Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН –
заведующий кафедрой моделирования физических процессов и систем физического факультета,
доктор физико-математических наук, профессор,
Аркадий Юрьевич ВОЛКОВ –
аспирант кафедры моделирования физических процессов и систем физического факультета

УДК: 536.7

ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП В ТЕОРИИ ЧАСТИЧНЫХ МАТРИЦ ПЛОТНОСТИ

АННОТАЦИЯ. В работе рассматривается актуальная проблема квантовой статистической физики: предпринимается попытка расчета двухчастичных матриц плотности квантовой статистической системы с применением прямого вариационного метода.

The authors tackle a topical problem of quantum statistical physics: an attempt is made using the direct variation method to calculate binary density matrices of quantum system.

В предлагаемой работе предпринимается попытка расчета частичных матриц плотности квантовой системы взаимодействующих частиц (Аналог частичных функций распределения в классической статистической теории жидкости).

Матрицы плотности содержат только статистическую информацию в отличие от функций Грина, которые также применяются для описания таких систем. Это позволяет рассчитать поведение системы в достаточно широком диапазоне температур и дает надежду на уменьшение технических сложностей.

Применение прямого вариационного метода позволит использовать некоторые параметры, вводимые из физических соображений (например, ширину энергетической щели), в качестве вариационных переменных и таким образом оценивать их величину.

Унарные матрицы плотности

В предлагаемой работе используется техника производящих функционалов, описанная в работе [1]. В той же работе, а также в работе [2] получены выражения для унарной матрицы плотности квантовой системы взаимодействующих частиц:

$$\rho_1 = \frac{1+M_1}{e^{\beta(E-\mu)} \mp (1+M_1)} = \frac{1}{e^{\beta(E_i-\mu-\omega_i)} \mp 1};$$

производящего функционала частичных матриц плотности:

$$R(\xi^*,\lambda) = \exp\left\{(\xi^* \rho_1^0 \lambda) + \left\{e^{u\left((\xi^*+\nu^*)\rho_1^0,\, \nu+(1\pm\rho_1^0)\lambda\right)} \otimes\right\}_c - \left\{e^{u\left(\nu^* \rho_1^0,\, \nu\right)} \otimes\right\}_c\right\}$$

и термодинамического потенциала:

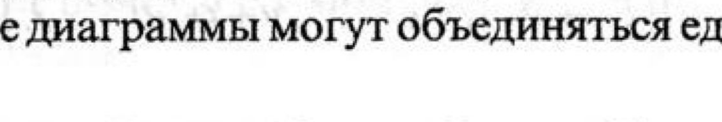
$$\beta\Omega = \pm\left(\xi^* \ln\left(1 \mp e^{-\beta(E-\mu)}\right)\xi\right) \otimes \pm\left(\xi^* \ln\left(1 \mp \rho_1^0 M_1(\ell)\right)\xi\right) \otimes +$$
$$+\left(\xi^* \ell M_1(\ell)\xi\right) \otimes - M_0(\ell).$$

В этих выражениях ω_i — сдвиг уровней энергии, обусловленный взаимодействием; M_1 — 1-неприводимая диаграмма, которая имеет одну входящую и одну выходящую линии и не распадается на две части при удалении одной из внутренних линий.

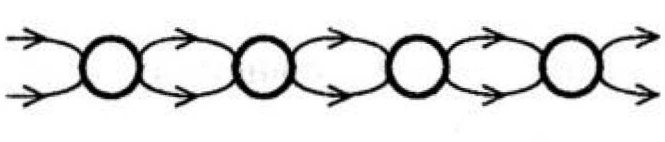
Двухчастичные матрицы плотности

Как видим, в разложении $\beta\Omega$ явным образом присутствует зависимость только от унарной матрицы плотности. В то же время влияние корреляций на термодинамические характеристики системы существенно (например, высокотемпературная сверхпроводимость обусловлена образованием куперовских пар, представляющих собой бинарные корреляции электронов), поэтому нахождение явной зависимости $\beta\Omega$ от бинарных корреляций представляется весьма важной задачей. Для ее решения необходимо выделить в разложении $R\left(\xi^*,\lambda\right)$ члены второго порядка по $\left(\xi^*,\lambda\right)$ и просуммировать соответствующие диаграммы.

