Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Э. А. Аринштейн, Теория возмущений для матриц плотности и термодинамического потенциала квантовой системы, *ТМФ*, 2002, том 130, номер 1, 54–63

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf290>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 14:30:34

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ МАТРИЦ ПЛОТНОСТИ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ

Разложение термодинамического потенциала квантовой системы, справедливое при высоких температурах, получено методом производящего функционала для матричных элементов операторов вторичного квантования. Этот метод позволяет выделить неприводимые части матриц, в том числе частичных матриц плотности. Получено уравнение для полной унарной матрицы плотности, эквивалентное вариационному принципу для термодинамического потенциала. Таким образом, термодинамические функции и матрица плотности определяются в рамках единой вариационной задачи.

В последнее время возрос интерес к исследованию макроскопических квантовых эффектов при высоких температурах. Метод квантовых групповых разложений для исследования термодинамических свойств квантовых систем был предложен Блохом и Доминиссом [1]–[3] по аналогии с методом групповых разложений в классической статистической физике. Частичное суммирование этих разложений, проведенное Ли и Янгом [4], позволило рассмотреть систему частиц с сильным отталкиванием на малых расстояниях (газ твердых сфер) с точностью до членов второго порядка. Этим же методом можно найти первые члены разложения частичных матриц плотности [5]. Систематический метод построения подобных разложений с любой степенью точности и приближенных интегральных уравнений для частичных матриц плотности, аналогичных интегральным уравнениям для классических частичных функций распределения, основан на методе производящего функционала.

1. МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩЕГО ФУНКЦИОНАЛА

Операторы рождения и поглощения частиц в одночастичных состояниях, характеризуемых набором дискретных или непрерывных квантовых чисел i , обозначим, как обычно, $a^+(i)$ и $a(i)$. Эти операторы подчиняются стандартным перестановочным соотношениям – коммутационным или антикоммутационным.

Введем производящий функционал для матричных элементов произвольного оператора в представлении вторичного квантования. Пусть $\xi^*(i)$ и $\lambda(i)$ – основные функции,

*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия. E-mail: earin@tsu.tmn.ru

зависящие от того же набора квантовых чисел, что и операторы рождения и поглощения. В случае статистики Ферми эти функции являются образующими грассмановой алгебры [6], антикоммутирующими между собой и с операторами рождения и поглощения ферми-частиц. Скалярное произведение в гильбертовом пространстве одночастичных состояний обозначим, как обычно, $(\xi^* \lambda)$. Остальные свойства пространства основных функций также определяются стандартным образом. Возможно рассмотрение системы, состоящей из различных частиц, в том числе из частиц различного типа.

Пусть A – оператор некоторой физической величины в представлении вторичного квантования. Функционал

$$A(\xi^*, \lambda) = \langle 0 | e^{(\xi^* a)} A e^{(a^+ \lambda)} | 0 \rangle \quad (1)$$

является производящим для матричных элементов оператора A . Обычно оператор может быть представлен в нормальной форме:

$$A = \sum_{m,n} \left(\prod_{\{m\}} a^+(i) \tilde{A}(\{m\}, \{n\}) \prod_{\{n\}} a(j) \right). \quad (2)$$

Величины $\tilde{A}(\{m\}, \{n\})$ (функции от наборов квантовых чисел) являются коэффициентами нормального разложения. Иногда из этих коэффициентов выделяется комбинаторный множитель $(m!n!)^{-1/2}$. С учетом соотношений

$$e^{(\xi^* a)} a^+(i) e^{-(\xi^* a)} = a^+(i) + \xi^*(i), \quad e^{-(a^+ \lambda)} a(i) e^{(a^+ \lambda)} = a(i) + \lambda(i),$$

которые легко установить разложением по функциям ξ^* и λ , получим

$$A(\xi^*, \lambda) = e^{(\xi^* \lambda)} \sum_{m,n} \left(\prod_{\{m\}} \xi^*(i) \tilde{A}(\{m\}, \{n\}) \prod_{\{n\}} \lambda(j) \right). \quad (3)$$

Таким образом, функционал

$$\tilde{A}(\xi^*, \lambda) = e^{-(\xi^* \lambda)} A(\xi^*, \lambda) \quad (4)$$

является производящим для коэффициентов нормального разложения.

