энергии большой системы только один (первый) член этого разложения пропорционален N , все же остальные его члены порядка единицы. Тогда что — только этот член и следует учитывать? Во-вторых, бывают и такие случаи, когда член более высокого порядка в какой-то области значений физических параметров системы исчезнет, и тогда, естественно, придется учесть вклад исчезающего, но предшествующего по

порядку величины ему члена. Именно это и имеет место в полученном мной уравнении для щели в модели БКШ. Учет этого обстоятельства и приводит к выводу, что теория БКШ справедлива только *вне* окрестности точки перехода, всюду левее ее, а в самой окрестности точки перехода работает другое уравнение. Этот вывод получен, разумеется, в рамках какого-то расщепления — именно того, которое соответствует требованию точного выполнения тождества Якоби. Формально-математически оно точнее, чем расщепление Валатина, хотя именно последнее точно воспроизводит результат БКШ. При расчете свойств многих взаимодействующих тел, конечно, бывают и такие случаи, когда формально-математическое уточнение предыдущего рассмотрения приводит не к улучшению *физического* результата, а к его ухудшению. Но в таких случаях можно говорить о физической неприемлемости более уточненного результата, а не о "вопиющей математической ошибке".

В заключение я хочу выразить свое твердое убеждение в том, что, несмотря (а, быть может, даже благодаря) на то, что обсуждаемую заметку подписал в качестве одного из соавторов, безусловно, весьма авторитетный в этих вопросах специалист — Д.Н. Зубарев, с которым, кстати, я был лично знаком, многократно обсуждал с ним различные вопросы, в том числе и вопросы ПАМ, заинтересованный в существе вопроса об аналитических методах вычисления КФ читатель постарается все же разобраться в истинном положении вещей. Что касается моей работы, то для этого достаточно внимательно прочесть "Введение", два первых и последний пункты ее второго раздела.

И последнее замечание. Интересный, на мой взгляд, метод вычисления КФ развит сотрудником кафедры теоретической физики Казанского ГУ Р.Р. Нигматуллин [9, 10]. К сожалению, эти работы, имевшиеся в виду мной в первоначальном варианте моей статьи [1], каким-то образом выпали из ее текста при последующих ее переработках.

Список литературы

1. Сарры М Ф *УФН* **161** (11) 47 (1991)
2. Зубарев Д Н, Рудой Ю Г *УФН* **163** (3) 103 (1993)
3. Зубарев Д Н *УФН* **71** (1) 71 (1960)
4. Сарры М Ф *Изв. вузов. Физика* **7** 80 (1980)
5. Ramos I G, Gomes A A *Nuovo Cimento A* **3** 441 (1971)
6. Боголюбов Н Н, Тябликов С В *ДАН СССР* **126** 53 (1959)
7. Тябликов С В *Методы квантовой теории магнетизма* (М.: Наука, 1975)
8. Roth L *Phys. Rev. Lett.* **20** 1431 (1968)
9. Нигматуллин Р Р *Изв. вузов. Физика* (10) 109 (1977)
10. Нигматуллин Р Р *Изв. вузов. Физика* (5) 37 (1980)