ФАКТОРИЗАЦИЯ ОПЕРАТОРОВ ЧАСТИЦ ПО ПЛОТНОСТЯМ СИСТЕМЫ С ПАРНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КОНТИНУАЛЬНОМ ПОДХОДЕ

Л.П.Мироненко
Донецкий государственный технический университет
кафедра высшей математики

Abstract
Mironenko L.P. The density factorization of particle operators for a pair interaction potential in the path integration. *It is produced the density factorization of particle operators for grand canonical ensemble. The problem is identical of a particle behavior in the gaussian random field. The method can be applied haw to bosons and fermions.*

Метод функций Грина в квантовой статистике, как правило, применяется для систем с потенциалом взаимодействия общего вида. Учет взаимодействия производится в рамках теории возмущений с применением диаграммной техники. Проблема вычисления термодинамических функций в конечном итоге сводится к вычислению конфигурационного интеграла, позволяющего найти вклад межатомных взаимодействий в свободную энергию. В этой связи факторизация статистической суммы системы многих частиц с учетом их взаимодействия остается одной из самых актуальных задач, решение которой затруднено участием большого количества переменных и интегрирования по ним.

Частичное решение проблемы в классической статистике в рамках парного потенциала взаимодействия рассмотрено в работе [1]. В квантовом случае нет необходимости производить факторизацию для большого числа частиц, поскольку условия симметрии волновых функций и операторов для системы тождественных частиц редуцируют гамильтониан к бинарной системе [2]. Тем не менее проблема остается для системы двух частиц с потенциалом взаимодействия общего вида.

В настоящей работе сделана попытка построить континуальный интеграл, фактически обобщающий результаты работы [1] на квантовый случай.

Рассмотрим систему N тождественных частиц массы m, заключенных в некоторый объем V с периодическими граничными условиями по пространственным координатам. Предположим, что эти частицы взаимодействуют попарно; потенциал взаимодействия атомного типа, с математической точки зрения, допускающий преобразование Фурье. Функционал действия для равновесной системы частиц имеет вид [3]

$$S=\int_0^\beta dt\int d\mathbf{r}\psi(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},t)-\int_0^\beta H'(t)dt,$$

$$H'(t)=H(t)-\mu N(t)=\int d\mathbf{r}\left[\frac{1}{2m}\left(\nabla\psi^*(\mathbf{r},t),\nabla\psi(\mathbf{r},t)\right)-\mu\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\right]+ \quad (1)$$

$$+\frac{1}{2}\iint d\mathbf{r}d\mathbf{r}'v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r},t)\psi^*(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t).$$

Здесь μ - химический потенциал системы; $\beta=1/T$, T - температура в энергетических единицах; $v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ - парный потенциал взаимодействия между двумя частицами; $\psi(\mathbf{r},t)$, $\psi^*(\mathbf{r},t)$ - комплексные поля, удовлетворяющие для бозе-статистики условиям периодичности по "времени" $\psi(\mathbf{r},0)=\psi(\mathbf{r},\beta)$, $\psi^*(\mathbf{r},0)=\psi^*(\mathbf{r},\beta)$, для ферми-статистики условиям антипериодичности $\psi(\mathbf{r},0)=-\psi(\mathbf{r},\beta)$, $\psi^*(\mathbf{r},0)=-\psi^*(\mathbf{r},\beta)$.

Представим действие S в виде суммы невозмущенной части S_o и возмущения S_1: $S=S_o+S_1$, где

$$S_o=\int_0^\beta dt\left\{\int d\mathbf{r}\psi(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},t)-\int d\mathbf{r}\left[\frac{1}{2m}\left(\nabla\psi^*(\mathbf{r},t),\nabla\psi(\mathbf{r},t)\right)-\mu\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\right]\right\}, \quad (2)$$

$$S_1=-\frac{1}{2}\int_0^\beta dt\iint d\mathbf{r}d\mathbf{r}'v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\psi^*(\mathbf{r},t)\psi^*(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t). \quad (3)$$

Предположим, что межатомный потенциал $v(\mathbf{r})$ допускает разложение Фурье

$$v(\mathbf{r})=\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\in\Omega}\tilde{v}(\mathbf{k})\,e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})},\ \text{где}\qquad \tilde{v}(\mathbf{k})=\int_V d\mathbf{r}v(\mathbf{r})\,e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}, \quad (4)$$

где Ω - множество всех векторов $\mathbf{k}$ - пространства. Тогда

$$S_1 = -\frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k}}\tilde{v}(\mathbf{k})\int_0^\beta dt\int d\mathbf{r}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\int d\mathbf{r}'e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\psi^*(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t). \qquad (5)$$