Вводя функциональную свертку

$$A_1(\xi) \otimes A_2(\xi^*) = A_1 \left(\frac{\delta}{\delta \xi^*} \right) A_2(\xi^*) \Big|_{\xi^*=0} = A_1(\xi) A_2 \left(\frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta \xi} \right) \Big|_{\xi=0}, \quad (5)$$

представим оператор A в виде

$$A = e^{(a^+ \xi)} \otimes \tilde{A}(\xi^*, \lambda) \otimes e^{(\lambda^* a)}, \quad (6)$$

а след оператора в виде

$$\text{Sp } A = A(\xi^*, \xi) \otimes, \quad (7)$$

причем в случае статистики Ферми немая функция ξ^* при свертке переносится циклически направо, а функция ξ — налево. Заметим, что немая функция всегда сворачивается со своей сопряженной.

Используя представление (6), можно легко установить соответствие

$$A = A_1 A_2 \iff A(\xi^*, \lambda) = A_1(\xi^*, \gamma) \otimes A_2(\gamma^*, \lambda). \quad (8)$$

Представление (1) производящего функционала эквивалентно представлению, введенному Березиным [6], однако для некоторых приложений оно может оказаться удобнее. Видно также, что оно связано с разложением по когерентным состояниям.

Производящий функционал для неприводимых частей матричных элементов оператора A определяется соотношением

$$A(\xi^*, \lambda) = e^{B(\xi^*, \lambda)}. \quad (9)$$

Если представить функционалы, входящие в выражения (7) и (8), через их неприводимые части, то свертка разобьется на произведение независимых (несвязанных) частей. Обычный подсчет множителей каждого типа приводит к теореме о связанных частях для следа оператора

$$\text{Sp } A = e^{B(\xi^*, \xi) \otimes} = \exp(e^{B(\xi^*, \xi) \otimes})_c \quad (10)$$

и для свертки двух функционалов

$$e^{B_1(\xi^*, \gamma)} \otimes e^{B_2(\gamma^*, \lambda)} = \exp(e^{B_1(\xi^*, \gamma)} \otimes e^{B_2(\gamma^*, \lambda)})_c. \quad (11)$$

В случае смешанного состояния, характеризуемого статистическим оператором ρ , среднее физической величины определяется как $\langle A \rangle = \text{Sp } \rho A$. Среднее значение физической величины, в представлении вторичного квантования имеющей вид

$$\prod_{\{m\}} a^+(i) \tilde{A}(\{m\}, \{n\}) \prod_{\{n\}} a(j),$$

принимает значение

$$\begin{aligned} \sum_{m,n} \text{Sp } \rho \prod_{\{m\}} a^+(i) \tilde{A}(\{m\}, \{n\}) \prod_{\{n\}} a(j) &= \\ &= \sum_{\{m\}, \{n\}} R_{n,m}(\{n\}, \{m\}) \tilde{A}_{m,n}(\{m\}, \{n\}), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$R_{n,m}(\{n\}, \{m\}) = \text{Sp } \rho \prod_{\{m\}} a^+(i) \prod_{\{n\}} a(j) = \text{Sp } \prod_{\{n\}} a(j) \rho \prod_{\{m\}} a^+(i) \quad (13)$$

— матрица плотности порядка n, m . В общем случае

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Sp } \rho A = \text{Sp } \rho e^{(a^+ \xi)} \otimes \tilde{A}(\xi^*, \lambda) \otimes e^{(\lambda^* a)} = \\ &= (\text{Sp } e^{(\lambda^* a)} \rho e^{(a^+ \xi)}) \otimes \tilde{A}(\xi^*, \lambda) \otimes = R(\lambda^*, \xi) \otimes \tilde{A}(\xi^*, \lambda) \otimes. \end{aligned} \quad (14)$$