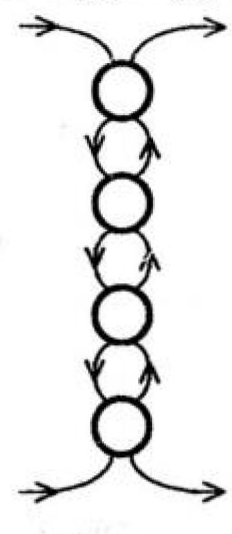
Деление линий на входящие и выходящие обусловлено несимметричностью вхождения переменных ξ^* и λ в разложение $R\left(\xi^*,\lambda\right)$. Тем не менее при суммировании 1-неприводимых диаграмм эта несимметричность не вызывает сложностей, так как 1-неприводимые диаграммы могут объединяться единственным образом — в цепочку:



При суммировании 2-неприводимых диаграмм направленность линий приводит к появлению двух принципиально различных структур:



и



,

которые могут различным образом переплетаться. В результате, вместо последовательности, аналогичной цепочке 1-неприводимых диаграмм, получается «паркет», просуммировать который очень сложно.

Избежать образования «паркета» можно, избавившись от направленности линий и переместив все несимметричные сомножители из линий в ядра диаграмм.

Поскольку несимметричность обусловлена неэрмитовостью оператора Мацубары

$$S = e^{\beta H_0} e^{-\beta H},$$

использовавшегося при построении теории возмущений, то, заменив его на эрмитов оператор

$$B = e^{-\beta H} - e^{-\beta H_0} = e^{-\beta H_0}\left(S-1\right),$$

мы получим симметричное по переменным (ξ^*,λ) разложение $R(\xi^*,\lambda)$.

Производящий функционал оператора Мацубары равен

$$S(\xi^*,\lambda)=e^{(\xi^*\lambda)}e^{u(\xi^*,\lambda)}$$

(см. [1]), а разложение вновь введенного оператора B имеет вид:

$$B(\xi^*,\lambda)=e^{\left(\xi^* e^{-\beta H_0}\lambda\right)}\left(e^{u\left(\xi^* e^{-\beta H_0},\lambda\right)}-1\right)=e^{\left(\xi^* e^{-\beta H_0}\lambda\right)}\left(e^{\tilde{u}(\xi^*,\lambda)}-1\right),$$

поэтому, переход от оператора Мацубары к эрмитовому оператору соответствует замене в разложениях $\beta\Omega$ и $R(\xi^*,\lambda)$ функции $u(\xi^*,\lambda)$ на функцию $\tilde{u}(\xi^*,\lambda)$, связанную с $u(\xi^*,\lambda)$ соотношением:

$$\tilde{u}(\xi^*,\lambda)=u\left(\xi^* e^{-\beta H_0},\lambda\right).$$

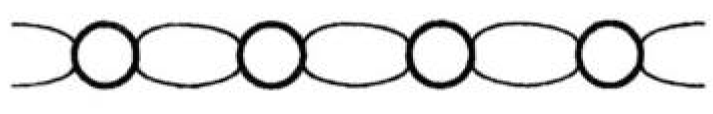
Произведя такую замену, получим, что в разложение $R(\xi^*,\lambda)$ вместо члена

$$e^{u\left((\xi^*+\nu^*)\rho_1^0,\,\nu+\left(1\pm\rho_1^0\right)\lambda\right)},$$

несимметричного по ξ^* и λ, войдет член

$$e^{\tilde{u}\left((\xi^*+\nu^*)\rho_1^0 e^{\beta H_0},\,\nu+\rho_1^0 e^{\beta H_0}\lambda\right)},$$

симметричный по этим переменным. Таким образом, все линии получаются одинаковыми, и их можно не разделять на входящие и выходящие. На языке диаграмм это означает, что вся несимметричность перенесена из линий в ядра и мы получаем «лестничную» последовательность, аналогичную цепочке 1-неприводимых диаграмм:



Сумма таких диаграмм удовлетворяет интегральному уравнению вида:

Трудности решения этого уравнения заключаются в необходимости определения достаточно удобных комбинаций импульсов, соответствующих линиям, что позволило бы произвести разделение переменных. Решение этого уравнения позволит провести суммирование 2-неприводимых диаграмм в разложении $R(\xi^*,\lambda)$ аналогично тому, как это было сделано при суммировании 1-неприводимых диаграмм.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аринштейн Э. А. Разложение частичных матриц плотности и термодинамического потенциала квантовых систем // Математическое и информационное моделирование: Сборник. Тюмень: ТГУ, 1996. С. 79-87..

2. Аринштейн Э. А., Волков А. Ю. Функциональное преобразование Лежандра для термодинамического потенциала квантовых систем // Математическое и информационное моделирование: Сборник. Тюмень: ТГУ, 1996. С. 88-94.