Представим (8) в виде

$$S_1 = -\frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k}}\tilde{v}(\mathbf{k})\int_0^\beta dt\int d\mathbf{r}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\int_0^\beta dt'\int d\mathbf{r}'e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\psi^*(\mathbf{r}',t')\psi(\mathbf{r}',t')\delta(t-t') \qquad (6)$$

и используем представление

$$\delta(t-t') = \frac{1}{\beta}\sum_\omega e^{-i\omega(t-t')}, \quad \omega=\omega_n=\frac{2\pi n}{\beta}.$$

Введем обозначения:

$$\Phi(\mathbf{k},\omega) = \int_0^\beta dt\int d\mathbf{r}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t), \quad \Phi^*(\mathbf{k},\omega) = \int_0^\beta dt'\int d\mathbf{r}'e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'-\omega t')}\psi^*(\mathbf{r}',t')\psi(\mathbf{r}',t'), \qquad (7)$$

и выделим действительную $A(\mathbf{k},\omega) = \operatorname{Re}\Phi(\mathbf{k},\omega)$ и мнимую части $B(\mathbf{k},\omega) = \operatorname{Im}\Phi(\mathbf{k},\omega)$. Тогда (6) запишется в виде

$$S_1 = -\frac{1}{2V\beta}\sum_{\mathbf{k},\omega}\tilde{v}(\mathbf{k})\Phi(\mathbf{k},\omega)\Phi^*(\mathbf{k},\omega) = -\frac{1}{2V\beta}\sum_{\mathbf{k},\omega}\tilde{v}(\mathbf{k})\left[A^2(\mathbf{k},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega)\right] \qquad (8)$$

Чтобы сделать квадратичный функционал (8) знакоопределенным, произведем разбиение множества Ω волновых векторов на три непересекающихся подмножества:

$$\Omega^+ = \{\mathbf{k} \quad \tilde{v}(\mathbf{k})>0\}, \quad \Omega^- = \{\mathbf{k} \quad \tilde{v}(\mathbf{k})<0\}, \quad \Omega^0 = \{\mathbf{k} \quad \tilde{v}(\mathbf{k})=0\} \qquad (9)$$

и введем две положительные функции $\tilde{v}^+(\mathbf{k})$ и $\tilde{v}^-(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned}\tilde{v}^+(\mathbf{k}) &= \tilde{v}(\mathbf{k}), \quad \mathbf{k}\in\Omega^+;\\ \tilde{v}^-(\mathbf{k}) &= -\tilde{v}(\mathbf{k}), \quad \mathbf{k}\in\Omega^-.\end{aligned} \qquad (10)$$

Тогда

$$S_1 = -\frac{1}{2V\beta}\sum_\omega\left(\sum_{\mathbf{k}\in\Omega^+}\tilde{v}^+(\mathbf{k})\left[A^2(\mathbf{k},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega)\right] - \sum_{\mathbf{q}\in\Omega^-}\tilde{v}^-(\mathbf{q})\left[A^2(\mathbf{q},\omega)+B^2(\mathbf{q},\omega)\right]\right). \qquad (11)$$

Применим к выражению

$$\exp\{S_1\} = \prod_{\omega} \prod_{\mathbf{k}\in\Omega^+} \exp\left\{-\frac{1}{2V\beta}\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})\left[A^2(\mathbf{k},\omega) + B^2(\mathbf{k},\omega)\right]\right\} \times$$
$$\times \prod_{\mathbf{q}\in\Omega^-} \exp\left\{+\frac{1}{2V\beta}\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})\left[A^2(\mathbf{q},\omega) + B^2(\mathbf{q},\omega)\right]\right\} \tag{12}$$

преобразование Хаббарда - Стратоновича [4]

$$e^{-\frac{A^2}{4a}} = \frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left\{-ax^2 \pm iAx\right\},\quad e^{\frac{A^2}{4a}} = \frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left\{-ax^2 \pm Ax\right\},\quad a > 0, \tag{13}$$