Таким образом, функционал

$$R(\xi^*, \lambda) = \text{Sp } e^{(\xi^* a)} \rho e^{(a^+ \lambda)} = \sum_{\{m\}, \{n\}} \frac{1}{m!n!} \prod_{\{m\}} \xi^*(i) \prod_{\{n\}} \lambda(j) R_{m,n}(\{m\}, \{n\}) \quad (15)$$

является производящим для частичных матриц плотности. Вводя представление

$$R(\xi^*, \lambda) = e^{(\xi^* \rho_{11} \lambda) + G(\xi^*, \lambda)}, \quad (16)$$

где ρ_{11} — унарная матрица плотности, определим производящий функционал $G(\xi^*, \lambda)$ корреляционных матриц, являющихся неприводимыми частями многочастичных матриц плотности.

Из определения матриц плотности (13) следуют соотношения

$$\langle \rho_{m+k, n+l} \rangle_{\{k\}, \{l\}} = \rho_{m, n}$$

и их нормировка $\langle \rho_{m, n} \rangle_{\{m\}, \{n\}} = 1$.

2. МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ ИДЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ

Статистический оператор равновесного идеального газа имеет вид

$$\rho_0 = e^{\beta(\Omega_0 - (a^+ T a))}, \quad T = H_0 - \mu. \quad (17)$$

Производящий функционал матриц плотности в этом случае можно найти исходя из перестановочных соотношений между операторами $(a^+ T a)$ и $(\xi^* a)$.

Разложением по степеням β легко установить соотношение

$$e^{\beta(a^+ T a)} (\xi^* a) e^{-\beta(a^+ T a)} = (\xi^* e^{-\beta T} a). \quad (18)$$

Тогда

$$\begin{aligned} R_0(\xi^*, \lambda) &= \text{Sp } e^{(\xi^* a)} \rho_0 e^{(a^+ \lambda)} = \text{Sp } \rho_0 e^{\beta(a^+ T a)} e^{(\xi^* a)} e^{-\beta(a^+ T a)} e^{(a^+ \lambda)} = \\ &= \text{Sp } \rho_0 \exp(\xi^* e^{-\beta T} a) e^{(a^+ \lambda)} = \\ &= \exp(\xi^* e^{-\beta T} \lambda) \text{Sp } \rho_0 e^{(a^+ \lambda)} \exp(\xi^* e^{-\beta T} a). \end{aligned} \quad (19)$$

В случае статистики Бозе, пользуясь правилом циклической перестановки операторов под знаком следа, отсюда сразу же получим уравнение

$$R_0(\xi^*, \lambda) = \exp(\xi^* e^{-\beta T} \lambda) R_0(\xi^* e^{-\beta T}, \lambda), \quad (20)$$

или после замены $\xi^* e^{-\beta T}$ на новую произвольную функцию ξ^* уравнение

$$R_0(\xi^* e^{\beta T}, \lambda) = e^{(\xi^* \lambda)} R_0(\xi^*, \lambda). \quad (21)$$

В случае статистики Ферми правило циклической перестановки относится только к операторам a и a^+ , тогда как множители ξ^* и λ необходимо переставлять с учетом их антикоммутативности. Перестановка этих множителей приводит к уравнению

$$R_0(\xi^*, \lambda) = \exp(\xi^* e^{-\beta T} \lambda) R_0(\xi^* e^{-\beta T}, -\lambda), \quad (22)$$

или

$$R_0(\xi^* e^{\beta T} \lambda) = e^{(\xi^* \lambda)} R_0(\xi^*, -\lambda). \quad (23)$$

Переходя к неприводимым частям функционала R_0 и объединяя оба случая, получим уравнение

$$(\xi^* (e^{\beta T} \pm 1) \rho_1^0 \lambda) + G_0(\xi^* e^{\beta T}, \lambda) = (\xi^* \lambda) + G_0(\xi^*, \pm \lambda), \quad (24)$$

откуда сравнением членов одинакового порядка по ξ^* и λ получим для корреляционных матриц идеального газа $G_0(\xi^*, \lambda) = 0$ и, произведя замену $\xi^* (e^{\beta T} \pm 1) \rightarrow \xi^*$, достаточно очевидный результат:

$$(\xi^* \rho_1^0 \lambda) = \left(\xi^* \frac{1}{e^{\beta T} \pm 1} \lambda \right). \quad (25)$$

Окончательно имеем

$$R_0(\xi^*, \lambda) = \exp \left(\xi^* \frac{1}{e^{\beta T} \pm 1} \lambda \right). \quad (26)$$

Из (24) можно получить все многочастичные матрицы плотности идеальных газов в виде (анти)симметризованных произведений унарных матриц. При этом автоматически учитывается корреляция, определяемая квантовой статистикой.

3. УЛУЧШЕННАЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Статистическая сумма системы взаимодействующих частиц имеет вид

$$Z = \text{Sp } e^{-\beta(H - \mu N)} = Z_0 \text{Sp } \rho_0 S, \quad (27)$$

где $S = e^{\beta H_0} e^{-\beta H}$ – оператор температурного рассеяния Мацубары [7]. Оператор Мацубары определен для гамильтонианов, имеющих ограниченный снизу спектр, в том числе и для взаимодействия, включающего сильное отталкивание на малых расстояниях (твердую сердцевину).

В случае идеального газа $S = 1$, соответствующий производящий функционал равен $S_0(\xi^*, \lambda) = e^{(\xi^* \lambda)}$ и, следовательно, $\tilde{S}_0(\xi^*, \lambda) = 1$.

Введем неприводимые части функционала S :

$$S(\xi^*, \lambda) = e^{(\xi^* \lambda)} \tilde{S}(\xi^*, \lambda) = e^{(\xi^* \lambda) + u(\xi^*, \lambda)}. \quad (28)$$

В случае гамильтониана, сохраняющего число частиц,

$$u(\xi^*, \lambda) = u_2(\xi^*, \lambda) + u_3(\xi^*, \lambda) + \dots + u_k(\xi^*, \lambda) + \dots, \quad (29)$$

т.е. функционал распадается на двух-, трех-, k -частичные неприводимые, диагональные по числу частиц части, имеющие соответствующий одинаковый порядок по функциям ξ^* и λ . Двухчастичная неприводимая часть совпадает с бинарным ядром, полученным Янгом и Ли суммированием бесконечной подпоследовательности членов ряда теории возмущений, и находится в явном виде из решения задачи двух тел:

$$u_2(\xi^*, \lambda) = \frac{1}{2}(\xi^*(1)\xi^*(2)(e^{\beta H_0^{(2)}} e^{-\beta H^{(2)}} - 1)\lambda(1')\lambda(2')). \quad (30)$$

Для определения старших неприводимых частей требуется решение соответствующих k -частичных задач либо разложение по бинарным ядрам последовательно для $k = 3, 4, \dots$. В общем случае для гамильтониана, не сохраняющего число частиц, например фононов, функционал u будет содержать недиагональные по числу частиц члены вида $u_{i,k}$.

Более детальное рассмотрение неприводимых частей оператора Мацубары приведено в приложении.

Используя представление (28) и соотношение $e^{(\xi^*(\delta/\delta\lambda^*))} A(\lambda^*) = A(\xi^* + \lambda^*)$, получим

$$\begin{aligned} Z &= Z_0 R_0(\xi^*, \lambda) \otimes \tilde{S}(\lambda^*, \xi) = Z_0 e^{(\xi^* \rho_1^0 \lambda)} \otimes e^{u(\lambda^*, \xi)} = \\ &= Z_0 \exp(e^{u(\xi^* \rho_1^0, \xi)} \otimes) = Z_0 \exp(\exp(u(\xi^* e^{-\beta(E-\mu)}(1 \pm \rho_1^0), \xi)) \otimes)_{\text{c}}, \end{aligned} \quad (31)$$

откуда

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta}(e^{u(\xi^* \rho_1^0, \xi)} \otimes)_{\text{c}} = \Omega_0 - \frac{1}{\beta}(\exp(u(\xi^* e^{-\beta(E-\mu)}(1 \pm \rho_1^0), \xi)) \otimes)_{\text{c}}. \quad (32)$$

Заметим, что функционал $\tilde{u}(\xi^*, \lambda) = u(\xi^* e^{-\beta(E-\mu)}, \lambda)$ определяет неприводимые части эрмитова оператора $e^{-\beta(H-\mu)}$, в отличие от функционала $u(\xi^*, \lambda)$, определяющего неприводимые части неэрмитова оператора Мацубары. Разложение (32) является квантовым обобщением классического разложения по степеням плотности. Ли и Янг получили первые два члена этого разложения суммированием бесконечной подпоследовательности разложения по бинарным ядрам.