$$\exp\{S_1\} = \int \prod_{\omega} \prod_{\mathbf{k}\in\Omega^+} \prod_{\mathbf{q}\in\Omega^-} Dx^+_{\mathbf{k},\omega} Dy^+_{\mathbf{k},\omega} Dx^-_{\mathbf{q},\omega} Dy^-_{\mathbf{q},\omega} \frac{V\beta}{2\pi\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})} \frac{V\beta}{2\pi\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})} \times$$
$$\times \exp\left\{-\frac{V\beta}{2\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})}\left[\left(x^+(\mathbf{k},\omega)\right)^2 + \left(y^+(\mathbf{k},\omega)\right)^2\right]\right\} \times$$
$$\times \exp\left\{-i\left[x^+(\mathbf{k},\omega)A(\mathbf{k},\omega) + y^+(\mathbf{k},\omega)B(\mathbf{k},\omega)\right]\right\} \times \tag{14}$$
$$\times \exp\left\{-\frac{V\beta}{2\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})}\left[\left(x^-(\mathbf{q},\omega)\right)^2 + \left(y^-(\mathbf{q},\omega)\right)^2\right]\right\} \times$$
$$\times \exp\left\{-\left[x^-(\mathbf{q},\omega)A(\mathbf{q},\omega) + y^-(\mathbf{q},\omega)B(\mathbf{q},\omega)\right]\right\}$$

Введем полярные переменные $\rho^\pm$ и $\varphi^\pm$: $x^\pm = \rho^\pm \cos\varphi^\pm, y^\pm = \rho^\pm \sin\varphi^\pm$, тогда

$$\exp\{S_1\} = \int \prod_{\omega} \prod_{\mathbf{k}\in\Omega^+} \prod_{\mathbf{q}\in\Omega^-} \rho^+_{\mathbf{k},\omega} d\rho^+_{\mathbf{k},\omega} \rho^-_{\mathbf{q},\omega} d\rho^-_{\mathbf{q},\omega} \frac{V\beta}{2\pi\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})} \frac{V\beta}{2\pi\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})} \times$$
$$\times \exp\left\{-\frac{V\beta}{2\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})}\left(\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\right)^2\right\} \exp\left\{-\frac{V\beta}{2\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})}\left(\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\right)^2\right\} \times$$
$$\times \int_0^{2\pi} d\varphi^+_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-i\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\left[A(\mathbf{k},\omega)\cos\varphi^+_{\mathbf{k},\omega} + B(\mathbf{k},\omega)\sin\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}\right]\right\} \times \tag{15}$$
$$\times \int_0^{2\pi} d\varphi^-_{\mathbf{q},\omega} \exp\left\{-\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\left[A(\mathbf{q},\omega)\cos\varphi^-_{\mathbf{q},\omega} + B(\mathbf{k},\omega)\sin\varphi^-_{\mathbf{q},\omega}\right]\right\}$$

Выполним преобразования:

$$A(\mathbf{k},\omega)\cos\varphi^+_{\mathbf{k},\omega} + B(\mathbf{k},\omega)\sin\varphi^+_{\mathbf{k},\omega} = A^2(\mathbf{k},\omega) + B^2(\mathbf{k},\omega)\cos(\varphi^+_{\mathbf{k},\omega} - \alpha_{\mathbf{k},\omega}),$$

где $\alpha_{\mathbf{k},\omega} = \arccos\dfrac{A(\mathbf{k},\omega)}{A^2(\mathbf{k},\omega) + B^2(\mathbf{k},\omega)} = \arcsin\dfrac{B(\mathbf{k},\omega)}{A^2(\mathbf{k},\omega) + B^2(\mathbf{k},\omega)}$

Тогда последние два интеграла в (15) приводятся к функциям Бесселя [5]:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^+_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-i\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\left[A(\mathbf{k},\omega)\cos\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}+B(\mathbf{k},\omega)\sin\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}\right]\right\}=2\pi \mathrm{I}_o(iz^+_{\mathbf{k},\omega}),$$

$$z^+_{\mathbf{k},\omega}=\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\quad A^2(\mathbf{k},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega).$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^-_{\mathbf{q},\omega} \exp\left\{-\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\left[A(\mathbf{q},\omega)\cos\varphi^-_{\mathbf{q},\omega}+B(\mathbf{k},\omega)\sin\varphi^-_{\mathbf{q},\omega}\right]\right\}=2\pi I_o(z^-_{\mathbf{q},\omega}),$$

$$z^-_{\mathbf{q},\omega}=\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\quad A^2(\mathbf{q},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega).$$

Здесь $\mathrm{I}_o(iz^+_{\mathbf{k},\omega})$ и $I_o(z^-_{\mathbf{q},\omega})$ модифицированные функции Бесселя нулевого порядка соответственно мнимого и действительного аргумента.