Аналогичным образом получим разложение частичных матриц плотности, точнее производящего функционала этих матриц:

$$\begin{aligned} R(\xi^*, \lambda) &= \text{Sp } e^{(\xi^* a)} \rho e^{(a^+ \lambda)} = e^{\beta(\Omega - \Omega_0)} \text{Sp } e^{(\xi^* a)} \rho_0 S e^{(a^+ \lambda)} = \\ &= e^{\beta(\Omega - \Omega_0)} \text{Sp } e^{(\xi^* a)} \rho_0 e^{(a^+ \gamma)} \otimes e^{u(\gamma^*, \nu)} \otimes e^{(\nu^* a)} e^{(a^+ \lambda)} = \\ &= e^{\beta(\Omega - \Omega_0)} \text{Sp } e^{((\xi^* + \nu^*) a)} \rho_0 e^{(a^+ (\gamma + \lambda))} \otimes e^{u(\gamma^*, \nu + \lambda)}. \end{aligned} \quad (33)$$

Это приводит к разложению

$$R(\xi^*, \lambda) = e^{\beta(\Omega - \Omega_0) + ((\xi^* + \nu^*) \rho_1^0 (\gamma + \lambda))} \otimes e^{u(\gamma^*, \nu + \lambda)}. \quad (34)$$

Необходимо учесть, что в скалярном произведении $(\nu^* \rho_1^0 \lambda)$ функция ν^* циклически перенесена направо при свертке, тогда как функция λ остается слева. Следовательно, при явном выполнении циклического переноса справа окажется множитель $e^{(\lambda \rho_1^0 \nu^*)} = e^{\pm(\nu^* \rho_1^0 \lambda)}$. В итоге получим

$$\begin{aligned} R(\xi^*, \lambda) &= e^{\beta(\Omega - \Omega_0) + (\xi^* \rho_1^0 \lambda)} e^{u((\xi^* + \nu^*) \rho_1^0, \nu + (1 \pm \rho_1^0) \lambda)} \otimes = \\ &= \exp((\xi^* \rho_1^0 \lambda) + (e^{u((\xi^* + \nu^*) \rho_1^0, \nu + (1 \pm \rho_1^0) \lambda)} \otimes) - (e^{u(\nu^* \rho_1^0, \nu)} \otimes)) = \\ &= \exp((\xi^* \rho_1^0 \lambda) + (\exp(u((\xi^* + \nu^*) e^{-\beta(E - \mu)} (1 \pm \rho_1^0), \nu + (1 \pm \rho_1^0) \lambda)) \otimes) - \\ &\quad - (e^{u(\nu^* \rho_1^0, \nu)} \otimes))_c, \end{aligned} \quad (35)$$

где знаки определяются, как обычно, статистикой. Это разложение всех матриц плотности является квантовым обобщением разложения частичных функций распределения по плотности и переходит в него в классическом пределе. Первые члены разложения (33) для унарной, бинарной и тройной матриц плотности были получены Исихарой [5] суммированием квантовых групповых разложений.

4. ЧАСТИЧНОЕ СУММИРОВАНИЕ РЯДОВ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Каждый член разложений (32) и (35) можно представить диаграммой, сопоставляя неприводимой части $u_{i,k}$ вершину с $(i+k)$ линиями (i выходящих функций ξ^* и k входящих функций λ), а функции ρ_1^0 внутренние линии, объединяющие по одной выходящей и одной входящей линии и тем самым связывающие вершины. Диаграммы разложения (35) содержат свободные (или внешние) линии – выходящие и входящие. При использовании вершин $u(\xi^*, \lambda)$ выходящие линии содержат множитель ρ_1^0 , а входящие – множитель $(1 \pm \rho_1^0)$. При использовании вершин $\tilde{u}(\xi^*, \lambda)$ и выходящие, и входящие свободные линии содержат одинаковый множитель $(1 \pm \rho_1^0)$.

Введем величину $M_1(1, 1')$ – сумму 1-неприводимых диаграмм, имеющих одну входящую и одну выходящую свободные линии при условии, что диаграмма не может быть разделена на две несвязанные части удалением одной внутренней линии. Очевидно, что для пространственно однородных систем 1-неприводимая диаграмма, так же как и матрица ρ_1 , в импульсном представлении диагональна. Функция M_1 связана с полной одночастичной матрицей плотности. Выделяя в разложении (35) члены первого порядка по функциям ξ^* и λ , получим

$$\begin{aligned} (\xi^* \rho_1 \lambda) &= (\xi^* \rho_1^0 \lambda) + (\xi^* \rho_1^0 M_1(1 \pm \rho_1^0) \lambda) \pm \\ &\quad \pm (\xi^* \rho_1^0 M_1 \nu) \otimes (\nu^* \rho_1^0 M_1(1 \pm \rho_1^0) \lambda) + \dots = \\ &= (\xi^* \rho_1^0 \lambda) + \left(\xi^* \frac{\rho_1^0 M_1}{1 \pm \rho_1^0 M_1} (1 \pm \rho_1^0) \lambda \right) = \left(\xi^* \frac{1 + M_1}{e^{\beta(E - \mu)} \pm (1 + M_1)} \lambda \right). \end{aligned} \quad (36)$$

Общий член ряда имеет вид $(\pm 1)^{n-1} (\xi^* (\rho_1^0 M_1)^n (1 \pm \rho_1^0) \lambda)$. Комбинаторный множитель равен $n!$ и сокращается с таким же знаменателем, возникающим при разложении

экспоненты; знаковый множитель $(\pm 1)^{n-1}$ возникает при переносе справа и перестановке каждой из $n - 1$ промежуточных сворачиваемых функций ν_k^* с несколькими парами, входящими в скалярные произведения $(\nu_j^* \rho_1^0 M_1 \nu_{j-1})$, что не дает изменения знака, и функцией ν_{k-1}^* , входящей в то же скалярное произведение, что и функция ν_k^* .

Из тождества $e^{u(\nu^* \rho_1^0, \nu)} \otimes_\nu = e^{u((\xi^* + \nu^*) \rho_1^0, (\nu + \xi))} \otimes_{\nu, \xi}$ следует, что замыкание свободных линий в диаграммном разложении матриц плотности (с исключением лишних множителей) дает в сумме диаграммное разложение термодинамического потенциала. Таким образом, диаграммы, входящие в разложение матриц плотности, в частности 1-неприводимые диаграммы, являются элементами, из которых строятся диаграммы, дающие разложение термодинамического потенциала. Это позволяет выделить в разложении (32) диаграммы двух основных типов.

Выделим, во-первых, вклад 0-неприводимых (скелетных) диаграмм $M_0(\rho_1^0)$, не содержащих во внутренних линиях 1-неприводимых частей, и, во-вторых, вклад циклических диаграмм, образованных двумя или более 1-неприводимыми диаграммами:

$$\sum_{n \geq 2} \frac{(\pm 1)^{n-1}}{n} (\xi^* (\rho_1^0 M_1)^n \xi) \otimes = \mp (\xi^* \ln(1 \mp \rho_1^0 M_1) \xi) \otimes - (\xi^* \rho_1^0 M_1 \xi) \otimes. \quad (37)$$

Для учета вклада остальных диаграмм следует заменить в диаграммах этих двух типов внутренние линии ρ_1^0 на линии

$$l = \sum_{n \geq 0} (\pm \rho_1^0 M_1)^n \rho_1^0 = \frac{\rho_1^0}{1 \mp \rho_1^0 M_1} = \frac{\rho_1}{1 + M_1} = e^{-\beta(E-\mu)} (1 \pm \rho_1). \quad (38)$$