Учитывая эти соотношения, получим

$$\exp\{S_1\}=4\pi^2\int\prod_{\omega}\prod_{\mathbf{k}\in\Omega^+}\prod_{\mathbf{q}\in\Omega^-}\rho^+_{\mathbf{k},\omega}d\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\rho^-_{\mathbf{q},\omega}d\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\frac{V\beta}{2\pi\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})}\frac{V\beta}{2\pi\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})}\times$$
$$\times\exp\left\{-\frac{V\beta}{2\tilde{\nu}^+(\mathbf{k})}\left(\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\right)^2\right\}\exp\left\{-\frac{V\beta}{2\tilde{\nu}^-(\mathbf{q})}\left(\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\right)^2\right\}\times \tag{16}$$
$$\times \mathrm{I}_o\left(i\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\quad A^2(\mathbf{k},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega)\right)I_o\left(\rho^-_{\mathbf{q},\omega}\quad A^2(\mathbf{q},\omega)+B^2(\mathbf{q},\omega)\right),$$

где

$$A^2(\mathbf{k},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega)=\Phi(\mathbf{k},\omega)\Phi^*(\mathbf{k},\omega)=$$
$$=\int_0^\beta dt\int d\mathbf{r}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\int_0^\beta dt'\int d\mathbf{r}'e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'-\omega t')}\psi^*(\mathbf{r}',t')\psi(\mathbf{r}',t').$$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведение некоторых интегралов к функциям Бесселя.

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}\exp\left\{-i\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\left[A(\mathbf{k},\omega)\cos\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}+B(\mathbf{k},\omega)\sin\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}\right]\right\}=$$
$$=\int_0^{2\pi} d\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}\exp\left\{-iz^+_{\mathbf{k},\omega}\cos(\varphi^+_{\mathbf{k},\omega}-\alpha^+_{\mathbf{k},\omega})\right\}$$

где введено обозначение $z^+_{\mathbf{k},\omega}=\rho^+_{\mathbf{k},\omega}\quad A^2(\mathbf{k},\omega)+B^2(\mathbf{k},\omega)$.

Сделаем сдвиг в интеграле на величину $\alpha^{+}_{\mathbf{k},\omega}$ и учтем, что интегрирование производится по периоду функции; тогда имеем

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos(\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}-\alpha^{+}_{\mathbf{k},\omega})\right\}=\int_0^{2\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}$$

Произведем преобразование интеграла

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}=$$

$$=\int_0^{\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}+\int_{\pi}^{2\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}$$

Во втором интеграле сделаем сдвиг аргумента на π: $\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}=\theta^{+}_{\mathbf{k},\omega}-\pi$, получим

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}=$$

$$=\int_0^{\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}+\int_0^{\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega} \exp\left\{+iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}=$$

$$=2\pi\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\frac{\exp\left\{+iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}+\exp\left\{-iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}}{2}=$$

$$=2\pi\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\left\{iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}\cos\varphi^{+}_{\mathbf{k},\omega}\right\}=2\pi \mathrm{I}_o(iz^{+}_{\mathbf{k},\omega}).$$

Аналогично

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^{-}_{\mathbf{q},\omega} \exp\left\{-iz^{-}_{\mathbf{q},\omega}\cos\varphi^{-}_{\mathbf{q},\omega}\right\}=$$

$$=2\pi\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi^{-}_{\mathbf{q},\omega}\frac{\exp\left\{z^{-}_{\mathbf{q},\omega}\cos\varphi^{-}_{\mathbf{q},\omega}\right\}+\exp\left\{-z^{-}_{\mathbf{q},\omega}\cos\varphi^{-}_{\mathbf{q},\omega}\right\}}{2}=$$

$$=2\pi\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi^{-}_{\mathbf{q},\omega}\cos\left\{z^{-}_{\mathbf{q},\omega}\cos\varphi^{-}_{\mathbf{k},\omega}\right\}=2\pi I_o(z^{-}_{\mathbf{q},\omega}).$$

Литература

1. A.Yu.Zakharov. Phys. Lett. A. - 1990. - 147, No. 8/9. - pp.442-444.
2. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н.(мл.) Введение к квантовую статистическую механику. - М.: Наука,1984 – 384 с.

3. Попов В.Н., Ярунин В.С. Коллективные эффекты в квантовой статистике излучения и вещества. - Ленинград: Издательство Ленинградского университета,1985 - 192 с.

4. Васильев А.Н. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. - Ленинград: из-во Ленинградского университета, 1976 - 294 с.

5. Справочник по специальным функциям // под ред. Абрамовица М., Стигана И..- М.:Наука, 1979 – 832 с.