Таким образом, разложение термодинамического потенциала системы с учетом явного выражения для термодинамического потенциала идеального газа, содержащее только скелетные диаграммы с внутренними линиями (38), примет вид

$$\begin{aligned} \beta \Omega = & \pm (\xi^* \ln(1 \mp e^{-\beta(E-\mu)}) \xi) \otimes \pm \\ & \pm (\xi^* \ln(1 \mp \rho_1^0 M_1(l)) \xi) \otimes + (\xi^* l M_1(l) \xi) \otimes - M_0(l). \end{aligned} \quad (39)$$

5. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ДЛЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Суммирование 1-неприводимых вкладов во внутренних линиях диаграмм разложения (36) (перенормировка внутренних линий) превращает это разложение в уравнение для полной унарной матрицы плотности, так как перенормированные линии зависят от нее. Записывая это уравнение в виде

$$\ln \rho_1 - \ln(1 \pm \rho_1) + \beta(E - \mu) - \ln(1 + M_1(l)) = 0 \quad (40)$$

и скалярно умножая на $\delta \rho_1$, найдем, что оно эквивалентно вариационному принципу для функционала

$$\begin{aligned} \beta \Omega = & (\xi^* \{ \rho_1 \ln \rho_1 \mp (1 \pm \rho_1) \ln(1 \pm \rho_1) + \rho_1 \beta(E - \mu) \} \xi) \otimes - \\ & - (\xi^* \{ \rho_1 \ln(1 + M_1) - l M_1 \} \xi) \otimes - M_0(l). \end{aligned} \quad (41)$$

Нетрудно проверить, что на экстремали (40) функционал (41) совпадает с термодинамическим потенциалом (39).

Таким образом, определение термодинамического потенциала и полной унарной матрицы плотности сводится к единой вариационной задаче для функционала (39). В случае системы частиц одного сорта с гамильтонианом, сохраняющим число частиц, имеем $M_1 = \delta M_0 / \delta l$. В случае системы, содержащей частицы нескольких сортов, функция M_1 определяется для каждого сорта частиц аналогично.

В работе [8] функционал вариационной задачи был найден с точностью до трех членов в виде разложения по функциям $\tilde{l} = \rho_1$, без выделения 1-неприводимых диаграмм, что привело к увеличению числа диаграмм.

Полагая в соответствии с (36) и (38)

$$\rho_1 = (e^{\beta(E-\mu)-\omega} \mp 1)^{-1}, \quad l = (e^{\beta(E-\mu)} \mp e^\omega)^{-1}, \quad (42)$$

получим

$$\beta\Omega = \pm(\xi^* \ln(1 \mp e^{-\beta(E-\mu)+\omega})\xi) \otimes + (\xi^* (\omega - \ln(1 + M_1))\rho_1 \xi) \otimes + (\xi^* l M_1 \xi) \otimes - M_0. \quad (43)$$

При этом сдвиг уровня ω определяется как функция от E из вариационного принципа для термодинамического потенциала.

Очевидно, что разложение по связанным диаграммам приводит в случае пространственно однородной системы к линейной зависимости термодинамического потенциала от объема. Кроме того, видно, что в случае ферми-системы существенной является сравнительно узкая область энергий вблизи уровня Ферми (с учетом сдвига).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Теория возмущений для неприводимых частей оператора Мацубары

Из уравнения Блоха для равновесного статистического оператора

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -H\rho, \quad H = T + V,$$

следует уравнение

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = -e^{\beta T} V e^{-\beta T} S$$

для оператора Мацубары. Выражая входящие сюда операторы через соответствующие производящие функционалы, получим уравнение

$$\begin{aligned} e^{(\xi^* \lambda)} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial \beta} &= -\tilde{V}(\xi^* e^{\beta T}; e^{-\beta T} \nu) e^{(\xi^* \nu)} \otimes e^{(\nu^* \lambda)} \tilde{S}(\nu^*, \lambda | \beta) = \\ &= -e^{(\xi^* \lambda)} \tilde{V}(\xi^* e^{\beta T}; e^{-\beta T} (\nu + \lambda)) \otimes \tilde{S}(\nu^* + \xi^*, \lambda | \beta) = \\ &= -e^{(\xi^* \lambda)} \tilde{V}\left(\xi^* e^{\beta T}; e^{-\beta T} \left(\lambda + \frac{\delta}{\delta \xi^*}\right)\right) \tilde{S}(\xi^*, \lambda). \end{aligned} \quad (44)$$

Наконец, используя представление функционала $\tilde{S}$ через производящий функционал u неприводимых частей и соотношение

$$e^{-u} \frac{\delta}{\delta \xi^*} e^u = \frac{\delta}{\delta \xi^*} + \frac{\delta u}{\delta \xi^*},$$

придем к уравнению

$$\frac{\partial u}{\partial \beta} = -\tilde{V} \left(\xi^* e^{\beta T}; e^{-\beta T} \left(\lambda + \frac{\delta u}{\delta \xi^*} + \frac{\delta}{\delta \xi^*} \right) \right). \quad (45)$$

От этого дифференциального уравнения с учетом начального условия $u|_{\beta=0} \equiv u(\xi^*, \lambda | 0) = 0$ легко перейти к интегральному уравнению

$$u(\xi^*, \lambda | \beta) = - \int_0^\beta \tilde{V} \left(\xi^* e^{\tau T}; e^{-\tau T} \left(\lambda + \frac{\delta u(\xi^*, \lambda | \tau)}{\delta \xi^*} + \frac{\delta}{\delta \xi^*} \right) \right) d\tau. \quad (46)$$

Полагая в нулевом приближении $u = 0$, придем путем последовательных итераций к высокотемпературному разложению неприводимых частей матричных элементов оператора Мацубары. В случае взаимодействия, включающего интенсивное отталкивание на малых расстояниях, в качестве исходного приближения для построения итерационной процедуры следует взять бинарное ядро Ли и Янга. Легко заметить, что в случае, когда возмущение имеет характер полинома по свободным полям, правые части уравнений (45), (46) являются полиномами той же степени по неприводимым частям. Действительно, в отсутствие других множителей справа от произведения двух типичных комбинаций, входящих в эти выражения, получим

$$\left(\lambda + \frac{\delta u}{\delta \xi^*} + \frac{\delta}{\delta \xi^*} \right)_i \left(\lambda + \frac{\delta u}{\delta \xi^*} + \frac{\delta}{\delta \xi^*} \right)_k = \lambda_i \lambda_k + \lambda_i \frac{\delta u}{\delta \xi_k^*} + \lambda_k \frac{\delta u}{\delta \xi_i^*} + \frac{\delta u}{\delta \xi_i^*} \frac{\delta u}{\delta \xi_k^*} + \frac{\delta^2 u}{\delta \xi_i^* \delta \xi_k^*}.$$

Произведение большего числа таких сомножителей раскрывается аналогично.

Список литературы

- [1] *C. Bloch, C. De Dominicis.* Nucl. Phys. 1958. V. 7. P. 495; 1959. V. 10. P. 509.
- [2] *C. Balian, C. Bloch, C. De Dominicis.* Nucl. Phys. 1961. V. 25. P. 529; V. 27. P. 294.
- [3] *C. Bloch.* Stud. Stat. Mech. 1965. V. 3. P. 1.
- [4] *C. D. Lee, C. N. Yang.* Phys. Rev. 1959. V. 113. № 5. P. 1165; V. 116. № 1. P. 25.
- [5] *A. Isichara.* Progr. Theor. Phys. Suppl. 1969. V. 44. P. 1; Phys. Rev. 1968. V. 172. P. 166.
- [6] *Ф. А. Березин.* Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1965.
- [7] *T. Matsubara.* Progr. Theor. Phys. 1956. V. 14. № 4. P. 351.
- [8] *Э. А. Ариунштейн, Д. М. Гитман.* Изв. вузов. Физика. 1968. № 10. С. 146; 1971. № 9. С. 98.

Поступила в редакцию 3.IV.2001 г.,
после доработки 8.VI.2001 г.